

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

P4-86-439

С.И.Виницкий, Ф.Р.Вукайлович<sup>1</sup>, М.Б.Кадоццев<sup>2</sup>

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ  
ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ  
В ПРЕДЕЛЕ РАЗЪЕДИНЕННЫХ АТОМОВ  
В ЕСТЕСТВЕННЫХ ПЕРЕМЕННЫХ

Направлено в журнал "Journal of Physics"

<sup>1</sup> Институт ядерных наук им.Бориса Кидрича,  
Белград

<sup>2</sup> Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова,  
Москва

1986

## I. Введение

Адиабатическое представление задачи трех тел широко используется в физике атомных столкновений и известно в литературе как метод возбужденных стационарных состояний (ВСС)<sup>/1/</sup>. В последнее время этот метод получил развитие в задачах мезоатомной физики, связанных с проблемой мюонного катализа<sup>/2/</sup>. Напомним, что в качестве адиабатического базиса обычно используется полный набор решений задачи двух кулоновских центров<sup>/3/</sup>. Это связано прежде всего с тем, что благодаря разделению переменных для этой задачи были созданы эффективные численные алгоритмы ее решения. Замена электрона более тяжелым мезоном в задачах мезоатомной физики увеличила роль неадиабатической связи каналов, что привело к существенному увеличению числа базисных функций, ~1000, в прецизионных расчетах слабосвязанных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$ <sup>/4/</sup>. Наличие большого набора базисных функций дало возможность аккуратно сформулировать граничные условия в адиабатическом представлении и показать, что они согласованы с физическими граничными условиями задачи рассеяния<sup>/5/</sup>. Выполненные расчеты сечений низкоэнергетических процессов рассеяния мезоатомов в смеси изотопов водорода подтвердили надежность и корректность данного подхода<sup>/6/</sup>.

Несмотря на определенные успехи стандартного адиабатического метода, в литературе на протяжении многих лет обсуждается проблема ослабления неадиабатической связи каналов и формирования более экономичного адиабатического базиса, асимптотически согласованного с физическими граничными условиями задачи рассеяния<sup>/7/</sup>. Для атомных систем типа  $H^-$ ,  $He$  и т.д. в качестве такого базиса был предложен гиперсферический адиабатический базис<sup>/8/</sup>. Развитие гиперсферического подхода для мезомолекулярных систем было дано в работах<sup>/9,10/</sup>. Как показано в этих работах, ключевым вопросом решения проблемы формирования согласованного адиабатического базиса (СAB) является использование естественных координат  $\bar{R}, \bar{r}'$ , асимптотически переходящих в каждом из трех возможных каналов реакции в соответствующую пару координат Якоби (см. рис.1). Тогда в случае медленных столкновений относительное движение мезоатома и ядра в  $a: (ac) + b$  и  $b: a + (bc)$  каналах описывается с правильной приведенной массой, а СAB переходит в волновые функции разведенных атомов. В таком подходе, однако, возникает задача двух центров с неразделяющимися переменными, для решения которой необходимо иметь эффективные численные алгоритмы. В недавних работах<sup>/11,12/</sup> гиперсферический адиабатический базис уже применялся для расчетов уровней энергии системы  $Ps \equiv e^-e^-e^+$  и  $HD^+$ , однако для его нахождения по-прежнему использовались стан-

дартные методы, не позволяющие вычислять высоковозбужденные состояния задачи двух центров.

В настоящей работе мы исходим из того, что эффективные численные алгоритмы решения многомерных задач известны<sup>/13/</sup>, тогда возникает проблема построения классификации состояний САВ и асимптотик решений адиабатических уравнений в пределе разьединенных атомов. В нашей предыдущей работе<sup>/10/</sup> эта задача была решена при нулевом полном орбитальном моменте. Здесь мы рассматриваем классификацию состояний САВ при ненулевом полном моменте. Показано, что состояния САВ в пределе разьединенных атомов классифицируются собственными значениями оператора  $\hat{L}$ , который при учете адиабатических поправок переходит в известный интеграл движения  $\hat{L}$  задачи рассеяния атома на заряженной частице в дипольном приближении<sup>/14/</sup>. При этом орбитальный момент мюона в разьединенном атоме ( $\alpha c$ ),  $\alpha \equiv a, b$  квантуется на ось  $\vec{z}_\alpha$ , направленную по якобиевскому вектору  $\vec{R}_\alpha$ , соединяющему удаленную заряженную частицу с центром масс атома, см. рис.1,2. Отметим, что в стандартном адиабатическом базисе такая "переквантовка" проекции момента мюона осуществляется лишь при учете неадиабатической связи<sup>/5/</sup>. В адиабатической системе уравнений по медленной переменной  $\mathcal{R}$ , полученной усреднением полного гамильтониана по САВ, отсутствует сильная неадиабатическая связь в каналах  $\alpha$ , присущая стандартному подходу<sup>/5,7/</sup>, но остается слабая  $\sim \mathcal{R}^{-1} \partial / \partial \mathcal{R}$  неадиабатическая связь в каждом канале  $\alpha$ , обусловленная отличием гиперрадиуса  $\mathcal{R}$  от модуля якобиевского вектора  $\vec{R}_\alpha$  на величину  $O(\mathcal{R}^{-1})$ <sup>/10/</sup>. Показано, что учет этой связи при больших, но конечных  $\mathcal{R}$  приводит к восстановлению модуля якобиевского вектора  $\vec{R}_\alpha$  в асимптотике компонент  $\Psi_\alpha$  полной волновой функции  $\Psi = \Psi_a + \Psi_b$  и обеспечивает ее согласование с физическими граничными условиями задачи рассеяния. Установлена связь между найденными адиабатическими асимптотиками и известным выражением для амплитуды рассеяния заряженной частицы на атоме в дипольном приближении<sup>/15/</sup>. При этом фазовый сдвиг от дипольного потенциала явно выделен в соответствии с теорией квантового дефекта<sup>/16,17/</sup>.

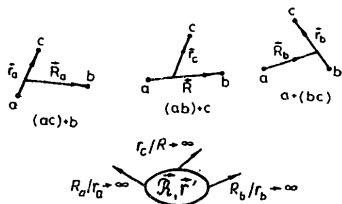


Рис.1. Якобиевские координаты системы трех частиц (abc).

## 2. Постановка задачи

Рассмотрим систему трех кулоновских частиц  $a, b, c$  с зарядами  $Z_a, Z_b$  и  $Z_c = -1$  и массами  $M_a, M_b$  и  $M_c$  ( $e = \hbar = 1$ ). Для определенности примем условие  $M_a \geq M_b > M_c$ , частицы  $a$  и  $b$  будем называть ядрами, а частицу  $c$  мюоном. В соответствии с работой<sup>/9/</sup> введем естественные переменные  $\vec{r}, \vec{r}'$ , связанные с обычными якобиевскими координатами  $\vec{r}_c, \vec{R}$  (см. рис.1) соотношениями

$$\begin{aligned} \vec{r}' &= \mathcal{D}(\theta, \Phi) \vec{r}_c / R, \quad \vec{R} = R \vec{e}_R, \\ \mathcal{R} &= \sqrt{\rho} R = \left\{ R^2 + \frac{m}{M} r_c^2 \right\}^{1/2}, \end{aligned} \quad (1)$$

где

$$m^{-1} = (M_a + M_b)^{-1} + M_c^{-1}, \quad M^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}.$$

Компоненты векторов  $\vec{r}'$  и  $\vec{R}$  определены во вращающейся системе координат с осью  $\vec{z}$ , направленной по  $\vec{R} = R \vec{e}_R$ , оси  $x$  и  $y$  направлены по сферическим ортам  $\vec{e}_\theta$  и  $\vec{e}_\Phi$  (см. рис.2). Матрица поворота  $\mathcal{D}(\theta, \Phi)$  осуществляет переход из неподвижной системы координат  $XYZ$  во вращающуюся  $x'yz'$  и отличается от стандартной лишь циклической перестановкой строк<sup>/18/</sup>. Уравнение Шредингера в естественных переменных (1) имеет вид

$$H \Psi = E \Psi, \quad H = -\frac{1}{2M} \frac{1}{\mathcal{R}^5} \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} \mathcal{R}^5 \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} + h, \quad (2)$$

$$h = -\frac{1}{2m} \frac{\rho^2}{\mathcal{R}^2} \Delta_{\vec{r}'} + \frac{1}{M} \frac{\rho}{\mathcal{R}^2} \vec{r}' \cdot \nabla_{\vec{r}'} + V + \rho \frac{\vec{J}^2 - 2\vec{L} \cdot \vec{J}}{2M\mathcal{R}^2}.$$

