объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-86-696

С.И.Виницкий, М.Б.Кадомцев*

АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ В ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ

Постановка задачи

Направлено в "J.Phys.B."

*Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова, Москва.

1986

I. Введение

Хорошо известно, что применение адиабатического метода в физике атомных столкновений основано на адиабатическом разделении быстрого движения электронов от медленного движения ядер[1]. Фундаментальную роль здесь играет задача о движении электрона в поле двух фиксированных кулоновских центров. Разделение переменных в этой задаче позволяет дать полную классификацию состояний электрона и построить эффективные алгоритмы ее решения[2]. Отметим, что несмотря на давность и кажущуюся простоту задачи двух центров, изучение аналитических свойств ее решений было выполнено лишь в самое последнее время[3]. В результате задача о медленных столкновениях водородоподобного атома с ядром получила исчерпывающее решение[4].

При переходе к задачам мезоатомной физики ядра уже нельзя считать бесконечно тяжелыми по сравнению с мюоном, поэтому желательно ввести новые адиабатические переменные, с самого начала учитывающие конечность масс ядер. В работах[5,6] было показано, что в качестве медленной переменной $\mathcal{R}_G$ следует использовать первый линейный инвариант тензора инерции системы трех частиц (см. рис. I):

$$\mathcal{R}_G^2 = MR^2 + mr^2 = m_a r_a^2 + \mu_a R_a^2 = m_b r_b^2 + \mu_b R_b^2. \qquad (\text{I})$$

Если частица c – мюон, а частицы a и b – ядра, то систему трех частиц естественно описывать якобиевской парой $\vec{R}$, $\vec{r}$ и соответствующими приведенными массами ядер M и мюона m (см. рис. I). Тогда медленную переменную $\mathcal{R}_G$ можно рассматривать как (гипер)радиус пятимерной сферы S^5, заданной сферическими углами якобиевских векторов $\vec{R}$ и

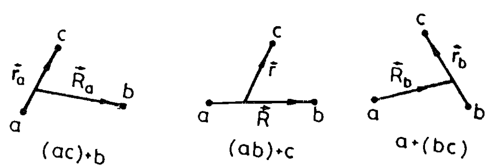


Рис. I. Координаты Якоби системы трех частиц a, b, c и соответствующие им приведенные массы:

a) $\vec{r}_a, \vec{R}_a$: $m_a^{-1} = M_a^{-1} + M_c^{-1}$, $\mu_a^{-1} = (M_a + M_c)^{-1} + M_b^{-1}$

b) $\vec{r}_b, \vec{R}_b$: $m_b^{-1} = M_b^{-1} + M_c^{-1}$, $\mu_b^{-1} = (M_b + M_c)^{-1} + M_a^{-1}$

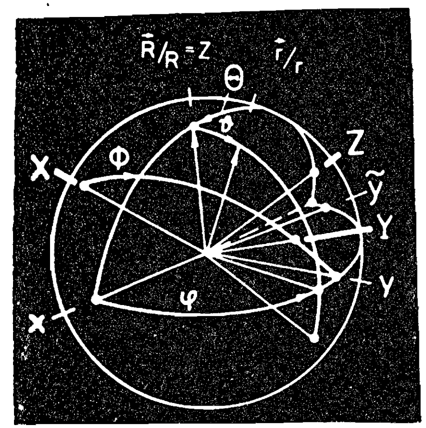
c) $\vec{R}, \vec{r}$: $M^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}$, $m = (M_a + M_b)^{-1} + M_c^{-1}$.

$\vec{r}$: Θ, Φ и ϑ, φ (см. рис.2), а также дополнительным углом α [6,7]:

$$R = \frac{1}{\sqrt{M}} \mathcal{R}_G \sin\alpha/2 \qquad (2)$$
$$r = \frac{1}{\sqrt{m}} \mathcal{R}_G \cos\alpha/2 \, .$$

Движение на сфере S^5 считается быстрым, и полный набор собственных функций и собственных значений угловой части гамильтониана трех частиц при каждом фиксированном значении $\mathcal{R}_G$ образует адиабатический базис (АБ) и термы гиперсферической задачи двух центров. Усреднение по гиперсферическому АБ приводит к системе связанных обыкновенных дифференциальных уравнений по медленной переменной $\mathcal{R}_G$. Такая параметризация уже не зависит от выбора конкретной якобиевской пары и позволяет описывать процессы рассеяния типа $(ac) + b \to a + (bc)$, поскольку гиперрадиус $\mathcal{R}_G$ при $\mathcal{R}_G \gg 1$ переходит с точностью до множителя в якобиевские векторы R_a и R_b [8,9] (см. рис. Ia и Ib):

$$\mathcal{R}_G \approx \sqrt{\mu_a} R_a \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m_a}{\mu_a} \frac{r_a^2}{R_a^2}\right) \approx \sqrt{\mu_b} R_b \left(1 + \frac{1}{2} \frac{m_b}{\mu_b} \frac{r_b^2}{R_b^2}\right).$$



ис.2. Вращающаяся система координат xyz задана на сферических ортах вектора $\vec{R} = \{R\Theta\Phi\}$. Вектор $\vec{r} = \{r\vartheta\varphi\}$ задан во вращающейся системе координат xyz: угол φ – поворот вокруг z, отсчитывается от оси x, угол ϑ – поворот вокруг $\tilde{y}$, отсчитывается от оси z, ось $\tilde{y}$ перпендикулярна плоскости трех частиц.

В настоящей работе в результате использования точных интегралов ижения: полного момента $\vec{J}^2$, его проекции J_Z на ось Z неподвиж-й системы координат и полной четности P_{tot}, гиперсферическую задачу двух центров удалось свести к системе J +I-двумерных краевых задач в области $\omega=\{\alpha,\vartheta\}$. Показано, что при малых $\mathcal{R}_G$ адиабатический базис и термы переходят соответственно в собственные функции и собственные значения угловой части оператора Лапласа на сфере S^5. В результате найдена асимптотика полной волновой функции в точке тройного соударения $\mathcal{R}_G\to 0$ с явно выделенной логарифмической особенностью Фока[7] по медленной переменной $\mathcal{R}_G$. Это означает, что гиперсферический адиабатический базис удовлетворяет физическим граничным условиям задачи рассеяния при $\mathcal{R}_G\ll 1$. Классификация состояний гиперсферического АБ в пределе разъединенных атомов $\mathcal{R}_G\gg 1$ дана в наших предыдущих работах[8,9]. Там же доказана согласованность АБ с физическими граничными условиями задачи рассеяния для процессов типа: $(ac)+b\to a+(bc)$. Полученные асимптотики позволяют использовать известные численные алгоритмы[I0] для нахождения гиперсферического АБ при всех значениях $\mathcal{R}_G$ и исследовать его аналитические свойства. В результате появляется возможность адекватного описания медленных мезоатомных столкновений в проблеме мюонного катализа[II].

