89-268

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р4-89-268

С.И.Виницкий, М.Б.Кадомцев,*
А.А.Сузько**

# АДИАБАТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ В ГИПЕРСФЕРИЧЕСКИХ КООРДИНАТАХ. АМПЛИТУДА РАССЕЯНИЯ

Направлено в журнал "Ядерная физика"

---

* Институт атомной энергии им.И.В.Курчатова, Москва
** Институт тепло- и массообмена АН БССР, Минск

1989

## Введение

В работе [1] было введено адиабатическое представление задачи трех тел в гиперсферических координатах. Оно отличается от стандартного [2] тем, что в качестве медленной переменной в нем выбирается не расстояние $x_c$ между тяжелыми частицами, $a$ и $b$ (ядрами), а инвариантная коллективная переменная $X$, связанная с приведенными якобиевскими векторами (см. рис.1) соотношениями

$$X^2 = x_\alpha^2 + y_\alpha^2 , \quad \alpha = a, c, b .$$

В конфигурационном пространстве $\{X, \hat{X}\} \in \mathcal{M}_+^1 = \mathbb{R}_+^1 \times S^2 \times S^3$ при фиксированных значениях полного орбитального момента $\vec{L}^2$, его проекции $L_z$ и полной четности $\mathcal{P}_{tot}$ трехчастичная волновая функция $\Psi(X,\hat{X})$ представляется в виде разложения

$$\Psi(X,\hat{X}) = \sum_j \Phi_j(X,\hat{X}) \, X^{-1} \chi_j(X) .$$

Базис $\Phi_j(X,\hat{X}) \in \mathcal{F}_X \sim L^2(S^2 \times S^3)$ задает быстрое движение трех частиц при каждом фиксированном значении $X \in \mathcal{B} = \mathbb{R}_+^1$. Преимущество такого адиабатического разбиения состоит в том, что базисные функции $\Phi_j(X,\hat{X})$ не только несут информацию о взаимодействии трех частиц, но и асимптотически согласованы с граничными условиями задачи рассеяния [3]. Эффективность гиперсферического адиабатического $HSA$-разложения продемонстрирована в работе [4] при вычислении основного и возбужденных связанных состояний иона позитрония $Ps^- = e^-e^-e^+$.

С помощью $HSA$-подхода в работе [5] были получены новые оценки величины $\omega_s^0$ коэффициента прилипания мюона к гелию в реакции $t\mu(d,n)\,^4He\mu$, играющей ключевую роль в проблеме мюонного катализа.

В настоящей работе дана формулировка многоканальной задачи рассеяния, позволяющая описывать процессы возбуждения $(d\mu) + t \to (d\mu)^* + t$ и перезарядки мезоатомов $(d\mu) + t \to d + (t\mu)$ в $HSA$-представлении. В отличие от стандартного для ядерной физики представления взаимодействия [6], реализованного с помощью разложения по $\mathcal{K}$-гармоникам [7]

$$\Psi(X,\hat{X}) = \sum_{\mathcal{K}} Y_{\mathcal{K}}(\hat{X}) \, X^{-5/2} \chi_{\mathcal{K}}(X) ,$$

в $HSA$ подходе связь между каналами задается не матричными элементами $\langle \mathcal{K}|V|\mathcal{K}'\rangle$ потенциальной энергии $V$ трех частиц, а матричными элементами $A_{ij}=\langle\Phi_i|\partial_x|\Phi_j\rangle$, имеющими смысл эффективного калибровочного поля [8]. Таким образом, в системе радиальных уравнений для коэффициентов $X_j$ возникает удлиненная производная $(1\!\!\otimes\partial_x + A_{ij}(x))^2$, что позволяет дать калибровочно-инвариантную трактовку многоканальной задачи рассеяния и построить инвариантную амплитуду с учетом дальнодействующего дипольного взаимодействия.

Содержание работы следующее:

В первом разделе дана постановка задачи рассеяния в якобиевских координатах. Приведены ведущие асимптотики трехчастичной волновой функции ниже трехчастичного порога развала, соотношения для амплитуды и матричных элементов оператора рассеяния $\hat{S}=S\hat{I}$ ( $\hat{I}$ - оператор инверсии координаты столкновения) в дипольном представлении $\Lambda$.

В разделе 2 рассмотрена параметризация задачи трех тел в гиперсферических координатах. Дано определение оператора полной инверсии $\hat{I}$, позволяющего ввести представление собственных фазовых сдвигов для парциальной амплитуды. Приведено выражение для амплитуды упругого рассеяния на (гипер)сферически симметричном потенциале.

В третьем разделе определен адиабатический гиперсферический базис для кулоновской задачи трех тел. Дана классификация спектра быстрого гамильтониана, в соответствии с возможными каналами задачи рассеяния. Получена система радиальных уравнений и указаны асимптотики ее решений.

В четвертом разделе определены регулярные и физические решения, а также решения и функции Йоста. Введено представление собственных фазовых сдвигов для унитарного оператора рассеяния $\hat{S}=S\hat{I}$, согласованное с дальнодействующим дипольным потенциалом. Получено выражение для инвариантной парциальной и полной амплитуды рассеяния в гиперсферическом адиабатическом базисе ниже трехчастичного порога развала. В заключении кратко обсуждаются условия применения предложенного подхода к задачам мюонного катализа.

## I. Задача рассеяния в якобиевских координатах

### А. Постановка задачи

Рассмотрим систему трех кулоновских частиц $a$, $b$ и $c$ с зарядами $Z_a$, $Z_b$ и $Z_c$=-I и массами $M_a \geq M_b > M_c = 1$, $e=\hbar=M_c=1$. Частицы $a$ и $b$ будем называть ядрами, а частицу $c$ - мюоном. В системе центра инерции введем приведенные координаты Якоби $\vec{x}$, $\vec{y}$ (см. рис.I), образующие конфигурационное пространство относительного движения $\vec{X}=\vec{x}\oplus\vec{y}\in\mathcal{M}\sim R^6$, например



$$\vec{x}_c = \sqrt{2m_c}\,(\vec{\rho}_b - \vec{\rho}_a),$$
$$\vec{y}_c = \sqrt{2\mu_c}\,\left(\vec{\rho}_c - \frac{M_b\vec{\rho}_b + M_a\vec{\rho}_a}{M_b+M_a}\right), \qquad (I)$$
$$m_c^{-1} = M_a^{-1} + M_b^{-1}, \quad \mu_c^{-1} = M_c^{-1} + (M_a+M_b)^{-1},$$

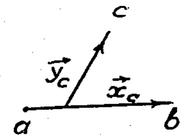


Рис.I. Стандартная якобиевская пара векторов.

где $m_c$ и $\mu_c$ - приведенные массы. Три набора координат Якоби $\{\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha\}$, $\alpha=a,c,b$ - номер пары частиц с относительной координатой $x_\alpha$ (см. рис.2), связаны между собой ортогональным преобразованием

$$\begin{pmatrix}\vec{x}_\alpha\\ \vec{y}_\alpha\end{pmatrix} = -\begin{pmatrix}C_{\alpha\beta} & -S_{\alpha\beta}\\ S_{\alpha\beta} & C_{\alpha\beta}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\vec{x}_\beta\\ \vec{y}_\beta\end{pmatrix}, \qquad (2)$$

где $\alpha=a,c,b$ и соответственно $\beta=b,a,c$. Коэффициенты $S_{\alpha\beta}$ и $C_{\alpha\beta}$ зависят от приведенных масс:

$$S_{\alpha\beta} = \sqrt{m_\alpha/\mu_\beta} = \sqrt{m_\beta/\mu_\alpha}, \quad C_{\alpha\beta} = \sqrt{1-S_{\alpha\beta}^2},$$
$$C_{\alpha\beta}^2 + S_{\alpha\beta}^2 = 1, \quad S_{\alpha\beta}\geq 0, \quad C_{\alpha\beta}\geq 0. \qquad (3)$$

Импульсы $\vec{k}$ и $\vec{p}$ - сопряженные с $\vec{x}$ и $\vec{y}$, образуют пространство относительных импульсов $\vec{P}=\vec{k}\oplus\vec{p}\in\mathcal{M}\sim R^6$ и связаны теми же соотношениями. Соотношения (2), (3) согласованы со стандартным циклическим определением якобиевских координат, а индексация якобиевской пары $\alpha=a,b$ - с асимптотическими состояниями $|A\rangle$ и $|B\rangle$, которые нумеруются значениями энергии $\mathcal{E}_A$ и $\mathcal{E}_B$ атомов $ac$ и $bc$.

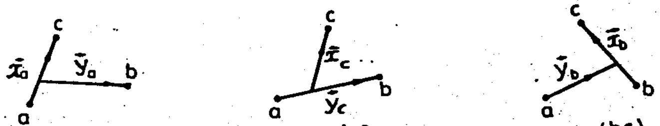


Рис.2. Якобиевские координаты для системы кулоновских частиц.

Ограничимся обсуждением процессов рассеяния частицы $b$ на связанном состоянии $|A\rangle$ пары $\alpha=a$ ниже трехчастичного порога развала в наиболее интересной для мезоатомной физики ситуации, когда заряды ядер $Z_a=Z_b=1$. Состояние $|A\rangle=|\alpha n \ell m_\ell\rangle$, где $n\equiv n_\alpha$ - главное квантовое число, $\ell\equiv\ell_\alpha$ и $m_\ell\equiv m_{\ell_\alpha}$ - орбитальные и азимутальные квантовые числа мюона, определяются собственными функциями

$$\varphi_A(\vec{x}_\alpha) = \varphi_{\alpha n l}(x_\alpha)\, Y_l^{m_l}(\hat{x}_\alpha) \qquad (4)$$

и собственными значениями энергии $\mathcal{E}_A = -\varkappa_A^2 < 0$; $\mathcal{E}_A = -q_\alpha^2/4n^2$ а.е., $(a.e = 2M_c Ry,\ q_\alpha = Z_\alpha\sqrt{2m_\alpha})$ парного гамильтониана

$$h_\alpha = -\Delta_{\vec{x}_\alpha} + V_\alpha(x_\alpha), \quad V_\alpha(x_\alpha) = x_\alpha^{-1} q_\alpha . \qquad (5)$$

Значение полной энергии

$$E = E_A(p_A) = p_A^2 + \mathcal{E}_A = p_A^2 - \varkappa_A^2 \qquad (6)$$

при нулевом импульсе $p_A$ относительного движения пары $a$ и налетающей частицы задает порог двучастичного канала

$$E_A(0) = -\varkappa_A^2 < 0 . \qquad (7)$$

Двухчастичный канал открывается, когда энергия системы больше порогового значения $E > -\varkappa_A^2$

$$E_A(p_A) \geq E_A(0), \text{ т.е. } p_A^2 = E + \varkappa_A^2 \geq 0 . \qquad (8)$$

Главный канал распада на три свободные частицы открывается при нулевой энергии:

$$E_0(0) = 0 \quad \text{т.е.} \quad P_0^2 = E_0 \geq 0 . \qquad (9)$$

Асимптотические граничные условия при $X \to \infty$ для волновой функции $\Psi_A(\vec{X})$, отвечающие процессам $ac + b \to a + bc$ и позволяющие выделить единственное решение уравнения Шредингера

$$\left\{ -\Delta_{\vec{X}} + \sum_\alpha V_\alpha(x_\alpha) - E \right\} \Psi_A(\vec{X}, \vec{p}_A) = 0, \qquad (10)$$

легко задать, если воспользоваться следующим разбиением $\Psi_A$:

$$\Psi_A = \sum_{\beta=a,b} F_{\beta A} . \qquad (11)$$

Компоненты $F_{\beta A}$ удовлетворяют модифицированным уравнениям Фаддеева /9/

$$\left\{ -\Delta_{\vec{X}} + V_c + \hat{V}_\alpha + \sum_{\beta=a,b} V_\beta^{(0)} - E \right\} F_{\alpha A} = -\hat{V}_\alpha F_{\beta A} . \qquad (12)$$