Здесь  $h$  - гамильтониан задачи двух центров в представлении полного момента  $\vec{J} = \vec{L} + \vec{I}$ ,  $\vec{L} = -i [\vec{r}' \cdot \nabla_{\vec{r}'}]$  - орбитальный момент мюона относительно центра масс ядер,  $\vec{I} = \vec{e}_\theta \{ (i/\sin\theta) \partial / \partial \Phi - \mathcal{L}_x + c \operatorname{tg} \theta \cdot \mathcal{L}_z \} + \vec{e}_\Phi \{ -i \partial / \partial \theta - \mathcal{L}_y \}$  - орбитальный момент относительного движения ядер,

$$2\vec{L} \cdot \vec{J} = \mathcal{L}_+ J_- + \mathcal{L}_- J_+ + 2J_z^2$$

- оператор кориолисова взаимодействия,  $J_z = \mathcal{L}_z$ ,

$$\mathcal{L}_\pm := \vec{e}_\pm \cdot \vec{L} = \mathcal{L}_x \pm i \mathcal{L}_y, \quad \vec{e}_\pm = \vec{e}_\theta \pm i \vec{e}_\Phi,$$

$$J_{\pm} := \vec{e}_{\pm} \cdot \vec{J} = J_x \pm i J_y = \pm \frac{\partial}{\partial \theta} + \frac{i}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \phi} + \text{ctg} \theta \mathcal{L}_{\pm}$$

- сферические компоненты  $\vec{L}$  и  $\vec{J}$ . Операторы  $\vec{L}^2$  и  $\vec{J}^2$  определены через эти компоненты соотношениями\*  $\vec{L}^2 = \frac{1}{2}(\mathcal{L}_+ \mathcal{L}_- + \mathcal{L}_- \mathcal{L}_+) + \mathcal{L}_z^2$ ,  $\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(J_+ J_- + J_- J_+) + \frac{1}{2} \text{ctg} \theta (J_- J_+) + J_z^2$ . Кулоновская потенциальная энергия  $V$  и элемент объема  $d\tau$  определяются в переменных  $\mathcal{R}, \mathcal{R}'$  следующим образом:

$$V = -\frac{\sqrt{\rho}}{\mathcal{R}} \left[ \frac{Z_a}{|\vec{r}' + \gamma_a \vec{e}_R|} + \frac{Z_b}{|\vec{r}' + \gamma_b \vec{e}_R|} - Z_a Z_b \right],$$

$$\gamma_a + \gamma_b = 1, \quad \gamma_a = M_b / (M_a + M_b), \quad \gamma_b = M_a / (M_a + M_b),$$

$$d\tau = \mathcal{R}^5 d\mathcal{R} \rho^3 d\mathcal{R}' \sin \theta d\theta d\phi, \quad \rho = 1 + \frac{m}{M} r'^2.$$

В качестве адиабатического базиса выберем полный набор решений задачи двух центров (СДВ):

$$h \Phi_i(\Omega; \mathcal{R}) = E_i(\mathcal{R}) \Phi_i(\Omega; \mathcal{R}), \quad (3)$$

определенных в области  $\Omega = \{\vec{r}' \theta \phi\}$  с элементом объема  $d\Omega = \mathcal{R}^3 \times \rho^3 d\mathcal{R}' \sin \theta d\theta d\phi$  и нормированных условием

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \int d\Omega \Phi_i^*(\Omega; \mathcal{R}) \Phi_j(\Omega; \mathcal{R}) = \delta_{ij}. \quad (4)$$

Здесь  $E_i(\mathcal{R})$  - термы: собственные значения задачи двух центров, зависящие от коллективной переменной  $\mathcal{R}$  как от параметра,  $i$  - набор квантовых чисел. Движение в области  $\Omega$  можно считать быстрым по сравнению с движением по  $\mathcal{R}$  благодаря присутствию в гамильтониане (2) формального параметра малости  $m/M < 1$ , который для мезомолекулярных систем составляет величину  $\sim 0,1$ . Таким образом, термы  $E_i(\mathcal{R})$  можно рассматривать как эффективные потенциалы, в которых осу-

\* Операторы  $J_{\pm}$  отличаются от стандартных понижающих  $\tilde{J}_{+}$  и повышающих  $\tilde{J}_{-}$  операторов:  $\tilde{J}_{\pm} = e^{\mp i\psi} J_{\pm}$ . Последние определены на ортах  $\vec{e}_{\pm} = e^{\mp i\psi} \vec{e}_{\pm}$ :  $\tilde{J}_{\pm} = \vec{e}_{\pm} \cdot \vec{J}$ , в системе координат  $\tilde{x}\tilde{y}\tilde{z}$ , полученной из  $xyz$  поворотом на угол  $\psi$  вокруг оси  $\tilde{z}$  (см. рис.2). Тогда оператор  $\vec{J}^2$  выражается известной формулой  $\vec{J}^2 = \frac{1}{2}(\tilde{J}_{-} \tilde{J}_{+} + \tilde{J}_{+} \tilde{J}_{-}) + J_z^2$ .

ществляется медленное коллективное движение системы трех частиц. Наличие двух притягивающих потенциалов в  $h$  приводит к тому, что в пределе  $\mathcal{R} \rightarrow \infty$  решения (3) локализуются вблизи зарядов  $Z_a$  и  $Z_b$  и переходят в волновые функции разьединенных атомов. Поэтому можно дать асимптотическую классификацию этих решений и представить полную волновую функцию в виде суммы

$$\Psi(\Omega, \mathcal{R}) = \Psi_a(\Omega, \mathcal{R}) + \Psi_b(\Omega, \mathcal{R}), \quad (5)$$

где  $\Psi_a(\Omega, \mathcal{R}) = \sum_i \Phi_{ia}(\Omega; \mathcal{R}) \chi_{ia}(\mathcal{R})$ .

Здесь индекс  $\alpha \equiv a, b$  явно выделен из набора  $i$ , так что соотношение ортогональности (4) принимает вид

$$\langle \Phi_{i\alpha} | \Phi_{j\beta} \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} \equiv I \delta_{\alpha\beta} = \langle \Phi_{\alpha} | \Phi_{\beta} \rangle. \quad (4')$$

Для тождественных ядер возникает дополнительное вырождение, связанное с симметрией  $h$  относительно перестановки ядер  $P_n$ . В этом случае решения  $\Phi_{\alpha} = \{\Phi_{i\alpha}\}$  связаны с  $g$ -четными и  $u$ -нечетными решениями (3) стандартными соотношениями

$$\begin{aligned} \Phi_{i\alpha} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{ig} + \Phi_{iu}), \\ \Phi_{i\beta} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\Phi_{ig} - \Phi_{iu}). \end{aligned} \quad (6)$$

Для получения адиабатической системы уравнений по медленной переменной  $\mathcal{R}$  следует усреднить уравнение (2) по двухцентровым функциям  $\Phi_{i\alpha}(\Omega; \mathcal{R})$ . Это усреднение упрощается, если предварительно перейти от волновой функции  $\Psi$  к  $\tilde{\Psi} = \rho^{3/2} \mathcal{R} \Psi$ . Тогда гамильтониан приобретает вид

$$\tilde{H} = \mathcal{R} \rho^{3/2} H \rho^{-3/2} \mathcal{R}^{-1} = -\frac{1}{2M} \left\{ \frac{\partial^2}{\partial \mathcal{R}^2} + \frac{3}{\mathcal{R}} \frac{\partial}{\partial \mathcal{R}} \right\} + \tilde{h},$$

$$\tilde{h} = \rho^{3/2} h \rho^{-3/2} = -\frac{1}{2m} \frac{\rho^2}{\mathcal{R}^2} \Delta_{\vec{r}'} + \frac{2}{M} \frac{\rho}{\mathcal{R}^2} Q^{(0)} + V + \rho \frac{\vec{J}^2 - 2\vec{L} \cdot \vec{J}}{2M\mathcal{R}^2}, \quad (7)$$

$$Q^{(0)} = -\left( \frac{3}{2} + \vec{r}' \cdot \nabla_{\vec{r}'} \right).$$

При этом собственные функции  $\tilde{\Phi}_{i\alpha}(\Omega; \mathcal{R})$  гамильтониана  $\tilde{h}$  нормированы условием (4') с более простым элементом объема

$$d\tilde{\Omega} = \mathcal{R}^3 d\mathcal{R}' \sin \theta d\theta d\phi,$$

а полный элемент объема равен  $d\tilde{r} = dR d\tilde{\Omega}$ . В результате получаем адиабатическую систему уравнений для вектора решений

$$X_\alpha \equiv \{X_{i\alpha}\} : \{I[\frac{d^2}{dR^2} + 2ME] - V_{\alpha\alpha}\} X_\alpha = \sum_{\beta \neq \alpha} V_{\alpha\beta} X_\beta, \quad (8)$$