2. Постановка задачи

Рассмотрим систему трех кулоновских частиц a, b и c с зарядами Z_a, Z_b и Z_c=-I и массами $M_a \geq M_b > M_c = 1$, $e=\hbar=M_c=1$, и будем называть частицы a и b ядрами, а частицу c -мюоном. Уравнение Шредингера в якобиевских координатах $\vec{R}, \vec{r}$ (см. рис.I) имеет стандартный вид:

$$H\Psi = E\Psi, \quad H = T + \tilde{V}, \quad T = -\frac{1}{2M}\Delta_{\vec{R}} - \frac{1}{2m}\Delta_{\vec{r}}$$
$$M^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}, \quad m^{-1} = 1 + (M_a+M_b)^{-1}. \tag{3}$$

Будем считать, что векторы $\vec{R}$ и $\vec{r}$ заданы сферическими компонентами $\vec{R}=\{R\,\Theta\,\Phi\}$ и $\vec{r}=\{r\,\vartheta\,\varphi\}$ (см. рис.I,2), поскольку выражение для потенциальной энергии:

$$\tilde{V} = -\frac{Z_a}{|\vec{r}+\gamma_a\vec{R}|} - \frac{Z_b}{|\vec{r}+\gamma_b\vec{R}|} + \frac{Z_a Z_b}{R} \tag{4}$$

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

зависит от модулей векторов $|\vec{R}|$, $|\vec{r}|$ и угла ϑ между ними и не зависит от ориентации треугольника abc в пространстве (рис.2). Тогда оператор кинетической энергии T преобразуется к виду[I2]:

$$T = -\frac{1}{2M}\frac{1}{R^2}\frac{\partial}{\partial R}R^2\frac{\partial}{\partial R} - \frac{1}{2m}\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\vec{\mathcal{L}}^2}{2mr^2} + \frac{(\vec{J}-\vec{\mathcal{L}})^2}{2MR^2}.$$

Здесь $\vec{J}$ - полный орбитальный момент, $\vec{\mathcal{L}}$ - орбитальный момент мюона. Переход согласно (2) к гиперсферическим координатам $\{\mathcal{R},\Omega\} = \{\mathcal{R},\alpha\,\vartheta\,\varphi\,\Theta\,\Phi\}$ (здесь и далее индекс G у $\mathcal{R}_G$ будет опускаться) позволяет придать гамильтониану H особенно изящный вид:

$$H = -\frac{1}{2}\frac{1}{\mathcal{R}^5}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}}\mathcal{R}^5\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} + h. \tag{5}$$

Здесь h – угловая часть гамильтониана на сфере S^5:

$$h = -\frac{1}{2\mathcal{R}^2}\left\{\frac{4}{\sin^2\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} - \vec{\mathcal{L}}^2\right) - \frac{\vec{J}^2 - 2\vec{\mathcal{L}}\vec{J}}{\sin^2\alpha/2}\right\} + \frac{1}{\mathcal{R}}V(\alpha,\vartheta) \tag{6}$$

зависит от $\mathcal{R}$ как от параметра. Потенциальная энергия $\tilde{V} = \mathcal{R}^{-1}V(\alpha,\vartheta)$

$$V = \frac{\sqrt{M}}{\sin\alpha/2}\left[-\sum_{p=a,b} Z_p\left\{\frac{M}{m}\operatorname{ctg}^2\alpha/2 + 2\gamma_p\sqrt{\frac{M}{m}}\operatorname{ctg}\alpha/2\cos\vartheta + \gamma_p^2\right\}^{-1/2} + Z_a Z_b\right] \tag{7}$$

обращается в бесконечность в точке тройного соударения $\mathcal{R}$ =0 и в точках парных соударений частиц:

$$\begin{array}{lll} (ac) & \vartheta = \pi & \operatorname{ctg}\alpha/2 = \gamma_a\sqrt{m/M} \\ (bc) & \vartheta = 0 & \operatorname{ctg}\alpha/2 = |\gamma_b|\sqrt{m/M} \\ (ab) & \vartheta \in [0,\pi] & \alpha = 0. \end{array}$$

Волновая функция Ψ определена в области $\{\mathcal{R},\Omega\} = \{0 \leq \mathcal{R} < \infty, 0\leq\alpha\leq\pi, 0\leq\vartheta\leq\pi, 0\leq\varphi\leq 2\pi, 0\leq\Theta\leq\pi, 0\leq\Phi\leq 2\pi\}$ и для связанных состояний системы трех частиц (мезомолекулы) нормирована условием

$$\int \mathcal{R}^2 d\mathcal{R}\, d\Omega\, |\Psi(\mathcal{R},\Omega)|^2 = 1, \tag{8}$$

где

$$d\Omega = d\omega\, d\varphi \sin\Theta\, d\Theta\, d\Phi, \quad d\omega = \tau\, d\alpha\, d\vartheta$$

$$\tau = 1/8\,(1/mM)^{3/2}\mathcal{R}^3\sin^2\alpha\sin\vartheta.$$

Гиперсферический АВ определяется как полный набор решений задачи двух центров на сфере $S^5 \equiv \Omega$:

$$h \, \Phi_i(\Omega;\mathcal{R}) = E_i(\mathcal{R}) \Phi_i(\Omega;\mathcal{R}), \tag{9}$$

нормированных условием:

$$\langle \Phi_i | \Phi_j \rangle = \int d\Omega \, \overset{*}{\Phi}_i(\Omega;\mathcal{R}) \Phi_j(\Omega;\mathcal{R}) = \delta_{ij} \,. \tag{10}$$

Гамильтониан (6) имеет чисто дискретный спектр, его $E_i(\mathcal{R})$ – собственные значения – термы задачи двух центров (9), зависят от $\mathcal{R}$ как от параметра при фиксированном наборе квантовых чисел i . Движение на пятимерной сфере Ω можно считать быстрым по сравнению с движением на полуоси $\mathcal{R}$, благодаря присутствию в H формального параметра малости $m/M < 1$, который для мезомолекулярных систем составляет величину $\sim 0{,}1$ /7,9/. Это дает возможность представить полную волновую функцию в виде разложения по адиабатическому базису:

$$\Psi(\mathcal{R},\Omega) = \mathcal{R}^{-1} \sum_j \Phi_j(\Omega;\mathcal{R}) \chi_j(\mathcal{R}) \,. \tag{11}$$

Подстановка разложения (11) в уравнение (3) и усреднение по гиперсферическому АВ приводит к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальных волновых функций:

$$\left(\frac{d^2}{d\mathcal{R}^2} + 2E - U_{ii}\right)\chi_i = \sum_{j\neq i} U_{ij}\chi_j \,, \tag{12}$$

