

УДК 539.179

ПРИМЕНЕНИЕ ТРЕХЧАСТИЧНОГО ПРИБЛИЖЕНИЯ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТА ЕФИМОВА В МОЛЕКУЛЯРНЫХ СИСТЕМАХ

С. А. Позднеев

Представлены результаты расчетов эффекта Ефимова в молекулярных системах, причем основное внимание уделено простейшей системе, состоящей из трех атомов гелия. Расчеты проведены в приближении квантовой теории рассеяния в системе трех тел со стандартными парными межмолекулярными потенциалами. Выявлена роль кора и представлены геометрические характеристики этих необычных состояний трехчастичных систем. Рассмотрены достоинства, недостатки и область применимости предлагаемого метода.

Эффект Ефимова [1] является одним из наиболее ярких и интересных характеристик системы трех тел [2] в отличие от системы двух тел. Этот эффект возникает тогда, когда хотя бы в двух парных взаимодействиях трехчастичной системы появляются слабосвязанные состояния с близкой к нулю энергией связи. В этом случае в трехчастичной системе возникает взаимодействие, пропорциональное $1/R^2$, $R = r_1 + r_2 + r_3$, что приводит к появлению слабосвязанных трехчастичных состояний, количество которых определяется выражением [1, 2] $N \sim \ln(|A|/|R_0|)$, где A, R_0 – длина рассеяния и эффективный радиус двухчастичной системы соответственно.

Согласно теоретическим [1 – 18] и экспериментальным оценкам [19 – 22], подобные состояния могут возникать в таких системах как $H_2^-, He_3, Ar_3, Ne_3, Kr_3, Xe_3, Li_3, He_2Li, He_2Na$ [5 – 14], однако в настоящее время надежные экспериментальные данные, подтверждающие наличие этого эффекта, отсутствуют. Основным доказательством, подтверждающим наличие этого эффекта, является присутствие немонотонности в зависимости сечения от энергии в пороге развала на три свободные частицы, причем

проведение подобных экспериментов [22] чрезвычайно сложно и дорого и известны только результаты по столкновениям в системах электрон – молекула водорода, протон – дейтон и нейтрон – дейтон [3 – 22].

Следует отметить, что молекулярные кластеры, состоящие из атомов гелия, лития и ряда благородных газов привлекают внимание как теоретиков, так и экспериментаторов, что связано, в первую очередь, с прикладными исследованиями (сверхтекучесть, сверхпроводимость, бозе-конденсация, химия и физика кластеров, лазерная физика – возможность создания лазера на молекуле He_2^+ и т.д.), а также с реальной возможностью наблюдения этого необычного квантового эффекта в реальных системах.

Однако непосредственное теоретическое исследование даже такой самой простейшей системы из представленных выше – He_3 , состоящей из трех ядер гелия и шести электронов, представляет собой чрезвычайно сложную задачу.

Поэтому для исследования возможности существования эффекта Ефимова, например, в системе He_3 рассмотрим кластерное приближение, в котором эта система заменяется более простой – а именно системой, состоящей из трех силовых центров – атомов гелия. Известно, что атомы гелия являются бозонами и, таким образом, задача сводится к исследованию трех тождественных попарно взаимодействующих нейтральных бесспиновых частиц, для решения которой и предлагается использовать математически корректные безмодельные методы теории рассеяния в системе трех тел [2, 9, 10, 16 – 18].

Необходимо отметить особо, что в случае сложных многочастичных систем виртуальные уровни в парных подсистемах не приводят к возникновению эффекта Ефимова [1, 2]. Это однако не означает, что данный эффект отсутствует в этих системах, т.к. он может быть обусловлен не двухчастичными, а многочастичными виртуальными состояниями.

Поэтому в настоящей работе и предпринимается попытка интерпретации ряда необычных свойств систем He_3 , Ar_3 , Kr_3 , Ne_3 , Xe_3 , Li_3 , He_2Li , He_2Na именно на основе трехчастичного приближения. Отметим, что в настоящее время существует достаточно много как теоретических, так и экспериментальных методов исследования кластеров, состоящих из атомов гелия и ряда благородных газов, большинство из которых посвящено исследованию связанных состояний, причем состояния рассеяния [3, 9], которые наиболее информативны в плане подтверждения эффекта Ефимова, практически не рассматривались.

Как утверждается в ряде работ [3 – 15], основные трудности исследования системы

He_3 связаны с ее малой энергией связи (~ 1 мК), необычно большим размером возбужденного состояния (~ 150 Å) и сильным отталкиванием на малых расстояниях. Однако результаты работ [6, 11], использующие аналогичное трехчастичное приближение для расчета системы He_3 , расходятся с утверждениями, сделанными в [9].