где

$$V_{\alpha\beta} = 2Q_{\alpha\beta} \frac{d}{dR} + K_{\alpha\beta} + 2ME_\alpha(R) S_{\alpha\beta} I,$$

$$Q_{\alpha\beta} = -\frac{3}{2} \frac{1}{R} I S_{\alpha\beta} - \langle \tilde{\Phi}_\alpha | \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\Phi}_\beta \rangle,$$

$$K_{\alpha\beta} = \langle \tilde{\Phi}_\alpha | -\frac{\partial^2}{\partial R^2} - \frac{3}{R} \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\Phi}_\beta \rangle.$$

В асимптотической области  $R \rightarrow \infty$  перейдем от безразмерной координаты  $\vec{r}'$  к  $\vec{r} = \vec{r}' R$ , тогда асимптотический гамильтониан задачи двух центров

$$\tilde{h}_{as} = -\frac{1}{2m} p^2 \Delta_{\vec{r}} + \frac{2}{M} \frac{p}{R^2} Q' + V + p \frac{\vec{J}^2 - 2\vec{L} \cdot \vec{J}}{2MR^2} \quad (9)$$

с точностью до членов  $O(R^{-1})$  переходит в гамильтониан разьединенных атомов (ac) и (bc) /10/. Матричные элементы в адиабатических уравнениях (8) при такой замене преобразуются следующим образом:

$$Q_{\alpha\beta} = R^{-1} Q'_{\alpha\beta} + \langle \tilde{\Phi}_\alpha | -\frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\Phi}_\beta \rangle,$$

$$K_{\alpha\beta} = R^{-2} K'_{\alpha\beta} + \langle \tilde{\Phi}_\alpha | -\frac{\partial^2}{\partial R^2} + 2Q' \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial R} | \tilde{\Phi}_\beta \rangle,$$

$$K^{(0)} = -\{(\vec{r}' \cdot \nabla_{\vec{r}'})^2 + 2(\vec{r}' \cdot \nabla_{\vec{r}'})\}.$$

Здесь скалярное произведение (4') определено с элементом объема  $d\tilde{\Omega}_{as} = d\vec{r}' \sin\theta d\theta d\phi$ . Очевидно, при  $R \rightarrow \infty$  локализация  $\tilde{\Phi}_\alpha$  вблизи "своего" заряда  $Z_\alpha$  приводит к экспоненциальному затуханию матричных элементов, связывающих состояния разных разьединенных атомов (ac) и (bc). Это означает, что  $V_{\alpha\beta}(R)$  экспоненциально исчезает при больших  $R$  и уравнения (8) для  $X_\alpha$  и  $X_\beta$  асимптотически расщепляются:

$$\{I[\frac{d^2}{dR^2} + 2ME] - V_{\alpha\alpha}\} X_\alpha = 0. \quad (8')$$

Выполненный переход от (7) к (9) позволил явно выделить операторы

$Q^{(0)} R^{-1} \partial/\partial R$  и  $R^{-2} K^{(0)}$ , ответственные за слабую кинематическую связь в каналах  $a$  и  $b$  в пределе разьединенных атомов, обусловленную отличием  $R$  от якобиевских векторов  $\vec{R}_a$  и  $\vec{R}_b$  (см. рис.1) /10/.

3. Асимптотика волновой функции в пределе разьединенных атомов.

В настоящей работе нас интересует поведение волновой функции  $\Psi = \Psi_a + \Psi_b$  при  $R \rightarrow \infty$  в каналах  $a$  и  $b$ . Поскольку связь между этими каналами экспоненциально мала, достаточно рассмотреть асимптотику одной из компонент, например  $\Psi_b$ . В этом случае вектор  $\vec{r}'$  удобно отсчитывать от ядра  $b$ :

$$\vec{r}' = \vec{r}'_b R = \{\vec{r}'_b - \gamma_b \vec{e}_R\} R,$$

тогда

$$p = 1 + \frac{m}{M} (\vec{r}'_b + \gamma_b \vec{e}_R)^2 = \frac{m}{m_b} p_b \equiv \frac{M_b}{M} p_b,$$

где

$$p_b = (1 + 2 \frac{m_b}{M_b} r'_b \cos \nu_b + \frac{m_b}{M} r_b'^2),$$

$m_b = M_c M_b / (M_c + M_b)$  - приведенная масса мюона в атоме (bc), а

$$M_b = \frac{M_a (M_b + M_c)}{M_a + M_b + M_c} \equiv \left(\frac{1}{M} - \frac{m_b}{M_b^2}\right)^{-1}$$

- приведенная масса ядра  $a$  и атома (bc). Далее от  $\vec{r}'$  и  $R$  перейдем к переменным

$$\vec{r}_N = \sqrt{\frac{m_b}{m}} \vec{r}', \quad R_N = \sqrt{\frac{m_b}{m}} R \equiv \sqrt{\frac{M}{m_b}} R,$$

которые имеют простой физический смысл при  $R \gg 1$ . Действительно, вектор  $\vec{r}_N$ :

$$r_N = \sqrt{p_b} r_b \approx \left\{1 + \frac{m_b}{M_b} \frac{r_b}{R} \cos \nu_b\right\} r_b, \quad (10)$$

переходит при  $r_b^{-1} R \gg 1$  с точностью  $O(\frac{m_b}{m} \frac{r_b^2}{R})$  в якобиевский вектор  $\vec{r}_b$  атома (bc) (см. рис.1). Соответственно медленная переменная  $R_N$ :

$$R_N = \sqrt{\rho_b} R = \left\{ R_b^2 + \frac{m_b}{M_b} r_b^2 \right\}^{1/2} \approx \left\{ 1 + \frac{1}{2} \frac{m_b}{M_b} \frac{r_b^2}{R_b^2} \right\} R_b, \quad (II)$$

переходит при  $r_b^{-1} R_b \gg 1$  с точностью  $O\left\{\frac{m_b}{M_b} \frac{r_b^2}{R_b^2}\right\}$  в модуль якобиевского вектора  $\vec{R}_b = \vec{R} + M_c(M_c + M_b)^{-1} \vec{r}_b \approx \vec{R} + (m_b/M_b) \vec{r}_b$ . После указанных замен имеем следующее уравнение для  $\vec{\Psi}_b$  в единицах  $e = \hbar = m_b = 1$ , индекс  $N$  при  $R_N$  и  $r_N$  и индекс  $b$  при  $M_b$  в дальнейшем будем опускать:

$$\left\{ -\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial R^2} + \frac{1}{M} Q^{(0)} \frac{\partial}{\partial R} + \frac{1}{2\mu R^2} K^{(0)} + h_b^{(0)} - E \right\} \vec{\Psi}_b = 0, \quad (I2)$$

где

$$h_b = -\frac{1}{2} \rho_b^2 \Delta r^2 - \rho_b \left\{ \frac{2}{M_b} \frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial z} - \frac{2}{M} \frac{1}{R^2} Q^{(0)} \right\} + V + \\ + \frac{\rho_b}{2MR^2} (\vec{J}^2 - l_+ J_- - l_- J_+ - 2J_z^2) - \frac{\rho_b}{2M_b R} (p_+ J_- + p_- J_+), \\ \rho_b = 1 + \frac{2}{M_b} \frac{z}{R} + \frac{1}{M} \frac{r^2}{R^2}, \quad V = -\sqrt{\rho_b} \left\{ \frac{Z_b}{r} + \frac{Z_a}{|r + R \vec{e}_r|} - \frac{Z_a Z_b}{R} \right\}.$$

Здесь  $l_{\pm} = l_x \pm i l_y$  и  $p_{\pm} = \pm i p_x - p_y$  - сферические компоненты орбитального момента импульса мюона, отсчитанного от ядра  $b$ .