где

$$U_{ij} = W_i \delta_{ij} + K_{ij} + 2Q_{ij}\frac{d}{d\mathcal{R}}$$

$$W_i = 2E_i(\mathcal{R}) + 4/\mathcal{R}^2$$

$$K_{ij} = \langle \Phi_i | -\frac{\partial^2}{\partial\mathcal{R}^2} - \frac{3}{\mathcal{R}}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} | \Phi_j \rangle - \frac{1}{\mathcal{R}^2}\delta_{ij}$$

$$Q_{ij} = \langle \Phi_i | -\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}} | \Phi_j \rangle - \frac{3}{2}\frac{1}{\mathcal{R}}\delta_{ij} \,.$$

Матрицу K_{ij} можно представить в виде суммы симметричной и антисимметричной матриц

$$K_{ij} = H_{ij} + \left(\frac{d}{d\mathcal{R}}Q_{ij}\right) - \frac{1}{4}\frac{1}{\mathcal{R}^2}\delta_{ij}$$

$$H_{ij} = H_{ji} = \int d\Omega \frac{\partial \overset{*}{\Phi}_i}{\partial\mathcal{R}}\frac{\partial\Phi_j}{\partial\mathcal{R}} - \frac{9}{4}\frac{1}{\mathcal{R}^2}\delta_{ij}$$

$$K_{ij} - K_{ji} = 2\left(\frac{d}{d\mathcal{R}}Q_{ij}\right), \quad Q_{ij} = -Q_{ji} \,. \tag{13}$$

Тогда матрица потенциалов U приобретает явно самосопряженный вид:

$$U = W + H - \frac{1}{4}\mathcal{R}^{-2}I + Q\frac{d}{d\mathcal{R}} + \frac{d}{d\mathcal{R}}Q \,.$$

Матричные элементы (13) имеют простую структуру и сводятся к вычислению матричных элементов коммутатора:

$$\left[\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}}, h\right] = -2\mathcal{R}^{-1}h + \mathcal{R}^{-1}\tilde{V}$$

$$Q_{ij} = [\mathcal{R}(E_i - E_j)]^{-1}\langle i|\tilde{V}|j\rangle \tag{14}$$

$$H_{ij} = \sum_{j'} Q_{ij'}Q_{j'j} \,.$$

При $i=j$ из (14) следует теорема Гельмана-Фейнмана:

$$\langle i|\tilde{V}|j\rangle = \mathcal{R}\frac{\partial}{\partial\mathcal{R}}E_i + 2E_i \,.$$

3. Гиперсферический адиабатический базис

Упростим гиперсферическую задачу двух центров (9) с помощью точных интегралов движения: полного момента $\vec{J}^2$, его третьей проекции J_Z на ось Z неподвижной системы координат и полной четности P_{tot} по отношению к инверсии всех координат. Парциальный анализ в представлении полного момента позволяет отделить три угловые переменные $\Phi\Theta\varphi$, определяющие ориентацию треугольника частиц abc в неподвижной системе координат XYZ :

$$\Phi_i(\Omega;\mathcal{R}) = \sum_{m=0}^{J} \mathcal{D}^{J\lambda}_{mM_J}(\Phi\Theta\varphi)\,\Phi_{mi}(\alpha,\vartheta;\mathcal{R}). \tag{15}$$

Здесь $\mathcal{D}^{J\lambda}_{mm_J}$ – симметризованные и нормированные D-функции /12/, m , m_J – собственные значения J_z , J_Z на вращающуюся z и неподвижную Z оси, $\lambda = \sigma(-1)^J$ и $\sigma = \pm 1$ – собственные значения операторов P_{tot} и P_{yz} –отражения в плоскости yz вращающейся системы координат $\varphi \to \pi - \varphi$. Первые три квантовые числа в наборе i определяются значениями $\{J m_J \sigma\}$. Подстановка разложения (I5) в уравнение (9) и усреднение по $\mathcal{D}^{J\lambda}_{m m_J}$ позволяют представить (9) в виде системы J+I-уравнений для функций $\{\Phi^{+}_{mi}(\omega;\mathcal{R})\}_{m=0,J}$ при σ =+I и J-уравнений для функций $\{\Phi^{-}_{mi}(\omega;\mathcal{R})\}_{m=1,J}$ при σ =-I в области $\omega = \{0 \le \alpha \le \pi, \ 0 \le \vartheta \le \pi\}$ (здесь и далее знак σ иногда будем выписывать явно):

$$h_{mm-1}\Phi^{\sigma}_{m-1i} + (h_{mm} - E_i)\Phi^{\sigma}_{mi} + h_{mm+1}\Phi^{\sigma}_{m+1i} = 0, \qquad (9')$$

где

$$h_{mm} = T + V^{rot}_{mm} + \mathcal{R}^{-1}V$$

$$T = -\frac{1}{2\mathcal{R}^2}\frac{4}{\sin^2\alpha}\left(\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} + \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial}{\partial\vartheta}\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right)$$

$$V^{rot}_{mm} = \frac{4m^2}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha\sin^2\vartheta} + \frac{J(J+1)-2m^2}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha/2}$$

$$h_{mm\pm1} = T^{rot}_{mm\pm1} + V^{rot}_{mm\pm1}$$

$$T^{rot}_{mm\pm1} = \pm\frac{\gamma^{J\sigma}_{mm\pm1}}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha/2}\frac{\partial}{\partial\vartheta}, \quad V^{rot}_{mm\pm1} = \frac{\gamma^{J\sigma}_{mm\pm1}}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha/2}(m\pm1)\,\mathrm{ctg}\,\vartheta$$

$$\gamma^{J\sigma}_{mm+1} = -\{1+(\sqrt{2}-1)\delta_{m0}\}\{(J+m+1)(J-m)\}^{1/2}$$

$$\gamma^{J\sigma}_{mm-1} = -\{1+(\sqrt{2}-1)\delta_{m1}\}\{(J-m+1)(J+m)\}^{1/2}.$$

Кулоновская потенциальная энергия V определяется выражением (7). При σ =-I: $\mathcal{D}^{J\lambda}_{0m_J} = 0$, поэтому $\Phi^{-}_{0i} \equiv 0$ и $\gamma^{J-}_{01} = \gamma^{J-}_{10} = 0$, т.е. в этом случае уравнение с индексом m =0 отсутствует. Решения Φ^{σ}_{mi} нормированы условием

$$\sum_{m=(1-\sigma)/2}^{J}\int d\omega\ \Phi^{\sigma}_{mi}(\omega;\mathcal{R})\Phi^{\sigma}_{mj}(\omega;\mathcal{R}) = \delta_{ij}. \qquad (I0')$$

Систему уравнений (9') для векторов-решений $\Phi_i \equiv \{\Phi^{\sigma}_{mi}(\omega;\mathcal{R})\}_{m=\frac{1-\sigma}{2},J}$ схематично можно представить в матричном виде:

$$h\,\Phi_i(\omega;\mathcal{R}) = E_i(\mathcal{R})\,\Phi_i(\omega;\mathcal{R}), \qquad (9')$$

где

$$h = \begin{pmatrix} \ddots & \ddots & 0 \\ \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \Phi_i = \begin{pmatrix} | \end{pmatrix}, \quad E_i(\mathcal{R}) = E_i(\mathcal{R})\,I.$$

Здесь I – единичная матрица размерностью: $(J+1)\times(J+1)$ при σ =+I и $J\times J$ при σ =-I; h -самосопряженный оператор в пространстве $L_2(\omega)$ со скалярным произведением

$$(\Phi_i^T, \Phi_j) = \delta_{ij} \qquad (I0')$$

имеет чисто дискретный спектр $E_i(\mathcal{R})$. Для решения задачи на собственные значения (9') можно использовать эффективные численные алгоритмы /I0/, ориентированные на решение многомерных краевых задач.