Таким образом, представляет интерес проверка заключений работ [3 – 15] на основе трехчастичного приближения, с парными короткодействующими потенциалами, использованными в [9 – 10], причем основные цели этого исследования следующие:

- определения числа возможных состояний Ефимова;
- выяснение влияния вида парных потенциалов взаимодействия на характеристики этих состояний;
- оценка влияния отталкивания на малых расстояниях, которое аппроксимируется твердым кором в модели граничных условий (МГУ) [2, 9, 16], на характеристики этих необычных состояний.

Таким образом, задача теоретического изучения системы He_3 приводится к решению уравнений квантовой теории рассеяния в системе трех тел, что позволяет использовать хорошо известные методы [2, 9, 10, 15 – 17].

Теоретическое исследование эффекта Ефимова в системе He_3 в трехчастичном приближении с парными потенциалами типа [20] представлено в работах [3 – 14], основной вывод которых следующий – слабосвязанные состояния, подобные состояниям Ефимова, в системе He_3 возникают только в том случае, когда парные потенциалы умножаются на параметр $\Lambda > 1$, причем разница между энергией связи молекулы гелия и первым возбужденным состоянием системы He_3 $\epsilon_d(\Lambda) - E_t^1(\Lambda)$ возрастает. При дальнейшем увеличении Λ эта разница уменьшается, причем в этом случае даже при небольшом изменении Λ возникает второе возбужденное состояние $E_t^2(\Lambda)$ системы He_3 , причем именно это необычное поведение возбужденных состояний системы He_3 косвенным образом может служить подтверждением существования эффекта Ефимова в этой системе.

Исследуя зависимость этих уровней от параметра Λ было обнаружено, что возбужденные уровни в трехчастичной системе при $\Lambda < 1$ возникают из виртуальных состояний.

В отличие от работ [9], в которых исследования резонансов в трехчастичной системе проводились при помощи уравнений Фаддеева, основа которого – аналитическое продолжение матрицы рассеяния в область комплексных значений энергии, в настоящей работе используется прямое численное решение без аналитического продолжения.

Уравнения Фаддеева. Уравнения Фаддеева квантовой теории рассеяния для системы

трех частиц формулируются для трех частей, на которые разбивается полная волновая функция системы трех тел

$$\Psi = \sum_{i=1}^3 F_i,$$

каждая из которых соответствует всевозможным разбиениям системы на невзаимодействующие подгруппы. Эти уравнения для системы He_3 в трехчастичном приближении с парными короткодействующими потенциалами [19] после отделения угловых переменных имеют вид [2, 9, 10]

$$[H_{\lambda,l} - z]F_{aL}(x, y) = -V(x)(F_{aL}(x, y) + \sum_{a'=-1}^{+1} \int F_{a'L}(x', y') h_{aa'}^L(x', y', \eta) d\eta), \quad (1)$$

где

$$H_{\lambda,l} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{l(l+1)}{x^2} + \frac{\lambda(\lambda+1)}{y^2} \quad (2)$$

$$z = E + i0, \quad L = l + \lambda, \quad a = (l, \lambda),$$

причем в случае расчетов с твердым кором в МГУ правая часть равна нулю при $x < c$, где c – размер кора. Для однозначного разрешения уравнений необходимо задать граничные условия

$$F_{aL}(x, y)|_{x=0} = 0, \quad F_{aL}(x, y)|_{x=0} = 0, \quad (3)$$

которые в МГУ принимают вид

$$F_{aL}(c, y) + \sum_{a'=-1}^{+1} \int F_{a'L}(x', y') h_{aa'}^L(x', y', \eta) d\eta = 0$$

$$x' = \sqrt{x^2/4 + 3y^2/4 - \sqrt{3}xy\eta/2}, \quad y' = \sqrt{3x^2/4 + y^2/4 + \sqrt{3}xy\eta/2},$$

а при $\rho \rightarrow \infty$ в случае парных короткодействующих потенциалов граничные условия могут быть представлены следующим образом [2]:

$$F_{aL} \sim_{\rho \rightarrow \infty} a_{aL,v} \sum_v \psi_{l,v}(x) H_v(\sqrt{E - E_{2,l,v}}) + A_{aL}(\theta) \frac{\exp i\sqrt{E}\rho + i\pi L/2}{\sqrt{\rho}}, \quad (4)$$

$\psi_{l,v}(x)$ – парциальные компоненты волновых функций парных подсистем с энергией связи $\epsilon_{l,v}$; $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$; $\theta = \arctan y/x$; $a_{aL,v}$, $A_{aL}(\theta)$ – амплитуды рассеяния процессов,

когда в конечном состоянии находятся две или три частицы соответственно, $H_v(x)$ – сферические функции Ханкеля.