Рассмотрим асимптотику решений  $\Phi_{ib}(\Omega; R)$  гамильтониана

$$h_b \Phi_{ib}(\Omega; R) = E_{ib}(R) \Phi_{ib}(\Omega; R) \quad (I3)$$

вблизи ядра  $b$ . Для этого разложим  $h_b$  при  $r^{-1} R \gg 1$  по обратным степеням  $R$  и будем искать решения (I3) в виде

$$E_{ib}(R) = E_i^{(0)} + R^{-1} E_i^{(1)} + R^{-2} E_i^{(2)} + \dots, \\ \Phi_{ib}(\Omega; R) = \Psi_i^{(0)}(\Omega) + R^{-1} \Psi_i^{(1)} + \dots, \quad (I4)$$

где  $E_i^{(0)} = -Z_b^2/2n^2$  и  $\Psi_i^{(0)}$  - соответственно энергия и правильная функция нулевого приближения атома ( $b$ ) с фиксированным главным квантовым числом  $n$ . Сохраняя в (I3) члены с точностью  $O(R^{-2})$ , имеем

$$h_b = h^{(0)} + Z_a(Z_b - 1) + V^{(1)} R^{-1} + V^{(2)} R^{-2} + \\ + (\vec{J}^2 - 2\vec{\ell} \cdot \vec{J}) / (2MR^2) + V_J^{(1)} R^{-1} + V_J^{(2)} R^{-2}, \quad (I5)$$

где  $h^{(0)} = -\frac{1}{2} \Delta r^2 - Z_b/r$ ,  $V^{(1)} = -\frac{2}{M_b} \left[ \frac{\partial}{\partial z} + z \left( \Delta r^2 + \frac{Z_b}{2r} \right) \right],$

$$V^{(2)} = gz - \left[ \frac{1}{M} r^2 - \frac{1}{M_b^2} z^2 \right] \frac{Z_b}{2r} - \left( \frac{2}{M_b} \right)^2 z \frac{\partial}{\partial z} - \\ - \frac{1}{2} \left[ \frac{2}{M} r^2 + \left( \frac{2}{M_b} \right)^2 z^2 \right] \Delta r^2 + \frac{2}{M} Q^{(0)},$$

$$V_J^{(1)} = -\frac{1}{2M_b} (p_+ J_- + p_- J_+), \quad V_J^{(2)} = -\frac{1}{M_b^2} z (p_+ J_- + p_- J_+).$$

Здесь первый член в  $V^{(2)}$  соответствует линейному эффекту Штарка;

$g = Z_a(M_b - 1) M_b^{-1} + Z_a Z_b M_b^{-1}$ , причем  $g = Z_a$  при  $Z_b = 1$ . Принимая во внимание, что в  $n$ -слое  $\langle i | V^{(1)} | j \rangle = \langle i | V_J^{(1)} | j \rangle = 0$ , операторы  $V^{(1)}$  и  $V_J^{(1)}$  можно представить в виде

$$V^{(1)} = [h^{(0)}, v^{(1)}], \quad V_J^{(1)} = [h^{(0)}, v_J^{(1)}], \quad (I6)$$

где

$$v^{(1)} = -\frac{1}{M_b} \left\{ r^2 \frac{\partial}{\partial z} + 2z Q^{(0)} \right\},$$

$$v_J^{(1)} = -\frac{1}{M_b} \frac{i}{2} (r_+ J_- + r_- J_+), \quad r_{\pm} = \pm ix - y.$$

Представление (I6) позволяет устранить операторные члены  $\sim R^{-1}$  в гамильтониане (I5) с помощью изометрического преобразования  $S$ :

$$h_b \rightarrow \tilde{h}_b = e^{iS} h_b e^{-iS} \approx h^{(0)} + Z_a(Z_b - 1) R^{-1} + \\ + i[S, h^{(0)}] + (V^{(1)} + V_J^{(1)}) R^{-1} + \tilde{\Lambda} R^{-2}, \quad (I7)$$

$$\tilde{\Lambda} R^{-2} = (\vec{J}^2 - 2\vec{\ell} \cdot \vec{J}) / (2MR^2) + (V^{(2)} + V_J^{(2)}) R^{-2} + \\ + i[S, (V^{(1)} + V_J^{(1)})] R^{-1} + \frac{i^2}{2} [S, [S, h^{(0)}]],$$

$$\Phi_{ib} \rightarrow \Phi_{i\tilde{b}} = e^{iS} \Phi_{ib} \approx \left\{ 1 + iS + \frac{1}{2} i^2 S^2 \right\} \Phi_{ib},$$

потребовав выполнение условия

$$i [S, h^{(0)}] + (V^{(1)} + V_J^{(1)}) R^{-1} = 0,$$

т.е.  $iS = -(v^{(1)} + v_J^{(1)}) R^{-1}$ . В результате получаем явное выражение для эквивалентного оператора  $\tilde{\Lambda}$  без использования стандартного суммирования по полному набору собственных функций гамильтониана  $h^{(0)}$ :

$$\begin{aligned} \tilde{\Lambda} &= \Lambda^0 + \Lambda^J, \quad \Lambda^0 = V^{(2)} - V^{(1)} v^{(1)}, \\ \Lambda^J &= (\vec{J}^2 - 2J_z^2)(2M)^{-1} - V_J^{(1)} v_J^{(1)} - \\ &\quad - (\ell_+ J_- + \ell_- J_+)(2M)^{-1} + V_J^{(2)} - V^{(1)} v_J^{(1)} - V_J^{(1)} v^{(1)}. \end{aligned} \quad (I8)$$

Собственные значения и собственные функции эквивалентного оператора  $\tilde{\Lambda}$  представляют искомые поправки  $E^{(2)}$  в разложении (I4) и правильные функции нулевого приближения  $\tilde{\Psi}^{(0)}$  гамильтониана  $\tilde{h}_b$ . Оператор  $\Lambda^0$  был вычислен в нашей работе<sup>/10/</sup>:

$$\Lambda^0 = -\frac{3}{2} \frac{n}{Z_b} g A_z + \frac{1}{2\mu} \frac{3}{2} \vec{\ell}^2 - \frac{1}{2\mu} \frac{1}{2} (n^2 + 2). \quad (I9)$$

Здесь  $A_z$  и  $\vec{\ell}^2$  — проекция на ось  $z$  вектора Рунге-Ленца и квадрат орбитального момента атома (bc). Вычисление эквивалентного оператора  $\Lambda^J$  упрощается, поскольку в  $n$ -слое справедливы соотношения типа

$$V^{(1)} v = [h^{(0)}, v] = h^{(0)} v^2 - v h^{(0)} v + v h^{(0)} - v^2 h^{(0)} = -v V^{(1)},$$

$$y \frac{\partial}{\partial z} = -z \frac{\partial}{\partial y}$$

и т.д.