Здесь $\hat{V}_\alpha$ и $V_\alpha^{(0)}$ – соответственно короткодействующая и дальнодействующая части кулоновского потенциала $V_\alpha = V_\alpha^{(0)} + \hat{V}_\alpha$ пары $\alpha = a, b$:



$$\hat{V}_\alpha = V_\alpha(x_\alpha)\, \zeta_\alpha(\vec{X}) ,$$
$$V_\alpha^{(0)} = V_\alpha(x_\alpha)\,(1 - \zeta_\alpha(\vec{X})), \qquad (13)$$

где $\zeta(\vec{X})$ – гладкая функция срезки:

$$\zeta(\vec{X}) = \begin{cases} 1, & x_\alpha < a(1+y_\alpha)^{\nu} , \\ 0, & x_\alpha > a'(1+y_\alpha)^{\nu'} , \\ a < a' = const, & \nu < \nu' < 1/2 . \end{cases} \qquad (14)$$

Ведущие асимптотики компонент $F_{\beta A}$, при которых уравнения (12) ниже трехчастичного порога развала (9) однозначно разрешимы, имеют вид

$$F_{\beta A}^{as}(\vec{X}, \vec{p}_A) \underset{y_\beta/x_\beta \to \infty}{\approx} (2\pi)^{-3/2} \sum_B{}' \varphi_\beta(\vec{x}_\beta) \cdot \left[ e^{i(\vec{y}_\alpha \vec{p}_A)} \delta_{BA} + y_\beta^{-1} e^{i y_\beta p_B} p_B^{-1/2} f_{BA}(\hat{y}_\beta, \vec{p}_A)\, p_A^{1/2} \right] . \qquad (15)$$

Здесь входной канал описывается падающей поверхностной волной*)

$$\varphi_A(\vec{x}_\alpha)\, e^{i(\vec{y}_\alpha \vec{p}_A)}, \quad \text{где} \quad p_A = \sqrt{E - \mathcal{E}_A} = \sqrt{E + \varkappa_A^2} > 0$$

– относительный импульс налетающей частицы и пары $\alpha$. Амплитуды расходящихся поверхностных волн при $\beta = \alpha$ описывают процессы упругого рассеяния и возбуждения пары $\alpha$, а при $\beta \neq \alpha$ "перестройку"; суммирование по $B = \{\beta n l m_l\}$ осуществляется при фиксированном значении $\beta$: $\sum_B' = \sum_{n_\beta l_\beta m_{l_\beta}}$. Тогда в соответствии с разбиением (11) имеет место асимптотическое представление для $\Psi_A$

$$\Psi_A^{as} = F_{aA}^{as} + F_{bA}^{as} . \qquad (16)$$

Выражение для дифференциального сечения процессов рассеяния $(ac)_A + b \to a + (bc)_B$ формально определяется квадратом амплитуды $f_{BA}$ при расходящейся поверхностной волне:

$$d\sigma_{BA} = |f_{BA}|^2 d\hat{y}_\beta . \qquad (17)$$

Б. Бисферический базис

Гамильтониан $H$ системы трех заряженных частиц в системе центра инерции

$$H = -\Delta_{\vec{X}} + \sum_\alpha V_\alpha(x_\alpha), \qquad (18)$$

*) Здесь мы используем терминологию, принятую в монографии /10/.

где $\Delta_{\vec X} = \Delta_{\vec x} + \Delta_{\vec y}$ – оператор Лапласа-Бельтрами в $\mathbb{R}^6\setminus\{0\}$, коммутирует с операторами: отражения времени $T$, полной инверсии $\mathcal{P}$ : $\vec X \to -\vec X$ и оператора полного орбитального момента $\vec L$ :

$$\vec L = \vec \ell + \vec\lambda . \qquad (19)$$

где $\vec\ell = -i\vec x \wedge \nabla_{\vec x}$ и $\vec\lambda = -i\vec y \wedge \nabla_{\vec y}$ – операторы орбитальных моментов пары частиц и третьей частицы. Собственные функции этих операторов – стандартные сферические гармоники /11/ $Y_\ell^{m_\ell}(\hat x)$ и $Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat y)$ в $L^2(\mathbb{S}^2(\cdot))$, определенные на $\mathbb{S}^2(\hat x)$ : $\hat x = (\Theta, \Phi)$ и $\hat y = (\tilde\vartheta, \tilde\varphi)$, см. рис.3. Действие операторов инверсии $\mathcal{P}$ на сфере $\mathbb{S}^2(\cdot)$ задано соотношениями

$$\mathcal{P}_{\hat x} : \quad (\Theta \to \Theta - \pi, \quad \Phi \to \pi + \Phi)$$
$$\mathcal{P}_{\hat y} : \quad (\tilde\vartheta \to \tilde\vartheta - \pi, \quad \tilde\varphi \to \pi + \tilde\varphi) \qquad (20)$$

Собственные значения $\mathcal{P}_{\hat x}, \mathcal{P}_{\hat y}$-четность $\zeta$, $=\pm 1$-определяются квантовыми числами $\ell$ и $\lambda$ :

$$\mathcal{P}_{\hat x} \; Y_\ell^{m_\ell}(\hat x) = \zeta_\ell \, Y_\ell^{m_\ell}(\hat x), \quad \zeta_\ell = (-1)^\ell ,$$
$$\mathcal{P}_{\hat y} \; Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat y) = \zeta_\lambda \, Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat y), \quad \zeta_\lambda = (-1)^\lambda .$$

В представлении полного момента $L$ имеем базис бисферических гармоник

$$\mathcal{Y}_{\ell\lambda}^{L}(\hat x, \hat y) = \sum_{m_\lambda + m_\ell = M} \langle \ell m_\ell \lambda m_\lambda | L M \rangle Y_\ell^{m_\ell}(\hat x) \, Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat y) \qquad (21)$$

в пространстве $L^2(\mathbb{S}^2 \times \mathbb{S}^2)$ на четырехмерном торе $\mathbb{S}^2(\hat x) \times \mathbb{S}^2(\hat y)$. Здесь $L$ мультииндекс: $L = \{LM\}$. Действие $\mathcal{P}$ в пространстве $\mathcal{M}_+^2 = \mathbb{R}_+^2 \times \mathbb{S}^2 \times \mathbb{S}^2 \subset \mathbb{R}^6 \setminus \{0\}$

$$\mathcal{P} : \quad \mathcal{P} = \mathcal{P}_{\hat y} \mathcal{P}_{\hat x} \qquad (22)$$

не затрагивает подпространство $x, y \in \mathbb{R}_+^2$. Собственные значения $\mathcal{P}$ – полная четность $\zeta = \pm 1$-определяются соотношением

$$\mathcal{P} \, \mathcal{Y}_{\ell\lambda}^{L}(\hat x, \hat y) = \zeta \, \mathcal{Y}_{\ell\lambda}^{L}(\hat x, \hat y), \quad \zeta = \zeta_\ell \zeta_\lambda = (-1)^{\ell+\lambda} . \qquad (23)$$

Выражение для оператора Лапласа-Бельтрами $\Delta_{\vec X}$ в $\mathcal{M}$ имеет стандартный вид

$$-\Delta_{\vec X} = -\Delta_{xy}^{(2)} + x^{-2} \vec\ell^{\,2} + y^{-2} \vec\lambda^2 , \qquad (24)$$

где

$$\Delta_{xy}^{(2)} = x^{-2} \partial_x x^2 \partial_x + y^{-2} \partial_y y^2 \partial_y$$



"плоская" часть $\Delta_{\vec X}$ в $\mathbb{R}_+^2$. Соответствующий элемент объема в $\mathcal{M}_+^2$ равен

$$d^6 X = (2\mu)^{-3} x^2 dx \cdot y^2 dy \cdot d\hat x \, d\hat y ,$$
$$d\hat x = \sin\Theta \, d\Theta \, d\Phi, \quad d\hat y = \sin\tilde\vartheta \, d\tilde\vartheta \, d\tilde\varphi . \qquad (25)$$

Здесь $\mu = \{M_1 M_2 M_3 / (M_1 + M_2 + M_3)\}$ – инвариантная трехчастичная масса.

В отсутствие дальнодействующих потенциалов наряду с базисом бисферических функций используют также приведенные шаровые функции:

$$\mathcal{D}_{\ell m_\ell \lambda}^{L}(\hat y_\alpha) = \left(Y_\ell^{m_\ell}(\hat x_\alpha) \cdot \mathcal{Y}_{\ell\lambda}^{L}(\hat x_\alpha, \hat y_\alpha)\right) =$$
$$= \sum_{m_\lambda = -\lambda}^{\lambda} \langle \ell m_\ell \lambda m_\lambda | L M \rangle Y_\lambda^{m_\lambda}(\hat y_\alpha) , \qquad (26)$$

которые образуют базис в $L_2(\mathbb{S}^2(\hat y))$ :

$$\sum_{\lambda} \mathcal{D}_{\ell m_\ell \lambda}^{L}(\hat y_\alpha) \, \overset{*}{\mathcal{D}}{}_{\ell' m_\ell' \lambda}^{L}(\hat y_\alpha') = \delta(\hat y_\alpha - \hat y_\alpha') \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'} \qquad (27а)$$

$$\int d\hat y_\alpha \, \overset{*}{\mathcal{D}}{}_{\ell m_\ell \lambda}^{L}(\hat y_\alpha) \, \mathcal{D}_{\ell m_\ell \lambda'}^{L'}(\hat y_\alpha) = \delta_{LL'} \delta_{\lambda\lambda'} \qquad (27б)$$

В $\mathcal{D}$ – представлении естественно ввести поверхностные функции

$$\Phi_i^L \equiv \Phi_{n_\alpha \ell_\alpha \lambda_\alpha}^{L}(\vec x_\alpha, \hat y_\alpha) = \sum_{m_\ell = -\ell}^{\ell} \varphi_{n \ell m_\ell}(\vec x_\alpha) \, \mathcal{D}_{\ell m_\ell \lambda}^{L}(\hat y_\alpha) \qquad (28)$$

– собственные функции состояний $|i\rangle \equiv |n_\alpha \ell_\alpha \lambda_\alpha\rangle$ асимптотического гамильтониана

$$h_\alpha^{as} = h_\alpha + y_\alpha^{-2} \vec\lambda^2 . \qquad (29)$$

Тогда для компонент $F_{\beta A}$ справедливо следующее разложение

$$F_{\beta A}(\vec X, \vec P_A) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{L\lambda} F_{\beta i}^{L}(\vec X, P) \, \overset{*}{\mathcal{D}}{}_{\ell m_\ell \lambda}^{L}(-\hat P_A) \; P_i^{-1} . \qquad (30)$$

Его согласование с асимптотическим условием (15) задает асимптотическое поведение парциальных компонент $F_{\beta i}^{L}$ :

$$F_{\beta i}^{L}(\vec X, P) \underset{y_\beta/x_\beta \to \infty}{\approx} \sum_j{}' \Phi_j^L(\vec x_\beta, \hat y_\beta) \, y_\beta^{-1} \, \chi_{ji}^{L}(y_\beta, P) \qquad (31)$$

и физических радиальных компонент

$$\chi_{ji}^{L}(y_\beta, P) \underset{y_\beta \to \infty}{\approx} -\frac{1}{2i} \left\{ e^{-i y_\beta P_i} \delta_{ji} - e^{i y_\beta P_i} P_j^{-1/2} \hat S_{ji}^{L}(P) P_i^{1/2} \right\} . \qquad (32)$$

Здесь первый мультииндекс $j$ физической радиальной функции $\chi_{ji}$ отвечает каналовой компоненте, а второй $i$ нумерует начальное состояние системы. Полная амплитуда перехода $f_{BA}$, описывающая процессы рассеяния $(ac)_A + b \to a + (bc)_B$

$$f_{BA}(\hat{y}_\beta, \vec{P}_A) = 4\pi \sum_{L\lambda_\beta\lambda_\alpha} \eta^L_{\ell_\beta m_{\ell_\beta}\lambda_\beta}(\hat{y}_\beta)\, \hat{f}^L_{ji}(p)\, \overset{*}{\eta}{}^L_{\ell_\alpha m_{\ell_\alpha}\lambda_\alpha}(-\hat{P}_A), \quad (33)$$

определяется через инвариантную парциальную амплитуду $\hat{f}^L_{ji}$ :

$$\hat{f}^L_{ji}(p) = (\hat{S}^L_{ji}(p) - I_{ji}\delta_{ji})(2ip_i)^{-1}, \quad (34)$$

которая задается матричными элементами унитарного оператора рассеяния $\hat{S} = S\hat{I}$, где $S$ – матрица, действующая как интегральный оператор на сфере $\mathbb{S}^2(\hat{y})$, а $\hat{I} = \mathcal{P}_{\hat{y}}$ – оператор инверсии координаты столкновения.