Другой способ решения этой проблемы состоит в сведении (9') к бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений по переменной α. Решение (9') ищем в виде разложения по нормированным присоединенным полиномам Лежандра

$$\Phi_{mi}(\omega;\mathcal{R}) = \sum_{\ell=m}\mathcal{P}^m_\ell(\cos\vartheta)\,\Phi_{\ell mi}(\alpha;\mathcal{R}). \qquad (I6)$$

Подстановка (I6) и (9') и усреднение по $\mathcal{P}^m_\ell$ приводят к бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов $\Phi_{\ell mi}(\alpha;\mathcal{R})$ по переменной α $(0 \le \alpha \le \pi)$:

$$h_{\ell m,\ell m-1}\Phi_{\ell m-1i} + (h_{\ell m,\ell m} - E_i)\Phi_{\ell mi} + h_{\ell m,\ell m+1}\Phi_{\ell m+1i} = -\mathcal{R}^{-1}\sum_{\ell'=m}V_{\ell m,\ell' m}\Phi_{\ell' mi}, \qquad (9'')$$

где

$$h_{\ell m,\ell m} = -\frac{1}{2\mathcal{R}^2}\left\{\frac{4}{\sin^2\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} - \frac{\ell(\ell+1)}{\cos^2\alpha/2} - \frac{J(J+1)-2m^2+\ell(\ell+1)}{\sin^2\alpha/2}\right\}$$

$$h_{\ell m,\ell m\pm1} = \frac{\gamma^{J\sigma}_{mm\pm1}}{2\mathcal{R}^2\sin^2\alpha/2}\langle \ell m|\mathcal{L}_\mp|\ell m\pm1\rangle$$

$$\langle \ell m|\mathcal{L}_\mp|\ell m\pm1\rangle = \{(\ell\pm m+1)(\ell\mp m)\}^{1/2}.$$

Матричные элементы кулоновской потенциальной энергии V равны:

$$V_{\ell m,\ell' m} = \frac{Z_a Z_b\sqrt{M}}{\sin\alpha/2}\delta_{\ell\ell'} - \sum_{p=a,b}\begin{cases}(V_p)_<, & \mathrm{ctg}\,\alpha/2 < |\gamma_p|\sqrt{m/M} \\ (V_p)_>, & \mathrm{ctg}\,\alpha/2 > |\gamma_p|\sqrt{m/M}\end{cases} \qquad (I7)$$

$$(V_p)_< = \frac{Z_p\sqrt{M}}{\gamma_p \sin\alpha/2}\sum_{\ell''=0}\left(\sqrt{\frac{M}{m}}\,\frac{1}{\gamma_p}\operatorname{ctg}\alpha/2\right)^{\ell''} B^{p}_{\ell''}$$

$$(V_p)_> = \frac{Z_p\sqrt{m}}{\cos\alpha/2}\sum_{\ell''=0}\left(\sqrt{\frac{m}{M}}\,\gamma_p \operatorname{tg}\alpha/2\right)^{\ell''} B^{p}_{\ell''} \qquad (18)$$

$$B^{p}_{\ell''} = \{(2\ell'+1)(2\ell+1)\}^{1/2}\, C^{\ell m}_{\ell' m \ell'' 0}\, C^{\ell 0}_{\ell' 0 \ell'' 0}\begin{Bmatrix}(-1)^{\ell''}, & p=a\\ 1, & p=b\end{Bmatrix}.$$

Отметим, что выполненный нами переход во вращающуюся систему координат xyz привел к существенному упрощению матричных элементов потенциальной энергии (18), по сравнению с известным выражением в неподвижной системе координат XYZ. В самом деле, выражение (18) содержит лишь произведение двух коэффициентов Клебша-Гордана, тогда как в обычном подходе дополнительно присутствует еще и 6-j символ. При численной реализации необходимо ограничиться конечным числом членов как в (16), так и в (18). Таким образом, одномерный подход не позволяет исследовать аналитические свойства гиперсферического АВ базиса, и, следовательно, получать надежные численные результаты. Однако он оказывается полезным при исследовании асимптотических свойств решений гиперсферического АВ в случае $\mathcal{R}\to 0$.

4. Классификация состояний при $\mathcal{R}\to 0$

При $\mathcal{R}\to 0$ для начала можно ограничиться рассмотрением центробежной (левой) части уравнения (9''), поскольку она становится ведущей $\sim \mathcal{R}^{-2}$ по сравнению с потенциальной (правой) частью, имеющей порядок $\sim\mathcal{R}^{-1}$:

$$\left\{\frac{4}{\sin^2\alpha}\frac{\partial}{\partial\alpha}\sin^2\alpha\frac{\partial}{\partial\alpha} - \frac{\ell(\ell+1)}{\cos^2\alpha/2} + 2E_i\mathcal{R}^2\right\}\Phi_{\ell m i}(\alpha) - \sum_{m'=m-1}^{m+1}\frac{\langle i\ell m|\,(\vec{J}-\vec{\mathcal{L}})^2\,|i\ell m'\rangle}{\sin^2\alpha/2}\Phi_{\ell m' i}(\alpha) = 0. \qquad (19)$$

Решение системы уравнений (19) по $m=0,\dots J$ ищем в виде

$$\Phi_{\ell m i}(\alpha) = \sum_{L} G^{\ell J \sigma}_{mL}\;\Phi^{\mathcal{K}}_{L\ell}(\alpha),\quad L=|J-\ell|,\dots,J+\ell, \qquad (20)$$

где

$$G^{\ell J\sigma}_{mL} = (-1)^{\ell+m}\,\frac{1+\sigma(-1)^{J-\ell-L}}{2(1+\delta_{m0})}\,C^{L0}_{\ell m J -m}$$

– коэффициенты ортогонального преобразования Ченга-Фано [13]. Подстановка (20) с учетом равенства

$$\langle i\ell m|\,(\vec{J}-\vec{\mathcal{L}})^2\,|i\ell m'\rangle = \sum_{L=|J-\ell|}^{J+\ell} G^{\ell J\sigma}_{mL}\,L(L+1)\,G^{\ell J\sigma}_{m'L}$$

