

ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Меремьянин Алексей Васильевич

**Методы квантовой теории углового момента в
задаче нескольких тел**

01.04.02 – теоретическая физика

ДИССЕРТАЦИЯ

на соискание ученой степени

доктора физико-математических наук

Научный консультант:

доктор физико-математических наук,

профессор Манаков Н. Л.

Воронеж – 2009

Содержание

Введение	6
Глава 1. Отделение коллективных угловых переменных в уравнении Шрёдингера для системы N тел	20
1.1. Метод вращающихся координатных систем и колебательно-вращательное разложение гамильтониана	23
1.1.1. Отделение коллективных углов в методе вращающихся координатных систем	25
1.1.2. Колебательно-вращательное разложение гамильтониана	34
1.1.3. Общее определение вращающихся координатных систем	37
1.1.4. Калибровка мгновенных главных осей инерции	45
1.1.5. Калибровка z -связи	50
1.1.6. Примеры радиальных уравнений для задач трёх и четырёх тел	54
1.2. Калибровка Экарта	59
1.2.1. Производящие функции, векторы и матрица Экарта	62
1.2.2. Вычисление базисных векторов и матрицы Экарта	64
1.2.3. Вращательный и кориолисов гамильтонианы	69
1.2.4. Предел абсолютно твёрдого тела для системы Экарта	71
1.2.5. Планарные системы	74
1.2.6. Задача трёх тел	77
1.2.7. Задача четырёх тел	81
1.3. Метод минимальных биполярных гармоник	83
1.3.1. Разложения по минимальным биполярным гармоникам	85

1.3.2. Задача трёх тел	88
1.3.3. Задача N тел	91
1.4. Метод устранения калибровочных расходимостей	95
1.5. Выводы	102
Глава 2. Мультипольные разложения континуума трёх свободных частиц и волновые функции волчка	106
2.1. Мультипольные разложения волновой функции континуума трёх тел	107
2.2. Разложение произведения двух плоских волн	113
2.2.1. Калибровка половинного угла	117
2.2.2. Калибровка zzx	121
2.2.3. Связь мультиполей, соответствующих разным калибровкам, и интегралы с функциями Бесселя	125
2.3. Кинематическая модель трёхчастичного распада	127
2.3.1. Диаграммы Далитца	129
2.3.2. Распад трёхчастичного волчка	131
2.4. Выводы	138
Глава 3. Четырёхмерные мультипольные разложения и симметрия Фока атома водорода	141
3.1. Стереографические проекции и матричные элементы с водородными волновыми функциями	142
3.1.1. Матричные элементы в импульсном пространстве	142
3.1.2. Свойства стереографической проекции	146
3.2. Мультипольные разложения гиперсферической гармоник	149
3.2.1. Тензорная форма мультипольных разложений	149

3.2.2.	Явные выражения для мультипольных разложений	151
3.3.	Выражения для матричных элементов	155
3.3.1.	Явный вид матричных элементов	156
3.3.2.	Дипольное приближение	158
3.4.	Выводы	160
Глава 4.	Параметризация угловых распределений в процессах	
	однофотонной фрагментации	163
4.1.	Параметризация дипольной амплитуды N -частичной фрагмен-	
	тации	163
4.1.1.	Общие выражения для амплитуды фотофрагментации	165
4.1.2.	Полная фрагментация молекулы водорода	171
4.2.	Недипольные эффекты в двухэлектронной фотоионизации ато-	
	мов	174
4.2.1.	Параметризация амплитуды с учётом недипольных по-	
	правок	176
4.2.2.	Недипольные поправки к ионизации гелия	179
4.3.	Выводы	186
Заключение	189
Приложения	192
А.	Неприводимые тензоры и их свойства	192
Б.	Отделение координат вектора центра масс в задаче N тел	194
В.	Приложения к Главе 1	196
В.1.	Дифференциальные операции с матрицами конечных вра-	
	щений	196

В.2.	Параметры для калибровки z -связи	199
В.3.	Вычисление действия оператора Лапласа на разложения по минимальным биполярным гармоникам	201
В.4.	Градиенты минимальных биполярных гармоник	203
В.5.	Дифференциальные операции в пространстве внутрен- них переменных системы четырёх тел	206
Г.	Приложения к Главе 3	209
Г.1.	Вычисление сумм в (3.33)	209
Г.2.	Явные выражения для функций $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$	211
Г.3.	Функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ в частных случаях	213
Г.4.	Рекуррентные соотношения для функций $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$	216
Литература		218

Введение

Изучение малочастичных квантовых систем имеет большое значение для понимания структуры ядер, атомов и молекул. Диапазон задач, в которых приходится иметь дело с малочастичными системами чрезвычайно широк: от изучения ядерного гало [1, 2] и мюонного катализа ядерного синтеза [3–5] до исследования полупроводниковых наноразмерных структур – квантовых точек [6–8]. Как правило, в квантовых системах нескольких тел межчастичные корреляции велики, и методы вычислений, основанные на приближении самосогласованного поля, неприменимы. Таким образом, в данном случае необходимо решать уравнение Шрёдингера напрямую, что связано с большими трудностями численного решения уравнения в частных производных в многомерном пространстве. Поэтому, развитие аналитических методов, позволяющих уменьшить количество переменных в уравнении Шрёдингера, представляется весьма важной задачей. Возможность такого понижения размерности вытекает из симметрии изолированной системы относительно коллективных трансляций и вращений.

Квантовая теория углового момента является одним из важных инструментов теоретических исследований систем нескольких тел. Коротко говоря, квантовая теория углового момента представляет собой науку о неприводимых тензорах. В трёхмерном пространстве, неприводимый тензор ранга l есть совокупность $(2l + 1)$ компонент, преобразующихся при вращениях системы координат по линейному закону. Одно из преимуществ неприводимых тензоров заключается в том, что в трёхмерном пространстве число их компонент линейно растёт с увеличением ранга l , в отличие от обычных (декартовых) тензоров, где рост 3^l экспоненциален. Простейшим примером неприводимых

тензоров¹ являются сферические гармоники $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = Y_{lm}(\theta, \phi)$, где θ, ϕ – сферические углы единичного вектора $\hat{\mathbf{r}}$.

Важность теории углового момента для приложений обусловлена тем обстоятельством, что для изолированной системы N тел сохраняется полный момент количества движения (момент импульса). В квантовой механике это означает, что волновая функция системы N тел в отсутствие внешних полей является собственной функцией оператора полного углового момента \mathbf{J} . Как известно, собственные функции оператора \mathbf{J} являются неприводимыми тензорами [9–11]. Для простоты, всюду в диссертации пренебрегается эффектами спин-орбитального взаимодействия, так что сохраняется полный орбитальный момент количества движения \mathbf{L} .

Нерелятивистское квантовомеханическое описание движения N частиц подразумевает решение уравнения Шрёдингера,

$$\left(- \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + V(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N) - E \right) \Psi^{(p)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N) = 0, \quad (1)$$

где E – энергия системы, ∇_i – оператор градиента относительно радиус-вектора \mathbf{R}_i частицы с массой m_i ; $\Psi^{(p)}(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_N)$ – полная волновая функция системы N тел, квантовое число p описывает чётность состояния, $p = 0, 1$ для чётного и нечётного состояний, соответственно. Уравнение (1) является дифференциальным уравнением в частных производных относительно $3N$ переменных – компонент радиус-векторов частиц \mathbf{R}_i .

Уже для трёх тел размерность уравнения (1) равна девяти, что делает практически невозможной любую попытку его прямолинейного численного решения. Однако, задача упрощается в случае изолированной системы, т.е. при отсутствии внешних полей, действующих на частицы. В этом случае по-

¹Основные свойства неприводимых тензоров приведены в Приложении А, см. также книги [9–11].

тенциальная энергия, и следовательно уравнение (1) в целом, инвариантны относительно пространственных трансляций и вращений совокупности частиц. При этом удобно перейти к следующей параметризации переменных в (1): три компоненты радиус-вектора \mathbf{R}_0 центра масс (ц.м.) частиц плюс три угла Ω , описывающих ориентацию всей системы как целого в пространстве, плюс три величины $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$, описывающие относительное положение трёх частиц. Данная параметризация легко обобщается на случай задачи N тел, при этом число внутренних переменных равно $3N - 6$, т.е. $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_{3N-6})$.

Тот факт, что для изолированной системы потенциальная энергия V зависит *только* от внутренних переменных ξ , позволяет устранить из уравнения Шрёдингера *шесть* коллективных степеней свободы. Три из них описывают движение ц.м. и могут быть устранены из уравнения (1) несколькими способами. Одним из наиболее употребительных является использование набора векторов Якоби [12–15]. (Необходимый минимум информации об этом методе содержится в Приложении Б.) Преимущество данного метода в том, что в записи через векторы Якоби оператор кинетической энергии относительного движения имеет диагональный вид. Отметим, что диагональность кинетической энергии сохраняется также и при использовании координат Радó (Radau coordinates, см. [12, 16–18]).

В Приложении Б показано, что при использовании масс-масштабированных векторов Якоби уравнение Шрёдингера можно представить в виде²,

$$(H - E) \Psi^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = 0,$$

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{n \equiv N-1} \nabla_{\alpha}^2 + V(\xi). \quad (2)$$

²Здесь, и далее в тексте диссертации, если иное не оговорено особо, используются единицы $\hbar = 1$.

Сохранение полного углового момента позволяет отделить в уравнении (2) ещё три коллективные переменные, которые описывают ориентацию системы в пространстве. Существует целый ряд методов отделения коллективных угловых переменных. Можно показать [19], что все они основаны на разложении волновой функции по угловому базису, которое для состояния с определённым значением углового момента lm имеет вид,

$$\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \sum_{q=-l}^l \psi_{lq}^{(p)}(\xi) T_{lm}^{(q)}(\Omega), \quad (3)$$

где $T_{lm}^{(q)}(\Omega)$ – набор базисных функций, зависящих от трёх коллективных углов Ω ; независящие от коллективных углов функции $\psi_{lq}^{(p)}(\xi)$ будем называть обобщёнными радиальными функциями. Цель главы 1 диссертации состоит в отыскании обобщённых радиальных уравнений на функции $\psi_{lq}^{(p)}(\xi)$ при различных вариантах выбора углового базиса $T_{lm}^{(q)}(\Omega)$. Отметим, что удачный выбор углового базиса может существенно упростить решение системы радиальных уравнений [20], что объясняет важность поставленной задачи. В диссертации не затрагивается вопрос о способах решения радиальных уравнений в задаче нескольких тел. Данный вопрос тесно связан со свойствами рассматриваемой задачи и представляет собой отдельную сложную проблему (см., например, книгу [14]).

В молекулярной физике часто используется метод вращающихся координатных систем (ВКС) [12, 21], в котором коллективные углы определены как углы поворота системы координат, связанной с частицами, относительно осей неподвижной лабораторной координатной системы (ЛКС). При этом в (3) в качестве базисных функций используются матрицы конечных вращений (МКВ), которые при параметризации поворота углами Эйлера известны как D -функции Вигнера $D_{q,m}^l(\alpha\beta\gamma)$. Существует, очевидно, бесконечно мно-

го вариантов выбора ВКС, так что каждый конкретный выбор ВКС можно рассматривать как “калибровочное соглашение” [12].

Известно [19], что метод ВКС эквивалентен представлению гамильтониана системы в виде суммы колебательной H_0 , кориолисовой H_{cor} , и вращательной H_{rot} частей [22–28]. Колебательный гамильтониан H_0 описывает относительное движение частиц, вращательный гамильтониан H_{rot} соответствует вращению системы как целого, и кориолисов гамильтониан H_{cor} (обозначенный в работе [19] как колебательно-вращательный гамильтониан H_{vib}) описывает взаимодействие между относительным движением частиц и вращением системы. Выбор калибровки определяет относительную величину гамильтонианов H_{cor} и H_{rot} , но не влияет на H_0 . Отметим, что малость относительной величины кориолисова гамильтониана означает независимость вращения и колебаний, и в этом случае вращение системы подобно вращению твёрдого тела. Отыскание ВКС, в которой минимизируются кориолисовы члены гамильтониана является важной задачей теории несферических ядер [20, 28–38].

В разделе 1.1 развит общий метод отыскания обобщённых радиальных уравнений, основанный на технике векторного дифференцирования неприводимых тензорных произведений, развитой в работах [19, 39–41]. Метод является универсальным и применим к отысканию радиальных уравнений для любых калибровок. В разделах 1.1–1.3 показано, что использование разложения (3) приводит к возникновению в радиальных уравнениях членов, расходящихся при определённых положениях частиц. Расходимости такого типа называют “калибровочными” [12, 42], поскольку они зависят от выбора углового базиса (т.е. калибровки). В практических вычислениях проблему калибровочных расходимостей можно обойти сшивкой решений, соответствующих нескольким калибровкам, расходимости которых не пересекаются. Тем не ме-

нее, представляет интерес вопрос о существовании такого метода отделения коллективных углов, при котором калибровочные расходимости не возникали бы вообще [12]. Ответ на этот вопрос дан в разделе 1.4, где предложен метод отделения коллективных углов, свободный от калибровочных расходимостей. Метод основан на применении переполненного углового базиса мультиполярных гармоник [19]. Цена, которую приходится платить за отсутствие расходимостей в данном методе – быстрый рост числа радиальных уравнений с увеличением числа частиц и/или полного углового момента системы.

В квантовой задаче нескольких тел особую сложность представляет теоретическое описание процессов с участием нескольких ($N \geq 3$) частиц в непрерывном спектре. Примерами таких задач могут служить двухэлектронная фотоионизация атомов и молекул [43–46], ионизация атомов электронным ударом [47–50], трёхчастичная диссоциация [51–54]. Одна из трудностей заключается в том, что волновая функция задачи рассеяния не является собственной функцией оператора полного углового момента. Действительно, волновая функция рассеяния характеризуется квантовыми числами асимптотических импульсов частиц, их энергией и спиральностью. Например, квантовые числа волновой функции трёх тел в непрерывном спектре составляют асимптотические импульсы³ \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 , полная энергия $\sum_{i=1}^3 p_i^2/m_i$ и спины s_1, s_2, s_3 (в пренебрежении спин-орбитальными эффектами). Таким образом, волновая функция рассеяния в задаче трёх тел зависит от *шести* пространственных переменных, представляющих собой компоненты векторов Якоби \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 в системе координат, связанной с импульсами \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 , наблюдаемыми на эксперименте.

Хотя волновой функции рассеяния нельзя приписать определённое зна-

³Ц.м. предполагается неподвижным, так что $\mathbf{p}_1 + \mathbf{p}_2 + \mathbf{p}_3 = 0$.

чение углового момента, её можно разложить по набору собственных функций оператора полного углового момента. Такого рода разложения называют мультипольными [9, 10]. Несмотря на то, что мультипольные разложения представляют собой бесконечные ряды, часто в практических приложениях достаточная точность достигается при учёте сравнительного небольшого числа мультиполей [55, 56]. Существуют, конечно, задачи в которых скорость сходимости мультипольных разложений недостаточна. Такая ситуация, например, имеет место в задаче о рассеянии быстрых электронов атомами.

В классической задаче рассеяния полный момент импульса сохраняется и определяется массами частиц и прицельным параметром. Известно, что точность классического описания рассеяния, при данной скорости частиц, улучшается с увеличением их масс. Поэтому использование мультипольных разложений в задачах молекулярного рассеяния и диссоциации, как правило, весьма эффективно. Кроме того, часто лишь конечное число членов мультипольных разложений даёт вклад в амплитуду из-за наличия правил отбора, вытекающих из особенностей рассматриваемой задачи. Например, трёхатомная преддиссоциация молекулы H_3 [51, 53, 54], описывается матричным элементом перехода между начальным состоянием молекулы, характеризующимся определёнными квантовыми числами углового момента, и конечным состоянием непрерывного спектра. При этом оператор перехода является скаляром [57], откуда следует, что ненулевой вклад в амплитуду будут давать только те мультиполи разложения конечного состояния, угловой момент которых равен угловому моменту начального состояния. Похожая ситуация имеет место и в однофотонной двухэлектронной ионизации атома, где в амплитуду дают вклад мультиполи конечного состояния с угловым моментом, отличающимся от момента начального состояния на единицу (см. главу 4).

В главе 2 рассмотрен вопрос о выборе базиса для разложения волновой функции непрерывного спектра в задаче трёх тел. В задаче трёх тел часто используется разложение по базису биполярных гармоник⁴ (БГ), т.е. тензорных произведений сферических функций, зависящих от углов векторов Якоби. Разложение по БГ эквивалентно разложению волновой функции по базису одночастичных состояний, что приводит к возникновению дополнительного бесконечного суммирования, сходимость которого не всегда достаточна. В главе 2 в качестве углового базиса выбраны D -функции Вигнера, описывающие поворот от системы координат, связанной с импульсами $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2$ (это неподвижная система, т.е. ЛКС), к системе координат, связанной с векторами Якоби (вращающаяся система, ВКС). Коэффициенты в разложении зависят от трёх внутренних переменных ξ , которыми могут быть, например, длины векторов Якоби и угол между ними: $\xi = r_1, r_2, \theta$.

В качестве примера, в разделе 2.2 рассматривается мультипольное разложение произведения двух плоских волн, которое представляет собой волновую функцию трёх невзаимодействующих частиц. Математически, коэффициенты такого мультипольного разложения эквивалентны импульсному представлению волновой функции жёсткого трёхчастичного симметричного волчка. Если рассмотреть задачу о преддиссоциации молекулы типа симметричного волчка на три нейтральных фрагмента, то, в нулевом приближении, амплитуду процесса преддиссоциации состояния с нулевыми колебательными квантовыми числами можно представить как интеграл перекрытия между начальным состоянием симметричного волчка и конечным состоянием невзаимодействующих частиц. Таким образом, мультипольные коэффициенты разложения произведения плоских волн можно рассматривать как “кинематиче-

⁴Определение см. формулу (A.4) Приложения A.

скую модель” процесса предиссоциации (см. раздел 2.3). Если кинетическая энергия частиц велика по сравнению с межчастичным взаимодействием, то потенциал взаимодействия можно учитывать по теории возмущений. Коллективные мультипольные разложения поправочных членов и матричные элементы с ними, рассмотрены в статье [58].

Как было отмечено выше, квантовая теория углового момента обычно используется в задаче нескольких тел для отделения коллективных (или одностичных) угловых переменных. Интересно, что существует задача двух тел, которую можно *полностью* решить методами квантовой теории углового момента. Это задача об атоме водорода – В.А. Фока в работе [59] показал, что нерелятивистские волновые функции атома водорода в импульсном пространстве пропорциональны четырёхмерным гиперсферическим гармоникам (ГСГ). Другими словами, оказывается что задача об атоме водорода обладает симметрией группы $O(4)$. Такое свойство квантовой кулоновской задачи двух тел связано с наличием дополнительной сохраняющейся величины – оператора Лапласа-Рунге-Ленца.

Приложения симметрии Фока весьма обширны. В работе [60] симметрия Фока использовалась для вычисления лэмбовского сдвига в атоме водорода. Теоретико-групповые свойства $O(4)$ -симметрии атома водорода изучались в [61]. Швингер [62] получил простое выражение функции Грина атома водорода в терминах четырёхмерных ГСГ. Симметрия Фока использовалась для вычисления эффектов запаздывания в двухфотонных связанно-связанных переходах в атоме водорода [63]. В работах [64–67, 67–76] четырёхмерные ГСГ использовались в качестве штурмовского базиса в многоцентровой кулоновской задаче. Недавно метод фоковских проекций был применён в физике конденсированного состояния к теории анизотропных экситонов [77].

Либер (M. Lieber, [60]) отметил, что основная трудность применения фокковской симметрии состоит в зависимости аргументов ГСГ от энергии. Это не позволяет использовать теорему Вигнера-Экарта для вычисления матричных элементов с водородными волновыми функциями. В некоторых случаях данную проблему можно обойти, используя набор штурмовских функций [66, 67, 72]. Эти функции в основном совпадают с водородными волновыми функциями; их отличие состоит в том, что аргументы ГСГ, соответствующих штурмовским функциям, одинаковы для всего набора. Как следствие, для вычисления интегралов со штурмовскими функциями, принадлежащими одному множеству, можно использовать стандартные методы теории углового момента в четырёхмерном пространстве [67, 78].

При вычислении интегралов со штурмовскими функциями из разных наборов, возникает та же проблема, что и при вычислении водородных матричных элементов между состояниями с разной энергией. Дело в том, что теорема Вигнера-Экарта применима только для интегралов с ГСГ, имеющими одинаковые аргументы, которые указывают на одну и ту же точку 4-сферы. Однако, водородные функции с *разной* энергией (или штурмовские функции из разных наборов) соответствуют *разным* точкам на 4-сфере.

В главе 3 диссертации показано, что использование полученных в [79] мультипольных разложений ГСГ позволяет эффективно вычислять водородные (и штурмовские) матричные элементы. Математически это означает, что удалось установить соотношение между ГСГ, соответствующим различным стереографическим проекциям. А именно, 4-гармонику, зависящую от некоторой точки 4-сферы можно представить в виде ряда ГСГ, зависящих от точки 4-сферы, соответствующей другой стереографической проекции трёхмерного пространства на 4-сферу. Причём коэффициенты такого ряда можно

интерпретировать как форм-факторы атома водорода. Форм-факторные интегралы известны также как “обобщённые силы осцилляторов” (ОСО). ОСО играют важную роль в теории рассеяния быстрых частиц атомами и молекулами. Начиная с пионерской работа Бёте [80], к настоящему времени имеется обширная литература, посвящённая ОСО атома водорода (см., например, обзор [81]). В книге [82] даны компактные выражения для водородных ОСО, соответствующих переходам $1s, 2s \rightarrow n, l$. В работе [83] водородные ОСО, соответствующие переходам между произвольными связанными состояниями, представлены в виде комбинаций гипергеометрических функций двух переменных. Водородные матричные элементы оператора электромагнитного взаимодействия вычислялись в работе [84] с использованием параболических координат. Выражения для водородных связанно-свободных матричных элементов можно найти, например, в статьях [85, 86]. Во всех цитированных выше работах проводились прямые вычисления трёхмерных интегралов в сферических координатах. В главе 3 получено представление ОСО в виде комбинации мультипольных коэффициентов, каждый из которых выражается в компактном замкнутом виде, содержащем производные элементарной функции. Такое дифференциальное представление весьма удобно для анализа различных свойств матричных элементов, например, их асимптотического поведения. С помощью дифференциальных представлений удобно получать рекуррентные соотношения, связывающие радиальные интегралы с различными квантовыми числами.

В последние десятилетия достигнут значительный прогресс в экспериментах по изучению угловых распределений нескольких частиц в схеме совпадений [43, 46, 51, 52]. Сравнение результатов эксперимента с теорией усложняется большим количеством параметров, определяющих вид угловых распре-

делений фрагментов. Данное обстоятельство делает актуальной задачу об отыскании удобных параметризаций амплитуд и сечений соответствующих процессов. Например, для интерпретации экспериментов по двухэлектронной фотоионизации гелия (см. обзор [43]) в работах [39, 87, 88] были получены параметризации, позволившие установить ряд правил отбора для амплитуды процесса двойной фотоионизации.

В существующих подходах, однако, для каждого процесса фотофрагментации параметризацию приходится выводить заново. Иными словами, имеющиеся параметризации не являются универсальными. В главе 4 получена инвариантная параметризация амплитуды однофотонной фрагментации, основанная на разложении вектора поляризации фотона по базису пары векторов асимптотического импульса фрагментов (раздел 4.1). Предлагаемая параметризация применима для описания произвольных процессов многочастичной фотофрагментации. В качестве примера, в п. 4.1.2 рассматривается полная фрагментация молекулы водорода.

Далее, в разделе 4.2, рассматривается параметризация амплитуды двухэлектронной фотоионизации с учётом недипольных поправок. Данная задача представляет интерес в связи с экспериментами по ионизации гелия фотонами с энергией 529 [89]. В п. 4.2.1 на основе метода вычисления тензорных произведений, развитого в работах [39–41], получены выражения для динамических факторов амплитуды, не зависящих от поляризации фотона. Динамические факторы представлены в виде рядов, содержащих производные от многочленов Лежандра с весами в виде комбинации приведённых матричных элементов операторов дипольного и квадрупольного моментов. В п. 4.2.2 рассматривается двойная ионизация атома гелия. Там же указаны условия, оптимальные для наблюдения недипольных эффектов в угловых распределениях.

Приведены правила отбора для квадрупольной амплитуды, показывающие, что её вклад обращается в ноль при ортогональной геометрии эксперимента, когда векторы импульсов фотоэлектронов перпендикулярны направлению фотонного пучка. Результаты расчёта амплитуды с помощью теории возмущений по межэлектронному взаимодействию показывают, что недипольные эффекты можно наблюдать при надпороговой энергии фотона ~ 80 эВ, см. [90–92].

Положения, выносимые на защиту.

- Предложен универсальный метод отделения коллективных угловых переменных в квантовой задаче N тел. Рассмотрены различные варианты выбора углового базиса. Детально изучены свойства вращающейся системы координат Экарта, минимизирующей кориолисовы члены гамильтониана вблизи положений равновесия. Указан способ, позволяющий обойти проблему калибровочных расходимостей при отделении коллективных углов.
- Проведён анализ вариантов выбора углового базиса мультипольных разложений волновых функций непрерывного спектра системы трёх тел – базис биполярных гармоник и базис D -функций Вигнера. Получено коллективное мультипольное разложение произведения двух плоских волн, установлены его свойства симметрии.
- Развита техника, позволяющая применять четырёхмерную симметрию Фока к задачам вычисления матричных элементов с водородными волновыми функциями. В результате получено компактное дифференциальное представление для радиальной части форм-факторного инте-

грала. Для данного интеграла получены замкнутые выражения при нескольких частных значениях квантовых чисел, а также выведены рекуррентные соотношения.

- Построена универсальная параметризация амплитуд процессов однофотонной многочастичной фрагментации атомов и молекул. В качестве примера рассмотрен процесс полной фотофрагментации молекулы водорода. Изучена роль недипольных эффектов в двухэлектронной фотоионизации атома гелия, указаны условия их наблюдения в угловых распределениях.

Список сокращений

Ц.М. – центр масс,

ВКС – вращающаяся координатная система; система координат, связанная с телом,

ЛКС – лабораторная координатная система; неподвижная система координат,

СЭ – система Экарта, т.е. ВКС, удовлетворяющая условию Экарта (1.98),

БГ – биполярные гармоники, определение см. формулу (A.4),

МБГ – минимальные биполярные гармоники, см. формулу (A.9),

МКВ – матрицы конечных вращений, см. формулу (A.1),

ГСГ – гиперсферические гармоники,

В диссертации используются стандартные обозначения алгебры углового момента, принятые в книге [10].

Отделение коллективных угловых переменных в уравнении Шрёдингера для системы N тел

В данной главе рассматривается проблема отделения трёх коллективных угловых переменных в уравнении Шрёдингера, описывающем систему N частиц в отсутствие внешних полей. Для простоты, спин-орбитальные эффекты предполагаются несущественными, так что справедливо приближение LS -связи и волновая функция может быть представлена в виде произведения пространственной и спиновой части. Всюду, где не оговорено особо, перестановочная симметрия волновых функций не рассматривается.

Математически, процедура отделения коллективных углов состоит из двух этапов: на первом выбирается коллективный угловой базис, по которому разлагается волновая функция состояния с определённым значением полного углового момента l ; второй этап состоит в отыскании уравнений на коэффициенты разложения, которые будем называть *обобщёнными радиальными функциями* (или просто радиальными функциями). Последние зависят от набора $3n - 3 = 3N - 6$ внутренних переменных ξ , описывающих относительное положение частиц.

Различные варианты выбора углового базиса анализировались в обзорной работе [19]. В настоящей главе рассматриваются два вида базиса. В разделах 1.1–1.2 в качестве углового базиса выбраны матрицы конечных вращений (МКВ), при параметризации поворотов углами Эйлера известные как D -функции Вигнера (см. Приложение А). В данном подходе необходимо дополнительно фиксировать связь осей вращающейся координатной системы

(ВКС) с векторами Якоби, что можно понимать как *калибровочное соглашение* [12]. Отметим, что, хотя вид радиальных уравнений зависит от калибровки, полная волновая функция и энергетический спектр системы от выбора калибровки зависеть не должны.

Члены в радиальных уравнениях, возникающие в результате действия оператора кинетической энергии на функции углового базиса, зависят от выбора калибровки и потому их называют *калибровочными потенциалами*. В задаче двух тел роль калибровочного потенциала¹ играет центробежная энергия $\sim l(l+1)/r^2$. Это выражение расходится при столкновении частиц, что имеет определённый физический смысл. Калибровочные потенциалы в задаче нескольких тел имеют более сложный вид, но также содержат расходимости. Причём, положение расходимостей в конфигурационном пространстве зависит от калибровки, что лишено физического смысла. Кроме того, структура расходимостей в задаче двух и N тел различается. Например, в задаче четырёх тел (см. рис. Б.1 на стр. 195), расходимость возникает при коллинеарной конфигурации трёх частиц из-за наличия членов $\sim (r_1 \sin \theta_{12})^{-2}$.

Расходимости центробежного типа r^{-2} называют точечными; они зависят от выбора векторов Якоби и возникают не только в калибровочных потенциалах, но и в выражении для кинетической энергии относительного движения. Угловые расходимости, связанные с взаимной ориентацией частиц (в указанном выше примере это $(\sin \theta_{12})^{-2}$), представляют собой поверхности в конфигурационном пространстве² и целиком обусловлены выбором калибровки. Они не имеют аналогов в задаче двух тел и далее обозначаются термином

¹В задаче двух тел вопроса о калибровке не возникает, т.к. единственным целесообразным выбором является базис сферических функций, зависящих от сферических углов вектора, соединяющего частицы.

²Тем самым, угловые расходимости “хуже” точечных.

“калибровочные расходимости”. Отметим, что в задаче трёх тел калибровочные расходимости эффективно сокращаются, см. п. 1.3.2. Однако, при $N > 3$ калибровочные расходимости неустранимы (в обычных подходах).

В разделе 1.1 рассматриваются две часто используемые координатные системы: система мгновенных главных осей инерции (п. 1.1.4), и калибровка z -связи (п. 1.1.5), в которой ось z ВКС направлена вдоль одного из векторов Якоби. При этом получены явные выражения для калибровочных потенциалов. Там же обсуждается их калибровочные расходимости.

В разделе 1.2 рассмотрена схема выбора вращающихся осей, предложенная Экартом [22] и популярная в молекулярной физике [17, 93, 94, 96–117].

Далее, в разделе 1.3, в качестве углового базиса используется набор минимальных биполярных гармоник (МБГ). Метод МБГ является обобщением подхода, развитого первоначально в рамках теории атома гелия [118, 119]. На возможность использования базиса МБГ для разложения любых неприводимых тензоров целого ранга было впервые указано в работе [40]. Позже аналогичный вывод был независимо получен в работе [120]. В методе МБГ также возникает вопрос о калибровке, что соответствует свободе выбора пары реперных векторов, входящих в определение МБГ. Преимуществом МБГ является то, что в отличие от метода ВКС, калибровочные расходимости в задаче трёх тел изначально отсутствуют.

Интересно, что существует способ отделения коллективных углов, при котором калибровочные расходимости не возникают вообще. Такой метод предложен в разделе 1.4. Предлагаемый метод основан на использовании переполненного базиса минимальных мультиполярных гармоник и впервые был предложен в работе [121].

1.1. Метод вращающихся координатных систем и колебательно-вращательное разложение гамильтониана

Зависимость волновой функции $\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ от проекции m определяется ориентацией системы относительно осей лабораторной системы координат. Метод ВКС (вращающихся координатных систем) состоит в разложении волновой функции $\Psi_{lm}^{(p)}$ по набору $(2l + 1)$ матриц конечных вращений (МКВ) $D_{k,m}^l(\Omega)$, пронумерованных индексом $k = -l, \dots, l$ и зависящих от трёх коллективных углов Ω . Скалярные коэффициенты разложения (т.е. обобщённые радиальные функции), зависят от $(3n - 3)$ внутренних переменных ξ . Цель данного раздела состоит в отыскании явного вида уравнений³ на обобщённые радиальные функции. Очевидно, что вид уравнений будет зависеть от выбора ВКС. Следовательно, неудачный выбор ВКС может привести к дополнительным осложнениям при отыскании решений – например, ухудшению сходимости, численным неустойчивостям и т.п..

В разделе 1.1.1 излагаются детали процедуры отделения трёх коллективных углов в уравнении Шрёдингера (2) с помощью набора МКВ, которые представляют собой матрицу преобразования от подвижной координатной системы (ВКС), связанной с частицами, к неподвижной лабораторной координатной системе (ЛКС). (Будем считать, что ц.м. системы неподвижен, так что начала координат обеих систем совпадают.)

Систему обобщённых радиальных уравнений можно записать в компактном виде как уравнение Шрёдингера, содержащее компоненты оператора полного углового момента \mathbf{L} , заданные относительно осей ВКС. Гамильтониан

³Для них в дальнейшем используется термин “обобщённые радиальные уравнения”.

при этом выражается в виде суммы трёх частей – колебательной, колебательно-вращательной (кориолисовой) и вращательной. Такое представление называют колебательно-вращательным разложением гамильтониана.

Поскольку физические характеристики не должны зависеть от выбора ВКС, связь осей ВКС с векторами Якоби системы можно рассматривать как калибровочное соглашение [12]. Возникает вопрос о существовании оптимальной калибровки. Ответ зависит от свойств рассматриваемой системы, т.е. потенциала межчастичного взаимодействия, спинов и масс частиц, но в общем случае, ответ на данный вопрос отрицателен [12, 93]. Таким образом, выбор ВКС обусловлен исключительно соображениями удобства.

Как было отмечено Экартом [22], наиболее общее определение ВКС состоит в наложении трёх неявных условий на координаты частиц относительно осей ВКС. В разделе 1.1.2 показано, что отыскание колебательно-вращательного разложения гамильтониана сводится к вычислению градиентов векторов декартового базиса ВКС. Там же получены выражения для кориолисова H_{cor} и вращательного H_{rot} гамильтонианов.

В разделе 1.1.3 предложена техника построения колебательно-вращательного разложения гамильтониана для ВКС, определённых неявными условиями. Эффективный способ вычисления градиентов базисных векторов ВКС приведён в разделах 1.1.3 и Приложении В.1.

В разделах 1.1.4, 1.1.5 получены колебательно-вращательные разложения и обобщённые радиальные уравнения для двух калибровок, часто используемых в задачах атомной, молекулярной и ядерной физики. Эти калибровки:

- ВКС мгновенных главных осей инерции (МГОИ), впервые предложенная в работе [23], и впоследствии изучавшаяся многими авторами [28–31, 128, 129].