Непосредственная подстановка асимптотического выражения (32) для $\chi^L_{ji}$ в (30) и использование условия полноты (27) приведенных угловых функций $\eta$ в $L_2(\mathbb{S}^2(\hat{y}))$, необходимое для формирования плоской волны в $\mathbb{R}^1_+ \times \mathbb{S}^2(\hat{y})$ :

$$(2\pi)^{-3/2} e^{i(\vec{y}_\alpha \vec{P}_A)} \underset{y_\alpha P_A \to \infty}{\approx} -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \frac{1}{2i} (y_\alpha P_A)^{-1} \cdot \left\{ e^{-iy_\alpha P_A} \delta(\hat{y}_\alpha + \hat{P}_A) - e^{-iy_\alpha P_A} \delta(\hat{y}_\alpha - \hat{P}_A) \right\}, \quad (35)$$

позволяет убедиться в согласованности введенных выше разложений с асимптотическими условиями (I5).

В. Дипольное представление

Наличие дальнодействующих потенциалов в асимптотических парных гамильтонианах $\alpha = a, b$ :

$$h^{as}_\alpha = -\Delta_{\vec{x}_\alpha} + V_\alpha + \vec{\lambda}^2 y_\alpha^{-2} + V_c + V^{(0)}_\beta$$

приводит к модификации центробежного потенциала

$$h^{as}_\alpha \underset{x_\alpha/y_\alpha \ll 1}{=} -\Delta_{\vec{x}_\alpha} + V_\alpha + \left[\hat{\Lambda}_\alpha y_\alpha^{-2} + \frac{Z_\beta(Z_\alpha - 1)}{y_\alpha}\sqrt{2\mu_\alpha}\right] \quad (36)$$

и появлению асимптотического дипольного интеграла движения /I2/:

$$\hat{\Lambda}_\alpha = \vec{\lambda}^2 - 3\frac{n_\alpha \mu_\alpha}{Z_\alpha m_\alpha} Z_\beta g_\alpha (\vec{A}_\alpha \cdot \hat{y}_\alpha). \quad (37)$$



Здесь

$$\vec{A}_\alpha = \frac{1}{\sqrt{-4\mathcal{E}_A}} \left\{ [\vec{K}_\alpha \times \vec{\ell}_\alpha] - [\vec{\ell}_\alpha \times \vec{K}_\alpha] - \sqrt{2m_\alpha} Z_\alpha \hat{x}_\alpha \right\}$$

– вектор Рунге-Ленца, $\mathcal{E}_A = -Z_\alpha^2 m_\alpha / 2n_\alpha^2$ – энергия атома $\alpha c$, находящегося в состоянии $|A\rangle$, множитель $g_\alpha$ : $g_\alpha = (M_\alpha + Z_\alpha)/(M_\alpha + 1)$ возникает за счет перехода к якобиевским координатам и отделению движения центра масс атома $\alpha c$ в эффекте Штарка: $g_\alpha = 1$, если $Z_\alpha = 1$. При этом приведенные шаровые функции $\eta^L_{\ell_\alpha m_\ell \lambda}$ преобразуются с помощью ортогональной матрицы $U^{Ln}_\alpha$ в $\eta^{Ln}_{\ell m_\ell a}$

$$\eta^{Ln}_{\ell m_\ell a}(\hat{y}_\alpha) = \sum_\lambda U^{Ln}_\alpha(a|\ell\lambda)\, \eta^L_{\ell m_\ell \lambda}(\hat{y}_\alpha) \quad (38)$$

и образуют дипольный базис в $L^2(\mathbb{S}^2(\hat{y}_\alpha))$ :

$$\sum_{La} \eta^{Ln}_{\ell m_\ell a}(\hat{y}_\alpha)\, \overset{*}{\eta}{}^{Ln}_{\ell' m_{\ell'} a}(\hat{y}'_\alpha) = \delta(\hat{y}_\alpha - \hat{y}'_\alpha)\delta_{\ell\ell'}\delta_{m_\ell m_{\ell'}} \quad (39)$$

$$\int d\hat{y}_\alpha\, \overset{*}{\eta}{}^{Ln}_{\ell m_\ell a}(\hat{y}_\alpha)\, \eta^{L'n}_{\ell m_\ell a'}(\hat{y}_\alpha) = \delta_{LL'}\delta_{aa'} \quad (40)$$

Здесь $U^{Ln}_\alpha(a|\ell\lambda)$ – собственные векторы дипольного интеграла движения $\hat{\Lambda}_\alpha$ в $\eta$-представлении

$$\sum_{\ell'\lambda'} \left[\langle \Phi^L_{n\ell\lambda} | \hat{\Lambda}_\alpha | \Phi^L_{n\ell'\lambda'} \rangle - \Lambda^{Ln}_{\alpha a}\delta_{\ell\ell'}\delta_{\lambda\lambda'}\right] U^{Ln}_\alpha(a|\ell'\lambda') = 0, \quad (4I)$$

где $\Phi^L_i \equiv \Phi^L_{n\ell\lambda}$ – собственные функции (28) асимптотического гамильтониана (29) пары $\alpha$. Поверхностные функции $\Phi^L_i \equiv \Phi^L_{na}$ асимптотического гамильтониана (36) пары $\alpha$ нумеруются индексом $a$, определяющим порядок возрастания собственных значений $\Lambda^{Ln}_{\alpha a}$ дипольного интеграла $\hat{\Lambda}_\alpha$:

$$\begin{aligned} \Phi^L_i \equiv \Phi_{na}(\vec{x}_\alpha, \hat{y}_\alpha) &= \sum_{\ell m_\ell} \varphi_{n\ell m_\ell}(\vec{x}_\alpha)\, \eta^{Ln}_{\ell m_\ell a}(\hat{y}_\alpha) = \\ &= \sum_{\ell\lambda} U^{Ln}_\alpha(a|\ell\lambda)\, \Phi^L_{n\ell\lambda}(\vec{x}_\alpha, \hat{y}_\alpha) = \\ &= \sum_\ell \varphi_{\alpha n\ell}(x_\alpha)\, \mathcal{Y}^{Ln}_{\ell a}(\hat{x}_\alpha, \hat{y}_\alpha). \end{aligned} \quad (42)$$

Функции $\mathcal{Y}^{Ln}_{\ell a}(\hat{x}_\alpha, \hat{y}_\alpha)$ образуют дипольный бисферический базис в $L_2(\mathbb{S}^2(\hat{x}_\alpha) \times \mathbb{S}^2(\hat{y}_\alpha))$

$$\mathcal{Y}^{Ln}_{\ell a}(\hat{x}_\alpha, \hat{y}_\alpha) = \sum_\lambda U^{Ln}_\alpha(a|\ell\lambda)\, \mathcal{Y}^L_{\ell\lambda}(\hat{x}_\alpha, \hat{y}_\alpha).$$

Принимая во внимание переопределение приведенных шаровых функций $\eta$ и замену $\lambda \to a \equiv a(\ell,\lambda)$, а также мультииндекса $i \equiv \{\alpha n \ell \lambda\}$ $\to i \equiv \{n a\}$, все приведенные выше разложения для фаддеевских компонент (30) и (31), физических радиальных компонент (32) и выражений для амплитуды (33) и (34), можно использовать для описания процессов рассеяния $(ac)_A + b \to a + (bc)_B$ в системе трех кулоновских частиц с зарядами $Z_a = Z_b = 1$ и $Z_c = -1$.

## 2. Задача рассеяния в гиперсферических координатах

### А. Гамильтониан

Рассмотрим параметризацию подпространства $x, y \in R^2_+$ с помощью гиперсферических координат /10/

$$x = X\sin\eta,\ y = X\cos\eta,\ 0 \le \eta \le \pi/2. \qquad (43)$$

Матрица перехода (2) между якобиевскими парами $\{\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha\},\ \alpha = a,b,c$ и $\{\vec{x}_\beta, \vec{y}_\beta\},\ \beta = b,c,a$ задается при этом тремя фиксированными углами $u_\beta$:

$$S_{\alpha\beta} = \sin u_\beta,\quad C_{\alpha\beta} = \cos u_\beta. \qquad (44)$$

Здесь

$$u_\beta = \operatorname{arctg} m_\beta/\mu,\quad 0 \le u_\beta \le \pi/2 \qquad (45)$$

- углы между биссектрисами треугольника масс частиц со сторонами: $\alpha\beta = m_\alpha + m_\beta$, в который вписана окружность с радиусом, равным трехчастичной массе $\mu$:

$$u_a + u_b + u_c = \pi. \qquad (46)$$

Гиперсферическая параметризация выглядит естественной, если перейти к удвоенному углу $\xi = 2\eta$ и пространство $R^2_+$ дополнить до $R^3_+$, используя угол $\vartheta = \vartheta_{xy}$ между векторами $\vec{x}$ и $\vec{y}$:

$$\cos\vartheta = \cos\Theta\cos\tilde\vartheta + \sin\Theta\sin\tilde\vartheta\cos(\varphi - \tilde\varphi). \qquad (47)$$

Определенное таким образом внутреннее пространство $R^3_+$:

$$\{x, y, \vartheta_{xy}\} \in R^3_+$$

отображается четырьмя октантами сферы $S^2_X(\xi,\vartheta)$ с радиусом $X = \sqrt{x^2+y^2}$ и углами $\xi$ и $\vartheta$ (см. рис.3)

$$0 < X < \infty,\quad 0 \le \xi \le \pi,\quad 0 \le \vartheta \le \pi. \qquad (48)$$

Зафиксируем, например, якобиевскую пару $\{\vec{x}_c, \vec{y}_c\}$. Тогда в принятой параметризации пространства $\mathcal{M} = R^1_+ \times S^5$ гамильтониан $H$ приобретает вид

$$H = -X^{-5}\partial_X X^5 \partial_X - X^{-2}\Delta_{\hat X} + \sum_{\alpha=a,b,c} V_\alpha(X, \xi_\alpha). \qquad (49)$$

Здесь

$$-\Delta_{\hat X} = -\frac{4}{\sin^2\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\sin^2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\vec{\ell}^{\,2}}{\sin^2\frac{\xi}{2}} + \frac{\vec{\lambda}^2}{\cos^2\frac{\xi}{2}} \qquad (50)$$

-угловая часть оператора Лапласа-Бельтрами $\Delta_{\hat X}$ на "сфере" $S^5(\hat X)$:

$$\hat X = \{\xi, \vartheta(\Theta, \varphi, \tilde\vartheta, \tilde\varphi)\} \in S^5(\hat X) \subset R^6 \setminus \{0\},$$