В случае расчетов связанных состояний волновые функции достаточно быстро убывают на бесконечности и поэтому асимптотические граничные условия на достаточно большом расстоянии $x = R_x$, $y = R_y$ могут быть заменены на

$$\frac{\partial_x F_{aL}|_{x=R_x}}{F_{aL}|_{x=R_x}} = i\sqrt{\epsilon_v},$$

$$\frac{\partial_y F_{aL}|_{y=R_y}}{F_{aL}|_{y=R_y}} = i\sqrt{\epsilon_v - E}.$$

В случае системы He_3 в трехчастичном приближении с угловым моментом $L = 0$ имеем

$$H_{\lambda,l} = H_{0,l} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + l(l+1)(1/x^2 + 1/y^2),$$

где парциальные составляющие l принимают четные значения $l = 0, 2, 4, \dots$, а явное выражение для функций $h_{aa'}^L(x, y, \eta)$ можно найти в [2, 9, 15, 16].

Асимптотика компонент уравнений (1) для процессов рассеяния:

$$1 + (2, 3) \rightarrow \begin{cases} 1 + (2, 3) & \text{упругое рассеяние} \\ 1 + (2, 3)^* & \text{возбуждение} \\ (1, 2)^* + 3 & \text{перестройка с} \\ (1, 3)^* + 2 & \text{возбуждением} \\ 1 + 2 + 3 & \text{ионизация или развал на три свободные частицы,} \end{cases} \quad (5)$$

в случае короткодействующих потенциалов имеет вид [2, 9, 10, 16 – 18]

$$F_l(x, y; z) = \delta_{l0}\psi_d(x)[\sin(\sqrt{z - \epsilon_d}y) + \exp(i\sqrt{z - \epsilon_d}y)[a_0(z) + o(y^{-1/2})]] + \frac{\exp(i\sqrt{z\rho})}{\sqrt{\rho}}[A_l(z, \theta) + o(\rho^{-1/2})], \quad (6)$$

где $a_0(z)$, $z = E + i0$, для $E > \epsilon_d$ – амплитуда упругого рассеяния и $A_l(E, \theta)$ для $E > 0$ – амплитуда развала.

Предположим также, что молекула гелия 4He_2 имеет одно связанное состояние с энергией связи ϵ_d , $\epsilon_d < 0$ и соответствующей волновой функцией $\psi_d(x)$.

Для процессов рассеяния (5) матрица рассеяния при $z = E + i0$, $E > \epsilon_d$, фазы и длины рассеяния в s -состоянии выражаются при помощи следующих формул:

$$S_0(z) = 1 + 2ia_0(z),$$

$$\delta_0(p) = \frac{1}{2} \text{Im} \ln S_0(\epsilon_d + p^2 + i0), \quad p > 0,$$

$$L_{sl} = -\sqrt{3}/2 \lim_{p \rightarrow 0} a_0(p)/p.$$

Метод численного решения системы дифференциальных уравнений и результаты расчетов. Для численного решения системы уравнений (1) с граничными условиями (3, 4) применялся стандартный метод решения, детально описанный в работах [2, 9, 10, 16 – 18]. В качестве парных потенциалов взаимодействия применялись потенциалы HFDHE2, HFD-B, HFDID, LM2M1, LM2M2, ТТУРТ с соответствующими параметрами [20], которые достаточно детально воспроизводят основные параметры соответствующих молекул [19].

Результаты расчетов энергий связанных состояний систем He_2 , He_3 и He_3^* как с учетом так и без учета твердого кора представлены в таблицах 1 – 6.

Т а б л и ц а 1

Энергии связи, длина рассеяния, средний радиус и квадрат среднего радиуса для молекулы He_2

Потенциал	E_{He_2} , мК	l_{sl} , Å	$\langle r_{He_2} \rangle$, Å	$\langle r_{He_2}^2 \rangle^{1/2}$, Å
HFDHE2	-0.8301	89.30	64.21	88.18
HFD-B	-1.6854	88.40	46.18	62.71
HFD-ID	-0.4023	79.10	91.50	126.73
LM2M1	-1.2091	101.10	53.85	73.54
LM2M2	-1.3035	101.25	52.00	70.93
ТТУРТ	-1.3123	100.05	51.84	70.71

Т а б л и ц а 2

Энергии связи, длина рассеяния, средний радиус и квадрат среднего радиуса для молекулы He_2 , рассчитанные в МГУ

Потенциал	E_{He_2} , мК	l_{sl} , Å	$\langle r_{He_2} \rangle$, Å	$\langle r_{He_2}^2 \rangle^{1/2}$, Å
HFDHE2	-0.8301	123.87	64.20	88.15
HFD-B	-1.6841	88.48	46.18	62.71
HFD-ID	-0.4009	81.15	96.54	125.83
LM2M1	-1.2891	101.10	53.85	73.54
LM2M2	-1.3035	100.25	56.01	71.83
ТТУРТ	-1.3096	100.05	54.75	70.81

Т а б л и ц а 3

Энергии связи, длина рассеяния, коэффициент кластеризации, средний радиус и квадрат среднего радиуса для молекулы He_3