- Калибровка $z zx$, также известная как система “z-связи” (англ. bond-z coordinate system), в которой пара векторов Якоби определяет плоскость xz ВКС, причём один из векторов пары направлен вдоль оси z . Данная калибровка использовалась главным образом в задаче трёх тел, см. [122–127].

Подчеркнём, что используемый в диссертации метод отыскания радиальных уравнений является общим и применим к произвольной калибровке.

Система осей Экарта, предложенная в работе [22] и представляющая особый интерес с точки зрения приложений к задачам молекулярной физики. исследуется в следующем разделе 1.2.

1.1.1. Отделение коллективных углов в методе вращающихся координатных систем

В методе ВКС зависимость волновой функции системы от коллективных углов параметризуется с помощью правила преобразования неприводимых тензоров [10]

$$\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n) = \sum_{k=-l}^l \tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi) D_{k,m}^l(\Omega), \quad (1.1)$$

где ξ обозначает набор $(3n - 3)$ внутренних переменных (shape variables); $D_{k,m}^l(\Omega)$ – элементы матрицы конечных вращений (МКВ). Три действительных параметра Ω описывают поворот от вращающейся к неподвижной системе координат (т.е. ВКС \rightarrow ЛКС). При конфигурациях, для которых углы Ω равны нулю, волновая функция $\Psi_{lm}^{(p)}$ совпадает с радиальной функцией $\tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}$, поскольку $D_{k,m}^l(0) = \delta_{k,m}$.

Чтобы задать ВКС, необходимо указать связь её осей с векторами Якоби. Например, полагая ось z ВКС направленной вдоль вектора $\hat{\mathbf{r}}_1$ и плоскость zx

совпадающей с плоскостью векторов $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2$, получаем калибровку z -связи. В калибровке половинного угла (angle-bisector frame), использованной в работах [130], [131], принято, что векторы $\hat{\mathbf{r}}_1$ и $\hat{\mathbf{r}}_2$ лежат в плоскости xy , так что ось x делит пополам угол между этими векторами; ось z направлена вдоль векторного произведения $[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]$, см. рис. 1.1. Обе эти калибровки сингулярны при коллинеарных конфигурациях $\hat{\mathbf{r}}_1 = \pm \hat{\mathbf{r}}_2$, так как в данном случае ВКС определить невозможно.

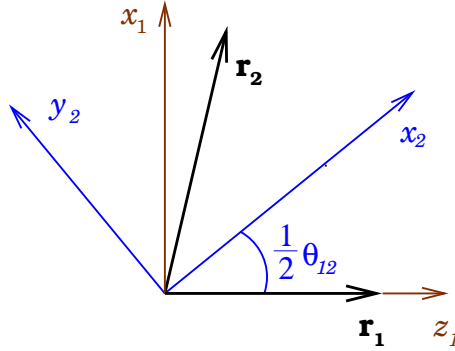


Рис. 1.1. Калибровочные соглашения: оси (x_1, z_1) и (x_2, y_2) соответствуют калибровкам z -связи и половинного угла.

Параметры Ω можно устранить из уравнения Шрёдингера (2) подстановкой (1.1) в (2), с последующим умножением на $D_{q,m}^{l*}(\Omega)$ и суммированием по индексу m ,

$$\sum_{k=-l}^l \sum_{m=-l}^l D_{q,m}^{l*}(\Omega)(H_0 - E)\tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi)D_{k,m}^l(\Omega) = 0, \quad q = -l, \dots, l. \quad (1.2)$$

(Суммирование по m можно заменить интегрированием по параметрам Ω .) Описанную процедуру будем обозначать как “проецирование” уравнения Шрёдингера на базис $(2l + 1)$ функций $D_{k,m}^l(\Omega)$, которые являются неприводимыми тензорами по отношению к индексам lm , см. [40]. Отметим, что индекс k функции $D_{k,m}^l$ не является индексом тензорной проекции, поскольку левая часть тензорного равенства (1.1) его не содержит.

Вычисление членов в (1.2), не содержащих дифференциальных операторов, довольно просто и проводится с использованием свойства ортогональности МКВ [10]. Например, член содержащий E в (1.2) можно записать как

$$\sum_{m=-l}^l D_{q,m}^{l*}(\Omega) E \tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi) D_{k,m}^l(\Omega) = E \tilde{\Psi}_{lq}^{(p)}(\xi) \delta_{k,q}.$$

Здесь было учтено, что внутренние волновые функции $\tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}$ не зависят от коллективных углов Ω и, следовательно, от тензорного индекса m .

Основная трудность состоит в вычислении кинетической энергии

$$\sum_{m=-l}^l D_{q,m}^{l*}(\Omega) \sum_{\alpha=1}^n \nabla_{\alpha}^2 \tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi) D_{k,m}^l(\Omega), \quad (1.3)$$

где $q = -l, -l+1, \dots, l$. Проблема в том, что ∇ -операторы действуют как на внутренние координаты ξ , так и на коллективные углы Ω . При этом результат действия необходимо выразить через функции $D_{q,m}^l(\Omega)$, чтобы затем применить соотношение ортогональности для МКВ.

Хотя процедура отделения коллективных углов является стандартной в квантовой задаче нескольких тел (см., например, [12, 32, 128–132]), простой метод отыскания радиальных уравнений отсутствует. Это связано с необходимостью вычисления действия дифференциальных операторов на D -функции Вигнера, что в традиционном подходе приводит к весьма громоздким выражениям, содержащим действия операторов градиента на углы Эйлера.

Перейдём к вычислению действия оператора кинетической энергии на разложение (1.1). Предварительно, запишем полезное выражение для оператора Лапласа

$$\nabla_{\alpha}^2 = \sum_{i=1}^3 (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_{\alpha})(\mathbf{c}_i \cdot \nabla_{\alpha}). \quad (1.4)$$

Здесь, $\mathbf{c}_{1,2,3}$ – любые три ортонормированных вектора. (Ими могут быть и базисные векторы ВКС \mathbf{e}_i .) Теперь, согласно правилу дифференцирования произведения, имеем

$$\begin{aligned} \nabla_\alpha^2 \tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi) D_{k,m}^l(\Omega) &= D_{k,m}^l(\Omega) \nabla_\alpha^2 \tilde{\Psi}_{lk}(\xi) + \tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi) \nabla_\alpha^2 D_{k,m}^l(\Omega) \\ &\quad + 2 \sum_{i=1}^3 [(\mathbf{c}_i \cdot \nabla_\alpha) D_{k,m}^l(\Omega)] (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_\alpha) \tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi), \end{aligned} \quad (1.5)$$

где \mathbf{c}_i – любые три ортонормированных вектора, построенные из векторов \mathbf{r}_α . Здесь, и далее, примем, что операторы градиента не действуют на величины, находящиеся за квадратными скобками.

Члены в выражении (1.5) можно интерпретировать следующим образом. Первый член описывает относительное (колебательное) движение частиц. Его связь с производными по внутренним координатам легко установить с помощью разложения (1.4),

$$\begin{aligned} \nabla_\alpha^2 \tilde{\Psi}_{lk}(\xi) &= \sum_{i=1}^3 (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_\alpha) \sum_{\gamma=1}^{2n-3} \frac{\partial \tilde{\Psi}_{lk}(\xi)}{\partial \xi_\gamma} (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma = \\ &= \sum_{\gamma, \gamma'=1}^{2n-3} \frac{\partial^2 \tilde{\Psi}_{lk}(\xi)}{\partial \xi_\gamma \partial \xi_{\gamma'}} \sum_{i=1}^3 [(\mathbf{c}_i \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma] (\mathbf{c}_i \cdot \nabla_\alpha) \xi_{\gamma'} + \sum_{\gamma=1}^{2n-3} \frac{\partial \tilde{\Psi}_{lk}(\xi)}{\partial \xi_\gamma} \nabla_\alpha^2 \xi_\gamma. \end{aligned}$$

После несложных преобразований это соотношение можно представить в виде

$$\sum_{\alpha=1}^n \nabla_\alpha^2 \tilde{\Psi}_{lk}(\xi) = -2 \sum_{\gamma \leq \gamma'=1}^{3n-3} a_{\gamma\gamma'}(\xi) \frac{\partial^2 \tilde{\Psi}_{lk}(\xi)}{\partial \xi_\gamma \partial \xi_{\gamma'}} - 2 \sum_{\gamma=1}^{3n-3} b_\gamma(\xi) \frac{\partial \tilde{\Psi}_{lk}(\xi)}{\partial \xi_\gamma}, \quad (1.6)$$

где коэффициенты определены равенствами

$$\begin{aligned} a_{\gamma\gamma'}(\xi) &= -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n (\nabla_\alpha^2 \xi_\gamma \xi_{\gamma'} - \xi_\gamma \nabla_\alpha^2 \xi_{\gamma'} - \xi_{\gamma'} \nabla_\alpha^2 \xi_\gamma), \\ b_\gamma(\xi) &= -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \nabla_\alpha^2 \xi_\gamma. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Второй член в (1.5) представляет собой энергию вращательного движения системы как целого, поскольку оператор Лапласа действует только на коллективные углы. Третий член в правой части (1.5) описывает “колебательно-вращательную” часть кинетической энергии, поскольку обращается в ноль как для нулевых колебаний, так и для нулевых вращений.

Ниже будем использовать обозначения T_{rot} и T_{cor} для операторов вращательной и колебательно-вращательной частей кинетической энергии, так что

$$\begin{aligned} T_{rot} D_{k,m}^l(\Omega) &= -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \nabla_{\alpha}^2 D_{k,m}^l(\Omega), \\ T_{cor} D_{k,m}^l(\Omega) &= -\sum_{\alpha=1}^n \sum_{i=1}^3 [(\mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\alpha}) D_{k,m}^l(\Omega)] (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\alpha}). \end{aligned} \tag{1.8}$$

(Здесь индексы $i = 1, 2, 3$ соответствуют базисным векторам подвижных осей x, y, z , соответственно.)

Как было отмечено выше, задача заключается в выражении операторов T_{rot} и T_{cor} через функции $D_{k,m}^l(\Omega)$. Отметим, что в работе [133] было получено выражение для $(\mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\alpha}) D_{k,m}^l(\Omega)$ в терминах параметров, описывающих инфинитезимальные повороты вокруг координатных осей. В указанной работе, проблема вычисления членов с производными второго порядка, $\nabla_{\alpha}^2 D_{k,m}^l(\Omega)$, была обойдена путём использования вариационного принципа. В этом подходе производные второго порядка от МКВ не возникают, поскольку лагранжиан, соответствующий уравнению Шрёдингера, содержит только производные первого порядка. Однако, предложенный авторами [133] метод широкого применения на нашёл.

Наиболее простой метод вычисления действия операторов градиента на МКВ состоит в использовании инвариантных представлений МКВ (см. равенства (17) и (19) работы [40]). Инвариантное представление МКВ $D_{k,m}^l(\Omega)$

определяется тензорным произведением векторов сферического базиса ВКС,

$$D_{k,m}^l(\Omega) = A_{lk} R_{k,m}^l, \quad R_{\pm k,m}^l = \{\{\mathbf{e}_{\mp 1}\}_k \otimes \{\mathbf{e}_0\}_{l-k}\}_{lm}, \quad k \geq 0, \quad (1.9)$$

где нормировочный коэффициент A_{lk} равен

$$A_{lk} = (-1)^k \sqrt{\frac{2^{k-l}(2l)!}{(l+k)!(l-k)!}}.$$

Выше, запись $\{\mathbf{e}_{\mp 1}\}_{k\mu}$ обозначает неприводимое тензорное произведение k одинаковых векторов $\mathbf{e}_{\mp 1}$, см. Приложение В.1. Всюду в тексте используется стандартное обозначение [10] векторов сферического базиса,

$$\mathbf{e}_{\pm 1} = \mp \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_x \pm i\mathbf{e}_y), \quad \mathbf{e}_0 = \mathbf{e}_z. \quad (1.10)$$

Перед тем как начать вычисления, рассмотрим вопрос пространственной чётности МКВ. Из соотношения $\mathbf{e}_z = [\mathbf{e}_x \times \mathbf{e}_y]$ следует, что один из трёх базисных векторов \mathbf{e}_i имеет чётность, противоположную чётности двух других. Например, в калибровке zzx чётность вектора \mathbf{e}_y положительна⁴, а чётность векторов $\mathbf{e}_{x,z}$ – отрицательна. В этом случае, функция $D_{k,m}^l$, в соответствии с (1.9), (1.10), не имеет определённой чётности. Однако, следующие комбинации МКВ

$$D_{k,m}^{l,\lambda}(\Omega) = \left(1 - \frac{\delta_{0,k}}{2}\right) [D_{-k,m}^l(\Omega) + (-1)^{k+\lambda} D_{k,m}^l(\Omega)], \quad (1.11)$$

где $k \geq 0$ и $\lambda = 0, 1$, имеют вполне определённую чётность (подробности см. в [40]). А именно, при $\lambda = 0$ чётность равна $(-1)^l$, т.е. комбинация (1.11) есть истинный (полярный) тензор; при $\lambda = 1$ чётность $(-1)^{l+1}$ и комбинация является псевдотензором (аксиальным тензором). Определённые аналогично

⁴Другими словами, \mathbf{e}_y есть псевдовектор, не меняющий знак при пространственной инверсии

комбинации D -функций использовались многими авторами. см. [87, 130, 131, 134, 135]).

Из свойств МКВ вытекают соотношения ортогональности для комбинаций (1.11),

$$\sum_{m=-l}^l D_{k',m}^{l,\lambda'}{}^*(\Omega) D_{k,m}^{l,\lambda}(\Omega) = (2 - \delta_{k,0}\delta_{\lambda,0})\delta_{k',k}\delta_{\lambda',\lambda}, \quad k = \lambda, \dots, l. \quad (1.12)$$

Удобство симметризованных комбинаций МКВ (1.11) связано с тем, что для многих калибровок действие оператора кинетической энергии на МКВ не изменяет индекс λ , который, таким образом, можно интерпретировать как квантовое число пространственной чётности. В соответствии с данным замечанием, удобно переписать разложение (1.1) через симметризованные МКВ

$$\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n) = \sum_{\lambda_p=0}^1 \sum_{k=\lambda_p}^l \psi_{l,k}^{(\lambda_p)}(\xi) D_{k,m}^{l,\lambda_p}(\Omega). \quad (1.13)$$

Беря квадрат модуля этого равенства с последующим суммированием по m , получаем

$$\sum_{m=-l}^l |\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n)|^2 = \sum_{\lambda_p=0}^1 \sum_{k=\lambda_p}^l |\psi_{l,k}^{(\lambda_p)}(\xi)|^2. \quad (1.14)$$

Из этого соотношения видно, что $|\psi_{l,k}^{(\lambda_p)}(\xi)|^2$ представляет собой вероятность того, что система N тел имеет чётность λ_p и проекцию полного углового момента на ось ВКС z , равную k . Величина $|\Psi_{lm}^{(p)}|^2$ есть вероятность того, что проекция углового момента на ось z неподвижной системы равна m при данной чётности состояния p .

В калибровке половинного угла (см. рис. 1.1) вектор \mathbf{e}_z имеет положительную чётность и из (1.9) непосредственно следует, что чётность функций $D_{k,m}^l$ определяется числом векторов \mathbf{e}_z в тензорном произведении в правой

части (1.9). А именно, $D_{k,m}^l$ есть тензор (псевдотензор) при чётных (нечётных) k . Поэтому, для калибровки половинного угла и остальных калибровок с псевдовектором \mathbf{e}_z , использование симметризованных МКВ (1.11) лишено смысла.

Вычисление действия оператора Лапласа на МКВ приведено в Приложении В.1. Окончательный результат можно представить в виде

$$\sum_{\alpha=1}^n \Delta_{\alpha} D_{k,m}^l(\Omega) = \sum_{\varkappa=-2}^2 B_{\varkappa}^{lk} D_{k+\varkappa,m}^l(\Omega), \quad (1.15)$$

где коэффициенты B_{\varkappa}^{lk} зависят только от внутренних переменных ξ . Вводя обозначение

$$B_{ij} = (\mathbf{e}_i \cdot \sum_{\alpha=1}^n \Delta_{\alpha} \mathbf{e}_j), \quad (1.16)$$

связь коэффициентов B_{\varkappa}^{lk} с базисными векторами ВКС имеет вид

$$\begin{aligned} B_0^{lk} &= \frac{l(l+1) - 2k^2}{2} B_{zz} + \frac{k^2}{2} (B_{xx} + B_{yy}) - i \frac{k}{2} (B_{xy} - B_{yx}), \\ B_{\pm 1}^{lk} &= - \frac{a_{\pm k,1}^{(l)}}{2} \left((k \pm 1) (B_{xz} \pm i B_{yz}) + k (B_{zx} \pm i B_{zy}) \right), \\ B_{\pm 2}^{lk} &= - \frac{a_{\pm k,2}^{(l)}}{4} \left(B_{xx} - B_{yy} \pm i (B_{xy} + B_{yx}) \right), \end{aligned} \quad (1.17)$$

где числовые коэффициенты $a_{k,\nu}^{(l)}$ равны

$$a_{k,\nu}^{(l)} = \sqrt{\frac{(l-k)!(l+k+\nu)!}{(l+k)!(l-k-\nu)!}}. \quad (1.18)$$

Таким образом, вычисление действия оператора Лапласа на МКВ сводится к вычислению действия того же оператора на базисные векторы ВКС.

Полученный результат позволяет записать оператор вращательной кинетической энергии в терминах компонент оператора полного углового момента

\mathbf{L} , заданных в осях ВКС. Для этого используем выражения для действия оператора \mathbf{L} на МКВ (см. формулу (4), п.4.2 книги [10]),

$$\begin{aligned} (L_{\pm 1})^{\varkappa} D_{k,m}^l &= (\mp \sqrt{2})^{-\varkappa} a_{\mp k, \varkappa}^{(l)} D_{k \mp \varkappa, m}^l, \\ L_0 D_{k,m}^l &= k D_{k,m}^l, \end{aligned} \quad (1.19)$$

где $L_{0,\pm 1}$ – циклические компоненты⁵ \mathbf{L} относительно осей ВКС. Переходя от циклических компонент к декартовым, уравнение (1.15) можно представить в особенно компактном виде

$$\sum_{\alpha=1}^n \Delta_{\alpha} D_{k,m}^l(\Omega) = \left(\frac{L^2}{2} \sum_i B_{ii} - \sum_i \sum_j B_{ij} L_j L_i \right) D_{k,m}^l(\Omega). \quad (1.20)$$

Здесь все суммирование проводится по декартовым компонентам x, y, z ВКС. При выводе использовались коммутационное соотношение $[L_x, L_y] = -iL_z$ для компонент оператора углового момента в осях ВКС.

Рассмотрение, проведённое в Приложении В.1 (см. равенство (В.4)), позволяет записать выражение для производной МКВ по направлению в следующем виде

$$\begin{aligned} (\mathbf{c} \cdot \nabla_{\alpha}) D_{k,m}^l(\Omega) &= i k D_{k,m}^l(\Omega) (\mathbf{e}_y \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla_{\alpha}) \mathbf{e}_x) + \frac{a_{-k,1}^{(l)}}{2} D_{k-1,m}^l(\Omega) \times \\ &\times (\mathbf{e}_x - i \mathbf{e}_y) \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla_{\alpha}) \mathbf{e}_z - \frac{a_{k,1}^{(l)}}{2} D_{k+1,m}^l(\Omega) (\mathbf{e}_x + i \mathbf{e}_y) \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla_{\alpha}) \mathbf{e}_z. \end{aligned} \quad (1.21)$$

Это равенство в компонентах оператора \mathbf{L} имеет вид

$$\begin{aligned} (\mathbf{c} \cdot \nabla) D_{k,m}^l(\Omega) &= -i \left((\mathbf{e}_x \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_y) L_z + (\mathbf{e}_y \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_z) L_x + \right. \\ &\left. + (\mathbf{e}_z \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_x) L_y \right) D_{k,m}^l. \end{aligned} \quad (1.22)$$

Здесь операторы ∇ в правой части действуют только на векторы $\mathbf{e}_{x,y,z}$, находящиеся правее.

⁵Определённые аналогично формуле (1.10)

1.1.2. Колебательно-вращательное разложение гамильтониана

Принимая во внимание формулы (1.5), (1.15), (1.19) – (1.22), оператор кинетической энергии системы N тел можно представить в виде

$$T = T_{vib} + T_{cor} + T_{rot}, \quad (1.23)$$

где T_{vib} обозначает оператор кинетической энергии относительного движения частиц (колебательная энергия), совпадающий с полной кинетической энергией системы при равном нулю полном угловом моменте,

$$T_{vib} = \sum_{\gamma \leq \gamma'=1}^{3n-3} a_{\gamma\gamma'}(\xi) \frac{\partial^2}{\partial \xi_\gamma \partial \xi_{\gamma'}} + \sum_{\gamma=1}^{3n-3} b_\gamma(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi_\gamma} \quad (1.24)$$

где $a_{\gamma\gamma'}$ и b_γ определены равенствами (1.7).

Оператор колебательно-вращательной связи (кориолисово слагаемое) T_{cor} определён соотношениями

$$T_{cor} = i \sum_{\gamma=1}^{3n-3} \sum_{k=1}^3 C_{\gamma k} L_k \frac{\partial}{\partial \xi_\gamma}, \quad (1.25)$$

$$C_{\gamma k} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i,j,l} \epsilon_{ijk} [\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{e}_l \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{e}_j] (\mathbf{e}_l \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma,$$

где L_i – i -ая компонента оператора полного углового момента \mathbf{L} , заданная в ВКС, ϵ_{ijk} – полностью антисимметричный единичный тензор, и оператор ∇_α в квадратных скобках действует только на вектор \mathbf{e}_j . Каждый из индексов суммирования i, j, l принимает значения 1, 2, 3, соответствующие вращающимся осям x, y, z . $(3n - 3) \times 3$ матрица $C_{\gamma k}$ содержит как динамические $(\mathbf{e}_l \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma$, так и геометрические $(\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{e}_l \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{e}_j)$ члены, причём последние целиком определяются связью векторов Якоби с осями ВКС и не зависят от выбора внутренних переменных.

Оператор вращательной части кинетической энергии равен

$$T_{rot} = -\frac{L^2}{4} \sum_i B_{ii} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_j B_{ij} L_j L_i. \quad (1.26)$$

Отметим, что данное выражение имеет простую структуру и не зависит от выбора внутренних переменных ξ . Зависимость T_{rot} от выбора калибровки определяется матрицей B_{ij} (см. (1.16)), которая имеет чисто геометрический смысл. Обе матрицы $C_{\gamma k}$ и B_{ij} являются функциями только от внутренних переменных и поэтому коммутируют с компонентами L_i оператора \mathbf{L} , заданными во вращающихся осях.

Из уравнений (1.24) и (1.26) видно, что операторы кориолисовой и вращательной энергии не являются эрмитовыми. Действительно, для оператора вращательной энергии имеем,

$$T_{rot} - T_{rot}^\dagger = \frac{1}{2} \sum_{i,j} B_{ij} (L_i L_j - L_i^\dagger L_j^\dagger) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (B_{ij} - B_{ji}) L_i L_j \neq 0. \quad (1.27)$$

Здесь использовалось свойство эрмитовости оператора углового момента \mathbf{L} .

Чтобы представить колебательно-вращательное разложение в виде комбинации эрмитовых операторов, разложим матрицу B_{ij} на симметричную $B_{ij}^{(s)}$ и антисимметричную $B_{ij}^{(as)}$ части,

$$\begin{aligned} B_{ij} &= B_{ij}^{(s)} + B_{ij}^{(as)}, \\ B_{ij}^{(s)} &= \frac{1}{2}(B_{ij} + B_{ji}), \quad B_{ij}^{(as)} = \frac{1}{2}(B_{ij} - B_{ji}). \end{aligned} \quad (1.28)$$

Подставляя эти равенства в (1.26), получаем

$$T_{rot} = -\frac{\mathbf{L}^2}{4} \sum_i B_{ii}^{(s)} + \frac{1}{4} \sum_{i,j} B_{ij}^{(s)} (L_j L_i + L_i L_j) + \frac{1}{4} \sum_{i,j} B_{ij}^{(as)} (L_j L_i - L_i L_j). \quad (1.29)$$

Отметим, что последний член в правой части упрощается при учёте коммутационного соотношения для компонент оператора полного углового момента

\mathbf{L} , заданных относительно вращающихся осей,

$$[L_i, L_j] = -i\epsilon_{ijk}L_k.$$

Таким образом, последнее слагаемое в (1.29) линейно по L_k и поэтому имеет смысл перенести его из определения (1.29) вращательной энергии T_{rot} в колебательно-вращательный оператор (1.25). В результате, полный гамильтониан системы N тел можно представить в виде суммы эрмитовых операторов

$$H = H_0 + H_{cor} + H_{rot}, \quad (1.30)$$

где $H_0 = T_{vib} + V$. Колебательно-вращательный гамильтониан H_{cor} равен

$$H_{cor} = \frac{i}{2} \sum_{i,j,k=1}^3 L_k \epsilon_{ijk} (\mathbf{e}_i \cdot \sum_{\alpha=1}^{3n} \nabla_{\alpha}^2 \mathbf{e}_j).$$

В эрмитовости оператора H_{cor} можно убедиться заметив, что операторное выражение в скобках действует только на внутренние переменные ξ и поэтому коммутирует с L_k . Более удобно переписать полученное представление H_{cor} в явном виде, аналогичном (1.25):

$$H_{cor} = i \sum_{k=1}^3 L_k \left(\sum_{\gamma=1}^{3n-3} C_{\gamma k}(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi_{\gamma}} + B_k(\xi) \right). \quad (1.31)$$

$$B_k(\xi) = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \epsilon_{ijk} B_{ij}^{(as)},$$

Здесь, коэффициенты $C_{\gamma k}$ определены в (1.25). Представление (1.31) следует из операторного равенства

$$\begin{aligned} \sum_{ij} \epsilon_{ijk} (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\alpha}^2 \mathbf{e}_j) &= \sum_{ij} \epsilon_{ijk} \frac{1}{2} ((\mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\alpha}^2 \mathbf{e}_j) - (\mathbf{e}_j \cdot \nabla_{\alpha}^2 \mathbf{e}_i)) + \\ &+ \sum_{ij} \epsilon_{ijk} \sum_l (\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{e}_l \cdot \nabla_{\alpha}) \mathbf{e}_j) (\mathbf{e}_l \cdot \nabla_{\alpha}). \end{aligned} \quad (1.32)$$

легко проверяемого с помощью правила дифференцирования произведения и свойств тензора ϵ_{ijk} .

Проводя преобразование в соответствии с замечанием, сделанным перед (1.30), с учётом уравнений (1.29) и (1.28), приходим к выражению для оператора вращательной энергии H_{rot} ,

$$H_{rot} = -\frac{1}{4} \sum_{i=1}^3 B_{ii}^{(s)} (\mathbf{L}^2 - 2L_i^2) + \frac{1}{2} \sum_{i>j=1}^3 B_{ij}^{(s)} (L_j L_i + L_i L_j), \quad (1.33)$$

где индексы 1, 2, 3 соответствуют осям x, y, z ВКС.

Как видно, недиагональные элементы $B_{ij}^{(s)}$ приводят к возникновению членов типа $L_x L_y$ и *т.п.* в гамильтониане H_{rot} . Для диагональной матрицы $B_{ij}^{(s)}$ оператор H_{rot} имеет вид

$$H_{rot} = \frac{B_{xx}^{(s)} - B_{yy}^{(s)} - B_{zz}^{(s)}}{4} L_x^2 + \frac{B_{yy}^{(s)} - B_{xx}^{(s)} - B_{zz}^{(s)}}{4} L_y^2 + \frac{B_{zz}^{(s)} - B_{xx}^{(s)} - B_{yy}^{(s)}}{4} L_z^2. \quad (1.34)$$

Таким образом, из разложения гамильтониана (1.30) следует, что отделение коллективных углов сводится к вычислению трёх величин – симметричной 3×3 -матрицы $B_{ij}^{(s)}$, $(3n - 3) \times 3$ -матрицы $C_{\gamma k}$ и трёхкомпонентной величины B_k . В оставшейся части данной главы анализируются свойства указанных величин для разных ВКС и проводится их вычисление.

1.1.3. Общее определение вращающихся координатных систем

Ниже рассмотрена задача вычисления параметров $C_{\gamma k}$, B_k и $B_{ij}^{(s)}$ для ВКС, определённых путём наложения трёх ограничений на компоненты векторов Якоби во вращающихся осях.

Производящие функции

Согласно Экарту [22], наиболее общее определение ВКС состоит в наложении трёх ограничений на координаты частиц в ВКС,

$$Y^{(i)} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (1.35)$$

где функции $Y^{(i)}$ зависят от $3n$ параметров $y_{\alpha k} = (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_k)$, являющихся декартовыми координатами векторов Якоби в ВКС. В дальнейшем $Y^{(i)}$ будем называть “производящими функциями”.

Рассмотрим несколько примеров. Для ВКС с осью z , направленной вдоль вектора \mathbf{r}_1 и плоскостью xz , определённой векторами \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , функции $Y^{(i)}$ можно выбрать в виде

$$\begin{aligned} Y^{(1)} &= (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{e}_1) = y_{11} = 0, \\ Y^{(2)} &= (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{e}_2) = y_{12} = 0, \\ Y^{(3)} &= (\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{e}_2) = y_{22} = 0. \end{aligned} \quad (1.36)$$

Для ВКС, соответствующей калибровке половинного угла, с осью z вдоль векторного произведения $[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]$ и осью x , направленной вдоль суммы векторов $(\hat{\mathbf{r}}_1 + \hat{\mathbf{r}}_2)$, производящие функции можно выбрать в виде

$$\begin{aligned} Y^{(1)} &= (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{e}_3) = y_{13} = 0, \\ Y^{(2)} &= (\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{e}_3) = y_{23} = 0, \\ Y^{(3)} &= (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \cdot \mathbf{e}_2 = y_{12} + y_{22} = 0. \end{aligned} \quad (1.37)$$

Для ВКС, оси которой совпадают с главными осями тензора инерции системы, производящие функции даны равенствами (1.70) раздела 1.1.4.

Отметим, что при заданной ВКС функции $Y^{(i)}$ можно выбирать различными способами.

Производные по направлению от базисных векторов вращающейся системы координат

Несмотря на то, что явные выражения для базисных векторов \mathbf{e}_i ВКС могут быть неизвестны (или имеют сложный вид), производные по направлению от \mathbf{e}_i можно вычислить с помощью производящих функций $Y^{(i)}$. Для доказательства этого утверждения подействуем оператором $\mathcal{O}_\alpha \equiv (\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha)$ на функцию $Y^{(i)}$, $i = 1, 2, 3$,

$$\mathcal{O}_\alpha Y^{(i)} = Y_{\beta k}^{(i)} (\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha) (\mathbf{r}_\beta \cdot \mathbf{e}_k) = Y_{\beta k}^{(i)} ((\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_k) \delta_{\beta\alpha} + (\mathbf{r}_\beta \cdot \mathbf{e}_j) (\mathbf{e}_j \cdot \mathcal{O}_\alpha \mathbf{e}_k)) = 0, \quad (1.38)$$

где введено сокращённое обозначение

$$Y_{\beta k}^{(i)} = \frac{\partial Y^{(i)}}{\partial y_{\beta k}} \quad (1.39)$$

и была использована полнота набора векторов \mathbf{e}_i . В (1.39), и ниже в данном разделе, по всем дважды повторяющимся индексам подразумевается суммирование.

Равенства (1.38) составляют систему трёх уравнений на девять неизвестных величин

$$A_{jk}(\mathbf{c}) = (\mathbf{e}_j \cdot \mathcal{O}_\alpha \mathbf{e}_k) = (\mathbf{e}_j \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{e}_k).$$

Легко, однако, убедиться что матрица A_{ij} антисимметрична и поэтому число неизвестных параметров уменьшается до трёх. Действительно, действуя оператором \mathcal{O}_α на скалярное произведение $(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j)$, получаем

$$\mathcal{O}_\alpha (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = (\mathbf{e}_i \cdot \mathcal{O}_\alpha \mathbf{e}_j) + (\mathbf{e}_j \cdot \mathcal{O}_\alpha \mathbf{e}_i) = A_{ij}(\mathbf{c}) + A_{ji}(\mathbf{c}) = 0, \quad (1.40)$$

где использовалось соотношение $(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$.

Антисимметричная матрица A_{ij} дуальна “вектору”⁶ \mathbf{A} , компоненты которого равны

$$A_i(\mathbf{c}) = \frac{1}{2}\epsilon_{ijk}A_{jk}(\mathbf{c}), \quad A_{jk}(\mathbf{c}) = \epsilon_{ijk}A_i(\mathbf{c}). \quad (1.41)$$

Отсюда следует выражение для коэффициентов $C_{\gamma k}(\xi)$ из (1.31),

$$C_{\gamma k}(\xi) = \sum_{\alpha=1}^n A_k(\mathbf{e}_\alpha) (\mathbf{e}_\alpha \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma. \quad (1.42)$$

(Параметры A_{jk} и A_k зависят от индекса α , который, для краткости, здесь и ниже опущен.) Преобразование равенства (1.38) с учётом (1.41) приводит к системе линейных уравнений на коэффициенты $A_i(\mathbf{c})$

$$\epsilon_{jkl}A_l(\mathbf{c})Y_{\beta k}^{(i)}(\mathbf{r}_\beta \cdot \mathbf{e}_j) = A_l(\mathbf{c})Y_{\beta k}^{(i)}(\mathbf{r}_\beta, \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l) = -Y_{\alpha k}^{(i)}(\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_k), \quad (1.43)$$

где было использовано вспомогательное соотношение $\epsilon_{jkl} = (\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l)$. Введя сокращённые обозначения

$$\mathbf{u}_i = Y_{\beta k}^{(i)}[\mathbf{r}_\beta \times \mathbf{e}_k], \quad U_{ik} = (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{e}_k), \quad (1.44)$$

перепишем систему уравнений (1.43) в виде

$$U_{ik}A_k(\mathbf{c}) = -Y_{\alpha k}^{(i)}(\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_k). \quad (1.45)$$

Полученная неоднородная система трёх линейных уравнений имеет решение только при отличном от нуля определителе \mathbf{U} . Полнота набора векторов \mathbf{e}_k приводит к следующему выражению для \mathbf{U} ,

$$U \equiv \det U_{ik} = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3). \quad (1.46)$$

⁶Из определения A_{ij} следует, что $\mathbf{A} = (A_1, A_2, A_3)$ не является вектором физического пространства, а представляет собой набор трёх скалярных функций, зависящих от внутренних координат.

Умножая (1.45) на обратную матрицу \mathbf{U}^{-1} , решение системы уравнений (1.45) можно записать в виде

$$A_k(\mathbf{c}) = -(\mathbf{U}^{-1})_{ki} Y_{\alpha j}^{(i)} (\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_j). \quad (1.47)$$

Конфигурации, при которых обратная матрица \mathbf{U}^{-1} не существует (т.е. когда $U = 0$), соответствуют калибровочным расходимостям.