и замены α на 2β приводит (19) к уравнению стандартного вида для гиперсферических гармоник на сфере S^5 по переменной $\beta=\alpha/2$ $(0\le\beta\le\pi/2)$ [14]

$$\left\{\frac{1}{\sin^2\beta\cos^2\beta}\frac{\partial}{\partial\beta}\sin^2\beta\cos^2\beta\frac{\partial}{\partial\beta} - \frac{L(L+1)}{\sin^2\beta} - \frac{\ell(\ell+1)}{\cos^2\beta} + 2E_i\mathcal{R}^2\right\}\Phi^{\mathcal{K}}_{L\ell}(2\beta)=0 \qquad (21)$$

Собственные значения этого уравнения

$$2E_i\mathcal{R}^2 = \mathcal{K}(\mathcal{K}+4) \qquad (22)$$

определяются гипермоментом $\mathcal{K}=2k+L+\ell$, а собственные функции выражаются через полиномы Якоби

$$\Phi^{\mathcal{K}}_{L\ell}(2\beta) = \mathcal{N}^{\mathcal{K}}_{L\ell}\,(\sin\beta)^L(\cos\beta)^{\ell}\,P_k^{(L+1/2,\,\ell+1/2)}(2\beta),$$

$$\mathcal{N}^{\mathcal{K}}_{L\ell} = 2^{1/2}\left\{\frac{(2k+L+\ell+2)\,k!\,(k+L+\ell+1)!}{\Gamma(k+L+3/2)\,\Gamma(k+\ell+3/2)}\right\}^{1/2} \qquad (23)$$

с целым (0,1...) индексом $k=(\mathcal{K}-L-\ell)/2$, который определяет число нулей $\Phi^{\mathcal{K}}_{L\ell}$ по переменной β. Таким образом, состояния i – гиперсферической задачи двух центров при $\mathcal{R}\to 0$ характеризуются также гипермоментом $\mathcal{K}$: $i=\{Jm_J\sigma\mathcal{K}\}$, который фиксирует значение центробежной энергии $E_i=\mathcal{K}(\mathcal{K}+4)/2\mathcal{R}^2$. В отсутствие взаимодействия частиц орбитальные моменты мюона и ядер ℓ и L являются хорошими квантовыми числами и по ним есть вырождение при фиксированном значении $\mathcal{K}$.

Отметим, что полная четность $\lambda=(-1)^{\mathcal{K}}$, причем для состояний с $\sigma=+1$:

$$\mathcal{K} = J+2S, \quad \text{где } S=0,1,2,\dots \qquad (23')$$

и кратность вырождения по ℓ и L равна: $(S+1)(J+1)$.

Для состояний с $\sigma=-1$:

$$\mathcal{K} = J + 2S + 1 \qquad (23'')$$

и кратность вырождения равна: $(S+1)J$.

При включении взаимодействия вырождение снимается и правильные функции нулевого приближения по переменной α необходимо искать в виде линейной комбинации

$$\Phi^{(0)}_{\ell m i}(\alpha) = \sum_{L=|J-\ell|}^{J+\ell} b^{i}_{L\ell}\, G^{\ell J \delta}_{mL}\, \Phi^{\mathcal{K}}_{L\ell}(\alpha). \qquad (24)$$

Коэффициенты $b^{i}_{L\ell}$ определяются одновременно с первой поправкой $E^{(1)}_i$ к энергии

$$E_i(\mathcal{R}) = \mathcal{K}(\mathcal{K}+4)/2\mathcal{R}^2 + E^{(1)}_i/\mathcal{R} + E^{(2)}_i + \ldots$$

из секулярного уравнения

$$\sum_{\ell'=\frac{1-\delta}{2}}^{J+S}\ \sum_{L'=|J-\ell'|}^{J+\ell'} \left\{\langle J\delta \mathcal{K} L\ell|V|J\delta\mathcal{K}L'\ell'\rangle - E^{(1)}_i \delta_{\ell\ell'}\delta_{LL'}\right\} b^{i}_{L'\ell'} = 0, \qquad (25)$$

где

$$\langle J\delta\mathcal{K}L\ell|V|J\delta\mathcal{K}L'\ell'\rangle = \sum_{m=0}^{J} G^{\ell J\delta}_{mL}\, V^{\mathcal{K}LL'}_{\ell m,\ell' m}\, G^{\ell' J\delta}_{mL'}$$

$$V^{\mathcal{K}LL'}_{\ell m,\ell' m} = \int_0^{\pi} d\alpha \sin^2\alpha\, \Phi^{\mathcal{K}}_{L\ell}(\alpha)\, V_{\ell m,\ell' m}(\alpha)\, \Phi^{\mathcal{K}}_{L'\ell'}(\alpha). \qquad (26)$$

Здесь S определено согласно (23), а состояния характеризуются теперь набором квантовых чисел $i = \{J m_J \delta \mathcal{K}\nu\}$, где значения ν нумеруют в порядке возрастания $E^{(1)}_i$ -корни секулярного уравнения при фиксированных $J m_J \delta\mathcal{K}$. Отметим, что для тождественных ядер возникает дополнительная симметрия гамильтониана h относительно инверсии координат мюона P_μ : $\vartheta\to\pi-\vartheta$, $\varphi\to\varphi+\pi$. При этом размерность секулярного уравнения понижается за счет отделения состояний с четными (g) и нечетными (u) значениями орбитального момента мюона ℓ, т.е. связь между $b^{i}_{L\ell}$ и $b^{i}_{L'\ell\pm1}$ отсутствует. После решения секулярного уравнения (25) правильные функции нулевого приближения двумерной задачи (9') также полностью определены:

$$\Phi^{(0)}_{mi}(\omega) = \sum_{\ell=\frac{1-\delta}{2}}^{J+S}\ \sum_{L=|J-\ell|}^{J+\ell} P^{m}_{\ell}(\cos\vartheta)\, b^{i}_{L\ell}\, G^{\ell J\delta}_{mL}\, \Phi^{\mathcal{K}}_{L\ell}(\alpha). \qquad (I6)$$

Найденные значения термов и волновых функций при $\mathcal{R}\ll 1$ позволяют продолжить численное интегрирование двумерной задачи (9') в области

ω при всех необходимых значениях гиперрадиуса $\mathcal{R}$, используя известные численные алгоритмы /I0/.