а парные потенциалы заданы соотношениями

$$V_a = -2Z_a\sqrt{m_a}\,X^{-1}(1 + \cos v_a\cos\xi + \sin v_a\sin\xi\cos\vartheta)^{-1/2},$$
$$V_b = -2Z_b\sqrt{m_b}\,X^{-1}(1 + \cos v_b\cos\xi - \sin v_b\sin\xi\cos\vartheta)^{-1/2}, \qquad (51)$$
$$V_c = 2Z_a Z_b\sqrt{m_c}\,X^{-1}(1 - \cos\xi)^{-1/2}.$$

Парные потенциалы обращаются в бесконечность в точке тройного соударения $X = 0$ и в точках парных соударений частиц:

$$\begin{aligned} &(ca)\quad \vartheta_{ca} = \pi, && \xi_{ca} = \pi - v_a, \\ &(cb)\quad \vartheta_{cb} = 0, && \xi_{cb} = \pi - v_b, \\ &(ab)\quad \vartheta_{ab} \in [0,\pi], && \xi_{ab} = \pi - \pi = 0, \end{aligned} \qquad (52)$$

где значения $v_\beta$ определяются коэффициентами перехода $u_\beta$: $v_\beta = 2u_\beta$. Соответствующий элемент объема в $\mathcal{M}$ равен

$$d^6x = X^5 dX\, d\Omega(\hat X),$$
$$d\Omega(\hat X) = (2\mu)^{-3}\frac{1}{8}\sin^2\xi\, d\xi\, d\hat x\, d\hat y. \qquad (53)$$

В окрестности точки тройного соударения можно использовать представление оператора гипермомента $\vec{K}^2 = -\Delta_{\hat X}$:

$$\vec{K}^2\Phi_K(X,\hat X) = K(K+4)\,\Phi_K(X,\hat X). \qquad (54)$$

Его собственные функции $\Phi_K(X,\hat X)$ образуют базис в $L_2(S^5_X(\hat X))$. Скалярное произведение

$$\langle K|K'\rangle = \int d\Omega^\gamma(X,\hat X)\,\bar{\Phi}_K(X,\hat X)\,\Phi_{K'}(X,\hat X) = \delta_{KK'} \qquad (55)$$

в $L_2(S^5_X(\hat X))$ удобно задать с инвариантной мерой

$$d\Omega^\gamma(X,\hat X) = X^{2\gamma}\, d\Omega(\hat X), \qquad (56)$$

которая позволяет согласовать нормировку гиперсферических функций

$$\Phi_K(x,\hat{x}) = x^{-\gamma}\Phi_K(\hat{x}), \quad \gamma = \frac{3}{2} \tag{57}$$

с нормировкой поверхностных функций $\Phi_i$ (42) асимптотического гамильтониана (36). Условие полноты в $L_2(S^5_x(\hat{x}))$ имеет вид

$$x^{2\gamma}\sum_K \Phi_K(x,\hat{x})\overset{*}{\Phi}_K(x,\hat{x}') = \delta(\hat{x}-\hat{x}'). \tag{58}$$

Гиперсферические функции

$$\Phi_K(\hat{x}) = (2\mu)^{-\gamma}\,Y_K(\hat{x}) \tag{59}$$

с точностью до множителя совпадают со стандартными $\mathcal{K}$-гармониками [10]:

$$Y_K(\hat{x}) = C_{N\ell\lambda}\sin^\ell\eta\cos^\ell\eta\, P_N^{\ell+\frac{1}{2},\lambda+\frac{1}{2}}(\cos 2\eta)\,y_{\ell\lambda}(\hat{x},\hat{y}),$$

$$C_{N\ell\lambda} = 2^{\frac{1}{2}}\left[\frac{(2N+\ell+\lambda+2)\,N!\,(N+\ell+\lambda+1)}{\Gamma(N+\ell+\frac{3}{2})\,\Gamma(N+\lambda+\frac{3}{2})}\right]^{\frac{1}{2}} \tag{60}$$

– нормировочный множитель, $K$ – мультииндекс: $K \equi \{\mathcal{K},\ell,\lambda\}$, $P_N^{\ell+\frac{1}{2},\lambda+\frac{1}{2}}$ – полином Якоби, имеющий $N = 0, 1, \ldots$, нулей по переменной $\eta$, $\mathcal{K} = 2N+\ell+\lambda$ – квантовое число гипермомента. Приведение к стандартной нормировке для $Y_K(\hat{x})$ осуществляется в результате перехода к масштабированному гиперрадиусу $x_\mu = (2\mu)^{-\frac{1}{2}}x$, что приводит к замене $d\Omega^\gamma(x,\hat{x}) \to d\Omega^\gamma_\mu(x,\hat{x}) = (x_\mu)^3 d\hat{x}$. Тогда для канонически сопряженного с $x_\mu$ импульса $P_\mu = (2\mu)^{\frac{1}{2}}P$ имеем привычное [13] соотношение $P^2 = 2\mu E$, вместо $P^2 = E$, принятого в монографии [9]. При необходимости указанная замена может быть легко выполнена.

## Б. Оператор инверсии

При стандартном определении углов $\xi$, $\vartheta$ на сфере $S^2_x(\xi,\vartheta)$ оператор четности $\mathcal{P}$ не затрагивает внутреннего пространства $\mathbb{R}^3_+$, также, как и $\mathbb{R}^2_+$. Его действие на $\Phi_K(x,\hat{x})$ определяется согласно (23):

$$\mathcal{P}\Phi_K(x,\hat{x}) = (-1)^{\ell+\lambda}\Phi_K(x,\hat{x}).$$

Дадим определение оператора полной инверсии $\hat{I}$, действующего в пространстве $\mathcal{M} = \mathbb{R}^1 \times S^5_x(\hat{x})$, который коммутирует с гамильтонианом $H$ и оператором $\hat{\mathcal{K}}^2$. Собственные значения $\hat{I}$ – полная четность $\zeta = \pm 1$, задаются соотношениями



$$\hat{I}\Phi_K(x,\hat{x}) = \zeta\,\Phi_K(x,\hat{x}), \quad \zeta = (-1)^{\mathcal{K}}. \tag{61}$$

Принимая во внимание, что

$$\zeta = (-1)^{\mathcal{K}} = (-1)^{2N+\ell+\lambda} = (-1)^{\ell+\lambda}, \tag{62}$$

имеем следующие определения оператора полной инверсии $\hat{I}$ в $\mathcal{M}$:

$$\hat{I} = \hat{I}_\xi\,\mathcal{P}\,\hat{I}_\xi = \hat{I}_\xi\,\mathcal{P}_\lambda\,\mathcal{P}_\ell\,\hat{I}_\xi, \tag{63}$$

где $\hat{I}_\xi: \xi \to \pi - \xi$ – оператор отражения на сфере $S^2_x(\xi,\vartheta)$. Его действие на гиперсферические функции $\Phi_K$ задано соотношением

$$\hat{I}_\xi\,\Phi_K(x,\hat{x}) = (-1)^N\,\Phi_K(x,\hat{x}). \tag{64}$$

В самом деле, поскольку точки $x$ и $-x$ внутреннего пространства $\mathbb{R}^3_+$ отождествлены, при действии оператора $\hat{I}$ в $\mathcal{M}$ мы имеем двойное отражение $\mathbb{R}^3_+$.

Данное определение оператора полной инверсии $\hat{I}$ согласовано с известным [14] разложением шестимерной плоской волны в $\mathcal{M}$:

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}-\gamma}e^{i\vec{X}\vec{P}} \underset{XP\to\infty}{\simeq} -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}(2ixP)^{-1}\cdot$$

$$\cdot\left\{e^{-i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)}(xP)^{\gamma}\,\delta(\hat{X}+\hat{P}) - e^{i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)}(xP)^{-\gamma}\,\delta(\hat{X}-\hat{P})\right\}. \tag{65}$$

При $\gamma = 0$ это соотношение переходит в разложение трехмерной плоской волны (35). Принимая во внимание условие полноты (58) в $L_2(S^5_x(\hat{x}))$, разложение (65) можно представить в виде

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}-\gamma}e^{i\vec{X}\vec{P}} \underset{X\hat{P}\to\infty}{\simeq} -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_K(2ixP)^{-1}\cdot\Phi_K(x,\hat{x})\cdot(xP)^{\gamma}\cdot$$

$$\cdot\left\{e^{-i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)} - e^{i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)}\hat{I}\right\}\overset{*}{\Phi}_K(P,-\hat{P}). \tag{66}$$

Если полярная ось $ON$ (см.рис.4) совпадает с осью $Z$ на рис.3, направление которой выбрано вдоль вектора $\vec{P}$, то выражение (66) упрощается:

$$(2\pi)^{-\frac{3}{2}-\gamma}e^{ixP\cos\xi} \underset{x\hat{P}\to\infty}{\simeq} -\left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}}\sum_{\mathcal{K}}(2ixP)^{-1}\cdot(xP)^{-\gamma}$$

$$\left\{e^{-i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)} - e^{(xP-\frac{\pi}{2}\gamma}\hat{I}_\xi\right\}\,D^s_{\mathcal{K}}(\cos\xi), \tag{67}$$

где
$$D^\gamma_{\mathcal{K}}(\cos\xi) = \frac{\Gamma(\frac{1}{2}+\gamma)}{(2\pi)^{\frac{3}{2}+\gamma}}\left(\mathcal{K}+\frac{1}{2}+\gamma\right)C^{\frac{1}{2}+\gamma}_{\mathcal{K}}(\cos\xi),$$

$$\delta(\hat{X}\mp\hat{P}) = \sum_{\mathcal{K}} D^\gamma_{\mathcal{K}}(\pm\cos\xi).$$

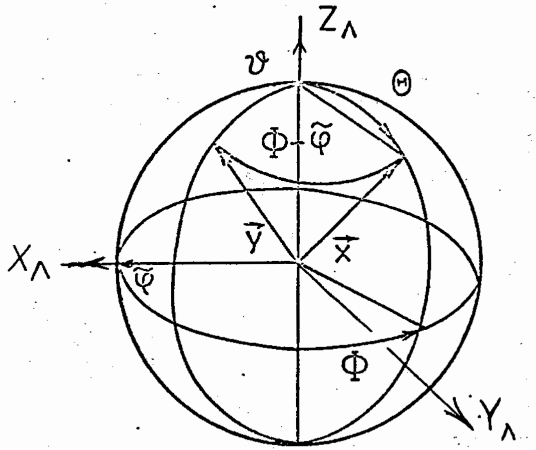


Рис. 3. Эффективная параметризация сферы $S^5$ через координаты сферы $S^3$.

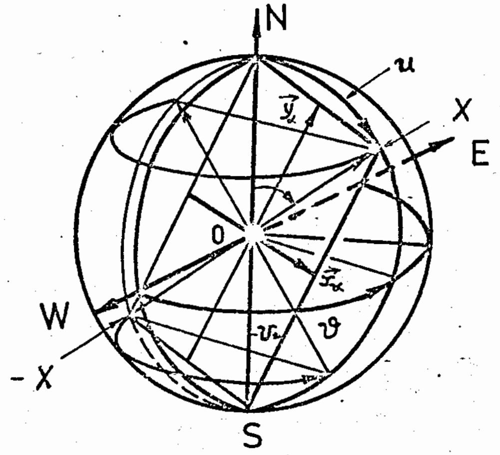


Рис.4. Эффективная параметризация координаты подходящей полусферы $S_+^2$. Отметим, что только введение (непрерывного) оператора инверсии $I$ позволяет дополнить параметризацию до $S^5$. При этом видно, что $S^5$ накрывается дважды.