Уравнение (1.47) позволяет представить матрицу $C_{\gamma k}$, определённую равенством (1.25), в следующем виде

$$C_{\gamma k} = -(\mathbf{U}^{-1})_{kq} Y_{\alpha i}^{(q)} (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma. \quad (1.48)$$

Приведём также векторную форму равенства (1.47),

$$(\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{e}_k = -\epsilon_{ijk} \mathbf{e}_j (\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_p) Y_{\alpha p}^{(q)} (\mathbf{U}^{-1})_{iq}. \quad (1.49)$$

Вторые производные базисных векторов

Ниже вычисляется действие операторов Лапласа на базисные векторы \mathbf{e}_i . Результат такого действия определяет вид коэффициентов в выражениях для кориолисова и вращательного гамильтонианов.

Сначала докажем, что симметризованная комбинация производных второго порядка выражается через первые производные векторов \mathbf{e}_i . Для этого подействуем оператором Лапласа на соотношение $(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = \delta_{i,j}$,

$$\Delta_\beta (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = (\mathbf{e}_i \cdot \Delta_\beta \mathbf{e}_j) + (\mathbf{e}_j \cdot \Delta_\beta \mathbf{e}_i) + 2[(\mathbf{e}_k \cdot \nabla_\beta) \mathbf{e}_i] \cdot (\mathbf{e}_k \cdot \nabla_\beta) \mathbf{e}_j = 0, \quad (1.50)$$

где оператор градиента в квадратных скобках действует только на вектор \mathbf{e}_i . Просуммировав по β , получаем выражение для элементов матрицы $\mathbf{B}^{(s)}$, определённой в (1.28), (см. также (1.16)),

$$B_{ij}^{(s)} = -[(\mathbf{e}_k \cdot \nabla_\beta) \mathbf{e}_i] \cdot (\mathbf{e}_k \cdot \nabla_\beta) \mathbf{e}_j. \quad (1.51)$$

Производные по направлению в этом уравнении можно переписать через параметры A_k , определённые в (1.41). В итоге получаем,

$$B_{ij}^{(s)} = -A_{ki}(\mathbf{e}_q)A_{kj}(\mathbf{e}_q) = A_i(\mathbf{e}_q)A_j(\mathbf{e}_q) - \delta_{ij}A_k(\mathbf{e}_q)A_k(\mathbf{e}_q). \quad (1.52)$$

Это уравнение удобно представить в матричном виде. Для этого используем соотношения (1.47) и (1.44) для коэффициентов A_k и $d_i^{(\beta)}$, соответственно. После несложных преобразований приходим к равенству

$$\mathbf{B}^{(s)} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{U}^{-1t} - \mathbf{E}(\text{Tr } \mathbf{U}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{U}^{-1t}), \quad (1.53)$$

где \mathbf{E} – единичная матрица 3×3 , индекс t обозначает транспонирование и элементы матрицы \mathbf{Y} определены формулой

$$Y_{pp'} = Y_{\beta k}^{(p)}Y_{\beta k}^{(p')}. \quad (1.54)$$

Как видно, матрица \mathbf{Y} симметрична и зависит только от внутренних координат.

Подставляя формулу (1.53) в выражение (1.33), после несложных преобразований получаем компактную формулу для вращательного гамильтониана,

$$H_{rot} = \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^3 \mathcal{I}_{ij} L_i L_j, \quad (1.55)$$

где матрица \mathcal{I} определена формулой,

$$\mathcal{I} = \mathbf{U}^{-1}\mathbf{Y}\mathbf{U}^{-1t}. \quad (1.56)$$

Матрицу \mathcal{I} можно интерпретировать как “эффективный обратный тензор инерции”, заданный во вращающихся осях.

Обратная матрица \mathbf{U}^{-1} , входящая в выражение для матрицы \mathcal{I} может быть легко вычислена с помощью теоремы Кэли-Гамильтона [136], которая

для произвольной 3×3 -матрицы \mathbf{U} имеет вид

$$\mathbf{U}^3 = U\mathbf{E} + \mathbf{U} \frac{\text{tr } \mathbf{U}^2 - (\text{tr } \mathbf{U})^2}{2} + \mathbf{U}^2 \text{tr } \mathbf{U}. \quad (1.57)$$

Умножение этого равенства на \mathbf{U}^{-1} приводит к выражению для обратной матрицы

$$\mathbf{U}^{-1} = \frac{1}{U} \left(\mathbf{E} \frac{(\text{tr } \mathbf{U})^2 - \text{tr } \mathbf{U}^2}{2} - \mathbf{U} \text{tr } \mathbf{U} + \mathbf{U}^2 \right). \quad (1.58)$$

Для вычисления параметров B_k , дуальных антисимметричной матрице $\mathbf{V}^{(as)}$, необходимо знать вторые производные производящих функций. Для их вычисления подействуем n -мерным оператором Лапласа $\sum_{\beta=1}^n \Delta_{\beta}$ на производящую функцию $Y^{(i)}$,

$$\begin{aligned} \sum_{\beta=1}^n \Delta_{\beta} Y^{(i)} &= Y_{\alpha k; \alpha' k'}^{(i)} [\delta_{kq} \delta_{\alpha\beta} + (\mathbf{r}_{\alpha} \cdot (\mathbf{e}_q \cdot \nabla_{\beta}) \mathbf{e}_k)] [\delta_{k'q} \delta_{\alpha'\beta} + (\mathbf{r}_{\alpha'} \cdot (\mathbf{e}_q \cdot \nabla_{\beta}) \mathbf{e}_{k'})] \\ &+ 2 Y_{\beta k}^{(i)} (\nabla_{\beta} \cdot \mathbf{e}_k) + \sum_{\beta=1}^n Y_{\alpha k}^{(i)} (\mathbf{r}_{\alpha} \cdot \Delta_{\beta} \mathbf{e}_k) = 0, \end{aligned} \quad (1.59)$$

где суммирование проводится по парам повторяющихся индексов и введено краткое обозначение

$$Y_{\alpha k; \alpha' k'}^{(i)} = \frac{\partial^2 Y^{(i)}}{\partial y_{\alpha k} \partial y_{\alpha' k'}}.$$

Выражение для дивергенции базисного вектора \mathbf{e}_k получается из (1.41), (1.44), (1.47). После несложных преобразований имеем

$$(\nabla_{\beta} \cdot \mathbf{e}_k) = \mathbf{e}_j \cdot (\mathbf{e}_j \cdot \nabla_{\beta}) \mathbf{e}_k = -\epsilon_{pjk} (\mathbf{U}^{-1})_{pq} Y_{\beta j}^{(q)}, \quad (1.60)$$

так что содержащее дивергенцию слагаемое в (1.59) принимает вид

$$-2 \epsilon_{pjk} Y_{\beta k}^{(i)} Y_{\beta j}^{(q)} (\mathbf{U}^{-1})_{pq}. \quad (1.61)$$

Использование равенства (1.49) позволяет переписать слагаемое в (1.59) с производной второго порядка $Y_{\alpha k; \alpha' k'}^{(i)}$ в виде

$$Y_{\alpha k; \alpha k}^{(i)} - 2 \epsilon_{lmk} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_m) Y_{\alpha k; \beta q}^{(i)} Y_{\beta q}^{(p)} (\mathbf{U}^{-1})_{lp} + \\ + \epsilon_{lmk} \epsilon_{l' m' k} Y_{\alpha k; \alpha' k'}^{(i)} \mathcal{I}_{ll'} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_m) (\mathbf{r}_{\alpha'} \cdot \mathbf{e}_{m'}), \quad (1.62)$$

где матрица \mathcal{I} определена в (1.56).

Последнее слагаемое в уравнении (1.59) удобно представить в виде суммы симметричной и антисимметричной матриц,

$$\sum_{\beta=1}^n Y_{\alpha k}^{(i)} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \Delta_\beta \mathbf{e}_k) = Y_{\alpha k}^{(i)} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_j) \left(B_{jk}^{(s)} + B_{jk}^{(as)} \right), \quad (1.63)$$

где симметричная матрица $\mathbf{B}^{(s)}$ определена равенством (1.53). Антисимметричная матрица $\mathbf{B}^{(as)}$ дуальна вектору B_l , т.е. $B_{jk}^{(as)} = \epsilon_{jkl} B_l$, (см. (1.41) выше), так что

$$Y_{\alpha k}^{(i)} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_j) B_{jk}^{(as)} = Y_{\alpha k}^{(i)} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_j) \epsilon_{jkl} B_l = (\mathbf{u}_i \cdot \mathbf{e}_l) B_l. \quad (1.64)$$

Подставляя это уравнение в (1.63) и затем в (1.59), и используя (1.60), (1.62), получаем систему трёх линейных уравнений на параметры B_l ,

$$U_{il} B_l = -d_i, \quad (1.65)$$

где компоненты d_i определены равенством

$$d_i = Y_{\alpha k}^{(i)} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_j) B_{jk}^{(s)} - 2 \epsilon_{pj k} Y_{\beta k}^{(i)} Y_{\beta j}^{(q)} (\mathbf{U}^{-1})_{pq} + (1.62). \quad (1.66)$$

Решение системы (1.65) получается умножением на обратную матрицу \mathbf{U}^{-1} ,

$$B_k = -(\mathbf{U}^{-1})_{ki} d_i. \quad (1.67)$$

1.1.4. Калибровка мгновенных главных осей инерции

Во многих задачах молекулы и ядра можно приближённо рассматривать как твёрдые тела. В этом случае может быть удобно использовать ВКС, оси которой направлены вдоль главных осей тензора инерции системы. Такой выбор ВКС назовём калибровкой мгновенных главных осей инерции⁷ (МГОИ). Отметим, что положение главных осей инерции зависит не только от ориентации всей системы в пространстве, но и от её колебательного состояния.

По-видимому, впервые использовать МГОИ для описания движения молекул предложил Экарт в работе [23], где рассмотрение проводилось в рамках классической механики. Вскоре после работы [23], Вигнер и Хиршфельдер в статье [133] рассмотрели МГОИ в квантовом случае. Там же были получены выражения для соответствующих обобщённых радиальных уравнений. Результаты [133] были впоследствии неоднократно переоткрыты, см. например, [29, 32, 129]. В задаче трёх тел МГОИ использовалась в работе [137]. Отделение коллективных углов в калибровке МГОИ рассматривалось также в [138], с помощью квантования классической функции Гамильтона с использованием набора гиперсферических координат. Полученные выражения оказались, однако, чрезвычайно громоздкими.

Компоненты тензора инерции системы N тел определяются формулой

$$I_{ik} = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \left(\delta_{ik} (\mathbf{R}_{\alpha} - \mathbf{R}_c)^2 - (X_i^{(\alpha)} - X_i^{(c)})(X_k^{(\alpha)} - X_k^{(c)}) \right), \quad (1.68)$$

где $\mathbf{R}_c = \sum_{\alpha=1}^N m_{\alpha} \mathbf{R}_{\alpha} / M$ – вектор ц.м. системы и $X_i^{(c)}$, $X_i^{(\alpha)}$ – i -ые компоненты радиус-векторов \mathbf{R}_c , \mathbf{R}_{α} , соответственно. Использование набора $n = (N - 1)$ масс-масштабированных векторов Якоби (см. Приложение Б) приводит к

⁷Англ. principal axes frame – paf.

следующему выражению для тензора инерции

$$I_{ik} = \sum_{\alpha=1}^n \left(r_{\alpha}^2 \delta_{i,k} - x_i^{(\alpha)} x_k^{(\alpha)} \right). \quad (1.69)$$

Поскольку тензор I_{ik} определяется действительной симметричной матрицей 3×3 , три собственных значения I_1, I_2, I_3 тензора инерции (т.е. главные моменты инерции) действительны, а соответствующие им собственные векторы (главные оси) $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ ортогональны.

Производящие функции для системы мгновенных главных осей инерции можно записать в компактном виде как

$$\begin{aligned} Y^{(1)} &= \sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha 2} y_{\alpha 3} = 0, \\ Y^{(2)} &= \sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha 3} y_{\alpha 1} = 0, \\ Y^{(3)} &= \sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha 1} y_{\alpha 2} = 0, \end{aligned} \quad (1.70)$$

где $y_{\alpha i} = (\mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{e}_i)$. Для краткости ВКС, определённую производящими функциями (1.70), будем также называть системой главных осей инерции.

Как было показано в разделе 1.1.2, чтобы получить выражения для кориолисова и вращательного гамильтонианов, необходимо вычислить матрицу \mathbf{U} , определённую в (1.44), (1.45). После несложных вычислений получаем, что эта матрица для калибровки МГОИ имеет диагональный вид,

$$\mathbf{U} = \text{diag} (I_3 - I_2, I_1 - I_3, I_2 - I_1). \quad (1.71)$$

Нетрудно проверить, что матрица $Y_{pp'} = Y_{\beta k}^{(p)} Y_{\beta k}^{(p')}$ также диагональна

$$\mathbf{Y} = \text{diag} (I_1, I_2, I_3). \quad (1.72)$$

Здесь, при выводе было учтено, что $y_{\alpha i} y_{\alpha j} = J_k \delta_{ij}$, где величины J_k связаны с главными моментами инерции соотношениями $I_1 = J_2 + J_3$ и т.п.⁸.

Зная матрицы \mathbf{U}^{-1} и \mathbf{Y} , можно вычислить матрицу обратного эффективного тензора инерции (1.56), которая также получается диагональной,

$$\mathcal{I} = \text{diag} \left(\frac{I_1}{(I_2 - I_3)^2}, \frac{I_2}{(I_1 - I_3)^2}, \frac{I_3}{(I_1 - I_2)^2} \right). \quad (1.73)$$

Таким образом, вращательный гамильтониан в калибровке МГОИ равен

$$H_{rot}^{(paf)} = \frac{I_1 L_1^2}{2(I_2 - I_3)^2} + \frac{I_2 L_2^2}{2(I_1 - I_3)^2} + \frac{I_3 L_3^2}{2(I_1 - I_2)^2}. \quad (1.74)$$

Перейдём к вычислению кориолисова гамильтониана. Анализ уравнения (1.66) с учётом выражений (1.71) – (1.73) показывает, что параметры B_k кориолисова гамильтониана для системы главных осей обращаются в ноль.

Выражения для параметров $C_{\gamma k}$ колебательно-вращательного гамильтониана (1.31) получаются из (1.48), с использованием соотношений (1.44), (1.70), (1.71),

$$\begin{aligned} C_{\gamma 1} &= \frac{1}{I_2 - I_3} \sum_{\alpha=1}^n [(\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_2)(\mathbf{e}_3 \cdot \nabla_\alpha) + (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_3)(\mathbf{e}_2 \cdot \nabla_\alpha)] \xi_\gamma, \\ C_{\gamma 2} &= \frac{1}{I_3 - I_1} \sum_{\alpha=1}^n [(\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_1)(\mathbf{e}_3 \cdot \nabla_\alpha) + (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_3)(\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_\alpha)] \xi_\gamma, \\ C_{\gamma 3} &= \frac{1}{I_1 - I_2} \sum_{\alpha=1}^n [(\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_1)(\mathbf{e}_2 \cdot \nabla_\alpha) + (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_2)(\mathbf{e}_1 \cdot \nabla_\alpha)] \xi_\gamma. \end{aligned} \quad (1.75)$$

Как видно из приведённых выше выражений (1.74) и (1.75), кориолисов и вращательный гамильтонианы расходятся при $I_i = I_j$, ($i \neq j$), т.е. при конфигурациях, соответствующих симметричному волчку. Это обстоятельство впервые было отмечено Экартом [23].

⁸ Отметим также формулу $I_1 - I_2 = J_2 - J_1$ и т.п.

В пределе нулевых колебаний, когда расстояния между частицами системы фиксированы, следовало бы ожидать, что выражение для гамильтониана твёрдого тела получится отбрасыванием колебательного и кориолисова гамильтонианов H_0 и $H_{cor}^{(paf)}$ в разложении (1.30). Однако, остающийся оператор вращательной кинетической энергии $H_{rot}^{(paf)}$, определённый формулой (1.74), не совпадает с гамильтонианом твёрдого тела. Различие между $H_{rot}^{(paf)}$ и корректным выражением состоит в коэффициентах при операторах $L_{1,2,3}^2$: гамильтониан твёрдого тела содержит коэффициенты I_i^{-1} вместо $I_i(I_j - I_k)^{-2}$. (Такие комбинации главных моментов инерции называют также “жидкостными моментами инерции”, см. [33, 94].) Такое неожиданное поведение системы главных осей инерции, известное как “парадокс Экарта” [94], было предметом нескольких исследований [24, 33, 139].

Парадокс Экарта объясняется не совсем корректным определением предела абсолютно твёрдого тела, данным выше. Дело в том, что предел нулевых колебаний требует учёта потенциальной энергии взаимодействия частиц. В пределе твёрдого тела систему N тел можно представить как набор частиц, связанных пружинами, жёсткость которых возрастает до бесконечности.

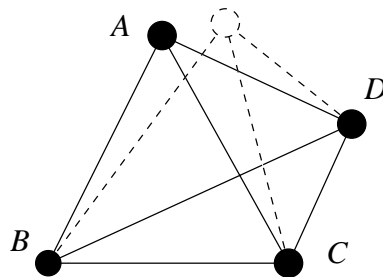


Рис. 1.2. Предел твёрдого тела для системы четырёх тел. В равновесном положении потенциальная энергия постоянна, но возрастает до бесконечности при отклонении частицы A от положения равновесия.

В [33] показано, что корректный учёт потенциальной энергии приводит к

тому, что расходимости калибровки МГОИ сокращаются в пределе колебаний бесконечно малой амплитуды. Рассмотрение [33] проводилось для потенциала квадратичной относительно амплитуд колебаний формы,

$$V(\xi) = \frac{1}{2}k \sum_{q=1}^{3n-3} \xi_q^2.$$

где ξ_q – отклонение внутренней координаты ξ_q от её положения равновесия. Предел твёрдого тела соответствует бесконечно большим значениям коэффициента упругости k . Авторы [33] использовали второй порядок теории возмущений для вычисления моментов инерции системы, соответствующих калибровке МГОИ. Полученные результаты подтвердили корректность предела твёрдого тела для данной калибровки.

Отметим, что существует возможность определить калибровку, для которой имеет место указанный выше “интуитивный” предел абсолютно твёрдого тела. Такая задача была решена К. Экартом в работе [22]. Калибровка Экарта рассматривается ниже в разделе 1.2.

В заключение, приведём явные выражения для обобщённых радиальных уравнений, соответствующих калибровке МГОИ,

$$(H_0 - E)\psi_{l,k}^{(\lambda_p)}(\xi) + V_{rot}^{(paf)} + V_{cor}^{(paf)} = 0, \quad (1.76)$$

где $\lambda_p = 0, 1$ и $k = \lambda_p, 1, \dots, l$. Вращательный калибровочный потенциал $V_{rot}^{(paf)}$ равен,

$$V_{rot}^{(paf)} = \left(\frac{f_3 k^2}{2} + (f_1 + f_2) \frac{l(l+1) - k^2}{4} \right) \psi_{l,k}^{(\lambda_p)} - \frac{f_1 - f_2}{8} \left(a_{k-2,2}^{(l)} \psi_{l,k-2}^{(\lambda_p)} + a_{-k-2,2}^{(l)} \psi_{l,k+2}^{(\lambda_p)} \right), \quad (1.77)$$

где $f_1 = I_1/(I_2 - I_3)^2$ и параметры f_2, f_3 определены аналогично; числовые коэффициенты $a_{k,\mu}^{(l)}$ определены формулой (1.18). Кориолисов калибровочный

потенциал равен,

$$\begin{aligned}
V_{cor}^{(paf)} = \sum_{\alpha=1}^n \left\{ -ik \frac{([\mathbf{r}_\alpha \times \mathbf{e}_3] \cdot [\mathbf{e}_3 \times \nabla_\alpha])}{I_1 - I_2} \psi_{l,k}^{(\bar{\lambda}_p)} + \right. \\
+ i \frac{([\mathbf{r}_\alpha \times \mathbf{e}_1] \cdot [\mathbf{e}_1 \times \nabla_\alpha])}{2(I_2 - I_3)} \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(\bar{\lambda}_p)} + a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(\bar{\lambda}_p)} \right) + \\
\left. + \frac{([\mathbf{r}_\alpha \times \mathbf{e}_2] \cdot [\mathbf{e}_2 \times \nabla_\alpha])}{2(I_1 - I_3)} \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(\lambda_p)} - a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(\lambda_p)} \right) \right\}. \quad (1.78)
\end{aligned}$$

Здесь черта в обозначении $\bar{\lambda}_p$ означает обратную чётность $\bar{\lambda}_p = 1 - \lambda_p$. Члены $\psi_{l,k-1}^{(\lambda)}$ и $\psi_{l,k-2}^{(\lambda)}$ в (1.77) и (1.78) при $k = 0, 1$ формально не определены, т.к. радиальные функции $\psi_{lk}^{(\lambda)}$ не могут иметь отрицательного индекса k . Несложный анализ приводит к дополнительным условиям⁹: $\psi_{l,-1}^{(\lambda)} = (-1)^{\lambda+1} \psi_{l,1}^{(\lambda)}$, и $\psi_{l,-2}^{(\lambda)} = \psi_{l,2}^{(\lambda)}$, $\psi_{l,0}^{(1)} = 0$.

1.1.5. Калибровка z -связи

В калибровке z -связи (будем её также называть калибровкой $z zx$), ось z ВКС направлена вдоль некоторого вектора (пусть, $\hat{\mathbf{r}}_1$) системы, а другой вектор ($\hat{\mathbf{r}}_2$) лежит в плоскости zx ВКС. Следовательно, ось y направлена вдоль векторного произведения $[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]$, см. рис. 1.1. Калибровка $z zx$ имеет смысл также и в задаче двух тел, при этом вектору \mathbf{r}_1 соответствует соединяющий частицы вектор $\mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$.

Базисные векторы ВКС в калибровке $z zx$ равны

$$\mathbf{e}_x = -\frac{[\hat{\mathbf{r}}_1 \times [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]]}{\sin \theta_{12}}, \quad \mathbf{e}_y = \frac{[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]}{\sin \theta_{12}}, \quad \mathbf{e}_z = \hat{\mathbf{r}}_1, \quad (1.79)$$

где θ_{12} – угол между векторами $\hat{\mathbf{r}}_1$ и $\hat{\mathbf{r}}_2$.

⁹ Эти условия следуют из того факта, что симметризованные МКВ $D_{-|k|m}^{l,\lambda}$, возникающие из-за появления в (1.15) и (1.21) членов D_{k-2m}^l и D_{k-1m}^l , в соответствии с определением (1.11), можно переписать в виде $D_{-|k|m}^{l,\lambda} = (-1)^{k+\lambda} D_{|k|m}^{l,\lambda}$.

Рассмотрим свойства пространственной чётности разложения (1.13), соответствующего калибровке $z zx$. При операции пространственной инверсии \hat{P} , векторы \mathbf{e}_μ , $\mu = 0, \pm 1$ преобразуются по формуле

$$\hat{P} \mathbf{e}_\mu = (-1)^\mu \mathbf{e}_{-\mu}. \quad (1.80)$$

Из этого равенства и определения МКВ (1.9) следует, что

$$\hat{P} D_{km}^l(\Omega) = (-1)^k D_{-km}^l(\Omega). \quad (1.81)$$

Как видно, чётность МКВ зависит от проекции k углового момента на ось z ВКС. Функции $D_{km}^{l,\lambda}(\Omega)$ при пространственной инверсии преобразуются по формуле

$$\hat{P} D_{km}^{l,\lambda}(\Omega) = (-1)^\lambda D_{km}^{l,\lambda}(\Omega). \quad (1.82)$$

Таким образом, симметризованные МКВ (1.11) являются собственными функциями оператора пространственной инверсии. Функции $D_{km}^{l,\lambda}$ есть полярные тензоры при чётных l и $\lambda = 0$ или нечётных l и $\lambda = 1$, в противном случае $D_{km}^{l,\lambda}$ – псевдотензоры.

Поскольку волновая функция в ЛКС (т.е. левая часть разложения (1.13)) при пространственной инверсии приобретает дополнительную фазу $(-1)^p$, из (1.82) следует закон преобразования обобщённых радиальных функций при пространственной инверсии

$$\hat{P} \psi_{lk}^{(\lambda_p)}(\xi) = (-1)^{p+\lambda_p} \psi_{lk}^{(\lambda_p)}(\xi). \quad (1.83)$$

Вычисление операторов T_{rot} и T_{cor} проведено в Приложении В.2. Общая структура обобщённых радиальных уравнений в калибровке z -связи аналогична калибровке МГОИ, рассмотренной в предыдущем разделе. Различие

состоит в калибровочных потенциалах, которые в рассматриваемом случае имеют вид

$$\begin{aligned}
V_{rot}^{(zzx)} &= \left(\frac{k^2}{2 \sin^2 \theta_{12}} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) + \frac{l(l+1) - 2k^2}{2r_1^2} \right) \psi_{l,k}^{(\lambda_p)} \\
&\quad - \frac{\text{ctg } \theta_{12}}{2r_1^2} \left((k+1)a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(\lambda_p)} + (k-1)a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(\lambda_p)} \right), \\
V_{cor}^{(zzx)} &= - \frac{k}{\sin^2 \theta_{12}} \left(\cos \theta_{12} \frac{(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1)}{r_1^2} + \frac{(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2)}{r_2^2} \right) \psi_{l,k}^{(\bar{\lambda}_p)} \\
&\quad + \frac{1}{2r_1^2 \sin \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1) \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(\bar{\lambda}_p)} + a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(\bar{\lambda}_p)} \right) \\
&\quad + \frac{i}{2r_1^2 \sin \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_1) \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(\lambda_p)} - a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(\lambda_p)} \right).
\end{aligned} \tag{1.84}$$

Как видно, при $\theta_{12} = 0, \pi$ радиальные уравнения расходятся. Умножая систему радиальных уравнений (1.76) на $\sin^2 \theta_{12}$ получаем, что калибровочные расходимости соответствуют обращению в ноль коэффициентов при операторе потенциальной энергии. Действительно, в системе уравнений

$$\begin{aligned}
\sin^2 \theta_{12} (H_0 - E) \psi_{lk}^{(\lambda_p)}(\xi) + \sin^2 \theta_{12} V_{rot}^{(zzx)} + \sin^2 \theta_{12} V_{cor}^{(zzx)} &= 0, \\
\lambda_p &= 0, 1, \quad k = \lambda_p, \dots, l,
\end{aligned} \tag{1.85}$$

второе и третье слагаемые всегда конечны, а первое обращается в ноль при коллинеарных конфигурациях, когда $\theta_{12} = 0, \pi$.

Используя уравнения (B.12), параметры $C_{\gamma k}$ колебательно-вращательного гамильтониана можно представить в виде

$$\begin{aligned}
C_{\gamma x} &= - \frac{i}{\sin^2 \theta_{12}} \left(\cos \theta_{12} \frac{(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1)}{r_1^2} + \frac{(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2)}{r_2^2} \right) \xi_\gamma, \\
C_{\gamma y} &= - \frac{i}{r_1^2} ([\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \cdot \mathbf{l}_1) \xi_\gamma, \\
C_{\gamma z} &= - \frac{i}{r_1^2} (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1) \xi_\gamma.
\end{aligned} \tag{1.86}$$

В задаче трёх тел, члены, содержащие псевдоскалярные операторы $(\hat{\mathbf{r}}_i \cdot \mathbf{l}_j)$, выпадают и отличен от нуля только коэффициент $C_{\gamma y}$.

Параметры B_k в (1.31) в калибровке z -связи равны

$$B_x = B_y = 0, \quad B_z = \operatorname{ctg} \theta_{12} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right), \quad (1.87)$$

где индексы x, y, z соответствуют $k = 1, 2, 3$ в (1.31).

В соответствии с (B.10) и (1.33), вращательный гамильтониан выражается равенством

$$H_{rot}^{(zzx)} = \frac{1}{2 \sin^2 \theta_{12}} \left(\frac{\cos^2 \theta_{12}}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) L_z^2 + \frac{1}{2r_1^2} (L_x^2 + L_y^2 + \operatorname{ctg} \theta_{12} [L_x L_z + L_z L_x]). \quad (1.88)$$

Таким образом, в калибровке zzx , в отличие от МГОИ, вращательный гамильтониан содержит недиагональный член $(L_x L_z + L_z L_x)$.

Калибровку zzx можно использовать и при наличии внешнего поля, зависящего от некоторого постоянного вектора \mathbf{E} . Такая ситуация имеет место для системы N тел, помещённой в постоянное электрическое поле (в данном случае добавка к потенциальной энергии имеет вид $(-\mathbf{d} \cdot \mathbf{E})$, где \mathbf{d} – полный дипольный момент системы). Отметим, что оператор $\mathcal{L} = \mathbf{L} - i[\mathbf{E} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{E}}]$ коммутирует с гамильтонианом и поэтому волновая функция $\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n, \mathbf{E})$ является собственной функцией оператора “расширенного” углового момента \mathcal{L} . Таким образом, с помощью разложения (1.13), можно отделить три угла, описывающих коллективное движение системы n векторов Якоби плюс вектор \mathbf{E} . При этом в качестве ВКС удобно выбрать систему координат с осью z , направленной вдоль вектора \mathbf{E} и плоскостью zx , определённой парой векторов \mathbf{r}_1 и \mathbf{E} . Соответствующие калибровочные потенциалы получаются из (1.84) заменой $\mathbf{r}_2 \rightarrow \mathbf{E}$, и вычёркиванием членов с E^{-2} (возникающих в результате действия оператора ∇_2 на МКВ).

Подсчитаем число внутренних переменных, т.е. размерность уравнений на функции $\psi_{lm}^{(p)}$ системы N тел во внешнем электрическом поле. Полная волновая функция $\Psi_{lm}^{(p)}$ зависит от $(3n + 3)$ переменных: $3n$ компонент векторов Якоби плюс 3 компоненты вектора \mathbf{E} . После отделения трёх коллективных углов получаем $3n$ координат, из которых одна, – длина $|\mathbf{E}| = const$, – фиксирована, поскольку внешнее поле предполагается постоянным. Таким образом, обобщённые радиальные функции $\psi_{l,k}^{(p)}$ зависят от $(3n - 1)$ внутренних переменных, которые образованы комбинациями скалярных и смешанных произведений вектора \mathbf{E} и векторов Якоби \mathbf{r}_i . Геометрически, возможность устранения одной степени свободы из уравнения Шрёдингера обусловлена аксиальной симметрией задачи N тел, помещённых в постоянное поле, определяемое вектором \mathbf{E} .

1.1.6. Примеры радиальных уравнений для задач трёх и четырёх тел

В данном разделе в явном виде выписаны обобщённые радиальные уравнения задачи трёх и четырёх тел, соответствующие конкретному набору внутренних переменных. Для определённости используется калибровка z -связи. Радиальные уравнения для других калибровок получаются подстановкой приведённых ниже выражений для операторов колебательной энергии и одночастичного углового момента в соответствующие уравнения разделов 1.1 и 1.3.

Задача этого раздела состоит, во-первых, в вычислении коэффициентов в равенстве (1.6) и, во-вторых, в вычислении действия операторов углового момента $\mathbf{I}_{1,2}$ на внутренние переменные.

Выберем в качестве внутренних переменных в задаче четырёх тел следу-

ющие величины,

$$(\xi) = (r_1, r_2, r_3, \tau_1, \tau_2, \tau_3), \quad (1.89)$$

где τ_i – косинусы углов между векторами Якоби, $\tau_1 = (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_3) = \cos \theta_{23}$, $\tau_2 = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_3) = \cos \theta_{13}$, $\tau_3 = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2) = \cos \theta_{12}$, (см. рис. 1.3). В задаче трёх тел данные координаты сводятся к набору¹⁰ (r_1, r_2, τ_3) .

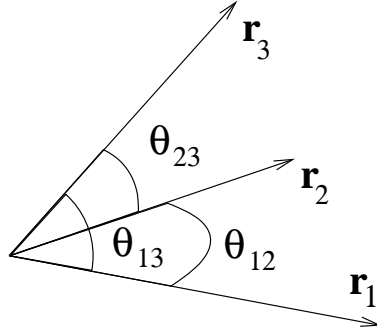


Рис. 1.3. Внутренние переменные в задаче четырёх тел. θ_{ij} – углы между векторами Якоби \mathbf{r}_i и \mathbf{r}_j .

В отличие от задачи трёх тел, в которой все радиальные функции являются истинными скалярами (поскольку из двух векторов невозможно образовать псевдоскаляр), в задаче четырёх тел радиальные функции $\psi_{l,k}^{(\lambda_p)}(\xi)$ могут быть как скалярами, так и псевдоскалярами, в зависимости от чётности комбинации $(p + \lambda_p)$ (см. формулу (1.83) выше). А именно, при чётных величинах $(p + \lambda_p)$ радиальные функции псевдоскалярны (обозначим их $\psi_{l,k}^{(\bar{p})}$ с $\bar{p} = 1 - p$ и определённым аналогично $\bar{\lambda}_p = 1 - \lambda_p$), и поэтому содержат в качестве множителя смешанное произведение $D = (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3)$. Отметим, что псевдоскаляр D нельзя выразить через внутренние переменные ξ из (1.89). Действительно, на рис. 1.3 видно, что углы θ_{ij} между векторами Якоби инвариантны относительно отражения любого из векторов относительно плос-

¹⁰Анализ различных вариантов выбора внутренних переменных в задаче трёх тел см., например, в работе [140].

кости, определённой оставшейся парой векторов. Отражённые конфигурации характеризуются одинаковыми внутренними переменными r_i и τ_i ($i = 1, 2, 3$), но соответствуют противоположным знакам псевдоскаляра D . Таким образом, скалярные функции $\psi_{l,k}^{(\lambda_p)} = \psi_{l,k}^{(p)}(\xi)$ с $\lambda_p = p$ зависят только от ξ , а из псевдоскалярных функций $\psi_{l,k}^{(\bar{p})}$ удобно выделить фактор D , т.е.,

$$\psi_{l,k}^{(\bar{p})} = D \phi_{l,k}(\xi), \quad (1.90)$$

где скаляры $\phi_{l,k}(\xi)$ являются функциями шести переменных ξ .