Потенциал	E_{He_3} , мК	$ f_c ^2$	L_{sl} , Å	$\langle r_{He_3} \rangle$, Å	$\langle r_{He_3}^3 \rangle^{1/2}$, Å
HFDHE2	-0.1171	0.2094	140	5.65	6.46
HFD-B	-0.1330	0.2717	137	5.48	6.23
HFD-ID	-0.1061	0.1555	139	5.80	6.64
LM2M1	-0.1247	0.2412	132	5.57	6.35
LM2M2	-0.1264	0.2479	131	5.55	6.32
ТТУРТ	-0.1264	0.2487	130	5.56	6.33

Т а б л и ц а 4

Энергии связи, длина рассеяния, коэффициент кластеризации, средний радиус и квадрат среднего радиуса для молекулы He_3 , рассчитанные в МГУ

Потенциал	E_{He_3} , мК	$ f_c ^2$	L_{sl} , Å	$\langle r_{He_3} \rangle$, Å	$\langle r_{He_3}^3 \rangle^{1/2}$, Å
HFDHE2	-0.1170	0.2095	138	5.65	6.46
HFD-B	-0.1329	0.2717	135	5.48	6.23
HFD-ID	-0.10612	0.1555	134	5.80	6.64
LM2M1	-0.12465	0.2412	130	5.57	6.35
LM2M2	-0.12641	0.2479	131	5.55	6.32
ТТУРТ	-0.12640	0.2487	131	5.56	6.33

Т а б л и ц а 5

Энергии связи, длина рассеяния, коэффициент кластеризации, средний радиус и квадрат среднего радиуса для молекулы He_3^*

Потенциал	$E_{He_3^*}, мК$	$\ f_c^*\ ^2$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*}^3 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-1.6653	0.9077	134	55.26	66.25
HFD-B	-2.743	0.9432	135	48.33	57.89
HFD-ID	-1.0612	0.8537	140	62.75	75.38
LM2M1	-2.1550	0.9283	129	51.53	61.74
LM2M2	-2.2713	0.9319	131	50.79	60.85
ТТУРТ	-2.2806	0.9323	131	50.76	60.81

Т а б л и ц а 6

Энергии связи, длина рассеяния, коэффициент кластеризации, средний радиус и квадрат среднего радиуса для молекулы He_3^* , рассчитанные в МГУ

Потенциал	$E_{He_3^*}, мК$	$\ f_c^*\ ^2$	$L_{sl}, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*} \rangle, \text{Å}$	$\langle r_{He_3^*}^3 \rangle^{1/2}, \text{Å}$
HFDHE2	-1.6765	0.9078	135	56.22	67.11
HFD-B	-2.7458	0.9439	135	48.31	58.00
HFD-ID	-1.1061	0.8597	136	62.87	76.13
LM2M1	-2.2585	0.9323	132	52.41	62.04
LM2M2	-2.2801	0.9319	131	50.79	61.05
ТТУРТ	-2.2885	0.9339	131	51.23	60.89

Для интерпретации геометрических характеристик молекулы He_3 на рис. 1 – 2 представлены результаты расчетов функции плотности [10 – 15], определяемой следующим образом:

$$\varrho(\mathbf{r}_1) = \int |\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)|^2 d\mathbf{r}_2 d\mathbf{r}_3,$$

где

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = F(x, y, z') + xy \left[\frac{F(x^+, y^+, z'^+)}{x^+ y^+} + \frac{F(x^-, y^-, z'^-)}{x^- y^-} \right] / 2\pi xy,$$

$$z' = (x, y) / xy,$$

$$x^{+-} = (x^2/4 + 3y^2/4 - \sqrt{3}xy z'/2)^{1/2}, \quad y^{+-} = (3x^2/4 + y^2/4 - \sqrt{3}xy z'/2)^{1/2},$$

которая в случае учета симметрии системы He_3 имеет вид

$$\rho(r) = \frac{\sqrt{3}}{4\pi^2 r^2} \int |\psi(x, r\sqrt{3}, z')|^2 dx dz'.$$

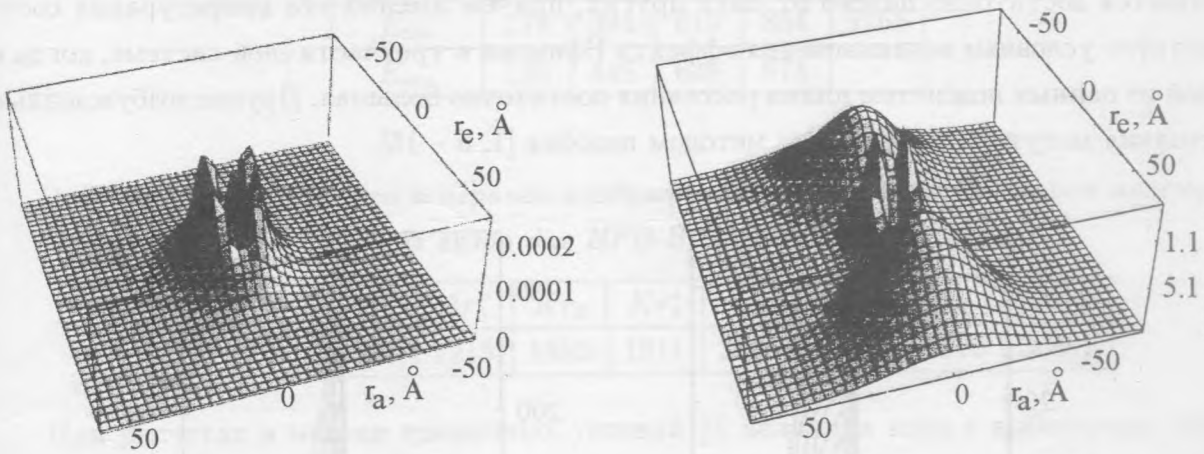


Рис. 1. Пространственное изображение функции плотности основного состояния молекулы He_3 .