Рассмотрим теперь систему уравнений (I3) вблизи точки тройного соударения $\mathcal{R}\to 0$:

$$\left\{\frac{d^2}{d\mathcal{R}^2} + 2E - W_i + \frac{1}{4\mathcal{R}^2} - \tilde{K}_{ii}\right\}X_i - \sum_{j\neq i}\left\{K_{ij} + 2Q_{ij}\frac{d}{d\mathcal{R}}\right\}X_j = 0. \qquad (27)$$

Здесь $\tilde{K}_{ij} = K_{ij} + 1/4\,\mathcal{R}^{-2}\delta_{ij}$, Q_{ij} - регулярные в нуле матричные элементы (I4), а $W_i = W^{(0)}_i\mathcal{R}^{-2} + 2E^{(1)}_i\mathcal{R}^{-1} + 2E^{(2)}_i + \ldots$, где $W^{(0)}_i = \mathcal{K}(\mathcal{K}+4) + 4 = (\mathcal{K}+2)^2$. Решение (27) ищем в виде

$$X_j(\mathcal{R}) = \sum_{i_0} \mathcal{R}^{\mathcal{K}_0+5/2} F_{ji_0}(\mathcal{R}), \qquad (28)$$

позволяющем выделить ведущую особенность $\sim\mathcal{R}^{-2}$:

$$\left\{\frac{d^2}{d\mathcal{R}^2} + 2E - W_i + \frac{1}{4\mathcal{R}^2} + \frac{(\mathcal{K}_0+5/2)(\mathcal{K}_0+3/2)}{\mathcal{R}^2}\right\}F_{ii_0} - \sum_{j}\left\{\tilde{K}_{ij} + 2(\mathcal{K}_0+5/2)\frac{Q_{ij}}{\mathcal{R}} + 2\left[-(\mathcal{K}_0+5/2)\frac{\delta_{ij}}{\mathcal{R}} + Q_{ij}\right]\frac{d}{d\mathcal{R}}\right\}F_{ji_0} = 0. \qquad (29)$$

Далее, следуя В.А.Фоку /7/, ищем решение системы уравнений (29):

$$F_{ji_0} = \sum_{t=0} F^{(t)}_{ji_0}\mathcal{R}^{t} + \sum_{t=2}\ \sum_{s=1} F^{(t,s)}_{ji_0}\mathcal{R}^{t}(\ln\mathcal{R})^{s}. \qquad (30)$$

Первые члены разложения определяются соотношениями:

$$F^{(0)}_{ji_0} = \delta_{ji_0}, \quad F^{(1)}_{i_0 i_0} = E^{(1)}_i/(\mathcal{K}_0+5/2) \qquad (3I)$$

$$F^{(1)}_{ji_0} = \frac{\{2(\mathcal{K}_0+2)+1\}\,Q_{ji_0}(0)}{(\mathcal{K}_0+3)^2 - (\mathcal{K}_j+2)^2}$$

$$F^{(2)}_{ji_0} = \frac{B_{ji_0}}{(\mathcal{K}_0+4)^2 - (\mathcal{K}_j+2)^2}$$

$$B_{ji_0} = \sum_{j'}\left\{[2(\mathcal{K}_0+2)+3]\,Q_{jj'}(0) + 2E^{(1)}_j\delta_{jj'}\right\}F^{(1)}_{j'i_0} + [2(\mathcal{K}_0+2)+1]\frac{d}{d\mathcal{R}}Q_{ji_0}(0) + K_{ji_0}(0) - (2E - 2E^{(2)}_j)\delta_{ji_0}.$$

Поскольку состояния с четными и нечетными $\mathcal{K}_j$ не связаны между собой вследствие сохранения полной четности $\lambda = (-1)^{\mathcal{K}_j}$, коэффициенты $F^{(1)}_{ji_o}$ регулярны, а знаменатель коэффициентов $F^{(2)}_{ji_o}$ обращается в нуль при $\mathcal{K}_j = \mathcal{K}_o + 2$. Поэтому такие коэффициенты необходимо считать равными нулю:

$$F^{(2)}_{ji_o} \equiv 0 \qquad \text{при} \qquad j \in \{\mathcal{K}_j = \mathcal{K}_o + 2\}$$

и вместо них вводить коэффициенты

$$F^{(2,1)}_{ji_o} = \left[\frac{B_{ji_o}}{2(\mathcal{K}_o + 4)}\right]_{j \in \{\mathcal{K}_j = \mathcal{K}_o + 2\}}.$$

Последующие члены разложения (30) также могут быть вычислены.

Таким образом, решения системы уравнений (27) по медленной переменной $\mathcal{R}$ содержат нетривиальную логарифмическую часть, начиная с члена $F^{(2,1)}_{ji_o} \mathcal{R}^2 \ln \mathcal{R}$ при $j \in \{\mathcal{K}_j = \mathcal{K}_o + 2\}$, тогда как для адиабатического базиса и термов задачи (9') имеют место стандартные степенные разложения по $\mathcal{R}$.

5. Классификация состояний при $\mathcal{R} \to \infty$

При $\mathcal{R} \to \infty$ наличие двух притягивающих потенциалов в h приводит к тому, что решения (9) локализованы вблизи зарядов Z_a и Z_b при $r/R \approx \gamma_a$, $\vartheta = \pi$ и $r/R \approx |\gamma_b|$, $\vartheta = 0$ и переходят в волновые функции разъединенных атомов. Это означает, что полная волновая функция разбивается на две компоненты, отвечающие каналам $a + bc$ и $ac + b$:

$$\Psi(\mathcal{R}, \Omega) = \Psi_a(\mathcal{R}, \Omega) + \Psi_b(\mathcal{R}, \Omega), \tag{II'}$$

где

$$\Psi_p(\mathcal{R}, \Omega) = \mathcal{R}^{-1} \sum_j \Phi_{jp}(\Omega; \mathcal{R}) \chi_{jp}(\mathcal{R}), \quad p = a, b.$$

Матричные элементы $U_{ij}(\mathcal{R})$ между состояниями разных разъединенных атомов в этом пределе экспоненциально малы, и в системе уравнений (I2) радиальные функции χ_{ja} не связаны с χ_{jb} :

$$\sum_j \left\{ \delta_{ij} \left(\frac{d^2}{d\mathcal{R}^2} + 2E \right) - U_{ip,jp} \right\} \chi_{jp} = 0, \quad p = a, b. \tag{I2'}$$

Ниже мы приводим асимптотику решений в канале $a + bc$, опуская все промежуточные выкладки, содержащиеся в наших работах [8,9]. Гамильтониан, термы и решения гиперсферической задачи (9') разлагают-

ся в ряд по обратным степеням $\mathcal{R}$. При $\mathcal{R} \to \infty$ имеем гамильтониан, энергию и волновые функции водородоподобного атома bc (см. рис.I). Для построения классификации состояний, т.е. правильных функций нулевого приближения, необходимо учесть в разложении гамильтониана (9') члены $\sim \mathcal{R}^{-2}$, которые снимают кулоновское вырождение в слое параболических состояний $|n_1 n_2 m\rangle$ с фиксированным главным квантовым числом $n = n_1 + n_2 + m + 1$. Эквивалентный оператор, соответствующий возмущению $\sim \mathcal{R}^{-2}$, имеет вид [9]:

$$\tilde{\Lambda}_b = \frac{1}{2\mu_b} \left\{ -3 \frac{n}{Z_b} \frac{\mu_b}{m_b} g_b A_z + \frac{3}{2} \vec{\ell}^{\,2} - \left(\frac{1}{2} n^2 + 4 \right) + \left(\vec{J}^2 - 2\vec{\ell}\vec{J} \right) \right\}, \tag{32}$$