В Приложении В.5 приведено вычисление действия операторов Лапласа углового момента на функции $\psi_{l,k}^{(\bar{p})}$ и $\psi_{l,k}^{(p)}$. Например, согласно выражению (В.38) для оператора Лапласа, действие оператора кинетической энергии T на функции, зависящие от переменных (1.89), имеет вид,

$$T = - \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2r_i^2} \frac{\partial}{\partial r_i} r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} - \sum_{(ijk)} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{1}{r_i^2} + \frac{1}{r_j^2} \right) \frac{\partial}{\partial \tau_k} (1 - \tau_k^2) \frac{\partial}{\partial \tau_k} + \frac{\tau_i - \tau_j \tau_k}{r_i^2} \frac{\partial^2}{\partial \tau_j \partial \tau_k} \right], \quad (1.91)$$

где сумма содержит три члена с $(ijk) = (123), (231), (312)$.

Поскольку потенциалы в калибровке z -связи имеют более простой вид, ниже приведены соответствующие радиальные уравнения. Для скалярных функций $\psi_{l,k}^{(p)}$ имеем,

$$\begin{aligned} (T + V(\xi) - E) \psi_{l,k}^{(p)} + V_{rot}^{(zzx)} + \frac{ik}{1 - \tau_3^2} \left(\frac{\tau_3}{r_1^2} \hat{A}_2 - \frac{1}{r_2^2} \hat{A}_1 \right) \phi_{l,k} - \\ - \frac{i}{2r_1^2 \sqrt{1 - \tau_3^2}} \hat{A}_2 \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \phi_{l,k+1} + a_{k-1,1}^{(l)} \phi_{l,k-1} \right) + \\ + \frac{1}{r_1^2 \sqrt{1 - \tau_3^2}} \hat{A}_3 \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(p)} - a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(p)} \right) = 0. \quad (1.92) \end{aligned}$$

Явное выражение для потенциала $V_{rot}^{(zzx)}$ дано выражением (1.84), где $\psi_{l,k}^{(\lambda_p)} \rightarrow \psi_{l,k}^{(p)}$ и $\lambda_p = p$ (в соответствии с условием $(-1)^{\lambda_p+p} = 1$). Операторы \hat{A}_i в (1.92) определены равенствами¹¹,

$$\begin{aligned}\hat{A}_1 &= \tau_1 - \tau_2\tau_3 - D^2 \frac{\partial}{\partial \tau_1}, \\ \hat{A}_2 &= \tau_2 - \tau_1\tau_3 - D^2 \frac{\partial}{\partial \tau_2}, \\ \hat{A}_3 &= (\tau_1 - \tau_2\tau_3) \frac{\partial}{\partial \tau_2} + (1 - \tau_3^2) \frac{\partial}{\partial \tau_3}.\end{aligned}\tag{1.93}$$

Уравнения на псевдоскалярные функции имеют вид

$$\begin{aligned}\left[T + V(\xi) - E + \sum_{i=1}^3 \frac{1}{r_i^2} + \sum_{ijk} \left(\frac{1}{r_i^2} + \frac{1}{r_j^2} \right) \tau_k \frac{\partial}{\partial \tau_k} \right] \phi_{l,k} + V_{rot}^{(zzx)} - \\ - \frac{ik}{1 - \tau_3^2} \left(\frac{\tau_3}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial \tau_2} - \frac{1}{r_2^2} \frac{\partial}{\partial \tau_1} \right) \psi_{l,k}^{(p)} + \\ + \frac{i}{2r_1^2 \sqrt{1 - \tau_3^2}} \frac{\partial}{\partial \tau_2} \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(p)} + a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(p)} \right) - \\ - \frac{1}{r_1^2 \sqrt{1 - \tau_3^2}} \hat{A}_4 \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \phi_{l,k+1} - a_{k-1,1}^{(l)} \phi_{l,k-1} \right) = 0.\end{aligned}\tag{1.94}$$

Здесь, сумма идёт по индексам $(ijk) = (123), (231), (312)$, и потенциал $V_{rot}^{(zzx)}$ определён формулой (1.84), где $\psi_{l,k}^{(\lambda_p)} \rightarrow \phi_{l,k}$ и $\lambda_p = 0$ при $p = 1$ или $\lambda_p = 1$ при $p = 0$ (эти условия соответствуют псевдоскалярной чётности $\psi_{l,k}^{(\bar{p})}$). Оператор \hat{A}_4 в (1.94) равен

$$\hat{A}_4 = \tau_3 - (1 - \tau_3^2) \frac{\partial}{\partial \tau_3} + (\tau_1 - \tau_2\tau_3) \frac{\partial}{\partial \tau_2}.\tag{1.95}$$

Отметим, что два набора уравнений – (1.92) для скалярных, и (1.94) для псевдоскалярных функций, связаны между собой.

Чтобы выписать радиальные уравнения в случае трёх тел, нужно убрать из (1.92) все члены, содержащие переменные r_3 , τ_1 и τ_2 . Уравнение (1.94)

¹¹Эти равенства являются следствиями уравнений (B.42) Приложения B.5

в задаче трёх тел не определено, поскольку в этом случае псевдоскалярные функции $\psi_{l,k}^{(\bar{p})}$ не существуют и условие $\lambda_p = p$ выполняется всегда. В результате, приходим к системе радиальных уравнений, соответствующих калибровке z -связи и внутренним переменным $\xi = r_1, r_2, \tau = \cos \theta_{12}$,

$$\begin{aligned}
& -\frac{1}{2} \left[\sum_{i=1}^2 \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_i} r_i^2 \frac{\partial}{\partial r_i} + \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} (1 - \tau^2) \frac{\partial}{\partial \tau} - \frac{k^2}{(1 - \tau^2)} \right) - \right. \\
& \quad \left. - 2V(\xi) + 2E - \frac{l(l+1) - 2k^2}{r_1^2} \right] \psi_{l,k}^{(p)} - \\
& \quad - \frac{\tau}{2r_1^2 \sqrt{1 - \tau^2}} \left((k+1) a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(p)} + (k-1) a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(p)} \right) \\
& \quad + \frac{\sqrt{1 - \tau^2}}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(a_{-k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k+1}^{(p)} - a_{k-1,1}^{(l)} \psi_{l,k-1}^{(p)} \right) = 0. \quad (1.96)
\end{aligned}$$

Как видно, при $\tau = \pm 1$, что соответствует $\hat{\mathbf{r}}_1 = \pm \hat{\mathbf{r}}_2$, уравнения (1.92), (1.94), (1.96) содержат расходящиеся члены. Физически, эти расходимости связаны с невозможностью определить ВКС для данной конфигурации. Радиальные уравнения в калибровке МГОИ также содержат расходимости, которые соответствуют конфигурациям, при которых некоторые моменты инерции совпадают. Здесь не приведены явные выражения для радиальных уравнений калибровки МГОИ, ввиду их громоздкости. Для справки, запишем выражения для главных моментов инерции системы трёх тел,

$$\begin{aligned}
I_3 &= r_1^2 + r_2^2, \\
I_2 &= \frac{r_1^2 + r_2^2}{2} - \frac{1}{2} \sqrt{(r_1^2 - r_2^2)^2 + 4r_1^2 r_2^2 \cos^2 \theta_{12}}, \\
I_1 &= \frac{r_1^2 + r_2^2}{2} + \frac{1}{2} \sqrt{(r_1^2 - r_2^2)^2 + 4r_1^2 r_2^2 \cos^2 \theta_{12}}.
\end{aligned} \quad (1.97)$$

Выражения для колебательного гамильтониана H_0 , соответствующие вариантам выбора внутренних переменных в задачах трёх и четырёх тел, отличным от (1.89), можно найти, например, в работах [140, 148–152].

1.2. Калибровка Экарта

Если отклонения частиц от некоторых точек пространства невелико (такие точки назовём положениями равновесия), то удобно выбирать ВКС таким образом, чтобы при стремящихся к нулю отклонениях частиц от положений равновесия, кориолисов гамильтониан также стремился бы к нулю, а вращательный гамильтониан переходил бы в гамильтониан абсолютно твёрдого тела. (Это условие известно как условие Казимира [95].) Конструкция ВКС, удовлетворяющей указанному условию, является нетривиальной задачей, которая была решена К. Экартом в работах [22, 23]. В работе 1934 года [23] рассматривалась ВКС, определенная требованием диагональности тензора инерции относительно осей ВКС (калибровка МГОИ, см. п 1.1.4 выше). Однако, в последующей работе 1935 года [22], Экарт указал, что МГОИ не удовлетворяет условиям Казимира, и предложил определять ВКС специальным условием, которое в настоящее время называют условием Экарта. Соответствующая ВКС, известная как система Экарта, имеет корректный предел при исчезающе малых амплитудах колебаний частиц. Все рассуждения Экартом проводились в рамках классической механики.

Система Экарта (СЭ) изучалась многими авторами. Особенности СЭ в квантовой задаче трёх тел исследовались в работах [17, 96–99, 142]. В статьях [100, 101, 143] изучалась СЭ для планарных систем. Связь СЭ и углов Эйлера рассматривалась в работе [102]. СЭ при наличии молекулярных симметрий рассматривалась в [103, 144]. Различные абстрактные математические свойства ВКС, включая СЭ, обсуждались в работах [104–107, 113, 145, 146]. Колебательно-вращательное разложение гамильтониана, удовлетворяющее условиям Экарта при малых колебаниях, рассматривалось в рабо-

тах [27, 108, 141, 147]. Несмотря на то, что СЭ хорошо изучена для многих частных реализаций, соответствующее колебательно-вращательное разложение гамильтониана в общем случае N тел, справедливое при произвольном выборе внутренних координат, в общедоступной литературе отсутствует.

Обозначая вектор Якоби \mathbf{r}_α в положении равновесия как $\mathbf{r}_\alpha^{(eq)}$, условие Экарта выражается уравнением [22],

$$\sum_{\alpha=1}^n [\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \times \mathbf{r}_\alpha] = 0. \quad (1.98)$$

которое должно выполняться в осях ВКС.

В рамках классической механики, физический смысл условия Экарта¹² легко понять, рассматривая производную по времени от (1.98), вычисленную с точки зрения наблюдателя, находящегося в ВКС. Для этого наблюдателя равновесные векторы Якоби постоянны, $\dot{\mathbf{r}}_\alpha^{(eq)} = 0$, и дифференцирование (1.98) по времени даёт

$$\sum_{\alpha=1}^n [\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \times \dot{\mathbf{r}}_\alpha] = 0. \quad (1.99)$$

В пределе малых колебаний, $\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \approx \mathbf{r}_\alpha$ и (1.99) принимает вид условия $\mathbf{L} = 0$, где \mathbf{L} – вектор полного углового момента системы, вычисленный в осях ВКС. Таким образом, при нулевых колебаниях полный угловой момент в СЭ равен нулю, и СЭ вращается вместе с твёрдым телом.

В данном разделе получено колебательно-вращательное разложение гамильтониана, соответствующее СЭ. Рассмотрение проводится в рамках квантовой механики и процедура квантования классического гамильтониана, применяемая многими авторами в задаче отделения коллективных углов (см.,

¹²Часто в литературе для (1.98) используется термин “второе условие Экарта”. Поскольку первое условие Экарта является просто требованием отсутствия поступательного движения системы, ниже ур. (1.98) будем называть просто “условием Экарта”.

например, [21, 27, 141]), не используется.

В п. 1.2.1 получены выражения для производящих функций СЭ. Для СЭ более удобно ввести набор трёх векторов Экарта \mathbf{f}_i вместо векторов \mathbf{u}_i , использовавшихся в п. 1.1.3. Свойства векторов Экарта анализируются в п. 1.2.1. Ключевым моментом при вычислении гамильтонианов H_{cor} и H_{vib} является отыскание компонент векторов Экарта в осях СЭ, что математически сводится к задаче о вычислении корня 3×3 -матрицы. Эта задача решена в п. 1.2.2 с помощью теоремы Кэли-Гамильтона. При этом также получены явные выражения для базисных векторов \mathbf{e}_i СЭ. В п. 1.2.3 приведены явные выражения для параметров, входящих в определения операторов кориолисовой H_{cor} и вращательной H_{vib} кинетической энергии.

П. 1.2.4 посвящён выяснению свойств СЭ в пределе абсолютно твёрдого тела (“предел нулевых колебаний”). Там же показано, что предельные свойства СЭ в квантовом и классическом случаях совпадают.

В п. 1.2.5 рассматривается СЭ в случае планарных систем, когда все частицы движутся в одной плоскости. Важным частным случаем таких систем является задача трёх тел, которая детально рассматривается в п. 1.2.6. Там же приведены выражения для вращательного и кориолисова гамильтонианов, соответствующие внутренним переменным $r_1, r_2, \cos \theta$. Общие свойства гамильтониана, соответствующего СЭ в задаче четырёх тел, обсуждаются в п. 1.2.7.

1.2.1. Производящие функции, векторы и матрица Экарта

Определим, предварительно, вспомогательные векторы¹³ \mathbf{f}_i

$$\mathbf{f}_i = \eta_{\alpha i} \mathbf{r}_\alpha, \quad \eta_{\alpha i} = (\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \cdot \mathbf{e}_i), \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.100)$$

Здесь, $\mathbf{r}_\alpha^{(eq)}$ обозначает вектор Якоби \mathbf{r}_α в положении равновесия. $3n$ параметров $\eta_{\alpha i}$ являются константами, определяющими форму равновесной конфигурации системы; наложим на них следующие условия

$$J_{ij} \equiv \eta_{\alpha i} \eta_{\alpha j} = 0, \quad i < j = 2, 3. \quad (1.101)$$

Таким образом, всего имеется $3n - 3$ независимых величин $\eta_{\alpha i}$. Условия (1.101) означают, что в положении равновесия базисные векторы \mathbf{e}_i системы Экарта направлены вдоль главных осей тензора инерции, соответствующего равновесной конфигурации¹⁴

Векторы \mathbf{f}_i называют “векторами Экарта” [22, 144]; в общем случае они не являются ни единичными, ни ортогональными. В записи через векторы \mathbf{f}_i условие Экарта (1.98) принимает вид

$$[\mathbf{e}_j \times \mathbf{f}_j] = 0. \quad (1.102)$$

Умножая скалярно это уравнение на вектор \mathbf{e}_i , получаем явное выражение для производящих функций $Y^{(i)}$,

$$Y^{(i)} = (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j, \mathbf{f}_j) = \epsilon_{ijk} (\mathbf{f}_j \cdot \mathbf{e}_k) = 0, \quad (1.103)$$

или, в компонентах,

$$Y^{(1)} = (\mathbf{f}_2 \cdot \mathbf{e}_3) - (\mathbf{f}_3 \cdot \mathbf{e}_2) = 0.$$

¹³Здесь и далее по каждой паре повторяющихся индексов подразумевается суммирование: по индексам α, β, \dots в пределах от 1 до n , по индексам i, j, \dots от 1 до 3.

¹⁴Условия (1.101) не являются принципиальными и выбраны лишь из соображений удобства. Можно было бы потребовать, например, чтобы в положении равновесия $\mathbf{e}_1 = \hat{\mathbf{r}}_1^{(eq)}$, $\mathbf{e}_2 = [\hat{\mathbf{r}}_1^{(eq)} \times \hat{\mathbf{r}}_2^{(eq)}]$ и т.д.

Две оставшиеся функции $Y^{(2,3)}$ получаются циклической перестановкой индексов $(1, 2, 3)$. Как видно, уравнения, определяющие систему Экарта линейны относительно компонент векторов Якоби. Этот факт упрощает вычисление матрицы \mathbf{B} с производными второго порядка, поскольку в этом случае все члены в (1.62) исчезают.

Согласно (1.39), выражения для параметров $Y_{\alpha k}^{(i)}$ получаются дифференцированием равенства (1.103),

$$Y_{\alpha k}^{(i)} = \epsilon_{ijk}\eta_{\alpha j} = \epsilon_{ijk}(\mathbf{r}_{\alpha}^{(eq)} \cdot \mathbf{e}_j) = (\mathbf{r}_{\alpha}^{(eq)}, \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_i). \quad (1.104)$$

В соответствии с (1.103), базисные векторы системы Экарта удовлетворяют условиям

$$(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{f}_j) = (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{f}_i). \quad (1.105)$$

Удобно определить “матрицу Экарта” \mathbf{F} с компонентами $F_{ij} \equiv (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{f}_j)$. Таким образом, \mathbf{F} – действительная симметричная ($\mathbf{F}^t = \mathbf{F}$) матрица размерности 3×3 . Определитель и след матрицы Экарта обозначим как $F \equiv \det F_{ij} = (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3)$ и $\mathcal{F} \equiv F_{ii}$, соответственно.

Связь между векторами \mathbf{u}_i и векторами Экарта \mathbf{f}_i можно установить с помощью (1.44) и (1.104),

$$\mathbf{u}_i = \epsilon_{ijk}\eta_{\alpha j}[\mathbf{r}_{\alpha} \times \mathbf{e}_k] = \epsilon_{ijk}[\mathbf{f}_j \times \mathbf{e}_k]. \quad (1.106)$$

Это равенство позволяет проверить, что матрица \mathbf{U} , соответствующая системе Экарта, симметрична (ср. с (1.105))

$$(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{u}_j) = \epsilon_{jkl}\epsilon_{liq}(\mathbf{e}_q \cdot \mathbf{f}_k) = \delta_{ij}\mathcal{F} - (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{f}_i) = (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{u}_i). \quad (1.107)$$

Данное обстоятельство приводит к тому, что в любом выражении векторы \mathbf{e}_k и \mathbf{u}_k (или \mathbf{f}_k) можно менять местами. Например,

$$(\mathbf{a} \cdot \mathbf{u}_k)(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{b}) = (\mathbf{a} \cdot \mathbf{e}_k)(\mathbf{u}_k \cdot \mathbf{b}), \quad (1.108)$$

где \mathbf{a} и \mathbf{b} – произвольные векторы. Равенство (1.108) можно проверить разлагая \mathbf{u}_k по базисным векторам \mathbf{e}_i и применяя (1.107). Связь матрицы \mathbf{U} с матрицей Экарта \mathbf{F} следует из уравнения (1.107),

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} F_{22} + F_{33} & -F_{12} & -F_{13} \\ -F_{12} & F_{11} + F_{33} & -F_{23} \\ -F_{13} & -F_{23} & F_{11} + F_{22} \end{pmatrix} = \mathbf{E}\mathcal{F} - \mathbf{F}. \quad (1.109)$$

Из этого уравнения следует ещё одно соотношение, связывающее векторы \mathbf{u}_i и \mathbf{f}_i ,

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{e}_i\mathcal{F} - \mathbf{f}_i. \quad (1.110)$$

В свою очередь, это равенство можно использовать для вычисления “объема” системы Экарта в терминах векторов \mathbf{f}_i . Опуская детали несложных вычислений, приведём окончательный результат

$$U = \frac{1}{2}\mathcal{F} \left(\mathcal{F}^2 - \sum_k f_k^2 \right) - F. \quad (1.111)$$

1.2.2. Вычисление базисных векторов и матрицы Экарта

Чтобы получить явное выражение для базисных векторов \mathbf{e}_i системы Экарта, необходимо установить их связь с векторами Экарта \mathbf{f}_i . Для этого разложим векторы Экарта по базису векторов \mathbf{e}_i ,

$$\mathbf{f}_i = F_{ik}\mathbf{e}_k, \quad \mathbf{e}_k = (F^{-1})_{ki}\mathbf{f}_i, \quad (1.112)$$

Скалярное умножение первого уравнения на \mathbf{f}_j даёт

$$(\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{f}_j) = F_{ik}F_{jk'}(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_{k'}).$$

Ортонормированность векторов \mathbf{e}_k позволяет переписать это уравнение в матричном виде

$$F_{ik}F_{kj} = \Phi_{ij}, \quad \Phi_{ij} \equiv (\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{f}_j). \quad (1.113)$$

Таким образом, матрица Экарта \mathbf{F} является квадратным корнем из матрицы Грама Φ .

В оригинальной работе [22] для вычисления квадратного корня из Φ предлагалось решать задачу на собственные значения и векторы матрицы Φ . Действительно, Φ является вещественной симметричной матрицей и поэтому полностью определяется своими собственными значениями и векторами. Понятно, что собственные векторы матрицы Экарта $\mathbf{F} = \sqrt{\Phi}$ и матрицы Грама Φ совпадают, а их собственные значения F_k и Φ_k связаны равенством

$$F_k = \sqrt{\Phi_k}, \quad (1.114)$$

(Для определённости выбрана положительная ветвь квадратного корня.)

Обратная матрица Экарта \mathbf{F}^{-1} также симметрична и её собственные значения равны $1/\sqrt{\Phi_k}$ при условии $\Phi_k \neq 0$. Равенство нулю какого-либо параметра Φ_k означает, что все три вектора Экарта \mathbf{f}_i лежат в одной плоскости. Отсюда, однако, не обязательно следует что все частицы двигаются в одной плоскости.

Сделаем несколько замечаний относительно свойств собственных значений матрицы Грама Φ . Величины Φ_k являются решениями характеристического уравнения $\det(\Phi_{ij} - \Phi_k \delta_{ij}) = 0$, которое в явном виде можно представить как

$$\begin{aligned} \Phi_k^3 - \Phi_k^2(f_1^2 + f_2^2 + f_3^2) + \Phi_k ([\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2]^2 + [\mathbf{f}_2 \times \mathbf{f}_3]^2 + [\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_3]^2) - \\ - (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3)^2 = 0. \end{aligned} \quad (1.115)$$

Из этого уравнения следует, что собственные значения Φ_k удовлетворяют

системе уравнений

$$\begin{aligned}\Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 &= f_1^2 + f_2^2 + f_3^2, \\ \Phi_1\Phi_2 + \Phi_2\Phi_3 + \Phi_1\Phi_3 &= [\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2]^2 + [\mathbf{f}_2 \times \mathbf{f}_3]^2 + [\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_3]^2, \\ \Phi_1\Phi_2\Phi_3 &= (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3)^2,\end{aligned}\tag{1.116}$$

Решения уравнения (1.115) имеют особенно простой вид в случае копланарных векторов Экарта. При этом смешанное произведение $(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3) = 0$ и характеристическое уравнение (1.115) сводится к квадратному, так что собственные значения матрицы Φ равны

$$\begin{aligned}\Phi_3 &= 0, \\ \Phi_{1,2} &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 f_i^2 \pm \frac{1}{2} \sqrt{\sum_{i,j=1}^3 (f_i^2 f_j^2 - 2[\mathbf{f}_i \times \mathbf{f}_j]^2)} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 f_i^2 \pm \frac{1}{2} \sqrt{\sum_{i,j=1}^3 f_i^2 f_j^2 \cos(2\phi_{ij})},\end{aligned}\tag{1.117}$$

где ϕ_{ij} – угол между векторами \mathbf{f}_i и \mathbf{f}_j .

Существует простой способ отыскания квадратного корня матрицы Грама Φ , не связанный с решением задачи на собственные значения и векторы. Способ основан на использовании теоремы Кэли-Гамильтона (1.57), согласно которой любая целая степень 3×3 -матрицы выражается через комбинацию 0-, 1- и 2-ой степеней той же матрицы. Например, четвёртая степень \mathbf{F}^4 матрицы \mathbf{F} выражается по формуле

$$\mathbf{F}^4 = \mathbf{E}F\mathcal{F} + \mathbf{F} \left(F + \mathcal{F} \frac{\text{tr } \mathbf{F}^2 - \mathcal{F}^2}{2} \right) + \mathbf{F}^2 \frac{\text{tr } \mathbf{F}^2 + \mathcal{F}^2}{2},\tag{1.118}$$

где $F = \det \mathbf{F}$ и $\mathcal{F} = \text{tr } \mathbf{F}$. Замечая, что $\mathbf{F}^2 = \Phi$, после несложных преобразований получаем

$$\mathbf{F} = \frac{2}{C} \left(\Phi^2 - \Phi \frac{\text{tr } \Phi + \mathcal{F}^2}{2} - \mathbf{E}F\mathcal{F} \right),\tag{1.119}$$

где скалярный коэффициент C определен равенством

$$C = 2F + \mathcal{F} \operatorname{tr} \Phi - \mathcal{F}^3. \quad (1.120)$$

Очевидно, что для конфигураций при которых $C = 0$, формула (1.119) неприменима. С целью выяснить физический смысл условия $C = 0$, перепишем C через собственные значения матрицы Грама (см. (1.114)-(1.116) выше),

$$C = -2 \left(2F + \sum_{i<j=2}^3 (\Phi_i \sqrt{\Phi_j} + \Phi_j \sqrt{\Phi_i}) \right).$$

Поскольку собственные значения Φ_i положительны, получаем что условие $C = 0$ выполняется если по крайней мере два из трёх собственных значений матрицы Φ равны нулю. Из уравнения (1.116) видно, что такая ситуация реализуется только если все три вектора Экарта \mathbf{f}_i коллинеарны. Таким образом, конфигурации $(\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3) = 0$ соответствуют калибровочными расходимостям ВКС Экарта.

Единственной неопределённой величиной в уравнении (1.119) является след матрицы Экарта \mathcal{F} . Для отыскания \mathcal{F} можно либо воспользоваться соотношением $\mathcal{F} = \sqrt{\Phi_1} + \sqrt{\Phi_2} + \sqrt{\Phi_3}$ (для определённости, взята положительная ветвь корня), либо решить уравнение

$$\mathcal{F}^4 - \mathcal{F}^2(2\operatorname{tr} \Phi) - \mathcal{F}(8F) + [2\operatorname{tr} \Phi^2 - (\operatorname{tr} \Phi)^2] = 0, \quad (1.121)$$

которое получается при взятии следа матричного равенства (1.118). Уравнение (1.121) является уравнением 4-го порядка и имеет четыре решения. Поскольку уравнение $F^2 = \det \Phi$ имеет два решения, заключаем что произвольная 3×3 -матрица имеет 8 квадратных корней. В рассматриваемом случае знак F фиксирован условием $F = (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3)$ (см. замечание после (1.105)). Выбор частного решения уравнения (1.121) не ограничен никакими условиями, за исключением очевидного требования вещественности величины \mathcal{F} .

Выражение для обратной матрицы \mathbf{F}^{-1} можно получить с помощью уравнения (1.58),

$$\mathbf{F}^{-1} = \frac{1}{F} \left(\mathbf{E} \frac{\mathcal{F}^2 - \text{tr } \Phi}{2} - \mathbf{F} \mathcal{F} + \Phi \right). \quad (1.122)$$

Отсюда видно, что хотя квадратный корень (1.119) матрицы Грама всегда существует, его обращение возможно только при ненулевом определителе $\det \Phi$.

Выражения (1.112), (1.122) и (1.119) позволяют записать в явном виде базисные векторы системы Экарта. Опуская детали довольно громоздких манипуляций с комбинациями векторных произведений, приведём окончательный результат,

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \frac{2}{C} \left\{ \mathbf{f}_1 \frac{\text{tr } \Phi - \mathcal{F}^2}{2} + [\mathbf{f}_2 \times [\mathbf{f}_2 \times \mathbf{f}_1]] + [\mathbf{f}_3 \times [\mathbf{f}_3 \times \mathbf{f}_1]] - \mathcal{F}[\mathbf{f}_2 \times \mathbf{f}_3] \right\}, \\ \mathbf{e}_2 &= \frac{2}{C} \left\{ \mathbf{f}_2 \frac{\text{tr } \Phi - \mathcal{F}^2}{2} + [\mathbf{f}_1 \times [\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2]] + [\mathbf{f}_3 \times [\mathbf{f}_3 \times \mathbf{f}_2]] - \mathcal{F}[\mathbf{f}_3 \times \mathbf{f}_1] \right\}, \\ \mathbf{e}_3 &= \frac{2}{C} \left\{ \mathbf{f}_3 \frac{\text{tr } \Phi - \mathcal{F}^2}{2} + [\mathbf{f}_2 \times [\mathbf{f}_2 \times \mathbf{f}_3]] + [\mathbf{f}_1 \times [\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_3]] - \mathcal{F}[\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2] \right\}, \end{aligned} \quad (1.123)$$

где коэффициент C определён формулой (1.120).

Несмотря на то, что при $F = 0$ уравнения $\mathbf{e}_i = \mathbf{F}_{ik}^{-1} \mathbf{f}_k$ теряют смысл (т.к. при $F = 0$ обратная матрица \mathbf{F}^{-1} не существует), записанные выше выражения для базисных векторов \mathbf{e}_i вполне определены. Этот факт имеет простое геометрическое истолкование. А именно, допустим что векторы \mathbf{f}_1 и \mathbf{f}_2 коллинеарны, т.е. $F = 0$. Но тогда неколлинеарные векторы \mathbf{f}_1 и \mathbf{f}_3 вместе с векторным произведением $[\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_3]$ образуют базис, по которому можно разложить векторы \mathbf{e}_i . В заключение отметим, что матрица \mathbf{U} легко вычисляется с помощью соотношений (1.109) и (1.119),

$$\mathbf{U}^{-1} = \frac{1}{U} \left(\mathbf{E} \frac{\mathcal{F}^2 - \text{tr } \Phi}{2} + \Phi \right), \quad (1.124)$$

где определитель U задан формулой (1.111).

1.2.3. Вращательный и кориолисов гамильтонианы

Теперь обратимся к вычислению матрицы $\mathbf{V}^{(s)}$. Для начала заметим, что условия (1.101), налагаемые на равновесные параметры $\eta_{\alpha i}$, приводят к тому, что матрица $Y_{pp'}$ в (1.54) диагональна. Собственные числа и векторы матрицы J_{ik} в (1.101) обозначим J_k . Отметим, что собственные значения матрицы J_{ik} связаны с главными моментами инерции в положении равновесия соотношением¹⁵ $I_1 = J_2 + J_3$ (и аналогично для I_2, I_3).

Используя определение J_{ik} и равенство (1.104) для $Y_{\alpha k}^{(i)}$, запишем цепочку равенств

$$Y_{pp'} = Y_{\alpha k}^{(p)} Y_{\alpha k}^{(p')} = \epsilon_{pjk} \epsilon_{p'j'k} \eta_{\alpha j} \eta_{\alpha j'} = \delta_{pp'} \sum_{i=1}^3 J_i - \delta_{pp'} J_p = \delta_{pp'} I_p. \quad (1.125)$$

Таким образом, для системы Экарта матрица \mathbf{Y} совпадает с тензором инерции в положении равновесия, $\mathbf{Y} = \mathbf{I}$.

Симметричность матрицы \mathbf{U} и диагональность матрицы \mathbf{Y} приводит к упрощению матрицы \mathcal{I} , входящей в выражение (1.55) для вращательного гамильтониана H_{rot} . Опуская детали несложных преобразований, приведём выражение для элементов матрицы \mathcal{I} ,

$$\mathcal{I}_{ij} = \delta_{ij} \frac{f^2 I_i}{U^2} + f \Phi_{ij} \frac{I_i + I_j}{U^2} + \sum_{q=1}^3 \frac{I_q}{U^2} \Phi_{iq} \Phi_{jq}, \quad (1.126)$$

где использовано обозначение $f = (\mathcal{F}^2 - \text{tr } \Phi)/2$ и U задано в (1.111).

Матрицу $C_{\gamma k}$, определяющую кориолисов гамильтониан (см. (1.48), (1.25)), удобно записать в виде

$$\begin{aligned} C_{\gamma k} &= -(\mathbf{U}^{-1})_{kq} Y_{\alpha i}^{(q)} (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\alpha}) \xi_{\gamma} = -(\mathbf{U}^{-1})_{kq} K_q^{(\gamma)}, \\ K_q^{(\gamma)} &= \epsilon_{ijq} \eta_{\alpha i} (\mathbf{e}_j \cdot \nabla_{\alpha}) \xi_{\gamma}, \end{aligned} \quad (1.127)$$

¹⁵В отличие от п. 1.1.4, всюду в данном разделе матрица J_{ik} и величины I_k, J_k являются константами, не зависящими от внутренних переменных.

где обратная матрица \mathbf{U}^{-1} определена формулой (1.124) предыдущего раздела.

Заметим, что если одна из внутренних координат (пусть ξ_1) является функцией только гиперрадиуса $R = (r_1^2 + r_2^2 + \dots + r_n^2)^{1/2}$, то соответствующий ей параметр $K_q^{(1)}$ обращается в ноль. Действительно, пусть $\xi_1 = R$. Тогда

$$K_q^{(1)} = \epsilon_{ijq} \eta_{\alpha i} (\mathbf{e}_j \cdot \nabla_\alpha) R = \frac{1}{R} \epsilon_{ijq} \eta_{\alpha i} (\mathbf{e}_j \cdot \mathbf{r}_\alpha) = \epsilon_{ijq} F_{ji} = 0, \quad (1.128)$$

поскольку $\eta_{\alpha i} \mathbf{r}_\alpha = \mathbf{f}_i$ и $F_{ji} = F_{ij}$. Таким образом, в случае ВКС Экарта кориолисов оператор действует только на гиперугловые внутренние переменные.

Вычисление параметров B_k кориолисова гамильтониана, определённых в общем случае формулами (1.66), (1.67), упрощается тем, что производящие функции для системы Экарта линейны по компонентам векторов Якоби, так что третье слагаемое в правой части (1.66) выпадает.

С учётом выражения (1.104) для производных $Y_{\alpha k}^{(i)}$, преобразуем первое слагаемое в (1.66),

$$\begin{aligned} Y_{\alpha k}^{(i)} (\mathbf{r}_\alpha \cdot \mathbf{e}_j) B_{jk}^{(s)} &= \epsilon_{ipk} F_{pj} B_{jk}^{(s)} = \\ &= \epsilon_{ipk} [(\mathbf{E} \mathcal{F} - \mathbf{U}) (\mathbf{U}^{-1} \mathbf{Y} \mathbf{U}^{-1} - \mathbf{E} \operatorname{tr} \mathbf{U}^{-1} \mathbf{Y} \mathbf{U}^{-1})]_{pk}. \end{aligned} \quad (1.129)$$

Здесь, при перемножении члены с единичной матрицей обращаются в ноль, поскольку умножаются на антисимметричный тензор ϵ_{ipk} . В результате, выражение (1.129) приводится к виду

$$\epsilon_{ipk} Y_{pj} (\mathbf{U}^{-1})_{jk} = \epsilon_{ijk} I_j (\mathbf{U}^{-1})_{jk}. \quad (1.130)$$

Преобразуем второй член в правой части (1.66),

$$\epsilon_{pj k} Y_{\beta k}^{(i)} Y_{\beta j}^{(q)} (\mathbf{U}^{-1})_{pq} = \epsilon_{pj k} \epsilon_{imk} \epsilon_{q m' j} \eta_{\beta m} \eta_{\beta m'} (\mathbf{U}^{-1})_{pq} = \epsilon_{ipq} J_p (\mathbf{U}^{-1})_{pq}. \quad (1.131)$$

Теперь можно написать выражение для параметра B_k из (1.67),

$$B_k = \epsilon_{ipq} J_p (\mathbf{U}^{-1})_{ik} (\mathbf{U}^{-1})_{pq}. \quad (1.132)$$

Подставляя сюда явное выражение (1.124) для обратной матрицы \mathbf{U}^{-1} , после несложных преобразований получаем выражения для компонент B_k ,

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{I_3 - I_2}{U^2} \left((f + \Phi_{11}) \Phi_{23} - \Phi_{12} \Phi_{13} \right), \\ B_2 &= \frac{I_1 - I_3}{U^2} \left((f + \Phi_{22}) \Phi_{13} - \Phi_{12} \Phi_{23} \right), \\ B_3 &= \frac{I_2 - I_1}{U^2} \left((f + \Phi_{22}) \Phi_{12} - \Phi_{13} \Phi_{23} \right), \end{aligned} \quad (1.133)$$

где $f = (\mathcal{F}^2 - \text{tr } \Phi)/2$.