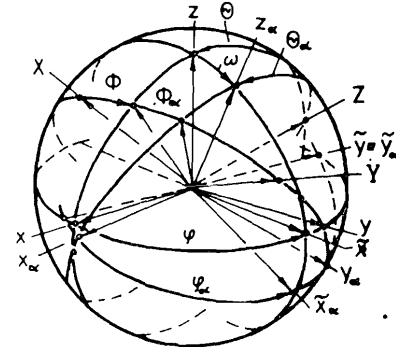
Отсюда сразу получаем

$$\begin{aligned} -V_J^{(1)} v^{(1)} - V_J^{(1)} v_J^{(1)} &= -[V^{(1)}, v^{(1)}] = \\ &= \frac{2}{M_b^2} \left\{ z \frac{\partial}{\partial x} (J_- - J_+) + i z \frac{\partial}{\partial y} (J_- + J_+) \right\} = -2V_J^{(2)} = \\ &= \frac{1}{M_b^2} \left\{ (z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z})(J_- - J_+) + i(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z})(J_- + J_+) \right\} = \\ &= \frac{1}{M_b^2} \{ \ell_+ J_- + \ell_- J_+ \}, \\ -V_J^{(1)} v_J^{(1)} &= -\frac{1}{2} [V_J^{(1)}, v_J^{(1)}] = -\frac{1}{2M_b^2} \{ \vec{J}^2 - 2J_z^2 \}. \end{aligned}$$

Принимая во внимание равенство  $\frac{mb}{Mb} = \frac{mb}{M} - \frac{mb^2}{M_b^2}$ , окончательно имеем

$$\Lambda^J = (2\mu)^{-1} (\vec{J}^2 - \ell_+ J_- - \ell_- J_+ - 2J_z^2). \quad (20)$$

Итак, во втором порядке теории возмущений при центробежном члене формулируется правильная приведенная масса  $\mathcal{M}$ . Отметим, что собственные функции гамильтониана  $h_b$ :  $\Phi_{\alpha}(\Omega; R) \approx (1-iS) \tilde{\Psi}_{\alpha}^{(0)}(\Omega) \approx \tilde{\Psi}_{\alpha}^{(0)}(\Omega_{\alpha})$ , совпадают с волновыми функциями разведенных атомов ( $\alpha c$ ) во вращающейся системе координат  $x_{\alpha} y_{\alpha} z_{\alpha}$  с осью  $z_{\alpha}$ , направленной по якобиевскому вектору  $\vec{R}_{\alpha}$  (см. рис.2), т.е.  $\Omega_{\alpha} = \{ \vec{r}_{\alpha} \theta_{\alpha} \Phi_{\alpha} \}$ . Действительно, оператор  $R^{-1} v^{(1)} \approx -\omega J_y = -1/2 \omega (J_+ - J_-)$  отвечает повороту на угол  $\omega = \vec{R}_{\alpha} \wedge \vec{R}_c : \sin \omega = M_c / (M_c + M_{\alpha}) \sqrt{x^2 + y^2} R^{-1} \approx \omega \ll 1$ , вокруг оси  $\vec{y}$ , перпендикулярной плоскости трех частиц  $a b c$  (см. рис.2)\*; оператор  $R^{-1} v^{(1)}$  переводит  $\vec{r}_N$  в якобиевский вектор  $\vec{r}_{\alpha}$  согласно (II).



$$\cos \theta_{\alpha} = \cos \theta \cos \omega + \sin \theta \sin \omega \cos(\pi - \varphi)$$

$$\operatorname{ctg}(\Phi_{\alpha} - \Phi) = \cos \theta \operatorname{ctg} \varphi + \operatorname{ctg} \omega \frac{\sin \theta}{\sin \varphi}$$

$$\operatorname{ctg} \varphi_{\alpha} = \cos \omega \operatorname{ctg} \varphi + \operatorname{ctg} \theta \frac{\sin \omega}{\sin \varphi}$$

Рис.2. Вращающиеся системы координат  $xyz$  и  $x_{\alpha} y_{\alpha} z_{\alpha}$  заданы на сферических ортах якобиевских векторов  $\vec{R} = \{ R \theta \Phi \}$  и  $\vec{R}_{\alpha} = \{ R_{\alpha} \theta_{\alpha} \Phi_{\alpha} \}$ . Соотношения между углами  $\theta_{\alpha} \Phi_{\alpha}$  и  $\theta \Phi$ , где  $\varphi_{\alpha}$  и  $\varphi$  — углы поворота вокруг осей  $z_{\alpha}$  и  $z$ , взяты из справочника<sup>/18/</sup>.

\* Такой же поворот происходит в стандартном подходе лишь при учете неадиабатической связи, сравни (I6) и формулу (I82) обзора<sup>/5/</sup>.

Правильные функции нулевого приближения  $\tilde{\Psi}^{(0)}$  оператора  $\tilde{\Lambda} = \Lambda^0 + \Lambda^1$  будем искать в виде линейной комбинации

$$\tilde{\Psi}_i^{(0)}(\Omega) = \sum_{m=0}^{\min(J, n-1)} \sum_{n_2=0}^{n-m-1} a_{n_2 m}^i \Psi_{n_1 n_2 m}^{J m \lambda}(\Omega), \quad (21)$$

$$\Psi_{n_1 n_2 m}^{J m \lambda}(\Omega) = \Psi_{n_1 n_2 m}^{(0)}(\mu, \nu) D_{m m_J}^{J \lambda}(\Phi \Theta \Psi),$$

$$D_{m m_J}^{J \lambda} = \left[ \frac{2J+1}{16\pi(1+\delta_{m0})} \right]^{1/2} \{ (-1)^m D_{m m_J}^J(\Phi \Theta \Psi) + \delta D_{-m m_J}^J(\Phi \Theta \Psi) \}$$

кулоновских параболических функций /19/  $\Psi_{n_1 n_2 m}^{(0)}(\mu, \nu)$ ,  $\mu = r + z$ ,  $\nu = r - z$  во вращающейся системе координат  $X'Y'Z'$  (см. рис.2) в представлении полного момента  $J^2$ . Здесь  $m_J$  - проекция момента  $J_z$  на ось  $Z$  неподвижной системы координат  $XYZ$ ,  $\lambda = \delta \cdot (-1)^J$  - собственное значение полной инверсии  $P_{tot}$ :  $(\vec{R} \rightarrow -\vec{R}, \vec{r} \rightarrow -\vec{r})$ ,  $\delta = \pm 1$  - собственное значение оператора  $P_{yz}$ :  $(\Psi \rightarrow \delta - \Psi)$  отражения в плоскости  $yz$ . Легко убедиться, что оператор  $\Lambda$  коммутирует с точными интегралами движения  $J^2, J_z, P_{tot}$ . Тогда собственные значения  $\tilde{\Lambda}_i$  и коэффициенты  $a_{n_2 m}^i$  находятся из секулярного уравнения

$$\sum_{m \neq 0} \sum_{n_2=0}^{\min(J, n-1) - m-1} [\langle n_1 n_2 m | J m \lambda | \tilde{\Lambda} | n_1' n_2' m' | J m \lambda \rangle - \tilde{\Lambda}_i \delta_{n_2 n_2'} \delta_{m m'}] a_{n_2 m}^i = 0.$$

Здесь  $i = \{ J m \delta n q \}$ , значения  $q$  нумеруют в порядке возрастания,  $\tilde{\Lambda}_i$  - корни секулярного уравнения при фиксированных  $J m \lambda n$ . При  $J \geq n-1$  число корней (22) равно  $n^2$ , причем  $n(n+1)/2$  имеет четность  $\lambda = +(-1)^J$ , а  $n(n-1)/2 - \lambda = -(-1)^J$ . Последние вырождены с состояниями противоположной четности. (Очевидно, что это вырождение имеет место только в пределе разъединенных атомов). Таким образом, всего имеется  $n(n+1)/2$  невырожденных корней (22) при фиксированных  $J m \lambda n$  (стандартное  $(2J+1)$ -кратное вырождение  $m_J$  остается). Необходимые выражения для решения секулярного уравнения (22) легко составляются из известных матричных элементов /20/:

$$\langle n_1 n_2 m | A_z | n_1' n_2' m' \rangle = (n_2 - n_1) \delta_{n_2 n_2'} \delta_{m m'},$$

$$\langle n_1 n_2 m | \vec{L}^2 | n_1' n_2' m' \rangle = \delta_{m m'} \left\{ \frac{1}{2} [n^2 - 1 + m^2 - (n_1 - n_2)^2] \right\} \delta_{n_2 n_2'}$$

$$- [ (n_2+1)n_1(n_1+m)(n_2+m+1) ]^{1/2} \delta_{n_2' n_2+1} - [ n_2(n_1+1)(n_1+m+1)(n_2+m) ]^{1/2} \delta_{n_2' n_2-1} \},$$