Рис. 2. Пространственное изображение функции плотности возбужденного состояния молекулы He_3 .

Достаточно наглядное представление о геометрических характеристиках систем He_3, He_3^* дает изображение этой функции в координатах r_l, r_a , где $r_l = rz'$ – проекция частицы 1 на ось, соединяющую две другие частицы, $r_a = \frac{z'}{|z'|} r(1 - z'^2)^{1/2}$, причем для возбужденного состояния He_3^* эта функция имеет два максимума, что соответствует линейной структуре системы He_3^* . Это соответствует тому, что в возбужденном состоянии третья частица с большой долей вероятности находится между двумя другими и подобное состояние как бы соответствует двум объединенным парным подсистемам. Этот вывод подтверждается расчетами коэффициента кластеризации, определенного следующим выражением [10]:

$$f_c = \int F(x, y, z') \phi_2(x) dx az'.$$

Результаты этих расчетов представлены в таблицах 3 – 6, из которых видно, что в возбужденном состоянии He_3^* преобладают двухчастичные состояния, а в основном состоянии роль этих состояний незначительна. Линии уровня волновых функций представлены на рис. 3, причем параметры сетки, применяемой в расчетах, следующие:

$N_\theta = N_p = 700 - 1200$, а ρ_{max} равен 800 \AA . Отметим, что масштабы на рис. 3а, который соответствует основному состоянию системы He_3 , и рис. 3б, соответствующий возбужденному состоянию, различны. В случае основного состояния система He_3 образует почти равносторонний треугольник, а в случае возбужденного – один из атомов находится достаточно далеко от двух других, причем именно эта конфигурация соответствует условиям возникновения эффекта Ефимова в трехчастичной системе, когда в одной из парных подсистем длина рассеяния достаточно большая. Другие возбужденные состояния могут быть получены методом подобия [1, 6 – 15].

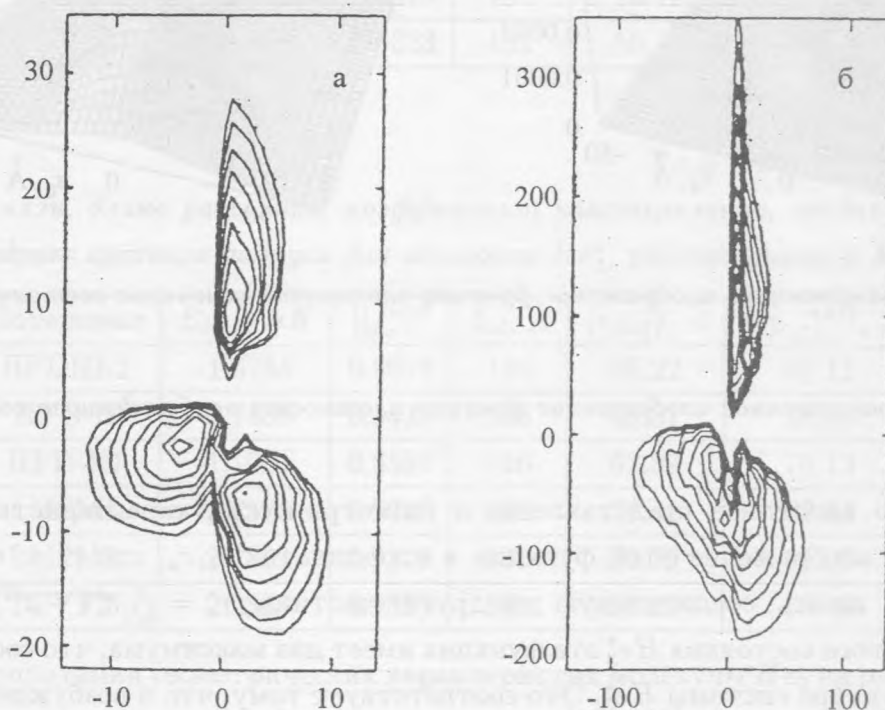


Рис. 3. Линии уровня плотности распределения основного состояния He_3 (а) и возбужденного состояния He_3^* .