В данном случае $\cos\xi = \cos\vartheta_{xP}$, а оператор полной инверсии $\hat{I} = \hat{I}_\xi$ определен на функциях $C_K^{\frac{1}{2}+\gamma}(\cos\xi)$ соотношением

$$\hat{I}\, C_K^{\frac{1}{2}+\gamma}(\cos\xi) = (-1)^K C_K^{\frac{1}{2}+\gamma}(\cos\xi).$$

При $\gamma=0$, $K=\lambda$ и соотношение (67) переходит в разложение трехмерной плоской волны по полиномам Лежандра:

$$P_\lambda(\cos\vartheta_{yP}) = C_\lambda^{\frac{1}{2}}(\cos\vartheta_{yP}),\quad \mathcal{P}_y P_\lambda(\cos\vartheta_{yP}) = (-1)^\lambda P_\lambda(\cos\vartheta_{yP}).$$

В. Амплитуда рассеяния на гиперсферически симметричном потенциале

Рассмотрим трехчастичное рассеяние на быстроубывающем модельном потенциале $V(\vec{x})$ с тем, чтобы перенести основные понятия задачи рассеяния из якобиевской параметризации в гиперсферическую.

Физическая волновая функция в представлении гипермомента $\vec{K}^2$ имеет вид

$$\Psi^{Ph}(\vec{x},\vec{P}) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \sum_{LKK'} \Phi^L_{K'}(x,\hat{x})\, x^{-1} \chi^{(ph)L}_{K'K}(x,P)\, \overset{*}{\Phi}{}^L_K(P,-\hat{P})\, P^{-1}.$$

Тогда имеем следующую систему радиальных уравнений Шредингера для коэффициентов $\chi$ :

$$\left\{-\frac{d^2}{dx^2} + [K'(K'+4)+\gamma(\gamma+1)]x^{-2} - P^2\right\}\chi_{K'K}(x) = -\sum_{K''} V_{K'K''}(x)\,\chi_{K''K}(x). \quad (68)$$

Для гиперсферически симметричного потенциала $V(\vec{x}) \equiv V(x)$ система уравнений (68) упрощается:

$$\left\{-\frac{d^2}{dx^2} + [K(K+4)+\gamma(\gamma+1)]x^{-2} - P^2\right\}\chi_K(x) = -V(x)\chi_K(x). \quad (69)$$

Свободные радиальные функции $\overset{\circ}{\chi}{}^{reg}$ этого уравнения $(V(x)\equiv 0)$ выражаются через цилиндрические функции Бесселя $J_{K+2}(x,P)$:

$$\overset{\circ}{\chi}{}^{reg}_K(x,P) = \sqrt{\frac{\pi}{2}\frac{x}{P}}\, J_{K+\frac{1}{2}+\gamma}(xP)$$

Они нормированы условием

$$\frac{2}{\pi}\int \overset{\circ}{\chi}{}^{reg}_K(x,P)\, \overset{\circ}{\chi}{}^{reg}_K(x,P')\, dx = P^{-2}\delta(P-P')$$

и имеют следующее асимптотическое поведение:

$$\overset{\circ}{\chi}{}^{reg}_K(x,P) \underset{xP\to\infty}{\approx} P^{-1}\sin\left(xP - \frac{\pi}{2}\gamma - \frac{\pi}{2}K\right).$$

Присутствие множителя $-\frac{\pi}{2}\gamma$ обусловлено неисчезающим центробежным потенциалом $\gamma(\gamma+1)x^{-2}$ в уравнении (68) и согласовано с разложением шестимерной плоской волны (65). Асимптотика регулярных решений уравнения (68) имеет вид

$$\chi^{reg}_{\mathcal K}(x,P)\underset{xP\to\infty}{\approx} P^{-1}\sin\{xP-\tfrac{\pi}{2}\gamma+(\Delta_{\mathcal K}-\tfrac{\pi}{2}\mathcal K)\}, \tag{70}$$

где $\Delta_{\mathcal K}\equiv\Delta_{\mathcal K}(P)$ – парциальный фазовый сдвиг. Физические решения связаны с регулярными обычным образом

$$\chi^{ph}_{\mathcal K}(x,P)=\chi^{reg}_{\mathcal K}(x,P)\,e^{i(\Delta_{\mathcal K}-\frac{\pi}{2}\mathcal K)}P$$

и удовлетворяют соотношениям ортогональности и полноты:

$$\frac{2}{\pi}\int_0^\infty dx\,\chi^{*ph}_{\mathcal K}(x,P)\,\chi^{ph}_{\mathcal K}(x,P')=\delta(P-P') \tag{71}$$

$$\frac{2}{\pi}\int_0^\infty dP\,\chi^{ph}_{\mathcal K}(x,P)\,\chi^{*ph}_{\mathcal K}(x',P)+\sum_n\chi_n(x)\chi_n(x')=\delta(x-x'). \tag{72}$$

Асимптотика физического решения имеет вид

$$\chi^{ph}_{\mathcal K}(x,P)\underset{xP\to\infty}{\approx}-(2i)^{-1}\left[e^{-i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)}-e^{i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)}e^{2i(\Delta_{\mathcal K}-\frac{\pi}{2}\mathcal K)}\right]. \tag{73}$$

В асимптотике решения уравнения Шредингера амплитуда расходящейся волны получается в результате действия унитарного оператора

$$\hat S=S\hat I \tag{74}$$

на амплитуду сходящейся волны /15/. В данном случае $\hat I$ – оператор инверсии (63), а $S$ – матрица рассеяния, действующая как интегральный оператор на единичной сфере $S^5(\hat x)$. Оператор $\hat S$ коммутирует с дополнительным интегралом движения $\hat{\mathcal K}^2$, т.е. эти операторы имеют общую систему собственных функций $\Phi_K(\infty,\hat x)$, образующих базис в $L_2(S^5(\hat x))$. Тогда фазовый сдвиг $\Delta_{\mathcal K}-\frac{\pi}{2}\mathcal K$ в асимптотике радиальных решений является фазой унитарного оператора

$$\hat S\,\Phi_K(\infty,\hat x)=\Phi_K(\infty,\hat x)\,e^{2i(\Delta_K-\frac{\pi}{2}\mathcal K)}. \tag{75}$$

Это соотношение полностью определяет оператор $\hat S$, а следовательно, и $S$-матрицу в $\mathcal K$-представлении:

$$\langle\mathcal K|S|\mathcal K'\rangle=e^{2i(\Delta_{\mathcal K}-\frac{\pi}{2}\mathcal K)}\langle K|I|K'\rangle.$$

В отличие от $\hat S$ сама $S$-матрица, вообще говоря, не диагональна и становится таковой только в случае коммутации дополнительного интеграла движения (в данном случае $\hat{\mathcal K}^2$) с оператором инверсии $\hat I$. Иными словами, если потенциал обладает центром инверсии, а в данном случае это так, то угловые функции являются собственными функциями $S$-матрицы:

$$\langle K|S|\mathcal K'\rangle=e^{2i\Delta_{\mathcal K}}\delta_{KK'}(-1)^{\mathcal K}.$$



Восстанавливая набор $L=\{LM\xi\}$ квантовых чисел точных интегралов движения, который мы по соглашению опустили, определим собственные фазовые сдвиги в $\mathcal K$-представлении равенством

$$\delta^L_{\mathcal K}=\Delta_{\mathcal K}-\tfrac{\pi}{2}(\mathcal K-L). \tag{76}$$

Тогда асимптотическое выражение для $\chi^{ph}$ примет вид

$$\chi^{(ph)L}_{\mathcal K}(x,P)\underset{xP\to\infty}{\approx}-(2i)^{-1}\left[e^{-(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)}-e^{i(xP-\frac{\pi}{2})}\langle L\mathcal K|\hat S|L'\mathcal K'\rangle e^{-\pi L}\right], \tag{77}$$

где

$$\langle L\mathcal K|\hat S|L'\mathcal K'\rangle=e^{2i\delta^L_{\mathcal K}}\delta_{LL'}\delta_{\mathcal K\mathcal K'}.$$

Используя соотношение полноты (58) для гиперсферических функций $\Phi_K(\infty,\hat x)\in L_2(S^5(\hat x))$ и представление (66) для шестимерной плоской волны, получаем асимптотическое разложение для физической волновой функции

$$\Psi^{ph}(\vec x,\vec P)\underset{xP\to\infty}{\approx}(2\pi)^{-\frac{3}{2}-\gamma}\left[e^{i(\vec x\vec P)}-x^{-1-\gamma}e^{i(xP-\frac{\pi}{2}\gamma)}f(\hat x,\vec P)\right].$$

Полная амплитуда $f(\hat x,\vec P)$ определяется выражением

$$f(\hat x,\vec P)=4\pi\sum_{LKK'}\Phi^L_K(\infty,\hat x)\,\hat f^L_{KK'}(P)\,\Phi^{*L}_{K'}(\infty,-\hat P), \tag{78}$$

где

$$\hat f^L_{KK'}(P)=\left[\langle LK|\hat S|LK'\rangle e^{-i\pi L}-\langle LK|\hat I|LK'\rangle\right](2iP)^{-1}P^{-\gamma}$$

– парциальная амплитуда в представлении собственных фазовых сдвигов (75)-(77). Формула для дифференциального сечения определяется квадратом амплитуды при расходящейся волне

$$d\sigma/d\Omega(\infty,\hat x)=|f(\hat x,\vec P)|^2, \tag{79}$$

где $d\Omega(\infty,\hat x)=d\Omega(\hat x)$-элемент телесного угла на $S^5(\hat x)$, см. (53). Очевидно, что для гиперсферически симметричного потенциала амплитуда рассеяния $f(\hat x,\vec P)$ зависит лишь от угла $\vartheta_{xP}=\xi$ между векторами $\vec P$ и $\vec P'$ ($\hat P'\equiv\hat x$). Поэтому можно аналогично (67) направить полярную ось $ON$ по $Z$, а последнюю вдоль импульса $\vec P$ падающей плоской шестимерной волны, тогда выражение для $f(\hat x,\vec P)$ упрощается

$$f(\cos\vartheta_{xP},P)=4\pi\sum_{LK}\Phi^L_K(\infty,\hat x)\left[e^{2i\Delta_{\mathcal K}(P)}-1\right](2iP)^{-1}\cdot$$
$$\cdot P^{-\gamma}\Phi^{*L}_K(\infty,\hat P)=4\pi\sum_{\mathcal K}\Delta^{\gamma}_{\mathcal K}(\cos\vartheta_{xP})\left[e^{2i\Delta_{\mathcal K}(P)}-1\right](2iP)^{-1}P^{-\gamma},$$

где $\mathcal{P}^{\gamma}_{\mathcal{K}}(\cos\vartheta_{x\rho})$ определено в (67). При $\gamma=0, \mathcal{K}\to\lambda, \rho\to p, X\to y$ это выражение переходит в стандартное разложение трехмерной амплитуды по полиномам Лежандра

$$f(\cos\vartheta_{yp}, p) = \sum_{\lambda}(2\lambda+1)\, P_{\lambda}(\cos\vartheta_{yp})[e^{2i\Delta_\lambda(p)}-1](2ip)^{-1}.$$

Отметим, что для трехмерной амплитуды в сфероидальных координатах $\{\xi,\eta,\varphi\}\in\mathcal{M}=R^3$ представление собственных фазовых сдвигов, в котором информацию о рассеянии несут не только фазы, но и угловые функции, было введено в работе [16]. Пример с гиперсферически симметричным потенциалом понадобился нам для наглядного определения основных понятий: дополнительного интеграла движения (в данном случае $\vec{\mathcal{K}}^2$ ) и унитарного оператора $\hat{S}=S\hat{I}$ , имеющих общую систему собственных функций, а также представления собственных фазовых сдвигов, которые необходимо вводить в многомерных и многоканальных задачах рассеяния. Такое представление согласовано с определением оператора инверсии $\hat{I}$ в гиперсферической параметризации в отличие от представления полуцелых моментов [13].