1.2.4. Предел абсолютно твёрдого тела для системы Экарта

Рассмотрим предел жёсткого тела для колебательно-вращательного разложения гамильтониана, т.е. предел колебаний с бесконечно малой амплитудой, когда единственно возможным движением является вращение системы как целого.

Предел вращательного гамильтониана

Согласно формуле (1.55), предельный переход в гамильтониане H_{rot} сводится к вычислению равновесных значений элементов матрицы \mathcal{I} , определённой в случае ВКС Экарта формулой (1.126).

Вычислим выражение для матрицы Грама $\Phi_{ij} = (\mathbf{f}_i \cdot \mathbf{f}_j)$ в положении равновесия, когда $\mathbf{r}_\alpha = \mathbf{r}_\alpha^{(eq)}$. Для этого воспользуемся определением векторов Экарта (1.100),

$$\Phi_{ij} = \eta_{\alpha i} \eta_{\beta j} (\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \cdot \mathbf{r}_\beta^{(eq)}) = (\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{r}_\alpha^{(eq)}) (\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \cdot \mathbf{r}_\beta^{(eq)}) (\mathbf{r}_\beta^{(eq)} \cdot \mathbf{e}_j). \quad (1.134)$$

С учётом определения матрицы J_{ik} и свойств её собственных векторов, это равенство принимает компактный вид,

$$\Phi_{ij} = \delta_{ij} J_i^2. \quad (1.135)$$

Таким образом, в положении равновесия матрица Грама Φ диагональна, откуда следует что матрицы \mathbf{F} и \mathbf{U} также диагональны. Из (1.114) и (1.109) получаем явные выражения для этих матриц

$$\mathbf{F} = \text{diag}(J_1, J_2, J_3), \quad \mathbf{U} = \text{diag}(I_1, I_2, I_3). \quad (1.136)$$

Таким образом, в положении равновесия матрица \mathbf{U} совпадает с тензором инерции системы.

Подстановка обратной матрицы $\mathbf{U}^{-1} = \text{diag}(I_1^{-1}, I_2^{-1}, I_3^{-1})$ в выражение (1.56) для матрицы \mathcal{I} , с учётом равенства $\mathbf{Y} = \mathbf{I}$ (см. (1.125)), даёт

$$\mathcal{I} = \text{diag} \left(\frac{1}{I_1}, \frac{1}{I_2}, \frac{1}{I_3} \right). \quad (1.137)$$

Подставляя это выражение в формулу (1.55) для вращательного гамильтониана H_{rot} , получаем известное выражение для гамильтониана абсолютно твёрдого тела,

$$H_{rot} = \frac{L_x^2}{2I_x} + \frac{L_y^2}{2I_y} + \frac{L_z^2}{2I_z}, \quad (1.138)$$

где индексы осей 1, 2, 3 были заменены на x, y, z , соответственно.

Таким образом доказано, что в положении равновесия (т.е. при нулевых колебаниях) вращательный гамильтониан системы Экарта совпадает с гамильтонианом абсолютно твёрдого тела.

Отметим также, что из приведённых выше уравнений следует, что в положении равновесия векторы \mathbf{e}_i , \mathbf{u}_i и векторы Экарта \mathbf{f}_i совпадают по направлению,

$$\mathbf{u}_i = I_i \mathbf{e}_i, \quad \mathbf{f}_i = J_i \mathbf{e}_i. \quad (1.139)$$

Предел кориолисова гамильтониана

Обратимся к анализу кориолисова гамильтониана H_{cor} . Для начала заметим, что, согласно (1.135), параметры B_k (определённые равенствами (1.133)) обращаются в ноль в положении равновесия. Поэтому, H_{cor} определяется только параметрами $C_{\gamma k}$, заданными формулой (1.25). Из этой формулы, и выражения (1.104) для $Y_{\alpha q}^{(m)}$, следует цепочка равенств для $C_{\gamma k}$,

$$\begin{aligned} C_{\gamma k} &= -\frac{1}{2I_m} \epsilon_{jlm} \epsilon_{kjl} Y_{\alpha q}^{(m)} (\mathbf{e}_q \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma = \frac{1}{2I_k} (\mathbf{r}_\alpha^{(eq)}, \mathbf{e}_k, \mathbf{e}_q) (\mathbf{e}_q \cdot \nabla_\alpha) \xi_\gamma \\ &= -\frac{1}{2I_k} (\mathbf{e}_k, \mathbf{r}_\alpha^{(eq)}, \nabla_\alpha) \xi_\gamma. \end{aligned} \quad (1.140)$$

(Нет суммы по k !) При малых колебаниях, отклонения вектора Якоби \mathbf{r}_α от его равновесного значения $\mathbf{r}_\alpha^{(eq)}$ малы: $\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \approx \mathbf{r}_\alpha$, и для смешанного произведения в правой части (1.140) имеем

$$(\mathbf{e}_k, \mathbf{r}_\alpha^{(eq)}, \nabla_\alpha) \approx (\mathbf{e}_k, \mathbf{r}_\alpha, \nabla_\alpha) = i(\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{L}) = iL_k,$$

где L_k – k -тая компонента оператора полного углового момента \mathbf{L} , вычисленная в осях системы Экарта. Теперь заметим, что $L_k \xi_\gamma = 0$, поскольку оператор полного углового момента действует только на коллективные углы, от которых внутренние переменные ξ не зависят. Таким образом, при малых колебаниях параметры $C_{\gamma k}$ пропорциональны амплитуде колебаний.

Проведённое выше рассмотрение доказывает, что в пределе малых колебаний кориолисов гамильтониан исчезает, а вращательный гамильтониан совпадает с гамильтонианом абсолютно твёрдого тела. Тем самым также доказано, что свойства ВКС Экарта в квантовой и классической задаче N тел идентичны.

1.2.5. Планарные системы

Если движение частиц ограничено одной плоскостью, то вычисление параметров кориолисова и вращательного гамильтонианов для ВКС Экарта существенно упрощается. Как было показано в предыдущих разделах, данная задача сводится к вычислению матрицы Экарта \mathbf{F} , которая определяет матрицу \mathbf{U} , и следовательно, гамильтонианы H_{cor} и H_{rot} .

Очевидно, что для планарных систем равновесная конфигурация также является планарной. Поэтому, векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 лежат в плоскости равновесной конфигурации, а третий вектор $\mathbf{e}_3 = [\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2]$ направлен перпендикулярно к ней. Согласно определению (1.100) векторов Экарта имеем,

$$\mathbf{f}_3 = \eta_{\alpha 3} \mathbf{r}_\alpha = (\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \cdot \mathbf{e}_3) \mathbf{r}_\alpha = 0.$$

Как следствие, получаем выражение для матрицы Грама,

$$\Phi = \begin{pmatrix} f_1^2 & (\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_2) & 0 \\ (\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_2) & f_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.141)$$

Отсюда видно, что матрица Грама Φ и квадратный корень из неё \mathbf{F} являются, по сути, двумерными матрицами что и подразумевается далее в тексте этого и следующего разделов. Для двумерных матриц теорема Кэли-Гамильтона имеет вид

$$\mathbf{F}^2 = \mathbf{F}(\text{tr } \mathbf{F}) - \mathbf{E}(\det \mathbf{F}). \quad (1.142)$$

Это равенство справедливо для произвольной матрицы 2×2 .

Замечая, что $\mathbf{F}^2 = \Phi$ и $F = \det \mathbf{F} = \sqrt{\det \Phi} = f_1 f_2 \sin \phi$, где ϕ – угол между векторами \mathbf{f}_1 и \mathbf{f}_2 , преобразуем (1.142),

$$\mathbf{F} = \frac{1}{F} \left(\Phi + \mathbf{E} \sqrt{\det \Phi} \right). \quad (1.143)$$

Здесь $\det \Phi$ обозначает определитель 2×2 -блока матрицы в правой части (1.141)). Выражение для следа \mathcal{F} матрицы Экарта \mathbf{F} можно получить, вычислив след матричного равенства (1.143). После несложных преобразований имеем,

$$\mathcal{F} = \sqrt{\operatorname{tr} \Phi + 2\sqrt{\det \Phi}} = \sqrt{f_1^2 + f_2^2 + 2|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2|}. \quad (1.144)$$

В общем случае, существует 4 корня из симметричной двумерной матрицы. Выражение (1.143) соответствует положительной ветви корня, возникающего при вычислении определителя $F = \det \mathbf{F}$.

Умножая (1.142) на \mathbf{F}^{-1} , получаем выражение для обратной матрицы

$$\mathbf{F}^{-1} = \frac{\mathbf{E} \operatorname{tr} \mathbf{F} - \mathbf{F}}{F} = \frac{\mathbf{U}'}{F}, \quad (1.145)$$

где матрица \mathbf{U}' представляет собой двумерный левый верхний блок 3×3 -матрицы \mathbf{U} (см. (1.109)).

Формулы (1.143), (1.145) позволяют записать в явном виде элементы матрицы \mathbf{F} ,

$$\mathbf{F} = \frac{f_1 f_2}{\mathcal{F}} \begin{pmatrix} \frac{f_1}{f_2} + \sin \phi & \cos \phi \\ \cos \phi & \frac{f_2}{f_1} + \sin \phi \end{pmatrix}. \quad (1.146)$$

Явное выражение для обратной матрицы \mathbf{F}^{-1} позволяет выписать решение системы уравнений (1.112), связывающей векторы декартового базиса \mathbf{e}_i с векторами Экарта \mathbf{f}_i ,

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \frac{1}{\mathcal{F}} \left(\mathbf{f}_1 + \frac{[\mathbf{f}_2 \times [\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2]]}{|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2|} \right), \\ \mathbf{e}_2 &= \frac{1}{\mathcal{F}} \left(\mathbf{f}_2 - \frac{[\mathbf{f}_1 \times [\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2]]}{|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2|} \right). \end{aligned} \quad (1.147)$$

Как легко проверить, базисные векторы \mathbf{e}_1 , \mathbf{e}_2 системы Экарта действительно являются ортонормированными. Отметим также, что приведённые выражения (1.147) совпадают с выражениями (1.123) взятыми при $\mathbf{f}_3 = 0$.

Матрица \mathbf{U} вычисляется по формулам (1.109) и (1.146),

$$\mathbf{U} = \frac{f_1 f_2}{\mathcal{F}} \begin{pmatrix} \frac{f_2}{f_1} + \sin \phi & -\cos \phi & 0 \\ -\cos \phi & \frac{f_1}{f_2} + \sin \phi & 0 \\ 0 & 0 & \frac{\mathcal{F}^2}{f_1 f_2} \end{pmatrix}. \quad (1.148)$$

Отсюда видно, что, несмотря на равенство нулю определителя трёхмерной матрицы \mathbf{F} , определитель матрицы \mathbf{U} отличен от нуля и равен

$$U = \mathcal{F} f_1 f_2 \sin \phi = \mathcal{F} |\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2|. \quad (1.149)$$

Отметим также, что параметр f , входящий в формулы (1.126) и (1.133) для \mathcal{I} и B_k , в случае планарных систем есть $f = |\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2|$.

Поскольку для планарных систем матричные элементы Φ_{ij} с $i = 3$ или $j = 3$ равны нулю, из (1.133) следует, что среди параметров B_i кориолисова гамильтониана (1.31), отличен от нуля только параметр B_3 , который равен

$$B_3 = \frac{I_2 - I_1}{\mathcal{F}^2} \frac{(\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_2)}{|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2|}. \quad (1.150)$$

Выражения для элементов матрицы \mathcal{I} , определяющей вращательный гамильтониан (1.55), получаются из уравнений (1.126) и (1.141),

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{11} &= \frac{I_1}{U^2} (|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2| + f_1^2)^2 + \frac{I_2}{U^2} (\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_2)^2, \\ \mathcal{I}_{22} &= \frac{I_2}{U^2} (|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2| + f_2^2)^2 + \frac{I_1}{U^2} (\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_2)^2, \\ \mathcal{I}_{12} &= \frac{(\mathbf{f}_1 \cdot \mathbf{f}_2)}{U^2} (I_1 (|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2| + f_1^2) + I_2 (|\mathbf{f}_1 \times \mathbf{f}_2| + f_2^2)), \\ \mathcal{I}_{33} &= \frac{I_1 + I_2}{\mathcal{F}^2}. \end{aligned} \quad (1.151)$$

Остальные элементы матрицы \mathcal{I} равны нулю.

Уравнения (1.151) полностью определяют вращательный гамильтониан H_{rot} . Кориолисов гамильтониан H_{cor} содержит, наряду с параметром B_3 из

(1.150), также матрицу $C_{\gamma k}$. Для полного определения $C_{\gamma k}$ необходимо явным образом выбрать набор внутренних переменных. Вычисление $C_{\gamma k}$ производится затем с помощью соотношений (1.127), (1.147) и (1.148).

1.2.6. Задача трёх тел

Простейшим примером планарной системы является система трёх тел. В этом случае выражения для вращательного и колебательно-вращательного гамильтонианов имеют наиболее простой вид. Внутренняя динамика системы трёх тел описывается *двумя* векторами Якоби $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, так что условие Экарта (1.98) принимает вид

$$[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_1^{(eq)}] + [\mathbf{r}_2 \times \mathbf{r}_2^{(eq)}] = 0. \quad (1.152)$$

Умножая это равенство скалярно на \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , получаем

$$([\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{r}_1^{(eq)}) = ([\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{r}_2^{(eq)}) = 0,$$

т.е. векторы Якоби $\mathbf{r}_1^{(eq)}, \mathbf{r}_2^{(eq)}$ равновесной конфигурации лежат в той же плоскости, что и векторы $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. В той же плоскости лежат и базисные векторы \mathbf{e}_1 и \mathbf{e}_2 , которые выберем направленными вдоль главных осей равновесного тензора инерции. Третий вектор \mathbf{e}_3 направлен перпендикулярно плоскости движения частиц и равен $\mathbf{e}_3 = [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] / \sin \theta$, где θ – угол между векторами Якоби \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 .

Связь векторов Экарта \mathbf{f}_i с векторами Якоби дана уравнениями (1.100), которые в рассматриваемом случае имеют вид,

$$\begin{aligned} \mathbf{f}_1 &= \eta_{11}\mathbf{r}_1 + \eta_{21}\mathbf{r}_2, & \mathbf{r}_1 &= \frac{\eta_{22}\mathbf{f}_1 - \eta_{21}\mathbf{f}_2}{\eta}, \\ \mathbf{f}_2 &= \eta_{12}\mathbf{r}_1 + \eta_{22}\mathbf{r}_2, & \mathbf{r}_2 &= \frac{\eta_{11}\mathbf{f}_2 - \eta_{12}\mathbf{f}_1}{\eta}, \end{aligned} \quad (1.153)$$

где $\eta = \eta_{11}\eta_{22} - \eta_{12}\eta_{21}$ – определитель 2×2 -матрицы, составленной из величин $\eta_{\alpha k}$.

Из определения (1.100) параметров $\eta_{\alpha k}$ вытекает, что определитель η совпадает с модулем векторного произведения $[\mathbf{r}_1^{(eq)} \times \mathbf{r}_2^{(eq)}]$, в то время как комбинация $(\eta_{12}\eta_{22} + \eta_{21}\eta_{11})$ равна скалярному произведению $(\mathbf{r}_1^{(eq)} \cdot \mathbf{r}_2^{(eq)})$, т.е.

$$\eta = r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \sin \theta_{eq}, \quad \eta_{12}\eta_{22} + \eta_{21}\eta_{11} = r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \cos \theta_{eq}, \quad (1.154)$$

где θ_{eq} – величина угла θ в положении равновесия.

Выражение для \mathcal{F}^2 через равновесные параметры имеет вид,

$$\mathcal{F}^2 = (r_1 r_1^{(eq)})^2 + (r_2 r_2^{(eq)})^2 + 2r_1 r_2 r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \cos(\theta - \theta_{eq}). \quad (1.155)$$

Отсюда следует, что в положении равновесия $\mathcal{F} = (r_1^{(eq)})^2 + (r_2^{(eq)})^2$, т.е. \mathcal{F} равен квадрату равновесного гиперрадиуса.

Матрица Грама Φ для системы трёх тел дана равенством (1.141) предыдущего раздела. Определитель матрицы \mathbf{U} равен $U = \eta \mathcal{F} r_1 r_2 \sin \theta$ (см. (1.149)) и, поскольку матрица Экарта сингулярна при $U = 0$, получаем, что в задаче трёх тел калибровочные расходимости системы Экарта присутствуют при $r_1 = 0$, $r_2 = 0$ или $\theta = 0, \pi$. Последнее условие означает $\hat{\mathbf{r}}_1 = \pm \hat{\mathbf{r}}_2$, т.е. коллинеарную конфигурацию.

Явные выражения для $\mathbf{e}_{1,2}$ через векторы Якоби $\mathbf{r}_{1,2}$ следуют из (1.147) и (1.153). После несложных преобразований имеем,

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= \frac{\mathbf{r}_1}{\mathcal{F}} \left(\eta_{11} + \frac{\eta_{12} r_1 \cos \theta + \eta_{22} r_2}{r_1 \sin \theta} \right) + \frac{\mathbf{r}_2}{\mathcal{F}} \left(\eta_{21} - \frac{\eta_{22} r_2 \cos \theta + \eta_{12} r_1}{r_2 \sin \theta} \right), \\ \mathbf{e}_2 &= \frac{\mathbf{r}_1}{\mathcal{F}} \left(\eta_{12} - \frac{\eta_{11} r_1 \cos \theta + \eta_{21} r_2}{r_1 \sin \theta} \right) + \frac{\mathbf{r}_2}{\mathcal{F}} \left(\eta_{22} + \frac{\eta_{21} r_2 \cos \theta + \eta_{11} r_1}{r_2 \sin \theta} \right). \end{aligned} \quad (1.156)$$

Чтобы получить выражение для колебательно-вращательного (кориолисова) гамильтониана, необходимо определиться с выбором внутренних пере-

менных ξ . Выберем в качестве ξ следующие величины,

$$\xi_1 = r_1, \quad \xi_2 = r_2, \quad \xi_3 = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2) = \cos \theta. \quad (1.157)$$

Вычисление градиентов переменных ξ_i довольно просто и ниже не приводится. Как следствие оказывается, что среди параметров $K_k^{(\gamma)}$, определяющих кориолисово слагаемое в соответствии с (1.127), отличны от нуля только параметры с $k = 3$,

$$K_3^{(\gamma)} = \frac{1}{\sin \theta} ([\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \cdot [\mathbf{r}_\beta^{(eq)} \times \nabla_\beta]) \xi_\gamma, \quad (1.158)$$

где использовалось определение параметров $\eta_{\beta i}$ и полнота набора \mathbf{e}_j .

Установим теперь связь равновесных векторов $\mathbf{r}_\beta^{(eq)}$ с векторами Якоби \mathbf{r}_α . Учитывая равенство $\mathbf{r}_\beta^{(eq)} = \eta_{\beta i} \mathbf{e}_i$, и используя выражения (1.147) (или (1.156)) для \mathbf{e}_i , получаем

$$\mathbf{r}_\beta^{(eq)} = \frac{1}{\mathcal{F}} \left((\mathbf{r}_\beta^{(eq)} \cdot \mathbf{r}_\alpha^{(eq)}) \mathbf{r}_\alpha - \epsilon_{\alpha\beta\gamma} |\mathbf{r}_1^{(eq)} \times \mathbf{r}_2^{(eq)}| \frac{[\mathbf{r}_\alpha \times [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]]}{\sin \theta} \right). \quad (1.159)$$

Подстановка этого равенства в (1.158) даёт

$$K_3^{(\gamma)} = \frac{1}{\mathcal{F} \sin \theta} \left((\mathbf{r}_\beta^{(eq)} \cdot \mathbf{r}_\alpha^{(eq)}) ([\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \cdot [\mathbf{r}_\alpha \times \nabla_\beta]) - \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \sin \theta |\mathbf{r}_1^{(eq)} \times \mathbf{r}_2^{(eq)}| (\mathbf{r}_\alpha \cdot \nabla_\beta) \right) \xi_\gamma. \quad (1.160)$$

В правых частях равенств (1.159), (1.160) сумма по индексам α и β идёт в пределах 1, 2.

Выпишем в явном виде параметры (1.160),

$$\begin{aligned} K_3^{(1)} &= -\frac{r_2}{\mathcal{F}} r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \sin(\theta - \theta_{eq}), \\ K_3^{(2)} &= \frac{r_1}{\mathcal{F}} r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \sin(\theta - \theta_{eq}), \\ K_3^{(3)} &= \frac{\sin \theta}{\mathcal{F}} \left\{ \frac{r_1^2 - r_2^2}{r_1 r_2} r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \cos(\theta - \theta_{eq}) + (r_1^{(eq)})^2 - (r_2^{(eq)})^2 \right\}. \end{aligned} \quad (1.161)$$

Как было отмечено в разделе 1.2.5, в задаче трёх тел среди параметров B_k отличен от нуля только параметр B_3 , заданный формулой (1.150). Таким образом, из (1.150) и (1.161) следует, что в кориолисов гамильтониан (1.31) входит только одна компонента оператора полного углового момента L_3 , соответствующая оси z системы Экарта.

Часть H_{cor} , содержащая производные по внутренним координатам, получается из (1.127) и приведённого выше выражения для $K_3^{(\gamma)}$,

$$C_{\gamma 3} \frac{\partial}{\partial \xi_\gamma} = \frac{r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \sin(\theta - \theta_{eq})}{\mathcal{F}^2} \left(r_2 \frac{\partial}{\partial r_1} - r_1 \frac{\partial}{\partial r_2} \right) - \frac{\sin \theta}{\mathcal{F}^2} \left\{ \frac{r_1^{(eq)} r_2^{(eq)}}{r_1 r_2} (r_2^2 - r_1^2) \cos(\theta - \theta_{eq}) + (r_1^{(eq)})^2 - (r_2^{(eq)})^2 \right\} \frac{\partial}{\partial \cos \theta}, \quad (1.162)$$

Для малых колебаний, когда $\theta \approx \theta_{eq}$, $r_{1,2} \approx r_{1,2}^{(eq)}$, коэффициенты перед производными пропорциональны амплитудам колебаний, что означает малость кориолисова гамильтониана для малых отклонений от положения равновесия.

В задаче трёх тел выражение для элементов матрицы \mathcal{I} в терминах векторов Экарта дано формулой (1.151). Хотя эту формулу можно выписать в явном виде через внутренние переменные r_1 , r_2 , и $\cos \theta$, получающиеся выражения довольно громоздки¹⁶ и здесь не приводятся.

Альтернативные выражения для колебательно-вращательного разложения гамильтониана, соответствующего ВКС Экарта в задаче трёх тел, приведены в работах [17, 96, 142].

¹⁶ Исключение составляет коэффициент $\mathcal{I}_{33} = (I_1 + I_2)/\mathcal{F}^2$.

1.2.7. Задача четырёх тел

Относительное положение четырёх тел описывается *тремя* векторами Якоби \mathbf{r}_α , откуда вытекает, что между ними и векторами Экарта \mathbf{f}_i , можно установить взаимно-однозначное соответствие. Такая ситуация имеет место только в задачах трёх и четырёх тел.

В задаче четырёх тел выбор векторов Якоби существенно шире, чем в задаче трёх тел [12, 13, 153–155]. Например, одна из возможностей выбора векторов Якоби отражена на рис. Б.1. В этом случае связь векторов Якоби $\boldsymbol{\rho}_\alpha$ с масс-масштабированными векторами Якоби \mathbf{r}_α имеет вид,

$$\mathbf{r}_i = \sqrt{\mu_i} \boldsymbol{\rho}_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.163)$$

где приведённые массы μ_i определены формулами (Б.5) Приложения Б.

Используя определение векторов Экарта (1.100) получаем следующее выражение для определителя матрицы Экарта \mathbf{F} в задаче четырёх тел

$$\begin{aligned} F = (\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \mathbf{f}_3) &= \eta(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = \\ &= \frac{1}{8}(I_1 + I_2 - I_3)(I_2 + I_3 - I_1)(I_1 + I_3 - I_2)(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3). \end{aligned} \quad (1.164)$$

Отсюда видно, что определитель F обращается в ноль, если все частицы системы находятся на одной линии (коллинеарная конфигурация). Более того, для коллинеарных конфигураций определитель $U = \det \mathbf{U}$ также равен нулю. Действительно, рассмотрим второе уравнение системы (1.116). После несложных преобразований его можно представить в виде,

$$\begin{aligned} \Phi_1 \Phi_2 + \Phi_2 \Phi_3 + \Phi_1 \Phi_3 &= \\ &= \sum_{\alpha < \alpha' = 2}^3 \sum_{\beta < \beta' = 2}^3 ([\mathbf{r}_\alpha \times \mathbf{r}_{\alpha'}] \cdot [\mathbf{r}_\beta \times \mathbf{r}_{\beta'}]) ([\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \times \mathbf{r}_{\alpha'}^{(eq)}] \cdot [\mathbf{r}_\beta^{(eq)} \times \mathbf{r}_{\beta'}^{(eq)}]). \end{aligned} \quad (1.165)$$

Очевидно, что правая часть исчезает при коллинеарных векторах \mathbf{r}_α , $\alpha = 1, 2, 3$, когда по крайней мере одно собственное значение Φ_λ обращается в ноль и, следовательно, $U = 0$.

Для планарных равновесных конфигураций¹⁷, один из равновесных главных моментов инерции равен сумме остальных и, в соответствии с (1.164), определитель F обращается в ноль. Это, однако, не является проблемой, но приводит к нетривиальному заключению, что свойства системы Экарта для систем с *планарным* положением равновесия совпадают со свойствами систем частиц, *всегда* движущихся в одной плоскости.

Чтобы проиллюстрировать использование ВКС Экарта в задаче четырёх тел, рассмотрим систему X_3Y , равновесное положение которой изображено на рис. 1.4. Выбор векторов Якоби (1.163) позволяет вычислить равновесные параметры $\eta_{\alpha i}$ и, вместе с ними, векторы Экарта

$$\mathbf{f}_1 = \sqrt{\frac{m_X}{2}} a \mathbf{r}_1, \quad \mathbf{f}_2 = \sqrt{\frac{m_X}{2}} a \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{f}_3 = -\sqrt{\frac{3m_X m_Y}{3m_X + m_Y}} b \mathbf{r}_3, \quad (1.166)$$

где m_X , m_Y – массы X -ой и Y -ой частиц, соответственно. Равновесные значения главных моментов инерции равны

$$I_1 = I_2 = \frac{m_X a^2}{2} + \frac{3m_X m_Y b^2}{3m_X + m_Y}, \quad I_3 = m_X a^2. \quad (1.167)$$

Подстановка равенств (1.166), (1.167) в уравнения п. 1.2.3 приводит в выражениям для вращательного гамильтониана H_{rot} и параметров $K_k^{(\gamma)}$ и B_k кориолисова гамильтониана. Замкнутые формулы для H_0 и H_{cor} можно получить, зная связь шести внутренних переменных с векторами Якоби. Выбор внутренних переменных связан со свойствами рассматриваемой физической системы и не является предметом представленного рассмотрения.

¹⁷Т.е. когда в положении равновесия все частицы находятся в одной плоскости

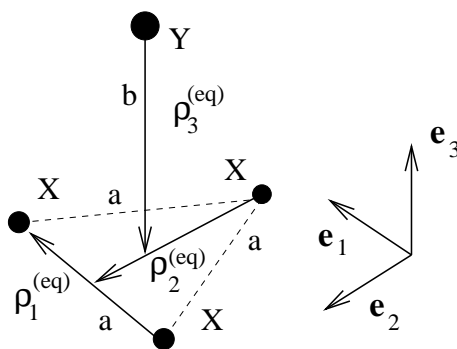


Рис. 1.4. Пример равновесной конфигурации системы X_3Y . Расстояния между атомами X равны a , расстояние между Y и ц.м. подсистемы X_3 равно b . Все три равновесных вектора Якоби $\rho_\alpha^{(eq)}$ ортогональны. Ориентация базисных векторов e_i системы Экарта показана в правой части рисунка.

Отметим, что подходы к проблеме отделение коллективных углов в задаче четырёх тел, не связанные с использованием системы Экарта, рассматривались в работах [18, 148, 155–157].

1.3. Метод минимальных биполярных гармоник

Разложения функций, зависящих от нескольких векторных аргументов по набору биполярных гармоник¹⁸ (БГ) широко используются в различных физических задачах. Удобство таких, называемых мультипольными, разложений состоит в возможности представить заданную функцию в виде ряда БГ, умноженных на скалярные функции радиальных переменных. Хотя бесконечные ряды представляют значительную трудность для анализа, во многих практически важных случаях мультипольные разложения сходятся достаточно быстро. Использование мультипольных разложений позволяет упростить вычисление многомерных интегралов, встречающихся в задачах квантовой теории рассеяния и взаимодействия конечных квантовых систем с электро-

¹⁸Определение биполярных гармоник дано в Приложении А, см. также [10].

магнитным излучением. Кроме того, часто закон сохранения углового момента даёт возможность уменьшить количество бесконечных суммирований в мультипольных разложениях. Например, при вычислении амплитуды процесса двухэлектронной фотоионизации атома возникает шестимерный интеграл (см. главу 4), содержащий волновую функцию конечного состояния, зависящую от четырёх векторов (два вектора импульса + два радиус-вектора электронов). Поскольку начальное состояние атома имеет, как правило, малый угловой момент ($l = 0, 1$), правила отбора (см., например, работы [88, 158]) редуцируют число бесконечных суммирований с трёх до одного.

Минимальными биполярными гармониками (МБГ) назовём биполярные гармоники, ранг которых равен сумме рангов сферических функций, входящих в тензорное произведение, см. формулу (A.9) Приложения A. В работе [40] показано, что МБГ образуют полный набор в пространстве неприводимых тензоров данного ранга. Этот факт позволяет использовать МБГ в качестве углового базиса для разложения волновой функции системы.

Имеется существенное различие между методом описания угловой зависимости с помощью МКВ и МБГ. А именно, МКВ не зависят от внутренних переменных (хотя формально они входят в выражения для базисных векторов, см. например, (1.79)), в то время как МБГ содержат одну внутреннюю переменную – относительный угол между векторами, определяющими МБГ. В методе ВКС положения частиц в пространстве определяется координатами векторов Якоби во вращающихся осях и тремя коллективными углами, описывающими ориентацию ВКС относительно лабораторной системы. В методе МБГ фиксируется положение $(n - 2)$ векторов Якоби относительно двух “реперных” векторов Якоби, входящих в МБГ, которые, в свою очередь, определяют ориентацию всей системы в пространстве. Физически, метод ВКС яв-

ляется обобщением теории вращения абсолютно твёрдого тела, а метод МБГ представляет собой развитие метода, используемого в квантовой задаче двух тел. Математически оба метода связаны друг с другом, поскольку МКВ можно представить в виде комбинации МБГ, и наоборот, см. [19, 40].

Ниже, в п. 1.3.1 рассматриваются общие свойства разложений по МБГ, такие как преобразование чётности и перестановочная симметрия. Показано, что известное в литературе [118] обобщение метода Брейта эквивалентно методу МБГ. Затем, в п. 1.3.2, получены обобщённые радиальные уравнения для задачи трёх тел. Там же дан их явный вид, соответствующий часто используемому выбору трёх внутренних переменных. В п. 1.3.3, получены обобщённые радиальные уравнения для общей задачи N тел.

1.3.1. Разложения по минимальным биполярным гармоникам

В работе [40] показано, что произвольная тензорная функция $\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ ранга l может быть представлена в виде комбинации МБГ, определённых формулой (A.9) Приложения A,

$$\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \sum_{\lambda_p=0}^1 \sum_{k=0}^{l-\lambda_p} f_k^{(l, \lambda_p)}(\xi) \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{r}}_j), \quad p = 0, 1, \quad (1.168)$$

где $\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{r}}_j$ – два неколлинеарных вектора, выбранные среди n векторов $\hat{\mathbf{r}}_k$, $k = 1, 2, \dots, n$; индекс p обозначает пространственную чётность: $p = 0$ ($p = 1$) для чётного (нечётного) состояния. Ниже, для определённости, положим $\hat{\mathbf{r}}_i = \hat{\mathbf{r}}_1$ и $\hat{\mathbf{r}}_j = \hat{\mathbf{r}}_2$. Коэффициенты $f_k^{(l, \lambda_p)}(\xi)$ в (1.168) являются скалярными функциями $(3n - 3)$ внутренних переменных ξ . В задаче трёх тел в качестве переменных ξ можно выбрать, например, $r_1, r_2, \tau = \cos \theta_{12} = \hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2$ или их произвольную комбинацию.

При пространственной инверсии МБГ $C_{lm}^{k,\lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ приобретают дополнительный фазовый множитель $(-1)^{l+\lambda_p}$, откуда следует, что скалярные функции $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$ преобразуются по закону

$$\hat{P}f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi) = (-1)^{p+l+\lambda_p}f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi), \quad (1.169)$$

где \hat{P} обозначает оператор пространственной инверсии. Таким образом, функции $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$ являются истинными скалярами при чётных величинах суммы $(p+l+\lambda_p)$, и псевдоскалярами при нечётных $(p+l+\lambda_p)$.

В важном частном случае системы трёх тел, функции $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$ могут быть только скалярами, поскольку из двух полярных векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ невозможно образовать псевдоскалярную величину. Это приводит к следующему правилу: при $n=2$ и чётных (нечётных) величинах $(l+p)$, в разложении (1.168) имеем $\lambda_p=0$ ($\lambda_p=1$).

Как следствие, волновая функция состояния с чётностью p системы трёх тел является комбинацией $l+\lambda_p$ скалярных функций $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$. В общей задаче N тел (при $N>3$), в разложении (1.168) имеются псевдоскалярные функции $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$, которые содержат смешанные произведения векторов. Поэтому в данном случае волновые функции будут комбинациями $(2l+1)$ радиальных функций $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$, независимо от чётности состояния.

В соответствии с принципом Паули, полная волновая функция системы одинаковых частиц должна иметь определённую перестановочную симметрию. Пренебрежение спин-орбитальными эффектами позволяет представить полную волновую функцию в виде произведения пространственной $\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ и спиновой частей (приближение LS -связи). Таким образом, волновая функция $\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ должна иметь определённую симметрию относительно перестановок векторных аргументов. Вид этой симметрии зависит

от выбора векторов Якоби.