Аналогичная треугольная структура возникает при расчете основных состояний систем $Ne_3, Ar_3, Kr_3, Xe_3, Li_3, ^{12}C_3$ при использовании трехчастичного приближения, результаты расчета которых в рассматриваемом приближении с потенциалом HFD-V и параметрами из [20] представлены в табл. 7, 8.

Т а б л и ц а 7

Энергии связи молекул благородных газов, рассчитанные с применением HFD-B потенциала, а.е. 10^{-6}

Энергия	Ne ₂	Ar ₂	Kr ₂	Xe ₂	Rn ₂
E_{thr}	178	394	619	854	9268
E_{exp}	135	446	629	874	-

Т а б л и ц а 8

Энергии связи основного и первого возбужденного состояния примеров молекул благородных газов для HFD-B потенциала, а.е. 10^{-6}

Ne ₃	Ne ₃ *	Ar ₃	Ar ₃ *	Kr ₃	Kr ₃ *	Xe ₃	Xe ₃ *	Rn ₃	Rn ₃ *
398	330	1278	1215	1885	1811	2509	2438	30875	30801

При расчетах в модели граничных условий [9] величина c выбиралась таким образом, чтобы даже небольшое ее изменение не влияло на энергию связи как парных подсистем ϵ_d , так и в трехчастичной системе E_t^0 . В данных расчетах эта величина равна $c = 1.5 \text{ \AA}$, причем значения величин энергии связи для молекулы гелия $\epsilon_d = -1.69 \text{ мК}$, а значение r_0 равно 100 \AA .

Подробное описание численного метода решения системы уравнений (3) с асимптотическими граничными условиями (24), (25) представлено в [2 – 17], поэтому отметим только особенности предлагаемого метода [2, 9, 17].

При численном решении системы уравнений в МГУ с асимптотическими граничными условиями использовалась конечно-разностная аппроксимация в полярной системе координат ρ и θ , $\rho = \rho_i$, $i = 1, 2, 3 \dots N_\rho$ и $\theta = \theta_j$, $j = 1, 2, 3 \dots N_\theta$ в соответствии с формулами

$$\rho_i = ic / (N_c^\rho + 1), \quad i = 1, 2, 3 \dots N_c^\rho,$$

$$\rho_{i+N_c^\rho} = \sqrt{c^2 + y_i^2}, \quad i = 1, 2, 3 \dots N_\rho - N_c^\rho,$$

где

$$y_i = f(\tau_i) \sqrt{\rho_{N_\rho}^2 - c^2}, \quad \tau_i = i / (N_\rho - N_c^\rho)$$

$$f(x) = \begin{cases} ax, & \text{для } x \in [0, x_0], \\ a_1x + x^\nu, & \text{для } x \in [x_0, 1]. \end{cases}$$

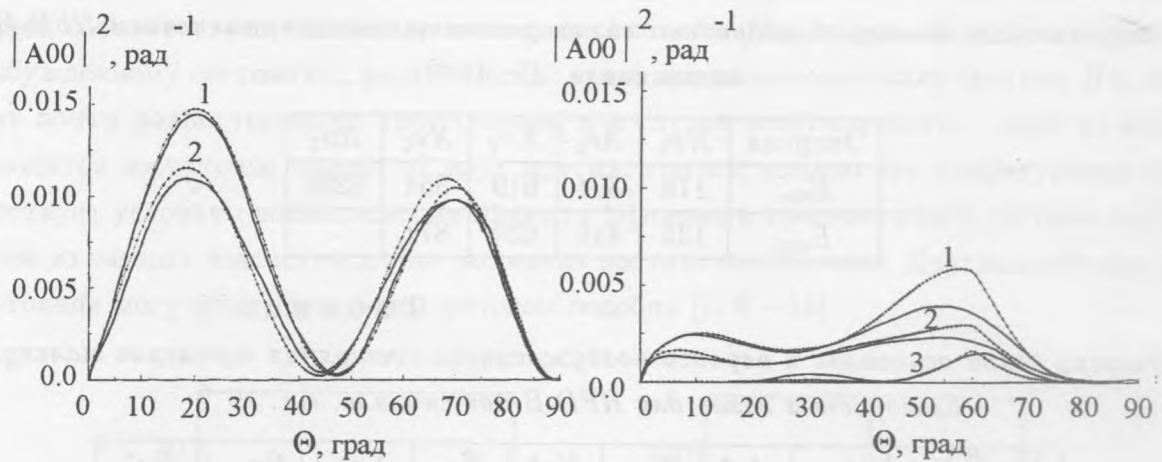


Рис. 4. Результаты расчетов в приближении МГУ квадрата модуля амплитуд развала $A_{00}(\theta)$ для парных потенциалов HFD-B при $E = +1.4$ мК. Кривая 1 соответствует $L = 0, l = \lambda = 0$, кривая 2 – учет также состояний $L = 0, l = \lambda = 2$. Сплошная линия – расчеты без применения приближения МГУ.