$$\begin{aligned} \langle n_1 n_2 m | J m \lambda | \ell_+ J_- | n_1 n_2 + 1 m - 1 | J m \lambda \rangle &= [ (n_2+1)(n_1+m) ]^{1/2} \delta_{m m-1}^{J \lambda}, \\ \langle n_1 n_2 m | J m \lambda | \ell_+ J_- | n_1 + 1 n_2 m - 1 | J m \lambda \rangle &= - [ (n_1+1)(n_2+m) ]^{1/2} \delta_{m m-1}^{J \lambda}, \\ \langle n_1 n_2 m | J m \lambda | \ell_- J_+ | n_1 n_2 - 1 m + 1 | J m \lambda \rangle &= [ n_2(n_1+m+1) ]^{1/2} \delta_{m m+1}^{J \lambda}, \\ \langle n_1 n_2 m | J m \lambda | \ell_- J_+ | n_1 - 1 n_2 m + 1 | J m \lambda \rangle &= - [ n_1(n_2+m+1) ]^{1/2} \delta_{m m+1}^{J \lambda}, \\ \langle n_1 n_2 m | J m \lambda | \vec{J}^2 - 2J_z^2 | n_1' n_2' m' | J m \lambda \rangle &= \{ J(J+1) - 2m^2 \} \delta_{n_2 n_2'} \delta_{m m'}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \delta_{m m-1}^{J \lambda} &= [ 1 + (\sqrt{2}-1) \delta_{m1} ] [ (J-m+1)(J+m) ]^{1/2}, \\ \delta_{m m+1}^{J \lambda} &= [ 1 + (\sqrt{2}-1) \delta_{m0} ] [ (J+m-1)(J-m) ]^{1/2}, \\ \delta_{00}^{J \lambda} = \delta_{01}^{J \lambda} = \delta_{10}^{J \lambda} &= 0 \quad \text{при } \delta = -1. \end{aligned}$$

Решение аналогичного секулярного уравнения в канале  $a$  позволит завершить построение полной классификации САВ в пределе разъединенных атомов.

Для нахождения асимптотики волновой функции (12) удобнее, однако, воспользоваться собственными функциями оператора  $h_b + K^{(0)}/2\mu R^2$ , явно присутствующего в уравнении (12). Поскольку эквивалентный оператор  $K^{(0)}$  в  $n$ -слое равен /10/

$$K^{(0)} = -1/2 \vec{L}^2 + 1/2 (n^2 + 2),$$

то соответствующий эквивалентный оператор  $\Lambda = 2\mu \tilde{\Lambda} + K^{(0)}$  имеет вид

$$\Lambda = -3 \frac{n}{Z_b} \mu g A_z + \vec{L}^2, \quad (23)$$

$$\text{где } \vec{L}^2 = (\vec{J} - \vec{\ell})^2 = \vec{J}^2 - \ell_+ J_- - \ell_- J_+ - 2J_z^2 + \vec{\ell}^2$$

- квадрат полного орбитального момента ядра  $a$  относительно атома (Вс). Его собственные функции  $\Psi_i^{(0)}$  находятся в результате решения секулярного уравнения (22) при замене  $\tilde{\Lambda}$  на  $\Lambda$ . Усреднение (12) по этим функциям приводит к асимптотической системе уравнений, которая позволяет найти функции  $\chi_{ib}(R)$  с точностью  $O(R^{-1})$ :

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} + 2M \cdot E - V_{ii}(R) \right\} \chi_{ib}(R) = \frac{2}{R} \sum_j Q_{ij}^{(0)} \frac{d}{dR} \chi_{ib}(R), \quad (24)$$



где

$$Q_{ij}^{(0)} = \frac{1}{2} \langle \Psi_i^{(0)} | [h^{(0)}, r^2] | \Psi_j^{(0)} \rangle = \frac{1}{2} (E_n^{(0)} - E_n'^{(0)}) \langle \Psi_i^{(0)} | r^2 | \Psi_j^{(0)} \rangle$$

$$V_{ii}(R) = 2M [E_n^{(0)} + Z_a(Z_b - 1)R^{-1}] + \Lambda_i R^{-2}$$

Систему уравнений (24) можно также получить, исходя из уравнения Шредингера для трех частиц в якобиевских переменных  $\vec{R}_b, \vec{r}_b$  (см. рис. 1):

$$\left\{ -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R_b^2} + h_b^{(0)} - \frac{Z_a}{|\vec{R}_b + (M_b - 1)\vec{r}_b|} + \frac{Z_a Z_b}{|\vec{R}_b - M_b^{-1}\vec{r}_b|} + \frac{\vec{L}^2}{2\mu R_b^2} - E \right\} \Psi = 0 \quad (25)$$

Здесь вектор  $\vec{r}_b$  задан в системе координат с осью  $Z_b$ , направленной по вектору  $\vec{R}_b$  (см. рис. 2),  $h_b^{(0)} = -1/2 \Delta \vec{r}_b - Z_b / r_b$ , а элемент объема равен  $d\tau_b = d\vec{r}_b dR_b \sin\theta_b d\theta_b d\Phi_b$ . Асимптотический вид (25) в канале  $b$  совпадает с точностью  $O(R_b^{-2})$  с уравнением для задачи рассеяния заряженной частицы  $a$  на атоме ( $b$ ) в дипольном приближении<sup>/15/</sup>.

$$\left\{ -\frac{1}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial R_b^2} + h_b - E \right\} \Psi_b(\vec{R}_b, \vec{r}_b) = 0,$$

$$h_b = h_b^{(0)} + Z_a(Z_b - 1)R_b^{-1} + \Lambda_b / 2\mu R_b^2, \quad (26)$$

$$\Lambda_b = -3 \frac{n}{Z_b} \mu g A_{Z_b} + \vec{L}^2$$

Переход в этом уравнении от  $R_b$  к  $R = \{R_b^2 + \mu^{-1}r_b^2\}^{1/2}$  с точностью  $O(R^{-2})$  и усреднение по правильным функциям нулевого приближения  $h_b$  дает систему уравнений, совпадающую с (24). Может показаться, что использование естественных переменных (I) только усложняет асимптотический вид (26) в канале  $b$ , поскольку появляется слабая кинематическая связь  $\sim R^{-1} \partial / \partial R$ . В действительности, однако, это минимальное усложнение есть следствие единого описания каналов  $a$  и  $b$  с помощью одного полного ортогонального набора САВ. Последнее означает, что в данном подходе отсутствуют трудности, присущие методу сильной связи каналов и решена проблема введения криволинейных координат в адиабатическом базисе. (История данного вопроса освещена в обзоре<sup>/17/</sup>).

Покажем теперь, как формируются физические граничные условия задачи рассеяния в естественных переменных. Для этого рассмотрим асимптотику решений системы уравнений (24) в канале  $i = |Jm_T \epsilon n q\rangle$ . Ограничиваясь случаем  $Z_a = Z_b = 1$ , наиболее важным в мезоатомной физике, и оставляя в (24) главные члены, нетрудно получить

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} + k_i^2 \left( 1 - \frac{2 \langle i | r^2 | i \rangle}{2\mu R^2} \right) - \frac{\Lambda_i}{R^2} \right\} X_{ib}(R) = 0, \quad (27)$$

$$\frac{d}{dR} X_{jb}(R) = \frac{k_i^2 \langle i | r^2 | j \rangle}{2\mu R} X_{ib}(R).$$

Здесь  $i$  и  $j$  принадлежат разным  $n$ ,  $k_i^2 = 2\mu(E - E_i^{(0)})$ ,  $E_i^{(0)} = -1/2n^2$ ; было использовано правило сумм

$$2 \sum_j \frac{Q_{ij}^{(0)} Q_{ji}^{(0)}}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} = \langle i | r^2 Q^{(0)} | i \rangle = \langle i | r^2 | i \rangle.$$

Решение (27) можно представить в виде  $(k_i \langle i | r^2 | j \rangle \ll 2\mu R)$ :

$$X_{ib}(R) \approx B_i \sin \left\{ k_i R \left( 1 - \frac{\langle i | r^2 | i \rangle}{2\mu R^2} - \frac{\Lambda_i}{2k_i^2 R^2} \right) + \delta_i \right\} \quad (28)$$

$$\approx B_i \left[ \sin \left( k_i R - \frac{\Lambda_i}{2k_i R} + \delta_i \right) - \frac{k_i \langle i | r^2 | i \rangle}{2\mu R} \cos \left( k_i R - \frac{\Lambda_i}{2k_i R} + \delta_i \right) \right],$$

$$X_{jb}(R) \approx -B_i \frac{k_i \langle i | r^2 | j \rangle}{2\mu R} \cos \left( k_i R - \frac{\Lambda_i}{2k_i R} + \delta_i \right).$$