## 3. Адиабатический базис

### А. Основные уравнения

Выберем гиперсферическую параметризацию (43)-(48) конфигурационного пространства $X=x_\alpha\oplus y_\alpha\in\mathcal{M}=\mathbb{R}^1_+\times S^5$ . Введем следующие разложения для парциальных фаддеевских компонент $F^{L}_{\beta}$ (II):

$$F_{\beta i}(\vec{X},p)=\sum_j F^{L}_{\beta j}(X,\hat{X}_\beta)\,X^{-1}\chi^{L}_{ji}(X,p), \tag{80}$$

где базисные компоненты $F_{\beta j}(X,\hat{X}_\beta)\in\mathcal{H}(\hat{X})$ определены как решения спектральной задачи для системы уравнений (I2) на сфере $\hat{X}\in S^5(\hat{X})$ при фиксированном значении гиперрадиуса $X\in B=\mathbb{R}^1_+$

$$\Big\{-X^{-2}\Delta_{\cdot}+V_c(X,\cdot)+\hat{V}_\alpha(X,\cdot)+\sum_{\beta=a,b}V^{(0)}_{\beta}(X,\cdot)-E^{L}_j(X)\Big\}F^{L}_{\alpha j}(X,\cdot)= -\hat{V}_\alpha(X,\cdot)\,F_{\beta j}(X,\cdot). \tag{81}$$

Здесь $\Delta_{\cdot}\equiv\Delta_{\hat{X}}$ – угловая часть оператора Лапласа-Бельтрами (см. (50)), $E_j(X)$ – спектральный параметр, $\{Lj\}$ – набор квантовых чисел, нумерующих спектр $\sigma(H(X))$ трехчастичного гамильтониана $H(X)$ :

$$H(X)=-X^{-2}\Delta_{\hat{X}}+\sum_{\alpha}V_\alpha(X,\hat{X}), \tag{82}$$



который действует в слое $\mathcal{F}_X=L^2(S^5(\hat{X}))$ и зависит от точки $X$ базы $B$ как от параметра. Решение шредингеровской задачи (I0) на $S^5(\hat{X})$

$$\{H(X)-E_j(X)\}\,\Phi^{L}_j(X,\hat{X})=0 \tag{83}$$

с подходящими граничными условиями [4] составляется подобно (I4) в виде суммы базисных компонент

$$\Phi^{L}_j(X,\hat{X})=\sum_\beta F^{L}_{\beta j}(X,\hat{X}_\beta) \tag{84}$$

и порождает гильбертово расслоение $\{\Phi^{L}_j(X,\hat{X})\}^{\infty}_{j=1}\in\mathcal{H}(X)\sim L_2(S^5(\hat{X}))$ с некомпактной базой $B$ . Скалярное произведение

$$\langle Li|L'j\rangle=\int d\Omega^{\gamma}(X,\hat{X})\,\Phi^{L}_i(X,\hat{X})\,\Phi^{L'}_j(X,\hat{X})=\delta_{ij}\,\delta_{LL'} \tag{85}$$

задано в $L^2(S^5(\hat{X}))$ с инвариантной мерой $d\Omega^{\gamma}(X,\hat{X})= =X^{2\gamma}d\Omega_{S^5}(\hat{X})$ , $\gamma=3/2$, аналогично (55). Соответственно при фиксированном $X\in B$ имеем условие полноты в $L^2(S^5(\hat{X}))$

$$X^{2\gamma}\sum_{iL}\Phi^{L}_i(X,\hat{X})\,\overset{*}{\Phi}{}^{L}_i(X,\hat{X})=\delta(\hat{X}-\hat{X}'). \tag{86}$$

Разложение (I4), (80) с учетом (84) при фиксированном $L$ приобретает вид

$$\Psi^{L}(\vec{X},p)=\sum_j\Phi^{L}_j(X,\hat{X})\,X^{-1}\chi^{L}_{ji}(X,p). \tag{87}$$

Такое представление гиперсферического адиабатического разбиения автоматически согласовано с граничными условиями задачи рассеяния, поскольку в нем с самого начала используется разбиение на фаддеевские компоненты.

Подстановка разложения (87) в исходное уравнение Шредингера (I0) при фиксированном полном орбитальном моменте $L$ приводит к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для коэффициентов $\chi_j\equiv\{\chi_{ji}(X,p)\}$

$$\sum_j\{-\mathcal{D}^2_{ij}+(E_i(X)+\gamma(\gamma+1)X^{-2}-E)\delta_{ij}\}\chi_j=0. \tag{88}$$

Здесь $E_i(X)+\gamma(\gamma+1)X^{-2}$ – эффективный потенциал, $\gamma=\frac{3}{2}$ , $\mathcal{D}_{ij}$ – ковариантная производная; $\mathcal{D}_{ij}=\langle i|j\rangle d_X+A_{ij}(X)$. Оператор $A_{ij}$: $A_{ij}=\langle i|d_X|j\rangle+\gamma X^{-1}\langle i|j\rangle$ имеет смысл связности в гильбертовом расслоении $\mathcal{H}(X)\sim L^2(S^5_X(\hat{X}))$ с некомпактной базой $B$ и обеспечивает согласование решений (87) с асимптотическими граничными условиями на фаддеевские компоненты $F_L(\vec{X})$.

### Б. Классификация состояний

В настоящей работе мы рассматриваем процессы рассеяния при энергиях столкновения $E$ ниже трехчастичного порога развала

$$E \equiv E_A(P_A) < E_o(0) = 0 \qquad \text{(см. (9)).}$$

Тогда достаточно рассмотреть такие состояния $|L i>$ адиабатического базиса (83), которым в пределе $X \to \infty$ соответствуют собственные значения $E_i^L(X)$ асимптотического гамильтониана (36)

$$E_i^L(X) \to \begin{cases} \varepsilon_A + Z_B(Z_a - 1)X^{-1}\sqrt{2\mu_a} + \hat{\Lambda}_a X^{-2}, \\ \varepsilon_B + Z_a(Z_B - 1)X^{-1}\sqrt{2\mu_B} + \hat{\Lambda}_\ell X^{-2}. \end{cases} \qquad (89)$$

Здесь $\varepsilon_A = -Z_a^2 m_a / 2n_a^2$ и $\varepsilon_B = -Z_B^2 m_B / 2n_B^2$ – энергии изолированных атомов $(ac)$ и $(Bc)$, $\Lambda_a$ и $\Lambda_\ell$ – значения (41) соответствующих дипольных интегралов движения (37). При этом собственные функции адиабатического базиса $|L i>$

$$\Phi_i^L(X \to \infty, \hat{X}_\alpha) = \sum_\ell \varphi_{\alpha n \ell}(X \to \infty, z_\alpha)\, Y_{\ell \partial}^{Ln}(\hat{X}_\alpha, \hat{y}_\alpha) \quad (42')$$

переходят в дипольные функции (42).

Таким образом, адиабатический базис $|L i>$ в пределе $X \to \infty$ характеризуется приближенными квантовыми числами $i \equiv \{\alpha, n, \partial\}$, $n \equiv n_\alpha$ – главным квантовым числом атома $(\alpha c)$, $\alpha = a, B$, и дипольным квантовым числом $\partial \equiv \partial_\alpha$ (41). Легко показать, что асимптотика системы уравнений (88) в пределе $X \to \infty$ имеет вид

$$\left\{-\frac{d^2}{dX^2} + [E_i(X) - E]\right\}\chi_i = -2\sum_j A_{ij}^{(0)} \frac{1}{X}\frac{d}{dX}\chi_j, \qquad (90)$$

где $A_{ij}^{(0)} = \frac{1}{2}(E_i^{(0)} - E_j^{(0)}) \langle \Psi_i^{(0)} | \frac{X_\alpha^2}{2m_\alpha} | \Psi_j^{(0)} \rangle$.

С точностью $O(X^{-1})$ решения (90) задаются выражением

$$\chi_{ij}^{as} \approx -(2i)^{-1}\{\delta_{ij}\, e^{-iXP_i} - e^{iXP_i} P_i^{-1/2} S_{ij}^{as} P_j^{1/2}\}. \qquad (91)$$

Присутствие недиагональных матричных элементов $\sim X^{-1}\frac{d}{dX}$ связано с отличием $X$ от модулей якобиевских векторов $y_\alpha \simeq X - \frac{x_\alpha^2}{2X}$ /3/. Учет недиагональных матричных элементов позволяет согласовать асимптотику (91) с (32) при больших, но конечных $X$ /I/.

Таким образом, адиабатическое разложение (87) в пределе $X \to \infty$ при фиксированном $L$ представимо в виде

$$\Psi_i^{as}(\vec{X}, P) = \sum_{n_a, \partial_a} \Phi_{n_a \partial_a}(X \to \infty, \hat{X}_a) X^{-1} \chi^{as}_{n_a \partial_a, i}(X, P) + \sum_{n_B, \partial_B} \Phi_{n_B \partial_B}(X \to \infty, \hat{X}_B) X^{-1} \chi^{as}_{n_B \partial_B, i}(X, P). \qquad (92)$$



Здесь первый, как обычно, мультииндекс радиальной функции отвечает каналовой компоненте, второй нумерует начальное состояние системы трех частиц.

При $X \to 0$ функции адиабатического базиса $|L i> : \Phi_i^L(X, \hat{X}) = \sum F_{\alpha i}^L(X, \hat{X}_\alpha)$ переходят в линейные комбинации гиперсферических функций (57)-(60) при фиксированном значении гипермомента $\mathcal{K}$:

$$F_{\alpha i}(X \to 0, \hat{X}_\alpha) = \sum_{\ell_\alpha, \lambda_\alpha \in \mathcal{K}} \Phi_{\mathcal{K}_\alpha}(X; \hat{X}_\alpha)\, C^i_{\mathcal{K}_\alpha}. \qquad (93)$$

Принимая во внимание, что $E_i(X)$ при $X \to 0$ представимо в виде

$$E_i(X) = \mathcal{K}(\mathcal{K}+4)X^{-2} + E_i^{(1)} X^{-1} + E_i^{(2)} + O(X) \qquad (94)$$

коэффициенты $C^i_{\mathcal{K}_\alpha}$ определяют вместе с поправками $E_i^{(1)}$ из секулярного уравнения

$$\langle \Phi_{\mathcal{K}_\alpha}(\hat{X}_\alpha) | \hat{V}_c(X, \cdot) + \hat{V}_\alpha^{\prime}(X, \cdot) + \sum_{\beta = a, B} V_\beta^{(0)}(X, \cdot) - E_j^{(1)} | \Phi_{\mathcal{K}_\alpha}(\hat{X}_\alpha) C^j_{\mathcal{K}_\alpha} = \sum_{\beta = a, B} \langle \Phi_{\mathcal{K}_\alpha} | \hat{V}_\alpha | \Phi_{\mathcal{K}_\beta} \rangle C^j_{\mathcal{K}_\beta}. \qquad (95)$$

Таким образом, адиабатический базис $|L i>$ в пределе $X \to 0$ характеризуется приближенными квантовыми числами $i = \{\mathcal{K}, \nu\}$, $\mathcal{K}$ – гипермоментом системы трех частиц в окрестности точки тройного соударения, и "кулоновским" числом $\nu \equiv \nu(\ell, \lambda)$, нумерующим в порядке возрастания корни секулярного уравнения (95).

В асимптотике системы уравнений (88) в окрестности точки тройного соударения

$$\chi_j(X) \underset{X \to 0}{\approx} \sum_{i_0} X^{\mathcal{K}_0 + 5/2} g_{j i_0}(X)$$

явно выделяется логарифмическая особенность /17/

$$g_{j i_0}(X) = \sum_{t=0} g_{j i_0}^{(t)} X^t + \sum_{t=2}\sum_{s=1} g_{j i_0}^{(t,s)} X^t (\ln X)^s. \qquad (96)$$

Первые коэффициенты разложения выписаны в работе /I/.