Рис. 5. Результаты расчетов в приближении МГУ квадрата модуля амплитуд развала $A_{00}(\theta)$ (1, 2) и $A_{22}(\theta)$ (3) для потенциалов HFD-B при $E = +1.4$ мК. Кривая 1 соответствует $L = 0, l = \lambda = 0$, а кривые 2 и 3 – соответствуют учету $l = \lambda = 0$ и $l = \lambda = 2$ парциальных волн. Сплошная линия – расчеты без использования приближения МГУ.

Значения величин $a_0, a_0 > 0$ и $a, a_1 > 0$ определялись на основе x_0, ν , где $x_0 \sim 0.1 - 0.2$. Узлы сетки $\theta = \theta_j, j = 1, 2, 3 \dots N_\rho - N_c^p$ определялись при помощи соотношений $\theta_j = \arctan(y_i/c)$ и $\theta_j, j = N_\rho - N_c^p + 1, \dots N_\theta$. Подобный неравномерный выбор узлов сетки необходим для определения значений искомой функции $\Psi_l(x, y, z)$ в областях, где она сильно изменяется, причем в этом случае узлы сетки располагаются достаточно плотно (области малых значений ρ и x).

В расчетах использовались параметры сетки $N_\theta = N_\rho = 700 - 1200$ с числом узлов внутри кора $N_c^p = 7$. Конечно разностная аппроксимация уравнений (1) и граничных условий (3), (4) в случае $l_{max} = 0$ приводит к решению задачи линейной системы $N_\theta N_\rho$ алгебраических уравнений с блочно-диагональной матрицей, каждый блок которой имеет размер $N_\theta N_\theta$, а количество блоков на главной диагонали – N_ρ . Для решения линейной системы алгебраических уравнений с блочно-диагональной матрицей в настоящее время существует достаточно много численных методов [21], выбор которых определяется

в основном решаемой задачей и ресурсами ЭВМ. В нашем случае наиболее подходящим является метод прогонки, который хорошо себя зарекомендовал при расчетах связанных состояний [9]. Тем не менее достаточно эффективным является и метод Якоби, а также ряд других численных методов [21].

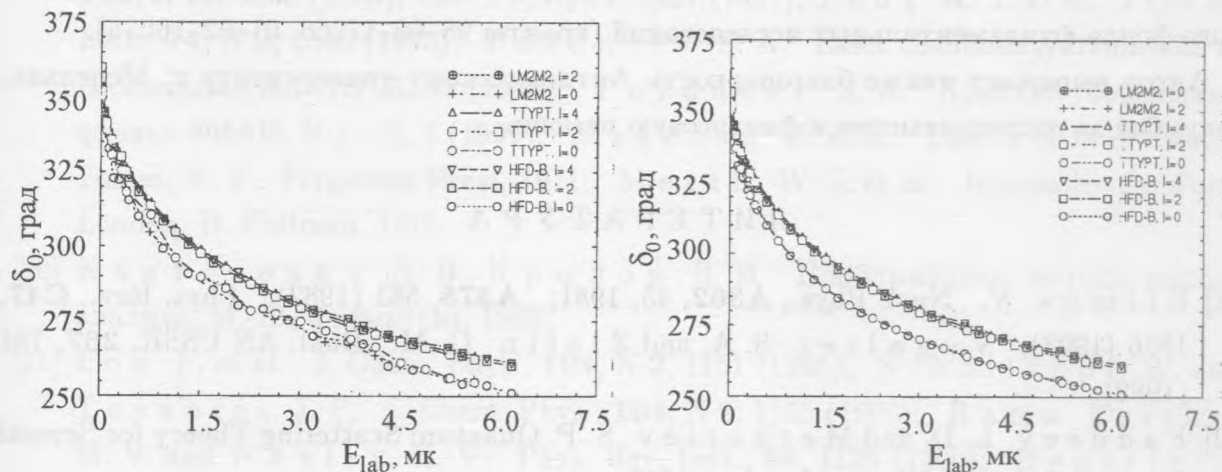


Рис. 6. Зависимость фазовых сдвигов от энергии $\delta_0(E_{lab})$, $E_{lab} = \frac{3}{2}(E + |\epsilon_d|)$ при столкновениях между атомом и молекулой гелия для HFD-B, LM2M2 и TTYPT потенциалов.

Рис. 7. Зависимость фазовых сдвигов от энергии $\delta_0(E_{lab})$, $E_{lab} = \frac{3}{2}(E + |\epsilon_d|)$ при столкновениях между атомом и молекулой гелия для HFD-B, LM2M2 и TTYPT потенциалов, рассчитанная в приближении МГУ.

Отметим, что размер основного состояния системы He_2 меньше размера молекулы гелия He_2 [22]. Однако размер возбужденного состояния трехчастичной системы He_3^* уже намного больше чем двухчастичной He_2 .

Таким образом, в данном приближении результаты расчетов свидетельствуют о возможном существовании эффекта Ефимова в системе He_3 , причем число возможных уровней не более двух.