Здесь в фазе  $\delta_i$  фазовый сдвиг  $\delta_i^D$  от дальнего действующего дипольного потенциала  $\Lambda_i R^{-2}$  выделяется явно:  $\delta_i = \delta_i^D + \delta_i^C$ , согласно теории квантового дефекта<sup>/17/</sup>. Выражение для  $\delta_i^D$  дано также в приложении. Фаза рассеяния  $\delta_i^C$  и амплитуда  $B_i$  находятся в результате численного решения адиабатической системы уравнений (8) с асимптотическим условием (28) с помощью алгоритмов, разработанных в работе<sup>/21/</sup>. Тогда, используя свойство полноты САВ, получим асимптотику полной волновой функции  $\Psi$  в канале  $b$  с точностью  $O(R^{-1})$ :

$$\begin{aligned} \Psi_b(\Omega, R) &= \Psi_i^{(0)}(\Omega_b) X_{ib}(R) + \sum_{j \neq i} \Psi_j^{(0)}(\Omega_b) X_{jb}(R) = \\ &= \Psi_i^{(0)}(\Omega_b) \left\{ \sin \left[ k_i R - \Lambda_i / 2k_i R + \delta_i \right] - \right. \\ &\quad \left. - \frac{k_i r_b^2}{2\mu R} \cos \left[ k_i R - \Lambda_i / 2k_i R + \delta_i \right] \right\} B_i. \end{aligned}$$

При условии  $k_i r_b^2 \ll 2\mu R$  имеем

$$\Psi_b(\Omega, R) \approx \Psi_i^{(0)}(\Omega_b) \sin \left[ k_i \left( R - \frac{r_b^2}{2\mu R} \right) - \frac{\Lambda_i}{2k_i R} + \delta_i \right] B_i \approx \Psi_i^{(0)}(\Omega_b) \sin \left[ k_i R_b - \frac{\Lambda_i}{2k_i R_b} + \delta_i \right] B_i \quad (29)$$

Таким образом, мы показали, что учет слабой кинематической связи в уравнениях (24) приводит к восстановлению модуля якобиевского вектора  $R_b \approx R - r_b^2/2\mu R$  (см. (II)) в асимптотике полной волновой функции (5) при больших, но конечных  $R$ . Это означает, что асимптотика решений  $\chi_{ib}(R)$  адиабатической системы уравнений (8) в естественных переменных согласована с физическими граничными условиями (29) задачи рассеяния в канале  $b$ . Очевидно, что в канале  $a$  физические граничные условия также удовлетворяются, поскольку и в этом случае естественные переменные (I) переходят в соответствующую якобиевскую пару  $\vec{R}_a, \vec{r}_a$  (см. рис. I).

#### 4. Обсуждение результатов

Возможность точной и достаточно простой постановки физических граничных условий в САВ связано с тем, что, в отличие от стандартного<sup>3,5/</sup>, в нем с самого начала учитывается конечность масс частиц  $a$  и  $b$ . Это приводит к тому, что при решении конкретных задач рассеяния необходимо вычислять термы и волновые функции задачи двух центров в естественных переменных для каждого набора масс  $M_a$  и  $M_b$ . С этой точки зрения данный подход является естественным развитием гиперсферического адиабатического метода, предложенного в работах<sup>8/</sup> для описания гелиоподобных систем в приближении бесконечно тяжелой массы ядра. Фазы  $\delta_i$  и амплитуды  $B_i$ , полученные из численного решения адиабатической системы уравнений (8) с асимптотическим условием (28), могут быть использованы для вычисления сечений низкоэнергетических процессов рассеяния в системе трех частиц. Для неупругого рассеяния атома на ионе с изменением орбитального момента атома:  $|n\ell^0 m_\ell^0\rangle \rightarrow |n\ell m_\ell\rangle$ , фазы и амплитуды известны<sup>16,17/</sup>:  $\delta_i = \delta_i^D$ ,  $B_i = 1$ . Если ограничиться дипольным приближением<sup>15/</sup>. Этот простой пример позволяет наглядно продемонстрировать связь адиабатических асимптотик с амплитудой рассеяния таких переходов:

$$\Psi_{bk, n\ell^0 m_\ell^0}(\vec{R}_b, \vec{r}_b) \underset{r_b^{-1} R_b \rightarrow \infty}{\approx} \sum_{\ell m_\ell} \Psi_{n\ell m_\ell}^{(0)}(\vec{r}_b) \left\{ \delta_{\ell\ell^0} \delta_{m_\ell m_\ell^0} e^{ik \cdot \vec{R}_b} + R_b^{-1} e^{ik \cdot R_b} f_{n\ell m_\ell, n\ell^0 m_\ell^0}(\vec{N}, \vec{N}_0) \right\}$$

Здесь единичные векторы  $\vec{N}_0 = \vec{k}/k$  и  $\vec{N} = \vec{R}_b/R_b$  характеризуют направление падающих и рассеянных волн, а ось квантования орбитальных моментов для определенности считается направленной вдоль вектора  $\vec{N}_0$ . Тогда согласно работам<sup>15,24/</sup> выражение для амплитуды рассеяния, сопровождающегося переходом атома ( $bc$ ) из состояния  $|n\ell^0 m_\ell^0\rangle$  в состояние  $|n\ell m_\ell\rangle$ , можно представить в виде

$$f_{n\ell m_\ell, n\ell^0 m_\ell^0}(\vec{N}, \vec{N}_0) = \frac{4\pi}{2ik} \sum_{J m_J q} \left\{ e^{i(2S_q(J, k) - J\pi)} \times \Phi_{n\ell^0 m_\ell^0}^{J m_J \lambda q}(-\vec{N}_0) - \Phi_{n\ell m_\ell}^{J m_J \lambda q}(\vec{N}_0) \right\} \Phi_{n\ell m_\ell}^{J m_J \lambda q}(\vec{N})$$

Здесь  $S_q(J, k) = S_i^D + \frac{\pi}{2} J$  - собственные фазы в  $\Lambda$ -представлении,  $i = \{J m_J \lambda n q\}$ , а  $\Phi_{n\ell m_\ell}^{J m_J \lambda q}(\vec{N})$  - полный набор функций на единичной сфере:

$$\Phi_{n\ell m_\ell}^{J m_J \lambda q}(\vec{N}) = \sum_{L m_L} U_{J\lambda}(q|\ell L) C_{L m_L \ell m_\ell}^{J m_J} Y_{L m_L}(\vec{N}),$$

который определяет собственные функции оператора  $\Lambda$  в неподвижной системе координат:

$$\Psi_i^{(0)}(\vec{r}_b, \vec{N}) = \sum_{\ell m_\ell} \Psi_{n\ell m_\ell}^{(0)}(\vec{r}_b) \Phi_{n\ell m_\ell}^{J m_J \lambda q}(\vec{N}),$$

при этом коэффициенты  $U_{J\lambda}(q|\ell L)$  связаны с решениями  $a_{n_2 m}^i$  секулярного уравнения (22) для  $\Lambda$  ортогональным преобразованием:

$$U_{J\lambda}(q|\ell L) = \sum_{m=0}^{\min(\ell, J)} \sum_{n_2=0}^{n-m-1} G_{mL}^{\ell J \delta} A_{n\ell m}^{n_1 n_2} a_{n_2 m}^{J m_J \delta n q},$$

где

$$G_{mL}^{\ell J \delta} = (-1)^{\ell+m} \frac{1 + \delta(-1)^{J-\ell-L}}{[2(1+\delta m_0)]^{1/2}} C_{\ell m J-m}^{10}$$

матрица Чэнга-Фано<sup>5,22/</sup>, связывающая угловые волновые функции в неподвижной  $XYZ$  и вращающейся  $x_b y_b z_b$  системах координат (рис. 2),  $A_{n\ell m}^{n_1 n_2}$  - матрица Тартера<sup>23/</sup>, связывающая кулоновские сферические и параболические функции. Это преобразование характеризуется полной четностью  $\lambda = (-1)^{\ell+L}$ , поэтому необходимые  $a_{n_2 m}^{J m_J \delta n q}$  отбираются согласно условию  $\delta = (-1)^{J-\ell-L}$ . Построение амплитуды рассеяния для неупругих переходов с изменением главного квантового числа  $n$  и процессов перезарядки также не вызывает принципиальных затруднений и осуществляется согласно работам<sup>22,25/</sup>.