## 4. Задача рассеяния в адиабатическом представлении

### А. Система радиальных уравнений

Полная физическая волновая функция $\Psi^{Ph}$, описывающая состояние рассеяния ниже трехчастичного порога при фиксированном направлении $\hat{P}_{n_\alpha}$ импульса $P_{n_\alpha}$ падающей кластерной $|n_\alpha>$ волны, имеет вид

$$\Psi^{Ph}_{n_\alpha}(\vec{X}, \vec{P}_{n_\alpha}) = \left(\frac{2}{\pi}\right)^{1/2} \sum_{L \partial_\alpha n_\alpha} \Psi^{(Ph)L}_{n_\alpha \partial_\alpha}(\vec{X}, P)\, \overset{*}{\Phi}{}^L_{n_\alpha, \partial_\alpha}(\infty, -\hat{P}_{n_\alpha}) P_{n_\alpha}^{1-\gamma}. \qquad (97)$$

Здесь $\Psi^{(ph)L}_{n_\alpha a_\alpha}(\vec{X}, P)$ задана в адиабатическом представлении (88) и при $X\to\infty$ определяется подобно (92):

$$\Psi^{(ph)L}_{n_\alpha a_\alpha}(\vec{X}, P) = \sum_{\beta=a,b}\sum_{n_\beta l_\beta} \Phi_{n_\beta a_\beta}(\infty, \hat{x}_\alpha)\, X^{-1-\gamma} \chi_{n_\beta a_\beta, n_\alpha a_\alpha}(X, P), \qquad (98)$$

где $\Phi_{n_\beta a_\beta}(\infty, \hat{x}_\beta) = X^{\gamma}\varphi_{n_\beta a_\beta}(X\to\infty, \hat{x}_\beta)$

отличаются на нормировочный множитель $X^{-\gamma}$ от базисных функций (83), нормированных условием (85). Считаем, что диагональная матрица импульсов задана в блочном виде:

$$|p| = \begin{pmatrix} p_a & 0 \\ 0 & p_b \end{pmatrix},$$

где $p_{n_\alpha} = \sqrt{E - E_{n_\alpha}}$, $\alpha = a, b$ - диагональная матрица модулей импульсов относительного движения центров масс атомов $(\alpha c)$ с энергией $E_{n_\alpha} = -\varkappa^2_{n_\alpha} = -\frac{Z_a^2 m}{2 n_\alpha^2} < 0$. Тогда для радиальной функции $\chi$

$$\chi = \begin{pmatrix} \chi_{bb} & \chi_{ba} \\ \chi_{ab} & \chi_{aa} \end{pmatrix} \qquad (99)$$

имеем соответствующее представление для системы уравнений (88) ниже трехчастичного порога развала

$$\begin{pmatrix} -D^2_{bb} + U_{bb} - p_b^2 & -dA_{ba} - A_{ba}d - (A^2)_{ba} + U_{ba} \\ -dA_{ab} - A_{ab}d - (A^2)_{ab} + U_{ab} & -D^2_{aa} + U_{aa} - p_a^2 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \chi_{bb} & \chi_{ba} \\ \chi_{ab} & \chi_{aa} \end{pmatrix} = 0. \qquad (100)$$

Здесь эффективные потенциалы $U_{\alpha\beta}$ переопределены:

$$U_{\alpha\beta} = [E_\alpha(X) + \gamma(\gamma+1)X^{-2}]\,\delta_{\alpha\beta} + H_{\alpha\beta} + (A^2)_{\alpha\beta}$$

$$H_{\alpha\beta} = \left\langle \frac{\partial\varphi_\alpha}{\partial X} \Big| \frac{\partial\varphi_\beta}{\partial X} \right\rangle - \frac{\gamma^2}{X^2}\,\delta_{\alpha\beta}$$

в связи с тем, что мы не используем условие полноты базиса, при котором имеет место равенство $H_{\alpha\beta} = -(A^2)_{\alpha\beta}$, при построении матрицы на конечном числе открытых каналов. Асимптотика физических решений $\chi^{ph}$, соответствующих волновой функции (97)-(98), определяется соотношениями

$$\chi^{(ph)L}_{\beta\alpha} \approx -(2i)^{-1}\left\{ e^{-i(Xp_\beta - \frac{\pi}{2}\gamma)}\,\delta_{\beta\alpha} - e^{i(Xp_\beta - \frac{\pi}{2}\gamma)}\, p_\beta^{-1/2} S^{phL}_{\beta\alpha} p_\alpha^{1/2} \right\}, \qquad (101)$$

где

$$S^{(ph)L} = \begin{pmatrix} S^{(ph)L}_{bb} & S^{(ph)L}_{ba} \\ S^{(ph)L}_{ab} & S^{(ph)L}_{aa} \end{pmatrix}$$



- физическая унитарная парциальная $S$-матрица, позволяющая определить амплитуды всех возможных процессов рассеяния ниже трехчастичного порога. Полная амплитуда перехода из состояния $|n_\alpha>$ кластера $\alpha$ в состояние $|n_\beta>$ кластера $\beta$ равна

$$f_{n_\beta n_\alpha}(\hat{X}, \vec{P}_{n_\alpha}) = 4\pi \sum_{L, a_\beta, a_\alpha} \Phi^L_{n_\beta a_\beta}(\infty, \hat{x})\, \hat{f}^L_{n_\beta a_\beta, n_\alpha a_\alpha}(P)\, \overset{*}{\Phi}_{n_\alpha a_\alpha}(\infty, -\hat{P}_{n_\alpha}). \qquad (102)$$

Инвариантная амплитуда

$$\hat{f}^L_{n_\beta a_\beta, n_\alpha a_\alpha}(P) = \{\hat{S}(P) - I\,\mathbb{1}\}_{n_\beta a_\beta, n_\alpha a_\alpha}(2i P_{n_\alpha})^{-1} \qquad (103)$$

определяется матричными элементами унитарного оператора рассеяния $\hat{S} = S\hat{I}$ (74) и оператора полной инверсии $\hat{I}$ (63) на подпространстве функций $\Phi^L_{n_\alpha a_\alpha}(\infty, \hat{x}_\alpha)$, которые задают асимптотическое поведение физической радиальной функции (101)

$$\chi^{ph} \approx -(2i)^{-1}\left\{ e^{-i(Xp - \frac{\pi}{2}\gamma)} - e^{i(Xp - \frac{\pi}{2}\gamma)}\hat{I} \right\}\mathbb{1} + e^{i(Xp - \frac{\pi}{2}\gamma)}\left\{ p^{-1/2}\hat{S}\, p^{1/2} - I\,\mathbb{1} \right\}. \qquad (101')$$

Б. Радиальные решения

Для построения физических решений используем стандартную процедуру[6,18]. Введем регулярные решения $\chi^{reg}$ для системы радиальных уравнений (100) с граничными условиями при $X\to 0$

$$\lim_{X\to 0} \chi^{reg}(X, P)\, X^{-(\mathcal{K}+\gamma+1)} = \mathbb{1}. \qquad (104)$$

Выполнение этого условия обеспечивается асимптотикой (94) $V(X) \approx [\mathcal{K}(\mathcal{K}+4) + \gamma(\gamma+1)]X^{-2}$ и регулярным поведением $A(X)$ и $\partial_X \chi(X, P)$ при $X\to 0$.

Регулярные решения представляются в виде линейной комбинации матричных решений Йоста $F \equiv F(X, P)$

$$\chi^{reg} = -(2i)^{-1}\{F_- P^{-1}\mathcal{F}_+ - F_+ P^{-1}\mathcal{F}_-\}, \qquad (105)$$

которые удовлетворяют системе радиальных уравнений и граничным условиям

$$F_\pm(X, P) \underset{XP\to\infty}{\longrightarrow} e^{\pm(XP - \frac{\pi}{2}\gamma)}\,\mathbb{1}. \qquad (106)$$

Здесь, как обычно, индексы "+" и "-" отвечают расходящимся и сходящимся волнам. Матричная функция Йоста $\mathcal{F}_\pm \equiv \mathcal{F}_\pm(p)$ по определению равна*)

$$\mathcal{F}_\pm = W\{F_\pm, \chi^{reg}\} = \tilde{F}_\pm D\chi^{reg} - \{\widetilde{DF}\}\chi^{reg}, \tag{107}$$

где $D = \mathbb{1}(\partial_x + \gamma x^{-1}) + A(x)$ - ковариантная производная (88). Отсюда немедленно следует, что $\mathcal{F}_\pm$ связана с асимптотикой $F_\pm$ соотношением

$$\mathcal{F}_\pm = 2(\mathcal{K}+\gamma+\tfrac{1}{2})\lim_{x\to 0}\tilde{F}_\pm(x,p)\,x^{\mathcal{K}+\gamma}. \tag{108}$$

При этом регулярные решения $\chi^{reg}$ нормированы условием

$$\left(\frac{2}{\pi}\right)\int_0^\infty dx\,\tilde{\chi}^{reg}(x,p)\,\chi^{reg}(x,p') = p^{-2}\,\delta(p-p') \tag{109}$$

и имеют следующие асимптотики

$$\chi^{reg}_{xp\to\infty} \approx -(2i)^{-1}\{e^{-i(xp-\frac{\pi}{2}\gamma)}p^{-1}\mathcal{F}_+ - e^{i(xp-\frac{\pi}{2}\gamma)}p^{-1}\mathcal{F}_-\}. \tag{110}$$

Физические решения выражаются через регулярные обычным образом :

$$\chi^{ph} = \chi^{reg}\mathcal{F}_+^{-1}p = -(2i)^{-1}\{F_- + F_+\bar{S}\} \underset{xp\to\infty}{\Rightarrow} -(2i)^{-1}\{e^{-i(xp-\frac{\pi}{2}\gamma)}\mathbb{1} - e^{i(xp-\frac{\pi}{2}\gamma)}\bar{S}\}. \tag{111}$$

Функции Йоста задают матрицу рассеяния

$$\bar{S} = p^{-1}\mathcal{F}_-\mathcal{F}_+^{-1}p. \tag{112}$$

Из равенства $W\{\chi^{reg},\chi^{reg}\}=0$ имеем привычные соотношения

$$\tilde{\mathcal{F}}_+ p^{-1}\mathcal{F}_- = \tilde{\mathcal{F}}_- p^{-1}\mathcal{F}_+, \quad p^{-1}\mathcal{F}_-\mathcal{F}_+^{-1}p = \tilde{\mathcal{F}}_+^{-1}\tilde{\mathcal{F}}_-.$$

Они позволяют ввести симметричную $\hat{S} \equiv \hat{S}(p)$ матрицу

$$\hat{S} = p^{1/2}\bar{S}p^{-1/2}, \quad \hat{S} = \tilde{\hat{S}}. \tag{113}$$

На открытых каналах из симметричной $\hat{S}$ -матрицы выделяется физическая унитарная $\hat{S}$ -матрица рассеяния

$$\hat{S}^+\hat{S} = \hat{S}\hat{S}^+ = \mathbb{1} \tag{114}$$

*) Здесь знак "~" означает транспонирование.



и соответствующие ей физические решения

$$\chi^{ph} = -(2i)^{-1}\{F_- + F_+ p^{-1/2}\hat{S}p^{1/2}\}. \tag{115}$$

Эти решения имеют асимптотику (101), гарантирующую условие сохранения радиального тока

$$\partial_x J = 0, \quad J = -i\,W\{\bar{\chi}^{ph}, \chi^{ph}\}. \tag{116}$$

При этом унитарный произвол $\mathcal{U} \equiv \mathcal{U}(x)$ в калибровке радиальных функций $\chi \to \chi' = \mathcal{U}\chi$ оставляет $W$ инвариантным*).