Если все частицы имеют нулевой спин, то спиновая часть полной волновой функции отсутствует и пространственная волновая функция должна быть симметрична относительно перестановок координат частиц. Если полный спин системы имеет максимально возможное значение¹⁹, то пространственная волновая функция должна быть либо симметрична (для бозонов – целые s) либо антисимметрична (для фермионов – полуцелые s). При других значениях полного спина, полная волновая функция определяется комбинацией пространственных и спиновых волновых функций, симметризованных в соответствии с правилами Юнга [9].

При заданной перестановочной симметрии функций $\Psi_{lm}^{(p)}$, перестановочные свойства радиальных функций $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$ можно установить, исходя из свойств внутренних переменных ξ и перестановочной симметрии МБГ,

$$C_{lm}^{k,\lambda}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = (-1)^\lambda C_{lm}^{l-k-\lambda,\lambda}(\hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_1).$$

Подстановка этого равенства в разложение (1.168) приводит к соотношению симметрии для радиальных функций

$$f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi) = (-1)^{\lambda_p+\rho} f_{l-\lambda_p-k}^{(l,\lambda_p)}(\xi'), \quad (1.170)$$

где $\rho = 0$, если функция $\Psi_{lm}^{(p)}$ симметрична при перестановке векторов $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2$, в противном случае $\rho = 1$. ξ' обозначает набор внутренних переменных, соответствующих переставленным векторам \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . Перестановочные свойства функций $\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ и $f_k^{(l,\lambda_p)}$ по отношению к векторам, отличным от $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, совпадают.

Ввиду неортогональности МБГ, радиальные функции $f_k^{(l,\lambda_p)}(\xi)$ не имеют простого физического смысла, в отличие от функций $\psi_{lk}^{(\lambda_p)}(\xi)$ метода ВКС.

¹⁹Если каждая частица имеет спин s , то максимальный спин равен Ns .

Напомним, что функции $\psi_{lk}^{(\lambda_p)}(\xi)$ определяют вероятность того, что проекция полного углового момента системы на ось z ВКС равна k (см. формулу (1.14)).

В литературе известно несколько работ, в которых неявно использовался базис МБГ. Например, в работе [119] для P -состояний системы трёх тел, и позже в работе [118] для состояний с произвольным угловым моментом l , был предложен метод отделения коллективных углов с помощью разложения волновой функции по степеням величин $\zeta_1 = e^{i\phi_1} \sin \theta_1$ и $\zeta_2 = e^{i\phi_2} \sin \theta_2$ (см. равенства (3)–(5) работы [118]),

$$\Psi_{lm=l}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=l} r_1^{l_1} r_2^{l_2} \zeta_1^{l_1} \zeta_2^{l_2} f_{l_1, l_2}^l(r_1, r_2, r_3). \quad (1.171)$$

Здесь, θ_1, ϕ_1 и θ_2, ϕ_2 – сферические углы векторов $\hat{\mathbf{r}}_1$ и $\hat{\mathbf{r}}_2$, соответственно, и $\mathbf{r}_3 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$. Легко убедиться, что формула (1.171) есть приведённое выше разложение (1.168), взятое при значении проекции $m = l$. Действительно, используя явные выражения для сферических функций $C_{aa}(\hat{\mathbf{r}})$, МБГ $C_{ll}^{l_2, 0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ можно представить в виде

$$C_{ll}^{l_2, 0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = C_{l_1 l_1 l_2 l_2}^{ll} C_{l_1 l_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) C_{l_2 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_2) = (-1)^l \sqrt{\frac{(2l_1 - 1)!! (2l_2 - 1)!!}{l_1! l_2!}} \times \\ \times e^{i[l_1 \phi_1 + l_2 \phi_2]} (\sin \theta_1)^{l_1} (\sin \theta_2)^{l_2}, \quad l_1 = l - l_2, \quad (1.172)$$

где была использовано выражение для коэффициента Клебша-Гордана $C_{l_1 l_1 l_2 l_2}^{l_1 + l_2, l_1 + l_2} = 1$, см. [10]. Предложенный в работе [118] подход был недавно обобщён на случай задачи N тел в статье [120].

1.3.2. Задача трёх тел

Прежде чем перейти к общей задаче N тел, рассмотрим важный для практики случай системы трёх тел. При использовании масс-масштабированных

векторов Якоби, уравнение Шрёдингера для задачи трёх имеет вид (см. Приложение Б),

$$\left(-\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - E\right) \Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0, \quad (1.173)$$

где $V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – потенциальная энергия взаимодействия частиц.

Разложение волновой функции $\Psi_{lm}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ системы трёх тел по МБГ получается из общей формулы (1.168) предыдущего раздела,

$$\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{k=0}^{l-\lambda_p} f_k^{(l, \lambda_p)}(\xi) \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2), \quad \lambda_p = \frac{1 - (-1)^{l+p}}{2}. \quad (1.174)$$

Задача состоит в выводе системы уравнений на радиальные функции $f_k^{(l, \lambda_p)}(\xi)$. Для этого подставим написанное разложение в уравнение Шрёдингера (1.173).

Вычисление действия операторов Лапласа на разложение (1.174), приведённое в Приложении В.3, приводит к следующему выражению для уравнения Шрёдингера (1.173),

$$\sum_{k=0}^l A_{lk}(r_1, r_2, \theta_{12}) \mathcal{C}_{lm}^{k, 0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) + \sum_{k=0}^{l-1} B_{lk}(r_1, r_2, \theta_{12}) \mathcal{C}_{lm}^{k, 1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = 0, \quad (1.175)$$

где скалярные коэффициенты $A_{lk}(r_1, r_2, \theta_{12})$ и $B_{lk}(r_1, r_2, \theta_{12})$ являются комбинациями производных обобщённых радиальных функций, см. Приложение В.3. Поскольку МБГ образуют линейно независимый набор тензоров, потребуем обращения в ноль каждого из коэффициентов A_{lk} и B_{lk} . Это приводит к системе связанных уравнений

$$H_{lk}^{(\lambda_p)} f_k^{(l, \lambda_p)} + \sum_{\alpha=-1}^1 \hat{V}_\alpha^{(\lambda_p)} f_{k+\alpha}^{(l, \lambda_p)} = 0, \quad k = 0, 1, \dots, l - \lambda_p, \quad (1.176)$$

где диагональный гамильтониан $H_{lk}^{(\lambda_p)}$ равен

$$H_{lk}^{(\lambda_p)} = -\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{2} + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - E + \frac{(k+1)(k+2\lambda_p)}{2r_2^2} + \frac{(l-k)(l-k+1)}{2r_1^2}, \quad (1.177)$$

и калибровочные потенциалы $\hat{V}_\alpha^{(\lambda_p)}$ определены равенствами

$$\begin{aligned} \hat{V}_0^{(\lambda_p)} &= i \frac{\cos \theta_{12}}{\sin^2 \theta_{12}} [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \cdot \left(\frac{l-k}{r_1^2} \mathbf{l}_1 - \frac{k+\lambda_p}{r_2^2} \mathbf{l}_2 \right), \\ \hat{V}_1^{(\lambda_p)} &= i \frac{a_k^{(l, \lambda_p)}}{r_2^2 \sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_2), \\ \hat{V}_{-1}^{(\lambda_p)} &= -i \frac{a_{l-k-\lambda_p}^{(l, \lambda_p)}}{r_1^2 \sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_1), \quad \lambda_p = 0, 1. \end{aligned} \quad (1.178)$$

Здесь, числовые коэффициенты $a_k^{(l, \lambda_p)}$ определены формулой (В.23) Приложения В.3.

Подчеркнём, что калибровочные потенциалы, связывающие уравнения для функций $f_q^{(l, \lambda_p)}$ с разными индексами $q = k-1, k, k+1$, являются истинными скалярами. Система (1.176) представляет собой набор $(l + \lambda_p)$ трёхмерных уравнений в частных производных на функции $f_k^{(l, \lambda_p)}(\xi)$ состояния с угловым моментом l и чётностью p . Для S -состояния имеем $k = 0, l = 0, \lambda_p = 0$ и система (1.176) сводится к одному уравнению (1.173) на функцию $f_0^{(0,0)} \equiv \Psi_{00}^0(\xi)$.

Хотя калибровочные потенциалы в (1.178) содержат в знаменателе коэффициент $\sin^2 \theta_{12}$, расходящийся при $\theta_{12} = 0, \pi$, эта расходимость сокращается²⁰ ввиду наличия векторного произведения $[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]$ в выражении (В.37) для оператора углового момента (в задаче трёх тел $\tau_3 = \tau$ и второе слагаемое в

²⁰Факт сокращения калибровочных расходимостей в задаче трёх тел был также отмечен в [42].

(B.37) выпадает, см. Приложение B.5). Выбирая в качестве внутренних переменных величины r_1 , r_2 и $\tau = \cos \theta_{12}$, и учитывая выражение (B.38) для оператора Лапласа²¹ Δ_1 , уравнение (1.176) записывается в виде

$$H_{lk}^{(\lambda_p)} f_k^{(l, \lambda_p)} + \frac{1}{r_2^2} \left((k + \lambda_p) \tau \frac{\partial f_k^{(l, \lambda_p)}}{\partial \tau} - a_k^{(l, \lambda_p)} \frac{\partial f_{k+1}^{(l, \lambda_p)}}{\partial \tau} \right) + \frac{1}{r_1^2} \left((l - k) \tau \frac{\partial f_k^{(l, \lambda_p)}}{\partial \tau} - a_{l-k-\lambda_p}^{(l, \lambda_p)} \frac{\partial f_{k-1}^{(l, \lambda_p)}}{\partial \tau} \right) = 0, \quad k = \lambda_p, \dots, l, \quad (1.179)$$

где диагональный оператор $H_{lk}^{(\lambda_p)}$ определён формулой

$$H_{lk}^{(\lambda_p)} = - \sum_{n=1}^2 \left(\frac{1}{2r_n^2} \frac{\partial}{\partial r_n} r_n^2 \frac{\partial}{\partial r_n} + \frac{1}{2r_n^2} \frac{\partial}{\partial \tau} (1 - \tau^2) \frac{\partial}{\partial \tau} \right) + V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) - E + \frac{(k+1)(k+2\lambda_p)}{2r_2^2} + \frac{(l-k)(l-k+1)}{2r_1^2}. \quad (1.180)$$

Приведённые уравнения явным образом демонстрируют отсутствие калибровочных расходимостей в задаче трёх тел.

1.3.3. Задача N тел

Рассмотрение предыдущего раздела можно обобщить на случай задачи N тел. Для этого необходимо подставить разложение (1.168) волновой функции по базису МБГ в уравнение Шрёдингера (2), и затем провести преобразования аналогично случаю задачи трёх тел, см. (B.16)–(B.19). При этом, однако, в случае N тел равенство (B.20) не выполняется, поскольку при его выводе было опущено третье слагаемое в выражении (B.18) для перекрёстного члена кинетической энергии. Запишем, например, член кинетической энергии,

²¹В котором должны быть опущены члены с $\tau_{1,2}$.

соответствующий выражению (B.33),

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{l-1} [(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) f_k^{(l,1)}](\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= ir_1 \sum_{k=0}^{l-1} \mathcal{C}_{lm}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \times \\ &\times \left((2k+1) \cos \theta_{12} b_k^{(l)}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \nabla_2) f_k^{(l,1)} - k b_{l-k}^{(l)}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \nabla_2) f_{k-1}^{(l,1)} - \right. \\ &\quad \left. - a_k^{(l,1)} b_{k+1}^{(l)}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \nabla_2) f_{k+1}^{(l,1)} \right), \end{aligned} \quad (1.181)$$

где числовой коэффициент $b_k^{(l)}$ равен

$$b_k^{(l)} = \sqrt{\frac{(l-k)(2k+1)}{l+1}}. \quad (1.182)$$

Как видно из (1.181), третье слагаемое в разложении оператора градиента (B.18) приводит к “перепутыванию” МБГ разной чётности. Как следствие, уравнения на радиальные функции $f_k^{(l,0)}$ будут содержать члены с $f_k^{(l,1)}$, и наоборот.

Принимая во внимание равенства (B.24), (1.181), приходим к системе уравнений того же типа, что и в задаче трёх тел. Отличие состоит в том, что в задаче N тел коэффициенты A_{lk} и B_{lk} содержат как скалярные, так и псевдоскалярные радиальные функции. Поскольку МБГ линейно независимы, получаем систему уравнений

$$\begin{aligned} \left(\hat{H}_0 + \frac{k(k+1)}{2r_1^2} + \frac{(l-k)(l-k+1)}{2r_2^2} - E \right) f_k^{(l,0)} + \\ + \sum_{\alpha=-1}^1 \hat{V}_\alpha^{(0)} f_{k+\alpha}^{(l,0)} + \sum_{\alpha=-2}^1 \hat{V}_\alpha^{(1,o)} f_{k+\alpha}^{(l,1)} = 0, \end{aligned} \quad (1.183)$$

где индекс k пробегает от 0 до l . Калибровочные потенциалы в каждом из уравнений связывают семь функций $f_k^{(l,\lambda_p)}$ с разными индексами k : среди них три функции $f_q^{(l,0)}$ с индексами $q = k-1, k, k+1$, и четыре функции $f_q^{(l,1)}$ с индексами $q = k-2, k-1, k, k+1$.

Радиальные уравнения, соответствующие действию оператора $(\hat{H}_0 - E)$ на члены с $\lambda_p = 1$ в (1.168) имеют вид,

$$\left(\hat{H}_0 + \frac{(k+1)(k+2)}{2r_1^2} + \frac{(l-k)(l-k+1)}{2r_2^2} - E \right) f_k^{(l,1)} + \sum_{\alpha=-1}^1 \hat{V}_\alpha^{(1)} f_{k+\alpha}^{(l,1)} + \sum_{\alpha=0}^1 \hat{V}_\alpha^{(0,o)} f_{k+\alpha}^{(l,0)} = 0, \quad (1.184)$$

где $k = 0, 1, \dots, l-1$. В системе (1.184) “запутываются” пять радиальных функций: две функции $f_q^{(l,0)}$ с $q = k, k+1$ и три функции $f_q^{(l,1)}$ с $q = k-1, k, k+1$. В уравнениях (1.183) и (1.184), калибровочные потенциалы $\hat{V}_\alpha^{(\lambda_p, o)}$ являются псевдоскалярами, что обозначено индексом (o) .

Потенциалы $\hat{V}_\alpha^{(\lambda_p)}$ имеют тот же вид, что и в случае трёх тел, см. (1.178). Приведём явные выражения для потенциалов $\hat{V}_\alpha^{(\lambda_p, o)}$,

$$\begin{aligned} \hat{V}_0^{(1,o)} &= \frac{b_k^{(l)}}{\sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_1 + \hat{\mathbf{r}}_2) \cdot \left(\frac{l-k}{r_1^2} \mathbf{l}_1 + \frac{2k+1}{r_2^2} \cos \theta_{12} \mathbf{l}_2 \right), \\ \hat{V}_{-1}^{(1,o)} &= -\frac{b_{l-k}^{(l)}}{\sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_1 + \hat{\mathbf{r}}_2) \cdot \left(\frac{2l-2k+1}{r_1^2} \cos \theta_{12} \mathbf{l}_1 + \frac{k}{r_2^2} \mathbf{l}_2 \right), \\ \hat{V}_1^{(1,o)} &= -\frac{a_k^{(l,0)} b_{k+1}^{(l)}}{r_2^2 \sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2), \quad \hat{V}_{-2}^{(1,o)} = \frac{a_{l-k}^{(l,0)} b_{l-k+1}^{(l)}}{r_2^2 \sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1), \\ \hat{V}_1^{(0,o)} &= -\frac{c_k^{(l)}}{r_2^2 \sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2), \quad \hat{V}_0^{(0,o)} = \frac{c_{l-k-1}^{(l)}}{r_1^2 \sin^2 \theta_{12}} (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1), \end{aligned} \quad (1.185)$$

где числовые коэффициенты $c_k^{(l)}$ определены формулой

$$c_k^{(l)} = \sqrt{\frac{(k+1)(l+1)}{2l-2k-1}}. \quad (1.186)$$

В задаче трёх тел потенциалы $\hat{V}_\alpha^{(\lambda_p, o)}$ выпадают, поскольку содержат операторы $(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2)$ и $(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1)$, действие которых на скалярные функции трёх переменных $r_1, r_2, \cos \theta_{12}$ даёт ноль. Таким образом, уравнения (1.183) и (1.184) при $N = 3$ ($n = 2$) сводятся к (1.179)

Каждое слагаемое в выражениях (1.178), (1.185) для калибровочных потенциалов содержит расходимости, связанные с множителем $\sin^{-2} \theta_{12}$, который обращается в бесконечность при углах $\theta = 0, \pi$. Причина этой сингулярности в том, что разложение оператора градиента (В.18) не определено при коллинеарных векторах \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 . При таких конфигурациях следует выбрать другие векторы $\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{r}}_j$ в разложении волновой функции (1.168). Отметим, что явный вид калибровочной расходимости $\sin^{-2} \theta_{12}$ обусловлен свойствами трёхмерного пространства, поскольку является следствием фундаментального векторного равенства (В.19), справедливого только для такого пространства.

Хотя при коллинеарных конфигурациях в задаче трёх тел разложение (В.18) оператора градиента не имеет смысла, сингулярный множитель $\sin^{-2} \theta_{12}$ в обобщённых радиальных уравнениях сокращается, что следует из выражения (В.37) для оператора углового момента. Причиной отсутствия калибровочной расходимости в задаче трёх тел является то, что разложение волновой функции (1.174) остаётся справедливым также и при коллинеарных конфигурациях $\hat{\mathbf{r}}_2 = \pm \hat{\mathbf{r}}_1$, так как в этом случае волновая функция пропорциональна сферической гармонике $C_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_1)$, т.е. в (1.174) имеем

$$C_{lm}^{k,\lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_1) = \delta_{\lambda_p,0} C_{l-k,0k0}^{l0} C_{lm}(\hat{\mathbf{r}}_1).$$

Из этого уравнения, в частности, следует, что в случае псевдотензорной чётности ($\lambda_p = 1$) коллинеарные конфигурации не реализуются, т.к. коэффициент Клебша-Гордана равен нулю: $C_{(l-k)0(k+1)0}^{l0} = 0$.

1.4. Метод устранения калибровочных расходимостей

Описанные в разделах 1.1–1.3 методы отделения коллективных угловых переменных приводят к возникновению в радиальных уравнениях членов, расходящихся при определённых конфигурациях частиц. При этом разным угловым базисам соответствуют разные расходящиеся конфигурации, что, в принципе, позволяет обойти проблему расходимостей, решая радиальные уравнения в свободных от расходимостей областях, с последующей сшивкой решений. Несмотря на это, представляет интерес вопрос об отыскании такого метода отделения коллективных угловых переменных, в котором бы изначально отсутствовали калибровочные расходимости [12, 42, 156].

Фундаментальной причиной возникновения калибровочных расходимостей является тот факт, что из n векторов задачи \mathbf{r}_α невозможно равноправным образом выбрать пару векторов, определяющих вид углового базиса как в методе ВКС, так и МБГ²².

Для иллюстрации, рассмотрим P -состояние ($l = 1$) системы N тел. Волновая функция P -состояния $\Psi_{1m}^{(p)}$ является неприводимым тензором первого ранга (вектором), составленным из n векторов $\hat{\mathbf{r}}_q$. В методе МБГ разложение волновой функции по угловому базису имеет вид,

$$\vec{\Psi}_1^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n) = \hat{\mathbf{r}}_1 \chi_1(\xi) + \hat{\mathbf{r}}_2 \chi_2(\xi) + [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \chi_3(\xi), \quad (1.187)$$

где реперные векторы $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2$ выбраны из набора векторов $\hat{\mathbf{r}}_q$. Очевидно, что (1.187) теряет смысл при $\hat{\mathbf{r}}_1 = \pm \hat{\mathbf{r}}_2$, поскольку в этом случае, согласно (1.187), имеем $\vec{\Psi}_1^{(p)} \sim \hat{\mathbf{r}}_1$, что при $n > 2$ не обязательно так. Причиной этого, как отмечено выше, является неравноправный выбор векторов $\hat{\mathbf{r}}_{1,2}$ из набора $\hat{\mathbf{r}}_q$, $q = 1, 2, \dots n$.

²²Связь этих двух методов обсуждается в обзоре [19].

При $l = 1$ равноправным разложением волновой функции будет следующая формула (запись в сферических компонентах),

$$\Psi_{1m}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n) = \sum_{q=1}^n C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q) \chi_1^{(q)}(\xi), \quad (1.188)$$

где $C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q)$ – модифицированная сферическая функция первого ранга, зависящая от углов единичного вектора $\hat{\mathbf{r}}_q$, и радиальные функции $\chi_1^{(q)}$ зависят от $(3n - 3)$ внутренних переменных ξ . Важно, что написанное разложение волновой функции справедливо для *любой* конфигурации векторов \mathbf{r}_q .

Для p -нечётных состояний $p = o(odd)$, функции $\chi_1^{(q)}(\xi)$ являются истинными скалярами (поскольку сферические функции являются полярными тензорами). Радиальные функции псевдоскалярны для p -чётных состояний $p = e(even)$, т.е. они должны содержать в виде множителей смешанные произведения типа $(\hat{\mathbf{r}}_i, \hat{\mathbf{r}}_j, \hat{\mathbf{r}}_k)$.

После подстановки разложения (1.188) в уравнение Шрёдингера (2) получаем следующее выражение для оператора кинетической энергии, соответствующего q -му члену в (1.188),

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^n \Delta_{\alpha} C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q) \chi_1^{(q)} = C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q) \sum_{i=1}^n \Delta_{\alpha} \chi_1^{(q)} - C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q) \chi_1^{(q)} \sum_{i=1}^n \delta_{\alpha,q} \frac{2}{r_q^2} \\ + 2 \sum_{\alpha=1}^n \sum_{j=1}^3 \frac{\partial C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q)}{\partial x_j^{(\alpha)}} \frac{\partial \chi_1^{(q)}}{\partial x_j^{(\alpha)}}, \end{aligned} \quad (1.189)$$

где было учтено, что $\Delta_{\alpha} C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q) = -\delta_{\alpha,q} (2/r_q^2) C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q)$.

Зависимость от коллективных углов входит в векторное уравнение (1.189) через индекс m сферических функций $C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q)$. Существует несколько способов устранить эту зависимость. Например, можно параметризовать каждый вектор $\hat{\mathbf{r}}_q$ углами Эйлера и проинтегрировать по ним уравнение (1.189). Однако, как было показано выше в разделе 1.1, такая процедура приводит к

возникновению калибровочных расходимостей, вызванных неоднозначностью определения вращающихся координатных осей.

Предлагаемая идея состоит в проектировании уравнения (1.189) на набор n сферических гармоник $C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_k)$, $k = 1, 2, \dots, n$. Для этого умножим слева равенство (1.189) на $C_{1m}^*(\hat{\mathbf{r}}_k)$ и возьмём сумму по $m = 0, \pm 1$. При этом основная трудность состоит в анализе третьего слагаемого в правой части (1.189). Вычисление удобнее всего провести, используя представление сферической гармоники в виде тензорного произведения. Опуская детали вычисления, которые содержатся в работе [19], приведём здесь окончательный результат,

$$\sum_{m=0,\pm 1} C_{1m}^*(\hat{\mathbf{r}}_k) \sum_{j=1}^3 \frac{\partial C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q)}{\partial x_j^{(\alpha)}} \frac{\partial}{\partial x_j^{(\alpha)}} = -i \frac{\delta_{\alpha,q}}{r_q^2}(\hat{\mathbf{r}}_k, \hat{\mathbf{r}}_q, \mathbf{l}_q), \quad (1.190)$$

где $\mathbf{l}_q = -i[\mathbf{r}_q \times \nabla_q]$ – оператор углового момента, действующий на координаты вектора \mathbf{r}_q .

Замечая, что $\sum_{m=0,\pm 1} C_{1m}^*(\hat{\mathbf{r}}_k) C_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q) = (\hat{\mathbf{r}}_k \cdot \hat{\mathbf{r}}_q)$, приходим к системе связанных дифференциальных уравнений на обобщённые радиальные функции $\chi_1^{(q)}(\xi)$,

$$\sum_{q=1}^n \left[(\hat{\mathbf{r}}_k \cdot \hat{\mathbf{r}}_q) H_q + \frac{i}{r_q^2}(\hat{\mathbf{r}}_k, \hat{\mathbf{r}}_q, \mathbf{l}_q) \right] \chi_1^{(q)} = 0, \quad (1.191)$$

$$H_q = H_0 + \frac{1}{r_q^2}.$$

Здесь, член $1/r_q^2$ в эффективном гамильтониане H_q имеет смысл центробежной энергии. Члены, содержащие смешанное скалярное произведение (кориолисовы слагаемые) приводят к запутыванию уравнений на функции $\chi_1^{(q)}(\xi)$. В классической механике, вектор $[\hat{\mathbf{r}}_q \times \mathbf{l}_q]$ всегда находится в плоскости орбиты частицы, так что смешанное произведение $(\hat{\mathbf{r}}_k, \hat{\mathbf{r}}_q, \mathbf{l}_q)$ можно интерпрети-

ровать как взаимодействие орбит, соответствующих k -ой и q -ой частицам²³. (Выражение для колебательного гамильтониана для одного частного выбора внутренних переменных в задаче трёх и четырёх тел см. в п. 1.1.6.)

Систему (1.191) можно рассматривать как операторное матричное уравнение

$$\hat{A}X_1(\xi) = 0, \quad (1.192)$$

где элементы $n \times n$ -матрицы \hat{A} равны $(\hat{A})_{kq} = (\hat{\mathbf{r}}_k \cdot \hat{\mathbf{r}}_q)H_q + \frac{i}{r_q^2}(\hat{\mathbf{r}}_k, \hat{\mathbf{r}}_q, \mathbf{l}_q)$, и $X_1(\xi)$ – столбец, состоящий из радиальных функций $\chi_1^{(q)}(\xi)$. Образовывая линейные комбинации строк матрицы \hat{A} , можно понизить её размерность до 3×3 (поскольку для P -состояния $2l + 1 = 3$). Коэффициенты в таких линейных комбинациях будут функциями параметров $(\hat{\mathbf{r}}_k \cdot \hat{\mathbf{r}}_q)$, зависящих от ориентации частиц. Этот факт и приводит к возникновению расходимостей.

Для задачи четырёх тел имеем $n = 3$, и система уравнений (1.191) принимает вид

$$\begin{aligned} H_1\chi_1^{(1)} + \cos\theta_{12}H_2\chi_1^{(2)} + \cos\theta_{13}H_3\chi_1^{(3)} + \frac{\mathcal{L}_{122}}{r_2^2}\chi_1^{(2)} + \frac{\mathcal{L}_{133}}{r_3^2}\chi_1^{(3)} &= 0, \\ \cos\theta_{12}H_1\chi_1^{(1)} + H_2\chi_1^{(2)} + \cos\theta_{23}H_3\chi_1^{(3)} - \frac{\mathcal{L}_{121}}{r_1^2}\chi_1^{(1)} + \frac{\mathcal{L}_{233}}{r_3^2}\chi_1^{(3)} &= 0, \\ \cos\theta_{13}H_1\chi_1^{(1)} + \cos\theta_{23}H_2\chi_1^{(2)} + H_3\chi_1^{(3)} - \frac{\mathcal{L}_{131}}{r_1^2}\chi_1^{(1)} - \frac{\mathcal{L}_{232}}{r_2^2}\chi_1^{(2)} &= 0, \end{aligned} \quad (1.193)$$

где $\mathcal{L}_{qjk} = i(\hat{\mathbf{r}}_q, \hat{\mathbf{r}}_j, \mathbf{l}_k)$ и $\cos\theta_{ij} = (\hat{\mathbf{r}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_j)$.

Как видно, при любой ориентации векторов \mathbf{r}_q , $q = 1, 2, \dots, n$, каждое уравнение в (1.191), (1.193) содержит по крайней мере один член вида H_i . Например, если векторы $\hat{\mathbf{r}}_2$ и $\hat{\mathbf{r}}_3$ коллинеарны и вектор $\hat{\mathbf{r}}_1$ перпендикулярен вектору $\hat{\mathbf{r}}_2$, имеем $\cos\theta_{12} = \cos\theta_{13} = 0$, и второе и третье слагаемые в первом уравнении системы (1.193) выпадают, однако остаётся член с H_1 . Это

²³Точнее, векторам Якоби \mathbf{r}_k и \mathbf{r}_q .

означает, что система (1.191) не содержит калибровочных расходимостей.

Рассмотрим теперь P -состояние системы трёх тел. Радиальные уравнения в этом случае можно получить из (1.193), опуская члены содержащие индекс “3”. В результате получаем,

$$H_1 \chi_1^{(1)} + \cos \theta_{12} H_2 \chi_1^{(2)} + \frac{i}{r_2^2} (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_2) \chi_1^{(2)} = 0, \quad (1.194)$$

$$\cos \theta_{12} H_1 \chi_1^{(1)} + H_2 \chi_1^{(2)} - \frac{i}{r_1^2} (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_1) \chi_1^{(1)} = 0. \quad (1.195)$$

Эти уравнения не содержат калибровочных расходимостей. Вычитая из второго уравнения первое, умноженное на $\cos \theta_{12}$ и наоборот, приходим к системе

$$\begin{aligned} H_1 \chi_1^{(1)} + \frac{i}{\sin^2 \theta_{12}} [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \left(\cos \theta_{12} \frac{\mathbf{l}_1}{r_1^2} \chi_1^{(1)} + \frac{\mathbf{l}_2}{r_2^2} \chi_1^{(2)} \right) &= 0, \\ H_2 \chi_1^{(2)} - \frac{i}{\sin^2 \theta_{12}} [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \left(\frac{\mathbf{l}_1}{r_1^2} \chi_1^{(1)} + \cos \theta_{12} \frac{\mathbf{l}_2}{r_2^2} \chi_1^{(2)} \right) &= 0. \end{aligned}$$

(Эти уравнения совпадают, очевидно, с системой (1.176), взятой при $l = 1$.) В написанных уравнениях появились расходящиеся члены²⁴, несмотря на то, что исходные уравнения (1.194), (1.195) расходящихся членов не содержат. Причина этого в том, что при $\theta_{12} \rightarrow 0$ имеем $\cos \theta_{12} \rightarrow 1$ и (1.194), (1.195) совпадают, так что вычитание одного уравнения из другого приводит к тривиальному тождеству $0 = 0$. Таким образом, преобразования радиальных уравнений должны проводиться с осторожностью. Например, как показано выше, линейная комбинация радиальных уравнений с коэффициентами, зависящими от внутренних переменных (углов между векторами и т.п.), может привести к появлению расходимости.

Равноправное разложение волновой функции по угловому базису в случае

²⁴Речь идёт о фиктивной расходимости, т.к. в задаче трёх тел калибровочные расходимости сокращаются, см. раздел 1.3.2.

D -состояния ($l = 2$), можно записать в виде

$$\Psi_{2m}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n) = \sum_{\substack{k_1, k_2=1 \\ k_1 \leq k_2}}^n \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{r}}_{k_2}\}_{2m} \chi_2^{(k_1 k_2)}(\xi). \quad (1.196)$$

Здесь ограничение $k_1 \leq k_2$ наложено с целью избежать повторения одинаковых тензорных произведений, так что полное число слагаемых в (1.196) равно $n(n+1)/2$. Отметим, что тензорные произведения в написанном разложении с точностью до коэффициентов совпадают с МБГ второго ранга. Как и для P -состояния, обобщённые волновые функции $\chi_2^{(k_1 k_2)}$, зависящие от $(3n-3)$ внутренних переменных ξ , содержат всю информацию о внутреннем движении системы, а тензорные произведения второго ранга в (1.196) описывают вращение системы как целого. Для нечётного состояния D^o , радиальные функции $\chi_2^{(k_1 k_2)}(\xi)$ должны быть псевдоскалярами, аналогично случаю P^e -состояния.

Чтобы получить уравнения на радиальные функции, подставим разложение (1.196) в уравнение Шрёдингера (2). Выражение для кинетической энергии вычисляется аналогично формуле (1.189),

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha=1}^n \Delta_{\alpha} \sum_{k_1 \leq k_2, 1}^n \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{r}}_{k_2}\}_{2m} \chi_2^{(k_1 k_2)}(\xi) &= \sum_{k_1 \leq k_2, 1}^n \left(\{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{r}}_{k_2}\}_{2m} \sum_{\alpha=1}^n \Delta_{\alpha} - \right. \\ &\quad \left. - 2 \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{r}}_{k_2}\}_{2m} \left(\frac{1}{r_{k_1}^2} + \frac{1}{r_{k_2}^2} + \frac{\delta_{k_1, k_2}}{r_{k_1}^2} \right) + \right. \\ &\quad \left. + 2 \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\mu=0, \pm 1} (-1)^{\mu} [(\nabla_{\alpha})_{\mu} \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{r}}_{k_2}\}_{2m}] (\nabla_{\alpha})_{-\mu} \right) \chi_2^{(k_1 k_2)}(\xi). \quad (1.197) \end{aligned}$$

Здесь, зависимость от проекции m устраняется проектированием на набор $\binom{n}{2} = n(n+1)/2$ тензорных произведений вида $\{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_{2m}$. Трудность состоит в преобразовании третьего слагаемого в (1.197), которое представляет собой

производную по направлению от МБГ второго ранга. Опуская детали вычислений²⁵, которые можно провести, используя результаты Приложения В.4, получаем систему $n(n+1)/2$ связанных дифференциальных уравнений,

$$\sum_{\substack{k_1, k_2=1 \\ k_1 \leq k_2}}^n \left[(\{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_2 \cdot \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{r}}_{k_2}\}_2) \hat{H}_{k_1 k_2} + \frac{i}{2r_{k_1}^2} (\{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_2 \cdot \{\hat{\mathbf{r}}_{k_2} \otimes [\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \times \mathbf{l}_{k_1}]\}_2) + \frac{i}{2r_{k_2}^2} (\{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_2 \cdot \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes [\hat{\mathbf{r}}_{k_2} \times \mathbf{l}_{k_2}]\}_2) \right] \chi_2^{(k_1 k_2)}(\xi) = 0, \quad (1.198)$$

где $p \leq q = 1, 2, \dots, n$, и эффективные гамильтонианы $H_{k_1 k_2}$ определены по формуле

$$H_{k_1 k_2} = H_0 + \frac{1}{r_{k_1}^2} + \frac{1}{r_{k_2}^2} + \frac{\delta_{k_1, k_2}}{r_{k_2}^2}, \quad (1.199)$$

Для полноты приведём соотношения, позволяющие переписать скалярные произведения тензоров в (1.198) в виде обычных скалярных произведений векторов [10],

$$\begin{aligned} (\{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_2 \cdot \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes \hat{\mathbf{r}}_{k_2}\}_2) &= \frac{1}{2} \cos \theta_{pk_1} \cos \theta_{qk_2} + \frac{1}{2} \cos \theta_{pk_2} \cos \theta_{qk_1} - \\ &\quad - \frac{1}{3} \cos \theta_{pq} \cos \theta_{k_1 k_2}, \end{aligned} \quad (1.200)$$

$$\begin{aligned} (\{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_2 \cdot \{\hat{\mathbf{r}}_{k_1} \otimes [\hat{\mathbf{r}}_{k_2} \times \mathbf{l}_{k_2}]\}_2) &= \frac{\cos \theta_{pk_1}}{2} (\hat{\mathbf{r}}_q, \hat{\mathbf{r}}_{k_2}, \mathbf{l}_{k_2}) + \\ &\quad + \frac{\cos \theta_{qk_1}}{2} (\hat{\mathbf{r}}_p, \hat{\mathbf{r}}_{k_2}, \mathbf{l}_{k_2}) - \frac{\cos \theta_{pq}}{3} (\hat{\mathbf{r}}_{k_1}, \hat{\mathbf{r}}_{k_2}, \mathbf{l}_{k_2}), \end{aligned} \quad (1.201)$$

где $\cos \theta_{pq} = (\hat{\mathbf{r}}_p \cdot \hat{\mathbf{r}}_q)$ и т.п..