где множитель $g_b = Z_a(M_b + Z_b)/(M_b + 1)$ возникает за счет отделения движения центра масс атома bc, он равен Z_a при $Z_b = 1$, $\mu_b = M_a(M_b+1)/(M_a + M_b + 1)$ – приведенная масса атома bc и ядра a, $m_b = M_b/(M_b+1)$ – приведенная масса мюона в атоме bc, A_z – проекция на ось z вектора Рунге-Ленца

$$\vec{A} = \frac{1}{\sqrt{-2E^{(0)}_{ib}}} \left\{ \frac{1}{2} \left(\vec{p} \times \vec{\ell} - \vec{\ell} \times \vec{p} \right) - \frac{Z_b \vec{r}_b}{r_b} \right\},$$

$E^{(0)}_{ib} = -Z_b^2 m_b / 2n^2$ – энергия, $\vec{p}$ – импульс, $\vec{\ell}$ – орбитальный момент мюона в атоме bc, $e = \hbar = M_c = 1$. Правильные функции нулевого приближения (9') в представлении полного момента J можно выразить линейной комбинацией

$$\tilde{\Psi}^{(0)}_{mib}(\omega) = \sum_{n_2=0}^{n-m-1} a^{ib}_{n_2 m} \varphi_{n_1 n_2 m}(\mu, \nu) \tag{33}$$

кулоновских параболических функций $\varphi_{n_1 n_2 m}(\mu, \nu)$, $\mu = r_b + z$, $\nu = r_b - z$ во вращающейся системе координат (рис.2). Коэффициенты $a^{ib}_{n_2 m}$ находятся из решения секулярного уравнения для оператора $\tilde{\Lambda}_b$:

$$\sum_{m'=0}^{\min(J,n-1)} \sum_{n_2'=0}^{n-m-1} \left[\langle n_1 n_2 m J m_J \sigma | \tilde{\Lambda}_b | n_1' n_2' m' J m_J \sigma \rangle - E^{(2)}_{ib} \delta_{n_2 n_2'} \delta_{m m'} \right] a^{ib}_{n_2' m'} = 0. \tag{34}$$

Здесь состояния характеризуются набором квантовых чисел ib : $i = \{J m_J \sigma n q\}$, где q нумерует в порядке возрастания корни $E^{(2)}_{ib}$ секулярного уравнения (34) при фиксированном $J m_J \sigma n$. При $J \geq n-1$ число корней (34) равно n^2, причем $n(n+1)/2$ имеют полную четность $\lambda = +(-1)^J$, а $n(n-1)/2 - \lambda = -(-1)^J$. Из них только $n(n+1)/2$ не совпадают друг с другом, поскольку состояния с противоположной четностью вырождены. Решая секулярное уравнение (34) (пример приведен в работе [9]), получаем выражение для терма с точностью $O(\mathcal{R}^{-2})$:

$$E_{ib}(\mathcal{R}) = E_{ib}^{(0)} + Z_a(Z_b-1)(\mathcal{R}/\sqrt{\mu_b})^{-1} + E_{ib}^{(2)}(\mathcal{R}/\sqrt{\mu_b})^{-2}. \quad (35)$$

Рассмотрим теперь асимптотику радиальных функций $X_{jb}(\mathcal{R})$ с точностью $O(\mathcal{R}^{-1})$, для этого в системе уравнений (I2') достаточно ограничиться членами $\sim \mathcal{R}^{-2}$:

$$\left\{\frac{d^2}{d\mathcal{R}^2} + 2E - U_{ib,ib}\right\} X_{ib} = \frac{2}{\mathcal{R}}\sum_{j\neq i} Q^{(0)}_{ib,jb}\frac{d}{d\mathcal{R}}X_{jb}(\mathcal{R}), \quad (I2'')$$

где

$$U_{ib,ib} = W_{ib} + K^{(0)}_{ib,ib}\mathcal{R}^{-2},$$

$$W_{ib} = 2E_{ib} + 4\mathcal{R}^{-2} = 2E^{(0)}_{ib} + 2Z_a(Z_b-1)\sqrt{\mu_b}\mathcal{R}^{-1} + (2\mu_b E^{(2)}_{ib} + 4)\mathcal{R}^{-2},$$

$$K^{(0)}_{ib,ib} = \langle ib| - 1/2\,\vec{\ell}^{\,2} + 1/2\,n^2|ib\rangle,$$

$$Q^{(0)}_{ib,jb} = 1/2\, m_b(E^{(0)}_{ib} - E^{(0)}_{jb})\langle ib|r_b^2|jb\rangle.$$

Явное выражение для $U_{ib,ib}$ с точностью $O(\mathcal{R}^{-2})$ получаем, используя формулу (32) для эквивалентного оператора $\tilde{\Lambda}_b$:

$$U_{ib,ib} = 2E^{(0)}_{ib} + 2Z_a(Z_b-1)\sqrt{\mu_b}\mathcal{R}^{-1} + \Lambda_{ib}\mathcal{R}^{-2}.$$

Здесь Λ_{ib} - собственное значение эквивалентного оператора:

$$\Lambda_b = -3\frac{n}{Z_b}\frac{\mu_b}{m_b}g_b A_z + (\vec{J}-\vec{\ell})^2 \quad (36)$$

приближенного интеграла движения, возникающего в задаче рассеяния заряженной частицы (а) на атоме (bc) в дипольном приближении [15].