Для исследования процессов рассеяния (5), происходящих при столкновении атома с молекулой гелия, и определения роли парных потенциалов взаимодействия проведены расчеты амплитуд упругого рассеяния и развала, а также фазовых сдвигов как с учетом, так и без учета твердого кора. Результаты этих расчетов представлены на рис. 4 – 7. Полученные результаты практически не зависят от вида парных потенциалов взаимодействия и учета твердого кора как в случае связанных состояний, так и для состояний рассеяния.

Таким образом можно заключить, что в рассматриваемом приближении вид парных потенциалов взаимодействия, а также учет твердого кора в модели граничных условий не оказывает существенного влияния на результаты расчетов.

Работа выполнена при поддержке Научного фонда Китайской Народной Республики (грант NSF 19734030), Академии наук Тайваня (грант NSC 85-212-M-007-009), Российского фонда фундаментальных исследований (гранты 98-02-17266, 01-02-16075).

Автор выражает также благодарность Антиокийскому университету г. Медельин, Колумбия за гостеприимство и финансовую помощь.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- [1] Efimov V. Nucl. Phys., **A362**, 45, 1981; **A378**, 581 (1982); Phys. Rev., **C47**, 1876 (1993); Vugalter S. A. and Zislin G. M. Dokl. AN USSR, **267**, 784 (1982).
- [2] Faddeev L. D. and Merkuriev S. P. Quantum Scattering Theory for Several Particles Systems, Kluwer, London, 1993.
- [3] Fedorov D. V. et al. Phys. Rev., **C50**, N 5, 2372 (1994).
- [4] Cobis A. Phys. Lett., **B424**, 1 (1998).
- [5] Yuan J. and Lin C. D. J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys., **31**, L637 (1998).
- [6] Gonzalez-Lezana T. et al. J. Chem. Phys., **110**, N 18, 1999; Phys. Rev. Lett., **82**, N 8, 1648 (1999).
- [7] Tang K. T. et al. Phys. Rev. Lett., **74**, N 9, 1546 (1995).
- [8] Motovilov A. K., Kalganova E. A., and Sofianos S. A. J. Phys. B: At. Mol. Phys., **31**, 1279 (1998); J. Chem. Phys., **275**, 168 (1997); Phys. Rev., **A56**, N 3, R1686 (1997).
- [9] Rudnev V. and Yakovlev S. Chem. Phys. Lett., **22**, 97 (2000); Physics of Atomic Nuclei, **63**, N 1, 61, 77; N 2, 271, 278; N 3, 402, 409; N 5, 830 (2000).
- [10] Frederico T. et al. Phys. Rev., **A60**, N 1, R9 (1999).
- [11] Hahn Y. Phys. Rev., **A60**, N 3, 2139 (1999).
- [12] Nielsen E. et al. Phys. Rev. Lett., **82**, N 14, 2844 (1999).
- [13] Bedaque P. F. et al. Phys. Rev. Lett., **82**, N 3, 463 (1999).
- [14] Ionescu R. A. and Nategan C. Europhys. Lett., **45**, N 3, 269 (1999).
- [15] Merkuriev S. P. and Pozdnev S. A. Sov. J. Nucl. Phys., **29**, 620 (1979).
- [16] Pozdnev S. A. Dynamics of Elementary Atomic-Molecular Processes in Gas and Plasma. Nova Science Publ., **212**, 99 (1996).

- [17] P o z d n e e v S. A. Phys. Lett., **B125**, 355 (1983).
- [18] H u b e r K. P. and G e r z b e r g G. Constants of Diatomic Molecules, New Jersey, 1979.
- [19] J a n z e n A. R. and A z i z R. A. J. Chem. Phys., **79**, 4330 (1979); **94**, 8047 (1991); **103**, N 22, 9626 (1995); Mol. Phys., **61**, 1487 (1987); T a n g K. T. et al. Phys. Rev. Lett., **74**, N 9, 1546 (1995); P o z d n e e v S. A. Laser Chemistry, Biophysics and Biomedicine ICONO'95, 92 (1996). P o z d n e e v S. A. Краткие сообщения по физике ФИАН, N 1 - 2, 3 (1997); M a g e n a n H. et al. Theory of Intermolecular Forces, N. Y., Pergamon Press, 1971; M e a t h W. J. et al. Intermolecular Forces, London, B. Pullman, 1978.
- [20] К а н т о р о в и ч Л. В., К р ы л о в В. И. Приближенные методы высшего анализа, М.-Л., Физматгиз, 1962.
- [21] L o n F. et al. J. Chem. Phys., **104**, N 2, 1151 (1996); S c h o l l k o p f W. and T o e n n i e s J. P. J. Chem. Phys., **104**, N 2, 1155 (1996); R a m a K r i s h n a M. V. and W h a l e y K. V. Phys. Rev. Lett., **64**, 1126 (1990); H e g e r f e l d t G. C. and K o h l e r T. Phys. Rev. Lett., **84**, N 15, 3215 (2000).

Поступила в редакцию 22 декабря 2000 г.