Таким образом, каждое уравнение системы (1.198) содержит комбинации гамильтонианов $H_{k_1 k_2}$, умноженных на скалярные произведения (1.200), и кориолисовы операторы (1.201). При любой ориентации векторов $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \dots, \hat{\mathbf{r}}_n$,

²⁵Они приведены в работе [19].

отлично от нуля по крайней мере одно скалярное произведение (1.200). Например, скаляр $(\{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_2 \cdot \{\hat{\mathbf{r}}_p \otimes \hat{\mathbf{r}}_q\}_2) = 1/2 + \cos^2 \theta_{pq}/6$ всегда неотрицателен. Другими словами, оператор потенциальной энергии входит в каждое радиальное уравнение, независимо от конфигурации системы. Это означает, что система $n(n+1)/2$ связанных радиальных уравнений (1.198) свободна от калибровочных расходимостей.

При значениях углового момента $l > 2$ равноправным угловым базисом может служить набор минимальных тензорных произведений ранга l , образованных всеми возможными способами из векторов \mathbf{r}_q . Число таких произведений равно биномиальному коэффициенту $\binom{l+n-1}{l}$. Таким образом, устранение калибровочных расходимостей достигается за счёт увеличения количества радиальных функций, число которых быстро возрастает с увеличением числа частиц и/или величины углового момента. Дальнейшие подробности метода, включая вывод соответствующих обобщённых радиальных уравнений, содержатся в работе [19].

1.5. Выводы

В данной главе была развита квантовая теория отделения коллективных углов в уравнении Шрёдингера для задачи N тел. Существует несколько подходов к данной задаче [12, 19, 21]. В молекулярной и ядерной физике одним из наиболее популярных методов является метод ВКС (body-frame approach). Это связано с тем обстоятельством, что во многих случаях вращение ядер и молекул по своим кинематическим свойствам схоже с вращением твёрдого тела. Выше были рассмотрены три варианта выбора ВКС – система главных осей инерции (п. 1.1.4), система $z zx$ (п. 1.1.5) и система Экарта (п. 1.2). Во

всех случаях были получены выражения для кориолисовой (т.е. колебательно-вращательной) и вращательной кинетической энергии, а также уравнения на обобщённые радиальные функции. В п. 1.1.6 получены в явном виде обобщённые радиальные уравнения для систем трёх и четырёх тел для внутренних переменных, определённых длинами векторов Якоби и косинусами относительных углов.

В разделе 1.2 бала детально рассмотрена ВКС, определённая условиями Экарта [22]. Данная калибровка часто используется в задачах о малых колебаниях молекул [6, 7, 104, 159]. Уравнения, полученные в пп. 1.2.3, 1.2.5, 1.2.6 применимы в общем случае, без каких-либо ограничений на величину амплитуд колебаний.

Среди различных ВКС, система Экарта выделяется рядом важных особенностей. А именно, условие Экарта (1.98) имеет простое физическое обоснование. Далее, определение системы Экарта содержит свободные параметры – равновесные положения частиц $\eta_{\alpha i}$ в (1.100). Варьируя $\eta_{\alpha i}$ можно, во-первых, добиться малости кориолисова гамильтониана (см. п. 1.2.4), что упрощает вычисления, а во-вторых, контролировать точность вычисления спектра и/или волновых функций, поскольку они не должны зависеть от свободных параметров. Кроме того, концепция равновесных конфигураций, в принципе, может быть обобщена и на случай колебаний с произвольной амплитудой и даже на столкновения молекулярных комплексов [93]. В этих случаях равновесная конфигурация должна быть выбрана исходя из геометрии рассматриваемого физического процесса. Сравнительно недавно такие конфигурации “относительного равновесия” были использованы в теории неупругих молекулярных столкновений [160]. Система Экарта используется в также квантовых расчётах молекулярной структуры [110, 111], в теории реакционного рассеяния

[109, 161], а также при анализе молекулярных свойств искусственных атомов (квантовых точек) [6, 7].

Несмотря на то, что условия Экарта сформулированы более 70 лет назад, некоторые свойства системы Экарта не были известны до сих пор. Например, выражения для базисных векторов системы Экарта в терминах радиус-векторов или векторов Якоби (см. (1.123)) для планарных систем получены недавно [100, 143]. В общем случае задачи четырёх и более тел, выражения для базисных векторов в общедоступной литературе отсутствовали вплоть до недавнего времени [162]. Такие выражения получены выше, см. (1.123)).

Задача о системе Экарта интересна тем, что в ней ключевую роль играет вычисление квадратного корня из матрицы ($\mathbf{F} = \sqrt{\Phi}$). Этот факт был отмечен уже в работе Экарта [22] (см. также [144]). Однако метод, предложенный Экартом для вычисления \mathbf{F} , основанный на решении задачи на собственные значения, не является оптимальным. Выше было показано (см. (1.57) и (1.58)), что наиболее простое выражение для квадратного корня из 3×3 -матрицы получается при использовании теоремы Кэли-Гамильтона.

В разделе 1.3 для отделения коллективных угловых переменных был применён базис минимальных биполярных гармоник (МБГ). Преимущество предложенного метода состоит в возможности упростить анализ перестановочной симметрии, поскольку закон преобразования МБГ при перестановке аргументов имеет простой вид. Метод МБГ имеет смысл использовать при отсутствии физического обоснования введению вращающейся системы координат, что может иметь место, например, в задачах о многочастичной фрагментации.

Результаты разделов 1.1, 1.2, 1.3 показывают, что процедура отделения коллективных угловых переменных с помощью углового базиса, состоящего из $(2l + 1)$ функций, приводит к возникновению в радиальных уравнениях

калибровочных расходимостей, не имеющих физического смысла. Эти расходимости представляют собой поверхности в пространстве внутренних переменных, в отличие от расходимостей точечного типа, связанных с отделением движения центра масс. Интересно, что в задаче трёх тел калибровочные расходимости сокращаются в методе МБГ (см. п. 1.3.2), но в обычных подходах к общей задаче N тел их наличие неизбежно. В разделе 1.4 на примере P - и D -состояний показано, что использование переполненного базиса минимальных тензорных произведений позволяет избежать возникновения калибровочных расходимостей. Цена, которую приходится при этом платить, состоит в резком росте числа радиальных функций с увеличением углового момента состояния.

В заключение отметим, что техника, развитая в данной главе, может быть применена для вывода колебательно-вращательного разложения гамильтониана для любой ВКС, независимо от выбора внутренних переменных. При этом процедура определения гамильтонианов H_{cor} и H_{rot} сводится к вычислению коэффициентов $C_{\gamma k}$, B_k и $\mathbf{V}^{(s)}$, определённых уравнениями (1.48), (1.67) и (1.53), соответственно.

Мультипольные разложения континуума трёх свободных частиц и волновые функции волчка

Цель данной главы состоит в анализе особенностей мультипольных разложений волновых функций непрерывного спектра квантовой системы трёх тел. В качестве примера рассматривается мультипольное разложение произведения двух плоских волн $\exp i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)$, которое является асимптотикой волновой функции трёх частиц, взаимодействующих посредством короткодействующего потенциала. Данный пример представляет особенный интерес также потому, что большинство результатов можно получить в аналитическом виде.

Разложение произведения плоских волн в ряд гиперсферических гармоник рассматривалось в работе [163]. Хорошо известно [64], что D -функции Вигнера представляют собой не только матрицы преобразования трёхмерных гармоник, но также являются гиперсферическими гармониками в четырёхмерном пространстве. Этот факт был использован в работе [163], в которой аргументами D -функций $D_{\mu,\nu}^j(\alpha\beta\gamma)$ были выбраны гиперуглы, не имеющие обычного геометрического смысла углов поворота. Ниже получены разложения по D -функциям, зависящим от углов Эйлера $\alpha\beta\gamma$, описывающих поворот вращающейся координатной системы (ВКС), связанной с частицами, относительно лабораторной координатной системы (ЛКС), фиксированной в пространстве. Данное обстоятельство позволяет интерпретировать коэффициенты разложения произведения плоских волн по D -функциям как волновые функции симметричного трёхчастичного волчка в импульсном пространстве.

Структура главы следующая. В разделе 2.1 обсуждается общая теория мультипольных разложений в задаче трёх тел. Раздел 2.2 посвящён выводу коллективных мультипольных разложений произведения двух плоских волн. Там же рассматривается связь мультипольных коэффициентов с волновыми функциями трёхчастичного волчка. Показано, что мультиполи определяются интегралом перекрытия между состояниями континуума трёх свободных частиц и состоянием абсолютно твёрдого тела, состоящего из трёх частиц. Физически, интеграл перекрытия можно понимать как амплитуду некоторого процесса фрагментации. Такая модель обсуждается в разделе 2.3. Для наглядного отображения результатов используется техника диаграмм Далитца [164], использовавшихся недавно для представления данных эксперимента по трёхатомной преддиссоциации молекулы трёхатомного водорода [51] (см. также статью [52]). Раздел 2.4 содержит краткий обзор полученных результатов и их обсуждение.

2.1. Мультипольные разложения волновой функции континуума трёх тел

Цель раздела состоит в рассмотрении задачи о разложении волновой функции континуума задачи трёх тел по состояниям с определёнными значениями полного углового момента \mathbf{j} .

Рассмотрим сначала задачу двух тел. В этом случае, волновая функция $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, описывающая рассеяние, зависит от асимптотического значения импульса \mathbf{k} и относительного вектора $\mathbf{r} = \mathbf{R}_1 - \mathbf{R}_2$. Функция $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ должна быть скаляром, поскольку граничные условия в задаче рассеяния, а также потенциал взаимодействия, являются скалярными величинами. Таким обра-

зом, $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ зависит от трёх переменных, в качестве которых можно взять, например, k , r и $\cos \theta \equiv (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{r}})$. Зависимость от r и $\cos \theta$ отделяется с помощью мультипольного разложения

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_{j=0}^{\infty} R_{k,j}(r) P_j(\cos \theta) = \sum_{j=0}^{\infty} R_{k,j}(r) \sum_{\mu=-j}^j C_{j\mu}^*(\hat{\mathbf{k}}) C_{j\mu}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (2.1)$$

Здесь, $C_{j\mu} = \sqrt{(2j+1)/4\pi} Y_{j\mu}$ и P_j – модифицированные сферические функции и многочлены Лежандра, соответственно [10]; $R_{k,j}(r)$ – радиальные функции, не зависящие от $\cos \theta$. Подставляя разложение (2.1) в уравнение Шрёдингера с последующим умножением на $C_{j\mu}(\hat{\mathbf{k}}) C_{j\mu}^*(\hat{\mathbf{r}})$ и интегрированием по сферическим углам векторов \mathbf{k} и \mathbf{r} , приходим к набору уравнений

$$\begin{aligned} (H_j - p^2/2) R_{k,j}(r) &= 0, \\ H_j &= H + \frac{j(j+1)}{2r^2}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Как видно, уравнения для разных j не связаны друг с другом.

Обратимся к задаче трёх тел. Отделение движение центра масс всей системы может быть достигнуто при использовании векторов Якоби, см. рис. Б.1. Обозначая радиус ц.м. системы как $\mathbf{R}_c = \sum_{i=1}^3 m_i \mathbf{R}_i / M$, $M = \sum_{i=1}^3 m_i$, связь радиус-векторов частиц $\mathbf{R}_{1,2,3}$ с векторами Якоби $\mathbf{r}_{1,2}$ можно представить в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_1 &= \mathbf{R}_c - \frac{m_2 + m_3}{M} \mathbf{r}_2, \\ \mathbf{R}_2 &= \mathbf{R}_c + \frac{m_1}{M} \mathbf{r}_2 + \frac{m_3}{m_2 + m_3} \mathbf{r}_1, \\ \mathbf{R}_3 &= \mathbf{R}_c + \frac{m_1}{M} \mathbf{r}_2 - \frac{m_2}{m_2 + m_3} \mathbf{r}_1. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Преобразование оператора кинетической энергии от радиус-векторов \mathbf{R}_i к векторам Якоби $\mathbf{r}_{1,2}$ и радиус-вектору центра масс \mathbf{R}_c даёт (см. Приложение Б),

$$T = -\frac{1}{2M} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{R}_c^2} - \frac{1}{2\mu_1} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_1^2} - \frac{1}{2\mu_2} \frac{\partial^2}{\partial \mathbf{r}_2^2}, \quad (2.4)$$

где приведённые массы $\mu_{1,2}$ равны

$$\frac{1}{\mu_1} = \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}, \quad \frac{1}{\mu_2} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_2 + m_3}. \quad (2.5)$$

Для последующего рассмотрения полезно переписать сумму $\sum_{i=1}^3 \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}_i$ через векторы Якоби. Это легко сделать используя уравнения (2.3),

$$\sum_{i=1}^3 \mathbf{k}_i \cdot \mathbf{R}_i = \mathbf{K} \cdot \mathbf{R}_c + \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2, \quad (2.6)$$

где $\mathbf{K} = \sum_{i=1}^3 \mathbf{k}_i$ – полный импульс и $\mathbf{q}_{1,2}$ обозначают векторы импульсов, сопряжённых векторам Якоби,

$$\mathbf{q}_1 = \frac{m_3 \mathbf{k}_2 - m_2 \mathbf{k}_3}{m_2 + m_3}, \quad \mathbf{q}_2 = \frac{1}{M} (m_1 (\mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3) - (m_2 + m_3) \mathbf{k}_1). \quad (2.7)$$

В частном случае тождественных частиц, $m_i = m$, и для импульсов Якоби имеем

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_3}{2}, \quad \mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{K}}{3} - \mathbf{k}_1. \quad (2.8)$$

Волновая функция континуума $\Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ зависит от двух векторов Якоби $\mathbf{r}_{1,2}$ и сопряжённых к ним импульсов $\mathbf{q}_{1,2}$. Как и для двух тел, функция $\Psi_{\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ является скаляром, поэтому её аргументы также должны быть скалярами. Всего из четырёх векторов $\mathbf{r}_{1,2}$ and $\mathbf{q}_{1,2}$ можно образовать десять скалярных произведений: четыре “радиальных” параметра (т.е. длины) $r_{1,2}$, $q_{1,2}$ и шесть углов $\theta = \arccos(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2)$, $\chi = \arccos(\hat{\mathbf{q}}_1 \cdot \hat{\mathbf{q}}_2)$ и $\arccos(\hat{\mathbf{r}}_i \cdot \hat{\mathbf{q}}_j)$, $i, j = 1, 2$. Три параметра $r_{1,2}$ и θ определяют пространственную структуру системы. Параметры $q_{1,2}$ и χ являются физически наблюдаемыми величинами, фиксированными в эксперименте. Остальные четыре параметра $(\hat{\mathbf{q}}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_j)$ ($i \neq j$) определяют ориентацию координатной системы связанной с частицами (определяемой векторами $\mathbf{r}_{1,2}$) относительно лабораторной системы координат, связанной с экспериментально наблюдаемыми векторами импульса

$\mathbf{q}_{1,2}$. Очевидно, однако, что взаимная ориентация двух координатных систем описывается всего *тремя* действительными параметрами¹.

Для прояснения этой ситуации рассмотрим два смешанных произведения, $S_1 = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot [\hat{\mathbf{q}}_1 \times \hat{\mathbf{q}}_2])$ и $S_2 = (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot [\hat{\mathbf{q}}_1 \times \hat{\mathbf{q}}_2])$. Поскольку параметры $S_{1,2}$ являются псевдоскалярами, их нельзя выразить через комбинации *скалярных* произведений $(\hat{\mathbf{r}}_i \cdot \hat{\mathbf{q}}_j)$. Однако, комбинации $S_1^2, S_2^2, S_1 S_2$ являются скалярами и, поэтому, их можно записать через скалярные произведения. Как видно, *два* смешанных произведения приводят к *трём* соотношениям, связывающим обычные скалярные произведения. Это означает, что достаточно использовать вместо четырёх скалярных произведений $(\hat{\mathbf{q}}_{1,2} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{2,1})$ три смешанных произведения $S_{1,2}$ и $S_3 = (\hat{\mathbf{q}}_1 \cdot [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2])$.

Устранение трёх коллективных угловых переменных в уравнении Шрёдингера задачи трёх тел можно произвести разложив волновую функцию $\Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ по базису биполярных гармоник $C_{j\mu}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$,

$$\Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\mu=-j}^j \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} \Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; j\mu}^{(l_1 l_2)}(r_1, r_2) C_{j\mu}^{l_1 l_2*}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2). \quad (2.9)$$

Поскольку индексы j, l_1, l_2 связаны правилом треугольника, $|l_2 - j| \leq l_1 \leq l_2 + j$, только две суммы в правой части бесконечны. Достоинство приведённого разложения состоит в независимости обобщённых радиальных (парциальных) волновых функций $\Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; j\mu}^{(l_1 l_2)}(r_1, r_2)$ от угла θ между векторами Якоби $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$. Отметим, что разложение (2.9) в задаче трёх тел использовалось многими авторами, см., например, (author?) [43, 87, 88]. Разложение (2.9), однако, не всегда удобно, поскольку ряды по индексам индивидуальных угловых моментов l_1, l_2 могут сходиться медленно.

¹Ими могут быть, например, углы Эйлера

Одно из бесконечных суммирований в (2.9) может быть устранено с помощью формул приведения для биполярных гармоник [39], позволяющих переписать $C_{j\mu}^{l_1 l_2}$ с произвольными индексами l_1, l_2 , через набор $(2j+1)$ минимальных биполярных гармоник² (МБГ) $C_{j\mu}^{\kappa, \lambda}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$. В терминах МБГ разложение (2.9) принимает вид

$$\Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; j\mu}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\mu=-j}^j \sum_{\lambda=0}^1 \sum_{\kappa=0}^{j-\lambda} \tilde{\Psi}_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; j\mu}^{(\kappa, \lambda)}(r_1, r_2, \cos \theta) C_{j\mu}^{\kappa, \lambda*}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2). \quad (2.10)$$

Как видно, радиальные функции (мультиполи) $\tilde{\Psi}_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2; j\mu}^{(\kappa, \lambda)}$ зависят не только от длин r_1, r_2 , но также и от относительного угла θ .

В Главе 1.1 (см. также обзор (author?) [19]) отмечено, что для описания коллективного углового движения молекулярных систем более удобным может оказаться метод ВКС. В этом методе полная волновая функция разлагается по базису матриц конечных вращений (МКВ), зависящих от трёх параметров, описывающих взаимную ориентацию ВКС и лабораторной системы координат. При выборе в качестве параметров поворота углов Эйлера $\Omega = \alpha\beta\gamma$ МКВ известны как D -функции Вигнера $D_{\mu, \nu}^j(\Omega)$ (см. Приложение А). В методе ВКС разложение волновой функции по угловому базису имеет вид

$$\Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\mu, \nu=-j}^j \psi_{\mu, \nu}^{(j)}(\xi_r, \xi_q) D_{\mu, \nu}^j(\Omega_{bl}) \quad (2.11)$$

где ξ_r обозначает набор внутренних переменных, которыми могут быть, например, r_1, r_2 и $\cos \theta$. Набор наблюдаемых параметров q_1, q_2 и $\cos \chi$, где χ – угол между векторами $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$, обозначен как ξ_q . Таким образом, внутренние (радиальные) волновые функции $\psi_{\mu, \nu}^j$ зависят от шести параметров, три из которых – внутренние переменные ξ_r . Аргумент D -функции Ω_{bl} обозначает

²См. формулу (A.9) Приложения А, а также статью (author?) [40].

углы Эйлера, описывающие поворот от ВКС к лабораторной системе координат.

Разложение (2.11) будем называть коллективным мультипольным разложением, поскольку базисом для него служат D -функции, зависящие от коллективных углов Ω_{bl} .

В практических приложениях часто возникает необходимость вычислить матричный элемент вида

$$\langle \Phi_{j_0\mu_0} | \Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \rangle, \quad (2.12)$$

где $\Phi_{j_0\mu_0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ – волновая функция состояния с определённым квантовым числом полного углового момента j_0 и его проекции μ_0 на некоторую ось квантования³. Используя теорему сложения поворотов, волновую функцию состояния с определённым значением квантового числа j_0 можно представить в виде

$$\begin{aligned} \Phi_{j_0\mu_0}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \sum_{\mu=-j_0}^{j_0} \tilde{\Phi}_{j_0\mu}(\xi_r) D_{\mu, \mu_0}^{j_0}(\Omega_{bq}) = \\ &= \sum_{\mu=-j_0}^{j_0} \tilde{\Phi}_{j_0\mu}(\xi_r) \sum_{\nu=-j_0}^{j_0} D_{\mu, \nu}^{j_0}(\Omega_{bl}) D_{\nu, \mu_0}^{j_0}(\Omega_{lq}), \end{aligned} \quad (2.13)$$

где $\tilde{\Phi}_{j_0\mu}(\xi_r)$ определена в ВКС и зависит только от внутренних переменных. Углы Ω_{lq} обозначают поворот от ВКС к ЛКС. Подстановка равенств (2.13) и (2.11) в (2.12) с учётом свойств ортогональности D -функций, даёт

$$\langle \Phi_{j_0\mu_0} | \Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \rangle = \sum_{\nu=-j_0}^{j_0} D_{\nu, \mu_0}^{j_0}(\Omega_{ql}) \sum_{\mu=-j_0}^{j_0} \langle \tilde{\Phi}_{j_0\mu} | \psi_{\mu, \nu}^{(j)} \rangle_r, \quad (2.14)$$

где подпись r означает, что в матричном элементе проводится интегрирование только по трём внутренним переменным ξ_r .

³Соответствующую систему координат обозначим QF. В общем случае, QF не совпадает ни с ВКС, ни с лабораторной системой.

2.2. Разложение произведения двух плоских волн

Волновая функция трёх невзаимодействующих частиц с моментами $\mathbf{q}_{1,2}$, сопряжёнными векторам Якоби $\mathbf{r}_{1,2}$, равна $\exp i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)$.

Если длины $r_{1,2}$ и угол θ между векторами Якоби фиксированы, то единственно возможным движением системы является вращение в пространстве⁴. Напомним, что векторы Якоби определяют ВКС, а векторы импульса \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 жёстко связаны с лабораторной координатной системой (ЛКС), фиксированной в пространстве.

Зависимость волновой функции от трёх коллективных углов, описывающих поворот от ВКС к ЛКС, представим в виде разложения по D -функциям Вигнера,

$$e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\mu, \nu=-j}^j F_{\mu, \nu}^j(\xi_r, \xi_q) D_{\mu, \nu}^j(\Omega_{bl}). \quad (2.15)$$

Здесь, параметры $F_{\mu, \nu}^j$ являются скалярными функциями наборов ξ_r и ξ_q (всего 6 переменных). Члены с фиксированным j в (2.15) соответствуют состояниям с определённым значением полного углового момента j , проекции которого на оси z ВКС и ЛКС равны $(-\mu)$ и ν , соответственно.

Очевидный способ вычисления коэффициентов $F_{\mu, \nu}^j$ состоит в разложении каждой плоской волны по отдельности [10],

$$e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} = \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} i^{l_1+l_2} (2l_1+1)(2l_2+1) j_{l_1}(q_1 r_1) j_{l_2}(q_2 r_2) \times \\ \times P_{l_1}(\hat{\mathbf{q}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_1) P_{l_2}(\hat{\mathbf{q}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (2.16)$$

где $j_{l_{1,2}}$ обозначает сферические функции Бесселя. Используя правила изме-

⁴Подразумевается, что начала координат лабораторной системы и ВКС совпадают и там же находится ц.м. системы.

нения схемы связи в тензорных произведениях [10], произведение двух многочленов Лежандра можно представить в виде скалярного произведения двух БГ,

$$P_{l_1}(\hat{\mathbf{q}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_1)P_{l_2}(\hat{\mathbf{q}}_2 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2) = \sum_{j,\nu} (-1)^{l_1+l_2+j+\nu} C_{j\nu}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) C_{j-\nu}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2). \quad (2.17)$$

В этом уравнении БГ должны вычисляться в одной и той же системе координат. Пусть это будет лабораторная система (ЛКС). Тогда связь компонент БГ в этой системе с компонентами, заданными в ВКС, осуществляется согласно правилу преобразования неприводимых тензоров

$$[C_{j\nu}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)]_{lf} = \sum_{\mu=-j}^j [C_{j\mu}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)]_{bf} D_{\mu,\nu}^j(\Omega_{bl}),$$

где подписи lf, bf обозначают в какой системе – лабораторной или вращающейся, соответственно, – заданы компоненты тензоров. Подставим теперь это уравнение в (2.17), затем полученное равенство в (2.16). В итоге, сравнивая коэффициенты с разложением (2.15), приходим к выражению

$$F_{\mu,\nu}^j = (-1)^{j+\nu} \sum_{l_1, l_2=0}^{\infty} (-i)^{l_1+l_2} (2l_1+1)(2l_2+1) j_{l_1}(q_1 r_1) j_{l_2}(q_2 r_2) \times \\ \times [C_{j\mu}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)]_{bf} [C_{j-\nu}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{q}}_1, \hat{\mathbf{q}}_2)]_{lf}. \quad (2.18)$$

Поскольку индексы связаны правилом треугольника, $|l_1 - j| \leq l_2 \leq (l_1 + j)$, заключаем, что только одно из двух суммирований является бесконечным.

Представление (2.18) коэффициентов $F_{\mu,\nu}^j$ в виде бесконечного ряда обладает рядом недостатков. Во-первых, при больших аргументах $q_{1,2} r_{1,2}$ функции Бесселя $j_{l_{1,2}}$ быстро осциллируют, что сильно замедляет сходимость ряда в (2.18). Такая ситуация, например, имеет место в случае тяжёлых частиц.

Во-вторых, как будет показано ниже, оказывается, что коэффициенты $F_{\mu,\nu}^j$ обладают рядом свойств симметрии, которые не видны в представлении (2.18).

Альтернативное представление коэффициентов $F_{\mu,\nu}^j$ можно получить, используя свойства ортогональности D -функций (см. формулу (4.10.5) книги [10]). В результате получаем следующее выражение для мультиполей,

$$F_{\mu,\nu}^j = \frac{2j+1}{8\pi^2} \int e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} D_{\mu,\nu}^j(\Omega) d\Omega. \quad (2.19)$$

где интегрирование проводится по трём коллективным углам Ω , описывающим поворот от ВКС к ЛКС. Полученное равенство является интегральным представлением мультипольных коэффициентов $F_{\mu,\nu}^j$.

Интеграл в (2.19) имеет простой физический смысл. Рассмотрим импульсное представление волновой функции жёсткого симметричного трёхчастичного волчка. Сначала заметим, что согласно стандартной теории [9, 133], волновая функция такой системы в координатном представлении равна

$$\Psi_r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \delta(r_1 - r_1^{(e)}) \delta(r_2 - r_2^{(e)}) \delta(\theta - \theta_e) D_{\mu,\nu}^j(\Omega), \quad (2.20)$$

где j, μ, ν – квантовые числа оператора полного углового момента; $\delta(x)$ – δ -функция Дирака и параметры $r_1^{(e)}, r_2^{(e)}, \theta_e$ описывают форму жёсткого треугольника⁵ (см. рис. Б.1).

Импульсное представление $\Psi_q(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ функции $\Psi_r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ определяется формулой,

$$\Psi_q(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) = \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 \Psi_r(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)}. \quad (2.21)$$

Элементарный объём интегрирования можно представить как $d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 = d\xi_r d\Omega$, где Ω описывает коллективное вращение и $d\xi_r = \sin \theta d\theta r_1^2 dr_1 r_2^2 dr_2$ – элемент

⁵При равных массах $m_1 = m_2 = m_3$ симметричный трёхчастичный волчок характеризуется параметрами $\theta_e = \pi/2, r_2^{(e)} = r_1^{(e)} \sqrt{3}/2$.

объёма в пространстве внутренних координат. Интегрирование по $d\xi_r$ снимается δ -функциями из (2.20). Таким образом, коэффициенты $F_{\mu,\nu}^j$ можно интерпретировать как волновую функцию трёхчастичного волчка в импульсном представлении.

В общем случае несимметричного волчка проекция $(-\mu)$ полного углового момента на ось z ВКС не является квантовым числом. Это означает, что в (2.20) должна быть произведена замена [9],

$$D_{\mu,\nu}^j(\Omega) \longrightarrow \sum_{\mu=-j}^j c_{j\mu} D_{\mu,\nu}^j(\Omega), \quad (2.22)$$

где не зависящие от Ω коэффициенты $c_{j\mu}$ являются функциями главных моментов инерции системы трёх тел. Если два из трёх моментов инерции равны, то, очевидно, получаем симметричный волчок с волновой функцией (2.20).

Чтобы вычислить интеграл в (2.19), необходимо фиксировать положение (т.е. компоненты) векторов Якоби $\mathbf{r}_{1,2}$ по отношению к осям ВКС. Аналогично, надо фиксировать компоненты импульсов $\mathbf{q}_{1,2}$ в осях ЛКС. Указанный выбор компонент можно рассматривать как калибровочные соглашения для ВКС и ЛКС.

Поскольку скаляр $(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)$ не зависит от выбора системы координат, можем вычислять его в лабораторной системе. Для этого заметим, что декартовы компоненты векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ в ЛКС связаны с компонентами из ВКС следующим равенством

$$r'_{1i} = \sum_k r_{1k} \mathcal{A}_{ki}, \quad i, k = x, y, z, \quad (2.23)$$

(аналогично для r'_{2i}), где штрих обозначает компоненты, заданные в лабораторной системе. Явные выражения для матрицы поворота \mathcal{A}_{ik} можно найти, например, в п. 1.4.6. книги [10]. Ниже, в п. 2.2.1 и п. 2.2.2, рассматриваются

две калибровки (т.е. варианты выбора) ВКС и ЛКС. В п. 2.2.3 рассматривается связь мультиполей, соответствующих разным калибровкам.

2.2.1. Калибровка половинного угла

В калибровке половинного угла компоненты векторов Якоби, заданные в ВКС, имеют вид

$$\hat{\mathbf{r}}_1 = \left(\cos \frac{\theta}{2}, -\sin \frac{\theta}{2}, 0 \right), \quad \hat{\mathbf{r}}_2 = \left(\cos \frac{\theta}{2}, \sin \frac{\theta}{2}, 0 \right). \quad (2.24)$$

Как видно, оба вектора Якоби лежат в плоскости xy ВКС с осью z , направленной вдоль векторного произведения $[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]$, см. рис. 2.1. Лабораторная

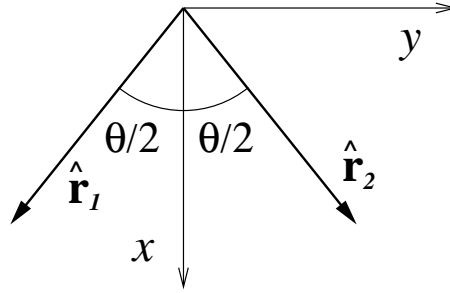


Рис. 2.1. ВКС в калибровке половинного угла (abf). Ось x направлена вдоль биссектрисы угла между векторами $\hat{\mathbf{r}}_1$ и $\hat{\mathbf{r}}_2$. Ось z перпендикулярна плоскости рисунка и направлена к читателю.

система (т.е. ЛКС) определяется выражениями, аналогичными (2.24) с очевидными заменами $\hat{\mathbf{r}}_{1,2} \rightarrow \hat{\mathbf{q}}_{1,2}$, $\theta \rightarrow \chi$, где χ обозначает угол между единичными векторами $\hat{\mathbf{q}}_1$ и $\hat{\mathbf{q}}_2$.