При практическом вычислении унитарной $\hat{S}$ -матрицы применяется представление собственных фазовых сдвигов $\delta\,(\mathrm{Im}\,\delta)=0$

$$\hat{S}B = Be^{2i\delta}, \quad \mathcal{F}_\pm = p^{1/2}Be^{\mp i\delta}, \tag{117}$$

где $B$ - ортогональная матрица

$$B\tilde{B} = 1, \quad B = p^{-1/2}\,\mathrm{Re}(\mathcal{F}_\pm e^{\pm i\delta}). \tag{118}$$

Физическая волновая функция (98) в этом представлении содержит падающие волны во всех каналах, а коэффициенты $B$ играют роль параметров смешивания

$$\Psi^{ph} = \psi^{ph}B = -(2i)^{-1}x^{-1}\Phi(x,\hat{x})[F_-B - F_+Be^{2i\delta}] \Rightarrow$$
$$\underset{xp\to\infty}{\Rightarrow} -(2i)^{-1}x^{-1}\Phi(x,\hat{x})\{e^{-i(xp-\frac{\pi}{2}\gamma)}B - e^{i(xp-\frac{\pi}{2}\gamma)}Be^{2i\delta}\}. \tag{119}$$

Преобразование Кели для унитарной $\hat{S}$ -матрицы $\hat{S} = (1+iK)(1-iK)^{-1}$ приводит к вещественной и симметричной $K$ -матрице

$$KB = B\,\mathrm{tg}\,\delta. \tag{120}$$

Итак, решение радиальных уравнений (100) дает возможность построить унитарную физическую $\hat{S}$ -матрицу (101), (112)-(114) для описания процессов возбуждения и перераспределения в системе трех заряженных частиц.

Напомним, что физические решения $\chi^{ph}$ строились через регулярные (111), и их асимптотика задавалась значением центробежного потенциала в точке тройного соударения. Однако, в отличие от стандартного подхода, само поведение центробежного потенциала претерпевает существенное изменение при больших $X$. В связи с этим в этой области необходимо использовать другие решения $\chi^{D}$, асимптотика которых отвечает собственным значениям дипольного интеграла движения $\Lambda$ (37):

*) Калибровочный произвол формально позволяет перейти к так называемому "диабатическому" представлению.

$$\chi^D \approx -(2i)^{-1}\{e^{-i\chi p} - e^{i\chi p} p^{-\gamma} \hat{S}^D p^{\gamma}\} . \qquad (121)$$

При этом зависимость от фактора $\gamma = 3/2$ исчезает, а вся информация о дипольных фазах $\delta_D$ содержится в матричных элементах асимптотического оператора $\hat{S}^D = S^D \hat{I}$, где $\hat{I}$ оператор полной инверсии координат (61)-(64)/16/. Дипольная матрица рассеяния $\hat{S}^D$ вычисляется из условия сшивки (121) с физическими рассеяниями (115), (101) при достаточно большом значении $X_0$. В результате можно найти инвариантную (102) и полную (103) амплитуды рассеяния, используя соотношение

$$\hat{S} = e^{i\frac{\pi}{2}\gamma} \hat{S}^D e^{i\frac{\pi}{2}\gamma} . \qquad (122)$$

В. Амплитуда рассеяния

Физическая волновая функция $\Psi_A^{ph}(\vec{X}, \vec{P}_A)$, описывающая процессы возбуждения и перезарядки (2 → 2) в конфигурационном пространстве с кластером $\alpha$ в начальном состоянии $|A\rangle = |n_\alpha \ell_\alpha m_{\ell_\alpha}\rangle$ связана с (97) соотношением

$$\Psi_A^{ph}(\vec{X}, \vec{P}_A) = \iint \Psi_{n_\alpha}^{ph}(\vec{X}, \vec{P}_{n_\alpha}) P_{n_\alpha}^{\gamma} \varphi_A(\infty, \omega_\alpha) d\omega_\rho d\omega_\alpha , \qquad (123)$$

где функция мишени и элемент объема

$$\varphi_A(\infty, \omega_\alpha) = X^{\gamma} \varphi_{n_\alpha \ell_\alpha}(X \to \infty, \xi_\alpha) Y_{\ell_\alpha m_{\ell_\alpha}}(\hat{x}_\alpha) \qquad (124)$$

$$d\omega_\alpha = (2\mu)^{-3} \frac{1}{8} \sin^2 \xi_\alpha \, d\xi_\alpha \, d\hat{x}_\alpha \qquad (125)$$

определены согласно (42') и (53).

Используя определение (42') свойство ортогональности $\varphi_A$ и свойство полноты дипольных сферических функций $\eta_{\alpha \ell m_\ell a}^{L n_\alpha}(\hat{y}_\alpha)$ (39), получаем асимптотическое разложение для $\Psi_A^{ph}(\vec{X}, \vec{P}_A)$

$$\Psi_A^{ph}(\vec{X}, \vec{P}_A) \approx (2\pi)^{-3/2} \sum_B \varphi_B(X \to \infty, \omega_\beta) \cdot \qquad (126)$$
$$\cdot [\chi_A(\gamma, X \to \infty, \hat{y}_\alpha, P_A) \hat{I}_{AA} \delta_{BA} + X^{-1} e^{i(P_B X - \frac{\pi}{2}\gamma)} P_B^{-\gamma} f_{BA}(\hat{y}_\beta, \vec{P}_A)] P_A^{\gamma} .$$

Здесь вместо стандартной плоской волны (35) возникает выражение



$$(2\pi)^{-3/2} \chi_A(\gamma, X \to \infty, \hat{y}_A, \vec{P}_A) I_{AA} \delta_{BA} \approx \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\gamma} (-2ix^{-1}) \delta_{n_\beta n_\alpha} \cdot$$
$$\cdot \sum_{L a}^{L n_\alpha} \eta_{\ell_\alpha m_{\ell_\alpha} a_\alpha}^{L n_\alpha}(\hat{y}_\alpha) [e^{-i(xP_A - \frac{\pi}{2}\gamma)} - e^{i(xP_A - \frac{\pi}{2}\gamma)} I_{n_\alpha a_\alpha, n_\alpha a_\alpha}^{L}] \overset{*}{\eta}_{\ell_\alpha m_{\ell_\alpha} a_\alpha}^{L n_\alpha}(\hat{P}_A) = \qquad (127)$$
$$= \left(\frac{2}{\pi}\right)^{\gamma} (-2ix^{-1}) \delta_{BA} [e^{-i(xP_A - \frac{\pi}{2}\gamma)} \delta(\hat{y}_\alpha + \hat{P}_A) \hat{I}_{AA} -$$
$$- e^{i(xP_A - \frac{\pi}{2}\gamma)} \delta(\hat{y}_\alpha - \hat{P}_A)] P_A^{-1} , \qquad (128)$$

где $\hat{I}_{AA} = (-1)^{\ell}$ и $I_{n_\alpha a_\alpha, n_\alpha a_\alpha} = \xi$ - собственные значения оператора инверсии $\hat{I}$ (63) на подпространстве функций $\varphi_A(\infty, \omega_\alpha)$ и $\Phi_{n_\alpha a_\alpha}^{L}(\infty, \hat{x}_\alpha)$ соответственно.

Амплитуда перехода $f_{BA}$ из состояния $A = |n_\alpha \ell_\alpha m_{\ell_\alpha}\rangle$ кластера $\alpha$ в состояние $B = n_\beta \ell_\beta m_{\ell_\beta}\rangle$ кластера $\beta$ получается усреднением полной инвариантной амплитуды (102) по состояниям $|A\rangle$ и $|B\rangle$

$$f_{BA} = \iint d\omega_\beta \overset{*}{\varphi}_B(\infty, \omega_\beta) f_{n_\beta n_\alpha}(\hat{x}, P_{n_\alpha}) \varphi_A(\infty, \omega_\alpha) d\omega_\alpha . \qquad (129)$$

Используя асимптотическое представление (42') и условие ортогональности $\varphi_A$ и $\varphi_B$, получаем выражение для $f_{BA}$:

$$f_{BA}(\hat{y}_B, P_A) = 4\pi \sum_{L a_\beta a_\alpha} I_{AA} \eta_{\ell_\beta m_{\ell_\beta} a_\beta}^{L n_\beta}(\hat{y}_i) \hat{f}_{n_\beta a_\beta, n_\alpha a_\alpha}^{L}(P) \overset{*}{\eta}_{\ell_\alpha m_{\ell_\alpha} a_\alpha}^{L n_\alpha}(\hat{P}_A) \qquad (130)$$

через инвариантную парциальную амплитуду (103).

## Обсуждение результатов

Выражение для амплитуды рассеяния (130), полученное в рамках гиперсферического адиабатического подхода, обобщает известное (33) на случай нецентрального взаимодействия сталкивающихся фрагментов. При этом дифференциальное сечение (17) для процессов рассеяния $(ac)_A + \ell \to (ac)_{A'} + \ell$, вообще говоря, для состояний с $n \geq 2$ расходится, однако транспортное сечение остается конечным и может служить интегральной характеристикой рассеяния/9/. С другой стороны, учет релятивистских поправок поляризации вакуума и т.д.), а также кулоновской экранировки при описании реальных мезомолекулярных процессов приводит к конечным дифференциальным и полным сечениям. Это позволяет использовать предложенную схему для решения многочисленных задач, возникающих в проблеме мюонного катализа.

## Литература

I. M.B.Kadomtsev, S.I.Vinitsky. J.Phys.B, 1987, v.20, p.5723.

2. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев. ЯФ, 1974, т.20, с.576; ЭЧАЯ 1982, т.13, вып.6, с.1336.

3. M.B.Kadomtsev, S.I.Vinitsky, F.R.Vukajlivich. Phys.Rev. A, 1987, v.35, N 10, p.4652.

4. А.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. ЯФ, 1988, т.48, с.945.

5. А.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. Коэффициент прилипания в реакции $t\mu(d,n)^4He\mu$ в гиперсферическом адиабатическом подходе. Препринт ОИЯИ, Р4-88-747, Дубна, 1988, 15 с.

6. Р.Ньютон. Теория рассеяния волн и частиц, Мир, М., 1969.

7. Ю.А.Симонов. ЯФ, 1966, т.3, с.630.

8. K.A.Makarov, Yu.A.Kuperin, B.S.Pavlov, V.M.Dubovik, B.L.Markovski, S.I.Vinitsky. A Noval Adiabatic Representation in the Few-Body Quantum Scattering Problem. Preprint FUB-HEP/87-11, Berlin(West), 1987, 21 p.

9. С.П.Меркурьев, Л.Д.Фаддеев. Теория рассеяния для систем нескольких частиц. Наука, М., 1985.

I0. Ф.М.Морс, Г.Фешбах. Методы теоретической физики. ИИЛ., М., 1960, т.2, гл.12.

II. М.Гольдбергер, К.Ватсон. Теория столкновений, Мир, М., 1967.

I2. В.Н.Островский. ЖЭТФ, 1977, т.73, вып.6(12), с.2077.

I3. L.M.Delves, Nucl.Phys. 1960, v.20, p.275.

I4. Р.К.Петеркоп. Теория ионизации атомов электронным ударом "Зинатне", Рига, 1975.

I5. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, ГИФМЛ, Москва, 1963.

I6. Д.И.Абрамов, И.В.Комаров. ТМФ, 1975, т.22, с.253.

I7. В.А.Фок. Изв. Акад.наук СССР, 1954, сер.физ., т.18, с.161.

I8. H.Klar. Phys.Rev. A, 1977, v.15, 1452.

I9. Д.И.Абрамов, И.В.Комаров. Вестник ЛГУ, 1975, № 22, с.24.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 апреля 1989 года.