В случае $Z_a = Z_b = 1$, наиболее важном для задач мезоатомной физики, асимптотика решений системы уравнений (I2'') в открытом канале $ib = |Jm_J\, \hat{s}\, nq\rangle$ с импульсом $k_{ib} = \{2(E-E^{(0)}_{ib})\}^{1/2} > 0$ имеет вид:

$$X_{ib} \approx B_i \sin\left\{k_{ib}\mathcal{R}\left(1 - \frac{m_b\langle ib|r_b^2|ib\rangle}{2\mathcal{R}^2} - \frac{\Lambda_{ib}}{2k_{ib}\mathcal{R}^2}\right) + \delta_i\right\},$$

$$X_{jb} \approx -B_i\frac{m_b\langle ib|r_b^2|jb\rangle}{2\mathcal{R}}\cos\left\{k_{ib}\mathcal{R} - \frac{\Lambda}{2k_{ib}\mathcal{R}} + \delta_i\right\}, \quad (37)$$

где δ_i - фаза рассеяния, а B_i - нормировочный множитель. Асимптотика волновой функции (II') в канале $a + bc$ с точностью $O(\mathcal{R}^{-1})$ при $k_{ib}r_b^2 \ll \mathcal{R}$ равна [9]:

$$\Psi_b(\mathcal{R},\Omega) = \Psi^{(0)}_{ib}(\Omega)X_{ib}(\mathcal{R}) + \sum_{j\neq i}\Psi^{(0)}_{jb}(\Omega)X_{jb}(\mathcal{R}) =$$

$$\approx \Psi^{(0)}_{ib}(\Omega_b)\sin\left\{k_{ib}\left(\mathcal{R} - \frac{m_b r_b^2}{2\mathcal{R}}\right) - \frac{\Lambda_{ib}}{2k_{ib}\mathcal{R}} + \delta_i\right\}B_i \approx \quad (38)$$

$$\approx \Psi^{(0)}_{ib}(\Omega_b)\sin\left\{\tilde{k}_{ib}R_b - \frac{\Lambda_{ib}}{2\tilde{k}_{ib}R_b} + \delta_i\right\}B_i.$$

Таким образом, учет слабой кинематической связи $\mathcal{R}^{-1}\partial/\partial\mathcal{R}$ в правой части (I2'') приводит к восстановлению модуля якобиевского вектора $\sqrt{\mu_b}R_b \approx (\mathcal{R} - m_b r_b^2/2\mathcal{R})$, см. (I), и якобиевского импульса $\tilde{k}_{ib} = \sqrt{\mu_b}k_{ib}$ в асимптотике компоненты Ψ_b полной волновой функции (II') при больших, но конечных $\mathcal{R}$. Это означает, что асимптотика решений $X_{jb}(\mathcal{R})$ адиабатической системы уравнений (I2) согласована с физическими граничными условиями (38) задачи рассеяния в канале $a + bc$. Очевидно, что в канале $ac + b$ физические граничные условия также удовлетворяются, поскольку и в этом случае гиперсферические переменные (2) переходят в соответствующую якобиевскую пару $\vec{R}_a, \vec{r}_a$.

Заключение

Возможность точной и достаточно простой постановки физических граничных условий в гиперсферическом адиабатическом базисе (9) связана с тем, что в отличие от стандартного [2], в нем с самого начала учитывается конечность масс ядер a и b. Это приводит к тому, что при решении конкретных задач рассеяния необходимо вычислять термы и волновые функции гиперсферической задачи двух центров (9) для каждого набора масс M_a и M_b. В настоящее время такая возможность появилась, благодаря разработке эффективных численных алгоритмов решения многомерных спектральных задач [10]. Фазы δ_i амплитуды B_i, полученные из численного решения адиабатической системы (I2) с асимптотическими условиями (I2'), (37) можно использовать для вычисления сечений низкоэнергетических процессов рассеяния в системе трех частиц. Соответствующие выражения для амплитуды рассеяния и сечений будут даны в следующей работе.

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

Литература

1. Мотт Н., Мэсси Г. Теория атомных столкновений. М., "Мир", 1969.
2. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., "Наука", 1976.
3. Соловьев Е.А. ЖЭТФ, 1986, т.90, стр. 1165-1171.
4. Овчинников С.Ю., Соловьев Е.А. ЖЭТФ, 1986, т.90, 921-932.
5. Fano U. Phys.Rev.A, 1981, v.24, p.2402-2416.
6. Soloviev E.A., Vinitsky S.I. J.Phys.B, 1985, v.18, p.L557 (-562).
7. Фок В.А. Изв. Акад.наук СССР, сер.физ., 1954, т.18, с.161-172; Norske Vidensk Selsk Forh 1958, v.31, p.138 -51.
8. Kadomtsev M.B., Vinitsky S.I. J.Phys.B, 1986, v.19, p.L756 - 62.
9. Виницкий С.И., Кадомцев М.Б., Вукайлович Ф.Р. Препринт ОИЯИ, Р4-86-439, 1986.
10. Гусев В.В., Касчиев М.С. Препринт ОИЯИ, Р11-85-758, Р11-85-965, 1985, Дубна.
11. Ponomarev L.I. Atom Kernenergie 1983, v.43, p.175- 81; Contribution on ICAP XI and μCF, Tokio, 1986.
12. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974. т.20, с.576-588. (1975, Sov.J. Nucl.Phys. v.20, p.310- 22).
13. Chang E.S., Fano U. Phys.Rev.A, 1972, v.6, p.173 - 185.
14. Никифоров А.Ф., Суслов С.К., В.Б.Уваров. Классические ортогональные полиномы дискретной переменной. М., "Наука", 1985.
15. Островский В.Н., Соловьев Е.А. ЖЭТФ, 1974, т.66, с.1590-98. Островский В.Н. ЖЭТФ, 1977, т.73, с.2077-87.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 октября 1986 года.

Виницкий С.И., Кадомцев М.Б. Р4-86-696

Адиабатическое представление задачи трех тел
в гиперсферических координатах. Постановка задачи

Для кулоновской задачи трех тел дана гиперсферическая параметризация независимых переменных на пятимерной сфере S^5 с гиперрадиусом R_C-первым линейным инвариантом тензора инерции трех частиц. Гиперсферический адиабатический базис определяется как полный набор собственных функций и собственных значений угловой части гамильтониана на сфере S^5 при каждом фиксированном значении медленной переменной R_C. Парциальный анализ в представлении полного момента J позволяет отделить три угла Эйлера и свести гиперсферическую задачу на S^5 к системе J+1 двумерных задач. Дана классификация состояний гиперсферического адиабатического базиса при малых и больших значениях гиперрадиуса R_C и явно выделена логарифмическая особенность Фока в точке тройного соударения. Схема ориентирована на расчет сечений мезоатомных процессов в проблеме мюонного катализа.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Vinitsky S.I., Kadomtsev M.B. Р4-86-696

Adiabatic Representation for Three-Body Problem
in Hyperspherical Coordinates. Statement of the Problem

For a three-body Coulomb problem a hyperspherical parametrization is given for independent variables on a five-dimensional sphere S^5 with a hyperradius R_H, the first linear invariant of the tensor of inertia of three particles. The hyperspherical adiabatic basis in defined as a complete set of eigenfunctions and eigenvalues of the Hamiltonian angular part on the sphere S^5 for every fixed value of the slow variable R_H. The partial wave analysis in the total momentum J representation allows us to separate three Euler angles and to reduce the hyperspherical problem on S^5 to a system of (J+1) two-dimensional problems. Classification is given of states of the hyperspherical adiabatic basis for small and large values of the hyperradius R_H and the logarithmic Fock singularity at the point of three-body collision is explicitly shown. The approach is assigned at computing the cross sections of mesic-atomic processes in the muon-catalysis problem.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986