В заключение авторы благодарят И.В.Комарова, Е.А.Соловьеву за помощь в работе, Ю.Н.Демкова, С.П.Меркурьева, Л.И.Пономарева, Ю.А.Симонова и участников их семинаров за полезные обсуждения.

### Приложение

Асимптотика решения уравнения Шредингера с произвольным дипольным потенциалом

$$\left\{ \frac{d^2}{dR^2} - \frac{\Lambda_i}{R^2} + k_i^2 \right\} X_i(R) = 0$$

имеет вид [17]:

$$X_i(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \sin(k_i R + S_i^D).$$

При  $\Lambda_i \geq -1/4$ ,  $\lambda \equiv \lambda_R = -1/2 + \sqrt{1/4 + \Lambda_i}$

$$S_i^D = -\frac{\pi}{2} \lambda_R.$$

При  $\Lambda_i < -1/4$ ,  $\lambda \equiv \lambda_R + i \lambda_I = -1/2 + i \sqrt{-1/4 + |\Lambda_i|}$

$$S_i^D = -\frac{\pi}{4} + \Phi(k_i, \lambda_I),$$

$$\Phi(k_i, \lambda_I) = \arctg \left\{ \left( \text{th} \frac{\pi \lambda_I}{2} \right) \text{tg} \left[ \lambda_I \ln \frac{2}{k_i} + \arg \Gamma(1 + i \lambda_I) \right] \right\}$$

Таблица. Собственные значения  $\Lambda_i$  оператора  $\Lambda$  для мезомолекулы в канале в  $\mu = \text{II}, 6\text{I}5\text{I}7, g = \text{I}, n = 4$

	0	1	2	3	4	5	6
1	-415.18	-413.26	-409.43	-403.68	-396.01	-386.43	-374.93
2	-132.41	-272.81	-268.92	-263.09	-255.32	-245.61	-233.95
3	146.41	-130.44	-132.38	-126.47	-118.58	-108.73	-96.90
4	421.13	8.00	-126.50	-120.59	-112.72	-102.87	-91.06
5		148.43	12.00	6.01	14.02	24.03	36.04
6		284.81	146.39	17.99	25.98	35.96	47.95
7		423.27	152.49	152.48	160.59	170.73	182.90
8			288.92	158.56	166.67	176.80	188.95
9			427.44	295.09	303.32	313.61	325.95
10				433.71	442.06	452.51	465.04

Расчеты выполнены по программе, составленной А.Г.Абрашкевичем.

### Литература

1. Мотт Н., Месси Г. Теория атомных столкновений. М., "Мир", 1969.
2. Пономарев Л.И. Atomkernenergie, 1983, vol.43, p.175.
3. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., "Наука", 1976.
4. Gochova A.D. et al. Phys.Lett.B, 1985, vol.153, p.349; Bakalov D. et al. Phys.Lett.B, 1985, vol.161, N1,2,3, p. 5.
5. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ, 1982, т.13, вып.6, с.1336; Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. 1979, J.Phys.B, vol.12, p.567; Ponomarev L.I., Vinitsky S.I., Vukajlovic F.R. J.Phys.B, 1980, vol.13, p.847; Ponomarev L.I., Vukajlovic F.R., Somov L.N. J.Phys.B, 1981, vol.14, p.591; Виноцкий С.И., Мележик В.С., Пономарев Л.И. ЯФ, 1982, т.32, с.465.
6. Мележик В.С., Пономарев Л.И., Файфман М.П. 1983, ЖЭТФ, т.85, с.434; Adamczak A., Melezhik V.S. Preprint IJNR, E4-86-215, Dubna, 1986; Melezhik V.S., Wozniak J. Preprint JINR, E4-85-953, Dubna, 1985; Adamczak A., Melezhik V.S., Menshikov L.I. Preprint JINR, E4-86-29, 1986, Dubna.
7. Delos J.B. Rev.Mod.Phys., 1981, vol.53, p.287.
8. Macek J.H. J.Phys. B, 1968, vol.1, p.831; Fano U.Rep.Progr.Phys., 1983, vol.46, p.97; Macek J. Phys.Rev.A, 1985, vol.31, p.2162.
9. Soloviev E.A., Vinitsky S.I. J.Phys. B, 1985, vol.18, p.1557.
10. Виноцкий С.И., Кадомцев М.Б. Препринт ОИЯИ, P4-86-244, 1986, Дубна.
11. Botero J., Greene C.H. Phys.Rev.A, 1985, vol.32, p.1249.
12. Macek J., Jerjian K.A. Phys.Rev.A, 1986, vol.33, p.233.
13. Гусев В.В., Касчиев М.С. Препринт ОИЯИ, PII-85-758, 1985, Дубна.
14. Nikitin S.I., Ostrovsky V.N. J.Phys.B, 1978, vol.11, p.1681; 1982, 15, p.1609; Островский В.Н., Соловьев Е.А. ЖЭТФ, 1974, 66, с.1590.
15. Островский В.Н. ЖЭТФ, 1977, т.73, 2077.
16. Green C., Fano U., Strinati G. Phys.Rev.A, 1979, vol.19, p.1485.
17. Green C., Rau A.R.P., Fano U. Phys.Rev.A, 1982, vol.26, p.2441.
18. Варшавович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. М., "Наука", 1975.
19. Kadomtsev M.B., Vinitsky S.I. J.Phys.B, 1985, vol.18, p.1689.
20. Englefield M.J. Group Theory and the Coulomb problem. Wiley-Interscience, New York, 1985.
21. Melezhik V.S. J.Comp.Phys., 1986, vol. 65, p. 165.
22. Chang E.S., Fano U. Phys.Rev.A, 1972, vol 6, p.173.
23. Tarter C.B. J.Math.Phys., 1970, vol 11, p.3192.
24. Абрамов Д.И., Комаров И.В. ТМФ, 1975, т.22, с.253.
25. Квицинский А.А., Комаров И.В., Меркурьев С.П. ЯФ, 1983, т.38, с.101.

Рукопись поступила в издательский отдел

3 июля 1986 года.

## НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
D13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
D2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
D1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
D17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
D10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
D4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
D11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.
D13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна 1985.	4 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

Виницкий С.И., Вукайлович Ф.Р., Кадомцев М.В. P4-86-439  
Адиабатическое представление задачи трех тел  
в пределе разъединенных атомов в естественных переменных

Для двухцентральной задачи в пределе разъединенных атомов получен эквивалентный оператор  $\bar{\Lambda}$ , снимающий кулоновское вырождение во втором порядке теории возмущений. Собственные значения и собственные функции оператора  $\bar{\Lambda}$  позволяют построить полную классификацию состояний задачи двух центров в естественных переменных согласованного адиабатического базиса /CAB/. Усреднение полного гамильтониана задачи трех тел по CAB приводит к системе адиабатических уравнений по медленной переменной  $R$  - гиперрадиусу системы трех частиц. Показано, что асимптотика этой системы уравнений согласуется с физическими условиями задачи рассеяния.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Vinitsky S.I., Vucajlovich F.R., Kadomtsev M.B. P4-86-439  
Adiabatic Representation for Three-Body Problem  
in the Limit of Separated Atom in Suitable Coordinates

For the two-center problem in the limit of separated atoms an equivalent operator  $\bar{\Lambda}$  is found removing the Coulomb degeneracy in the second order of perturbation theory. Eigenvalues and eigenfunctions of the operator  $\bar{\Lambda}$  allow us to construct a complete classification of states of the two-center problem in suitable coordinates, a compatible adiabatic basis (CAB). Averaging of the total Hamiltonian of a three-body problem over the CAB in a system of adiabatic equations in slow variable  $R$  the hyperradius of the three-body problem. It is shown that the asymptotics of that system of equations is compatible with the physical boundary conditions of the scattering problem.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986