В соответствии с уравнением (2.23), показатель экспоненты в левой части (2.15) можно записать как

$$p \equiv (\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{q}_1) + (\mathbf{r}_2 \cdot \mathbf{q}_2) = \sum_{i,k=x,y,z} (r_{1i} \mathcal{A}_{ik} q'_{1,k} + r_{2,i} \mathcal{A}_{i,k} q'_{2,k}). \quad (2.25)$$

Выражения (2.24) для компонент векторов $\mathbf{r}_{1,2}$ и $\mathbf{q}_{1,2}$ позволяют представить это равенство в виде

$$p = a\mathcal{A}_{xx} + b\mathcal{A}_{yy} + c\mathcal{A}_{xy} + d\mathcal{A}_{yx}, \quad (2.26)$$

где параметры a, b, c, d определены формулами

$$\begin{aligned} a &= (q_1 r_1 + q_2 r_2) \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\chi}{2}, & b &= (q_1 r_1 + q_2 r_2) \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\chi}{2}, \\ c &= (q_2 r_2 - q_1 r_1) \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\chi}{2}, & d &= (q_2 r_2 - q_1 r_1) \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\chi}{2}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Используя явный вид элементов матрицы поворота \mathcal{A}_{ik} , получаем выражение для параметра p через углы Эйлера

$$\begin{aligned} p &= \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^2 \left((a + b) \cos(\alpha + \gamma) - (c - d) \sin(\alpha + \gamma) \right) - \\ &\quad - \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^2 \left((a - b) \cos(\alpha - \gamma) + (c + d) \sin(\alpha - \gamma) \right). \end{aligned} \quad (2.28)$$

После несложных манипуляций с тригонометрическими функциями это соотношение несколько упрощается,

$$p = \rho_1 \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^2 \sin(\alpha + \gamma + \delta) - \rho_2 \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^2 \sin(\alpha - \gamma + \delta'), \quad (2.29)$$

где фазовые сдвиги определены равенствами

$$\begin{aligned} \sin \delta &= \frac{a + b}{\rho_1} = \frac{q_1 r_1 + q_2 r_2}{\rho_1} \cos \frac{\theta - \chi}{2}, \\ \sin \delta' &= \frac{a - b}{\rho_2} = \frac{q_1 r_1 + q_2 r_2}{\rho_2} \cos \frac{\theta + \chi}{2}, \end{aligned} \quad (2.30)$$

и радиальные параметры $\rho_{1,2}$ равны

$$\begin{aligned} \rho_n^2 &= a^2 + b^2 + c^2 + d^2 - 2(-1)^n (ab - cd) = \\ &= r_1^2 q_1^2 + r_2^2 q_2^2 + 2(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2) - 2(-1)^n |\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2| |\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2|, \quad n = 1, 2. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Воспользуемся известным представлением D -функций,

$$D_{\mu,\nu}^j(\Omega) = e^{-i\mu\alpha} d_{\mu,\nu}^j(\beta) e^{-i\nu\gamma}$$

и выражением для элемента телесного угла $d\Omega = d\alpha(\sin\beta d\beta) d\gamma$. С учётом этих соотношений и формулы для производящей функции для функций Бесселя целого порядка [165]

$$e^{ix \sin\phi} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} J_n(x) e^{in\phi}, \quad (2.32)$$

интегрирование в (2.19) по углам α и γ проводится аналитически. В результате, при одинаковой чётности квантовых чисел μ и ν (т.е. при $\mu = \nu + 2k$, $k = 0, \pm 1, \pm 2 \dots$), интеграл в (2.19) приводится к виду,

$$\int e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1)} D_{\mu,\nu}^{j*}(\Omega) d\Omega = (2\pi)^2 (-1)^\nu e^{-i\mu(\delta+\delta')/2} e^{i\nu(\delta'-\delta)/2} \times \\ \times \int_0^\pi (\sin\beta d\beta) d_{\mu,\nu}^j(\beta) J_{\frac{\mu+\nu}{2}}\left(\rho_1 \cos^2 \frac{\beta}{2}\right) J_{\frac{\nu-\mu}{2}}\left(\rho_2 \sin^2 \frac{\beta}{2}\right). \quad (2.33)$$

Если индексы μ и ν имеют разную чётность, то интеграл в левой части равен нулю. Этот факт имеет интересное следствие. А именно, при $j = 1$ интеграл отличен от нуля только при $\nu = \mu = 0$. Известно [40], что D -функция $D_{0,\nu}^1$ пропорциональна вектору оси z декартова базиса ВКС, $D_{0,\nu}^1 \sim (\mathbf{e}_z)_\nu$, причём в калибровке половинного угла (см. рис. 2.1) имеем $\mathbf{e}_z = [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] / \sin\theta$. Поскольку коэффициент $F_{0,\nu}^1$ в этой калибровке отличен от нуля только при $\nu = 0$, получаем, что интеграл (2.33) пропорционален векторному произведению $[\hat{\mathbf{q}}_1 \times \hat{\mathbf{q}}_2]$. После несложных преобразований, получаем векторную форму

выражения, соответствующего мультиполю $F_{0,0}^1$,

$$\begin{aligned} \int e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \frac{[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]}{\sin \theta} d\Omega = \\ = (2\pi)^2 \frac{[\hat{\mathbf{q}}_1 \times \hat{\mathbf{q}}_2]}{\sin \chi} \int_0^\pi J_0 \left(\rho_1 \cos^2 \frac{\beta}{2} \right) J_0 \left(\rho_2 \sin^2 \frac{\beta}{2} \right) \cos \beta \sin \beta d\beta. \end{aligned} \quad (2.34)$$

Приведём также выражение для мультиполя $F_{0,0}^0$, соответствующего S -компоненте произведения плоских волн,

$$\int e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} d\Omega = (2\pi)^2 \int_0^\pi J_0 \left(\rho_1 \cos^2 \frac{\beta}{2} \right) J_0 \left(\rho_2 \sin^2 \frac{\beta}{2} \right) \sin \beta d\beta. \quad (2.35)$$

Рассмотрим свойства интеграла из правой части уравнения (2.33). Для начала несколько преобразуем этот интеграл

$$\begin{aligned} \int_0^{\pi/2} (\sin \beta d\beta) \left\{ d_{\mu,\nu}^j(\beta) J_{\frac{\mu+\nu}{2}} \left(\rho_1 \cos^2 \frac{\beta}{2} \right) J_{\frac{\nu-\mu}{2}} \left(\rho_2 \sin^2 \frac{\beta}{2} \right) + \right. \\ \left. + d_{\mu,\nu}^j(\pi - \beta) J_{\frac{\mu+\nu}{2}} \left(\rho_1 \sin^2 \frac{\beta}{2} \right) J_{\frac{\nu-\mu}{2}} \left(\rho_2 \cos^2 \frac{\beta}{2} \right) \right\}. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Функция $d_{\mu,\nu}^j(\pi - \beta)$ выражается через $d_{\mu,\nu}^j(\beta)$ посредством соотношений [10],

$$d_{\mu,\nu}^j(\pi - \beta) = (-1)^{j+\mu} d_{\mu,-\nu}^j(\beta) = (-1)^{j-\nu} d_{-\mu,\nu}^j(\beta).$$

Подстановка этих равенств в интеграл (2.36) приводит к двум различным представлениям подынтегрального выражения в терминах функций $d_{\mu,\nu}^j(\beta)$. Это даёт возможность установить дополнительные⁶ правила отбора для мультиполей $F_{\mu,\nu}^j$.

А именно, мультипольные коэффициенты $F_{\mu,\nu}^j$ в калибровке половинного угла обращаются в ноль, когда

⁶Помимо требования одинаковой чётности проекций μ, ν .

1. При $\rho_1 = \rho_2$, $\mu = 0$ (или $\nu = 0$) и нечётных $j = 1, 3, \dots$

Это правило отбора следует из свойства функций Бесселя $J_n(x) = (-1)^n J_{-n}(x) = (-1)^n J_n(-x)$ и требования одинаковой чётности индексов μ и ν .

2. При $\rho_1 = 0$ и $\mu \neq -\nu$, или $\rho_2 = 0$ и $\nu \neq \mu$.

Это следствие свойства $J_n(0) = 0$ при чётных n , что приводит к обращению в ноль подынтегральной функции в (2.36).

2.2.2. Калибровка zzx

В калибровке zzx , ВКС определяется следующими соотношениями для компонент векторов Якоби

$$\hat{\mathbf{r}}_1 = (0, 0, 1), \quad \hat{\mathbf{r}}_2 = (\sin \theta, 0, \cos \theta), \quad (2.37)$$

Из этих уравнений видно, что единичный вектор $\hat{\mathbf{r}}_1$ совпадает с базисным вектором \mathbf{e}_z и вектор $\hat{\mathbf{r}}_2$ лежит в плоскости zx , см. рис. 2.2. Векторное произ-

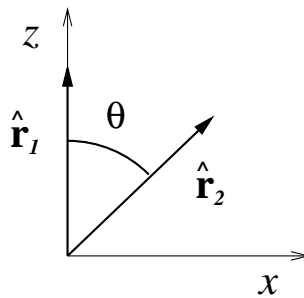


Рис. 2.2. ВКС в калибровке zzx . Ось z направлена вдоль $\hat{\mathbf{r}}_1$, ось y параллельна векторному произведению $[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]$. Вектор $\hat{\mathbf{r}}_2$ лежит в плоскости zx .

ведение $[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]$ имеет только одну ненулевую компоненту

$$[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]_y = \sin \theta. \quad (2.38)$$

Лабораторная координатная система (ЛКС) определена аналогично (2.37) с заменами $\hat{\mathbf{r}}_{1,2} \rightarrow \hat{\mathbf{q}}_{1,2}$, $\theta \rightarrow \chi$. Подставляя выражения для компонент векторов

$\mathbf{q}_{1,2}$ и $\mathbf{r}_{1,2}$ в (2.25), приходим к равенству

$$p = \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2 = q_1 r_1 (\mathcal{A}_{zx} \sin \chi + \mathcal{A}_{zz} \cos \chi) + q_2 r_2 (\mathcal{A}_{xz} \sin \theta + \mathcal{A}_{zz} \cos \theta). \quad (2.39)$$

Использование явного выражения для элементов матрицы поворота \mathcal{A}_{ik} позволяет записать параметр p через углы Эйлера,

$$p = \tilde{a} \cos \beta + \sin \beta (\tilde{b} \cos \alpha - \tilde{c} \cos \gamma), \quad (2.40)$$

где скалярные коэффициенты \tilde{a} , \tilde{b} и \tilde{c} определены формулами

$$\begin{aligned} \tilde{a} &= q_2 r_2 \cos \theta + q_1 r_1 \cos \chi, \\ \tilde{b} &= q_2 r_2 \sin \theta, \\ \tilde{c} &= q_1 r_1 \sin \chi. \end{aligned} \quad (2.41)$$

После подстановки (2.40) в (2.19) интегрирование по углам α , γ проводится в явном виде, так что в итоге имеем

$$F_{\mu,\nu}^j = \frac{2j+1}{2} (-1)^\nu i^{\nu+\mu} \int_0^\pi e^{i\tilde{a} \cos \beta} d_{\mu,\nu}^j(\beta) J_\mu(\tilde{b} \sin \beta) J_\nu(\tilde{c} \sin \beta) \sin \beta d\beta, \quad (2.42)$$

где J_μ – функция Бесселя [165].

Выражение для мультипольных коэффициентов в калибровке $z zx$ упрощается в важном частном случае, когда один из индексов μ , ν равен нулю. Для определённости, примем что $\mu = 0$. При $\mu = 0$ D -функция сводится к сферической гармонике: $D_{0,\nu}^j(\alpha\beta\gamma) = C_{j-\nu}(\beta, \gamma)$. Чтобы получить интегральное представление для $F_{0,\nu}^j$, проведём в выражении (2.40) замену переменных $\alpha \rightarrow \bar{\alpha}$, $\gamma \rightarrow \bar{\gamma}$ в соответствии с равенствами

$$\begin{aligned} \bar{\alpha} &= \frac{\alpha + \gamma}{2}, & \bar{\gamma} &= \frac{\alpha - \gamma}{2}, \\ \alpha &= \bar{\alpha} + \bar{\gamma}, & \gamma &= \bar{\alpha} - \bar{\gamma}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Область определения новых переменных $\bar{\alpha}$ и $\bar{\gamma}$ и якобиан преобразования D есть

$$0 \leq \bar{\alpha} \leq 2\pi, \quad -\pi \leq \bar{\gamma} \leq \pi, \quad D = \frac{\partial(\alpha, \gamma)}{\partial(\bar{\alpha}, \bar{\gamma})} = -2. \quad (2.44)$$

Выражение (2.40) для параметра p в новых переменных $\bar{\alpha}$, $\bar{\gamma}$ имеет вид

$$p = \tilde{a} \cos \beta + \sin \beta [(\tilde{b} - \tilde{c}) \cos \bar{\alpha} \cos \bar{\gamma} - (\tilde{b} + \tilde{c}) \sin \bar{\alpha} \sin \bar{\gamma}]. \quad (2.45)$$

Отметим, что формально параметр p можно представить как скалярное произведение двух векторов $\hat{\mathbf{x}}$ и \mathbf{v} , с декартовыми компонентами

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{x}} &= (\sin \beta \cos \bar{\alpha}, \sin \beta \sin \bar{\alpha}, \cos \beta), \\ \mathbf{v} &= (v_x, v_y, v_z) = ((\tilde{b} - \tilde{c}) \cos \bar{\gamma}, -(\tilde{b} + \tilde{c}) \sin \bar{\gamma}, \tilde{a}). \end{aligned} \quad (2.46)$$

Отсюда следует, что сферические углы единичного вектора $\hat{\mathbf{x}}$ равны β , $\bar{\alpha}$, а сферические координаты вектора \mathbf{v} есть

$$\begin{aligned} v &= \sqrt{\tilde{a}^2 + [(\tilde{b} - \tilde{c}) \cos \bar{\gamma}]^2 + [(\tilde{b} + \tilde{c}) \sin \bar{\gamma}]^2} = \sqrt{A - B \cos 2\bar{\gamma}}, \\ \cos \theta_v &= \frac{v_z}{v} = \frac{\tilde{a}}{\sqrt{A - B \cos 2\bar{\gamma}}}, \\ \tan \phi_v &= \frac{v_y}{v_x} = \frac{\tilde{c} + \tilde{b}}{\tilde{c} - \tilde{b}} \tan \bar{\gamma}, \end{aligned} \quad (2.47)$$

где параметры A и B определены равенствами

$$\begin{aligned} A &= \tilde{a}^2 + \tilde{b}^2 + \tilde{c}^2 = q_1^2 r_1^2 + q_2^2 r_2^2 + 2(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2)(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2) = \frac{\rho_1^2 + \rho_2^2}{2}, \\ B &= 2\tilde{b}\tilde{c} = 2|\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2| |\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2| = 2q_1 q_2 r_1 r_2 \sin \theta \sin \chi = \frac{\rho_1^2 - \rho_2^2}{2}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Используем теперь обычное мультипольное разложение плоской волны $\exp ip = \exp i(\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{v})$, что после подстановки в (2.19) даёт

$$\begin{aligned} F_{0,\nu}^j &= \frac{2j+1}{8\pi^2} \sum_{l=0}^{\infty} i^l (2l+1) \sum_{\mu=-l}^l (-1)^\mu \int_0^{2\pi} d\bar{\alpha} \int_{-\pi}^{\pi} d\bar{\gamma} \int_0^{\pi} (\sin \beta d\beta) \times \\ &\quad \times j_l(v) C_{l-\mu}(\theta_v, \phi_v) C_{l\mu}(\beta, \bar{\alpha}) C_{j-\nu}(\beta, \bar{\alpha} - \bar{\gamma}). \end{aligned} \quad (2.49)$$

Интегрирование по $\bar{\alpha}$ и β можно провести с помощью соотношения

$$\int_0^{2\pi} d\bar{\alpha} \int_0^\pi (\sin \beta d\beta) C_{l\mu}(\beta, \bar{\alpha}) C_{j-\nu}(\beta, \bar{\alpha} - \bar{\gamma}) = \frac{4\pi}{2j+1} \delta_{l,j} \delta_{\mu,\nu} (-1)^\nu e^{i\nu\bar{\gamma}}, \quad (2.50)$$

которое следует из свойства ортогональности сферических гармоник. Таким образом, получаем интегральное представление мультипольных коэффициентов $F_{0,\nu}^j$,

$$F_{0,\nu}^j = \frac{2j+1}{2\pi} i^j \int_{-\pi}^\pi e^{i\nu\bar{\gamma}} j_j(v) C_{j-\nu}(\theta_v, \phi_v) d\bar{\gamma}. \quad (2.51)$$

Для S -мультиполя (с $j = \nu = 0$), подынтегральное выражение существенно упрощается,

$$F_{0,0}^0 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi j_0(v) d\bar{\gamma} = \frac{1}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin \sqrt{A - B \cos \gamma}}{\sqrt{A - B \cos \gamma}} d\gamma. \quad (2.52)$$

Упрощается также выражение для P -мультиполя $F_{\mu,\nu}^1$ с $\mu = \mp 1$, $\nu = \pm 1$, что соответствует мультиполю $F_{0,0}^1$ в калибровке половинного угла, см. раздел 2.2.1.

Представления мультиполей (2.51), (2.42) при $\mu = 0$ приводят к нетривиальному соотношению для интегралов, содержащих функции Бесселя,

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{i\tilde{a} \cos \beta} C_{j\nu}(\beta) J_0(\tilde{b} \sin \beta) J_\nu(\tilde{c} \sin \beta) \sin \beta d\beta = \\ = i^{j+\nu} \int_{-\pi}^\pi e^{i\nu\bar{\gamma}} j_j(v) C_{j-\nu}(\theta_v, \phi_v) d\bar{\gamma}. \end{aligned} \quad (2.53)$$

2.2.3. Связь мультиполей, соответствующих разным калибровкам, и интегралы с функциями Бесселя

Ниже рассматривается связь между мультипольными коэффициентами $F_{\mu,\nu}^j$ в различных калибровках. В каждой калибровке мультиполи выражаются через интегралы, содержащие функции Бесселя. Таким образом, устанавливая связь между мультиполями в разных калибровках, мы попутно получаем соотношения, связывающие интегралы с функциями Бесселя. Отметим, что такого рода соотношения не известны в общедоступной литературе [165].

Для начала отметим, что S -мультиполь $F_{0,0}^0$ является скаляром и не зависит от калибровочного соглашения. Поэтому, сравнивая представления (2.33), (2.42) и (2.51) при $j = \nu = \mu = 0$, приходим к цепочке равенств

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{i\tilde{a}\cos\beta} J_0(\tilde{b}\sin\beta) J_0(\tilde{c}\sin\beta) \sin\beta d\beta &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin\sqrt{A-B\cos\gamma}}{\sqrt{A-B\cos\gamma}} d\gamma = \\ &= \int_0^\pi J_0\left(\sqrt{A+B}\cos^2\frac{\beta}{2}\right) J_0\left(\sqrt{A-B}\sin^2\frac{\beta}{2}\right) \sin\beta d\beta. \end{aligned} \quad (2.54)$$

Вычисление векторного интеграла

$$\int e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1)} \frac{[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]}{\sin\theta} d\Omega$$

в калибровке $z zx$, и сравнение получаемого выражения с формулой (2.34), соответствующей калибровке половинного угла, приводит к ряду соотношений типа (2.54),

$$\begin{aligned} \int_0^\pi e^{i\tilde{a}\cos\beta} J_1(\tilde{b}\sin\beta) J_1(\tilde{c}\sin\beta) \sin\beta d\beta &= \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \frac{\sin\sqrt{A-B\cos\gamma}}{\sqrt{A-B\cos\gamma}} \cos\gamma d\gamma = \\ &= - \int_0^\pi J_0\left(\sqrt{A+B}\cos^2\frac{\beta}{2}\right) J_0\left(\sqrt{A-B}\sin^2\frac{\beta}{2}\right) \cos\beta \sin\beta d\beta. \end{aligned} \quad (2.55)$$

В приведённых выше уравнениях, параметры $\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}$ определены в (2.41), а параметры A, B – равенствами (2.48).

Примечательно, что интегралы в левых частях равенств (2.54) и (2.55) зависят от *трёх* параметров $\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}$, в то время как интегралы в правых частях зависят только от *двух* параметров A и B .

Связь между мультиполями $F_{\mu,\nu}^j$, соответствующими различным калибровкам, можно установить с помощью теоремы сложения поворотов. Обозначая bf_1, lf_1 (bf_2, lf_2) вращающуюся и лабораторную системы, соответствующие первой (второй) калибровке, теорема сложения поворотов выражается соотношением [10]

$$D_{\mu,\nu}^j(\Omega_{b_1l_1}) = \sum_{\mu'=-j}^j D_{\mu,\mu'}^j(\Omega_{b_1b_2}) \sum_{\nu'=-j}^j D_{\mu',\nu'}^j(\Omega_{b_2l_2}) D_{\nu',\nu}^j(\Omega_{l_2l_1}),$$

где $\Omega_{b_1l_1}$ обозначает углы поворота от ВКС1 к ЛКС1 и т.п.. Важно, что углы поворота от первой ко второй ВКС, $\Omega_{b_1b_2}$ (или от первой ко второй ЛКС, $\Omega_{l_1l_2}$) зависят только от внутренних координат ξ_r (или ξ_q). Взяв комплексное сопряжение приведённого выше равенства и учитывая определение мультиполей (2.19), получаем

$$F_{\mu,\nu}^j(1) = \sum_{\mu',\nu'=-j}^j \left[D_{\mu,\mu'}^j(\Omega_{b_1b_2}) D_{\nu',\nu}^j(\Omega_{l_2l_1}) \right]^* F_{\mu',\nu'}^j(2). \quad (2.56)$$

Здесь, аргументы 1(2) мультиполей $F_{\mu,\nu}^j$ обозначают первое (второе) калибровочное соглашение.

Как следствие получаем соотношение между мультиполями, определёнными в калибровках $z zx$ и половинного угла abf ,

$$F_{\mu,\nu}^j(zzx) = \sum_{\mu',\nu'=-j}^j D_{\mu,\mu'}^j\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, -\frac{\theta}{2}\right) D_{\nu',\nu}^j\left(\frac{\chi}{2}, \frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right) F_{\mu',\nu'}^j(abf). \quad (2.57)$$

Обратное соотношение имеет вид

$$F_{\mu,\nu}^j(abf) = \sum_{\mu',\nu'=-j}^j D_{\mu,\mu'}^j\left(\frac{\theta}{2}, \frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{2}\right) D_{\nu',\nu}^j\left(\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}, -\frac{\chi}{2}\right) F_{\mu',\nu'}^j(zzx). \quad (2.58)$$

Поскольку мультипольные коэффициенты выражаются интегралами с функциями Бесселя, уравнения (2.57), (2.58) представляют собой соотношения между такими интегралами. Эти соотношения обладают интересной особенностью. А именно, мультиполи $F_{\mu,\nu}^j(zzx)$ представлены интегралами, зависящими от *трёх* параметров $\tilde{a}, \tilde{b}, \tilde{c}$ (см. (2.42)), в то время как мультиполи $F_{\mu,\nu}^j(abf)$ есть интегралы, зависящие от *двух* параметров $\rho_{1,2}$, т.к. третий параметр входит в выражение (2.33) для $F_{\mu,\nu}^j(abf)$ только в виде фазового множителя. Другими словами, трёхпараметрический интеграл (2.42) можно представить как комбинацию двухпараметрических интегралов (2.33) с весовыми множителями в виде фазовых факторов, зависящих от третьего параметра.

2.3. Кинематическая модель трёхчастичного распада

В качестве иллюстрации применения метода коллективных мультипольных разложений, рассмотрим простую модель полной фрагментации системы трёх слабо взаимодействующих частиц. Для простоты будем полагать, что массы частиц одинаковы и равны m . Чтобы избежать вопроса о перестановочной симметрии, предположим также, что частицы различимы.

Допустим, что в начальном состоянии частицы находятся в вершинах равностороннего треугольника и колебательное движение частиц пренебрежимо мало. Таким образом, единственно возможное движение системы представляет собой коллективное вращение тройки частиц. Затем, в некоторый корот-

кий промежуток времени, система распадается на три фрагмента. При этом допустим, что взаимодействие между фрагментами много меньше их кинетической энергии. Другими словами, частицы в начальном состоянии были связаны бесконечно большим потенциалом фиксированного радиуса, который внезапно обращается в ноль. Такой процесс можно назвать “взрывом” системы трёх тел.

В рамках такой модели, волновая функция частиц в конечном состоянии представляет собой произведение двух плоских волн (2.15), где векторы импульсов $\mathbf{q}_{1,2}$ определены формулой (2.8). (Предполагается, что ц.м. системы не движется, так что $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 + \mathbf{k}_3 = 0$.) В низшем приближении, амплитуда A фрагментации (или “взрыва”) определена интегралом перекрытия

$$A = \langle \Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} | \Psi_{jm} \rangle, \quad (2.59)$$

где Ψ_{jm} – волновая функция начального (связанного) состояния и $\Psi_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}$ – волновая функция непрерывного спектра системы трёх тел. Как видно, амплитуда A определена аналогично интегралу (2.21), и, поэтому, A совпадает с мультипольным коэффициентом $F_{\mu, \nu}^j$ с точностью до множителя $(2j + 1)/(8\pi^2)$.

Физический смысл квантовых чисел μ и ν в рамках рассматриваемой модели следующий. Индекс ν соответствует проекции полного углового момента j на ось z ЛКС. Поскольку детекторы измеряют асимптотические импульсы $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$, а не угловой момент \mathbf{j} , чтобы получить сечение процесса надо взять сумму квадратов модулей амплитуд $F_{\mu, \nu}^j$ по проекциям ν от $-j$ до j . Можно показать, что суммирование по индексу ν приводит к независимости сечения от выбора ЛКС.

Индекс $(-\mu)$ представляет собой проекцию момента \mathbf{j} на ось z ВКС [10, 40]. В общем случае, μ не является квантовым числом, за исключением случая

симметричного волчка, когда два момента инерции равны. Тем не менее, во многих ситуациях индекс μ можно считать хорошим квантовым числом. В рассматриваемой модели системы трёх частиц одинаковой массы, расположенных в вершинах равностороннего треугольника, μ является точным квантовым числом.

2.3.1. Диаграммы Далитца

Прежде чем представить результаты вычисления амплитуды фрагментации в рамках предлагаемой модели, необходимо кратко обсудить метод визуализации результатов.

Сечение процесса трёхчастичной фрагментации является функцией двух параметров, определяющих как распределение энергии между фрагментами, так и их угловое распределение. Действительно, среди шести компонентов векторов \mathbf{q}_1 и \mathbf{q}_2 , три описывают ориентацию пары векторов в пространстве, и фиксированы в эксперименте. Остальные три связаны между собой законом сохранения энергии, $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2 = 2mW$, где W – суммарная кинетическая энергия фрагментов. Ниже, для краткости, положим $W = m = 1$.

Наглядным способом визуализации угловых распределений фрагментов трёхчастичных распадов является техника диаграмм Далитца [164]. Предложенная изначально для анализа процессов распада в физике высоких энергий, эта техника недавно использовалась в работе [51, 53] для анализа экспериментальных данных процесса предиссоциации трёхатомной молекулы водорода H_3 . Стоит отметить, что диаграммы Далитца в задаче четырёх тел рассматривались в работе [166].

Декартовы координаты диаграммы Далитца определены равенствами $x = (\epsilon_2 - \epsilon_1)/\sqrt{3}$ и $y = \epsilon_3 - 1/3$. Чтобы связать координаты x , y с импульсами

$\mathbf{q}_{1,2}$, перепишем закон сохранения энергии через векторы $\mathbf{q}_{1,2}$, что даёт

$$q_1^2 + \frac{3}{4}q_2^2 = 1. \quad (2.60)$$

Это соотношение позволяет выразить декартовы координаты диаграммы Далинца через векторы импульса,

$$x = \frac{1}{2\sqrt{3}}(2q_1^2 + (\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2) - 1), \quad y = \frac{q_1^2}{3} - \frac{(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2)}{2} - \frac{1}{6}. \quad (2.61)$$

Смысл полярных координат диаграммы Далинца можно выяснить вычислив квадрат векторного произведения $[\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2]$,

$$|\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2|^2 = |\mathbf{k}_1 \times \mathbf{k}_2|^2 = \frac{1}{3} - 3(x^2 + y^2) = \frac{1}{3} - 3\rho^2, \quad (2.62)$$

где ρ – полярный радиус диаграммы Далинца, т.е. расстояние от центра диаграммы до точки с координатами x, y . Замечая, что векторное произведение $[\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2] = [\mathbf{k}_1 \times \mathbf{k}_2]$ определяет площадь треугольника, составленного из векторов импульса \mathbf{k}_i , $i = 1, 2, 3$, заключаем, что точки на диаграмме Далинца с фиксированным ρ соответствуют геометриям распада, характеризующимся одинаковой площадью треугольника конфигураций, см. рис. 2.3. Таким образом, при фиксированном ρ и различных значениях полярного угла

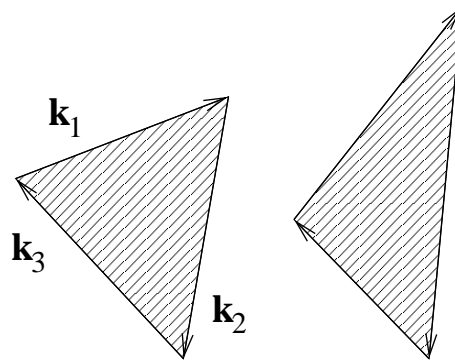


Рис. 2.3. Пример треугольников конфигураций с одинаковой площадью $S = |\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2|/2$.

$\phi = \tan^{-1}(x/y)$, изменяется только периметр $P = k_1 + k_2 + k_3$. Отметим, что

всюду на диаграмме сумма $k_1^2 + k_2^2 + k_3^2$ неизменна ввиду закона сохранения энергии.

Участки (направления) диаграммы для которых $\phi = \pi n/3, n = 0, 1, 2 \dots 5$, описывают “равнобедренные” конфигурации, для которых две стороны конфигурационного треугольника равны. Например, при $\phi = 0$ имеем $k_1 = k_2 < k_3$, и при $\phi = \pi$, $k_1 = k_2 > k_3$ и т.д.. Следовательно, диаграмма Делитца состоит из трёх секторов, определённых условиями $0 \leq \phi < 2\pi/3$, $2\pi/3 \leq \phi < 4\pi/3$, и $4\pi/3 \leq \phi < 2\pi$. Точки диаграммы с одинаковыми ρ , полярные углы ϕ которых отличаются на $2\pi/3$, описывают конфигурационные треугольники одной и той же формы, но с изменённым порядком частиц, например 123, 231, 312. Коллинеарные конфигурации⁷ соответствуют краям диаграммы, т.е. точкам с $\rho = 1/3$.

2.3.2. Распад трёхчастичного волчка

В этом разделе анализируются мультипольные коэффициенты $F_{\mu,\nu}^j$ для начального состояния системы трёх тел, расположенных в вершинах равностороннего треугольника, см. рис. Б.1 при $\theta = \pi/2$ и $r_1 = r_e, r_2 = r_e\sqrt{3}/2$. В данном случае начальное состояние представляет собой симметричный волчок. Так как проекция μ углового момента на ось симметрии, перпендикулярную плоскости векторов Якоби $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$, является квантовым числом, то при вычислении мультиполей следует использовать калибровку половинного угла, см. раздел 2.2.1.

Для равносторонней конфигурации параметры $\rho_{1,2}$ в (2.31) приводятся к

⁷Когда импульсы $\hat{\mathbf{k}}_i$ находятся на одной линии.

виду

$$\rho_n^2 = r_e^2 \left(1 - (-1)^n \sqrt{3} |\mathbf{q}_1 \times \mathbf{q}_2| \right) = r_e^2 (1 - (-1)^n \sqrt{1 - 9\rho^2}), \quad (2.63)$$

а фазовые сдвиги δ , δ' равны

$$\begin{aligned} \sin \delta &= \frac{r_e}{\rho_1} \left(q_1 + q_2 \sqrt{3}/2 \right) \cos \left(\frac{\pi}{4} - \frac{\chi}{2} \right), \\ \sin \delta' &= \frac{r_e}{\rho_2} \left(q_1 + q_2 \sqrt{3}/2 \right) \cos \left(\frac{\pi}{4} + \frac{\chi}{2} \right). \end{aligned} \quad (2.64)$$

Из уравнений (2.33) и (2.63) следует, что величина $|F_{\mu,\nu}^j|$ зависит только от полярного радиуса ρ диаграммы. Таким образом, в рассматриваемом случае диаграмма Далитца, соответствующая мультиполю $|F_{\mu,\nu}^j|^2$, представляет собой набор кольцевых структур. Отметим, что диаграмма Далитца для S -компоненты мультипольного разложения произведения плоских волн $|F_{0,0}^0|^2$ не зависит от калибровки и также имеет кольцевую симметрию. Этот факт следует из интегрального представления (2.52).

Согласно (2.63), коллинеарным конфигурациям в калибровке половинного угла соответствуют параметры $\rho_1 = \rho_2 = r_e$. В центре диаграммы имеем $\rho_2 = 0$ и $\rho_1 = \sqrt{2}r_e$. В обоих случаях мультипольный коэффициент $F_{\mu,\nu}^j$ подчиняется правилам отбора, указанным в п. 2.2.1.

На рис. 2.4 показана диаграмма Далитца для системы трёх частиц, массы которых равны массе протона. Как видно на рис. 2.4, диаграмма Далитца параметра $|F_{0,0}^0|^2$, т.е. S -компоненты мультипольного разложения, имеет максимум в центре. При коллинеарных конфигурациях, соответствующих краям диаграммы, также имеется максимум. В амплитуду распада состояния с квантовыми числами $j = 1$, $\mu = 1$ дают вклад три мультиполя $F_{1,\mu}^1$ с $\mu = 0, \pm 1$, из которых один равен нулю, $F_{1,0}^1 = 0$. Квадраты модулей этих мультиполей показаны на рис. 2.5. Мультиполи с $\mu = -1$ обращаются в ноль при сим-

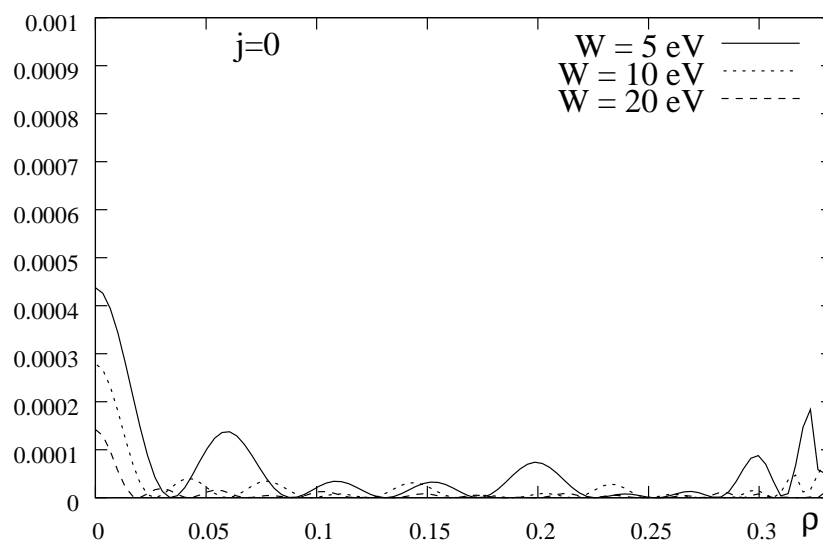
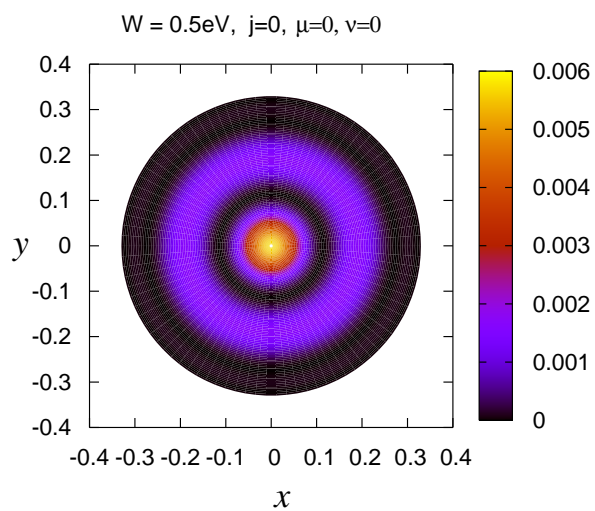


Рис. 2.4. Диаграмма Далитца для S -мультиполей: $|F_{0,0}^0|^2$, соответствующего энергии $W = 0.5, 5, 10, 20$ эВ, как функция полярной координаты ρ .

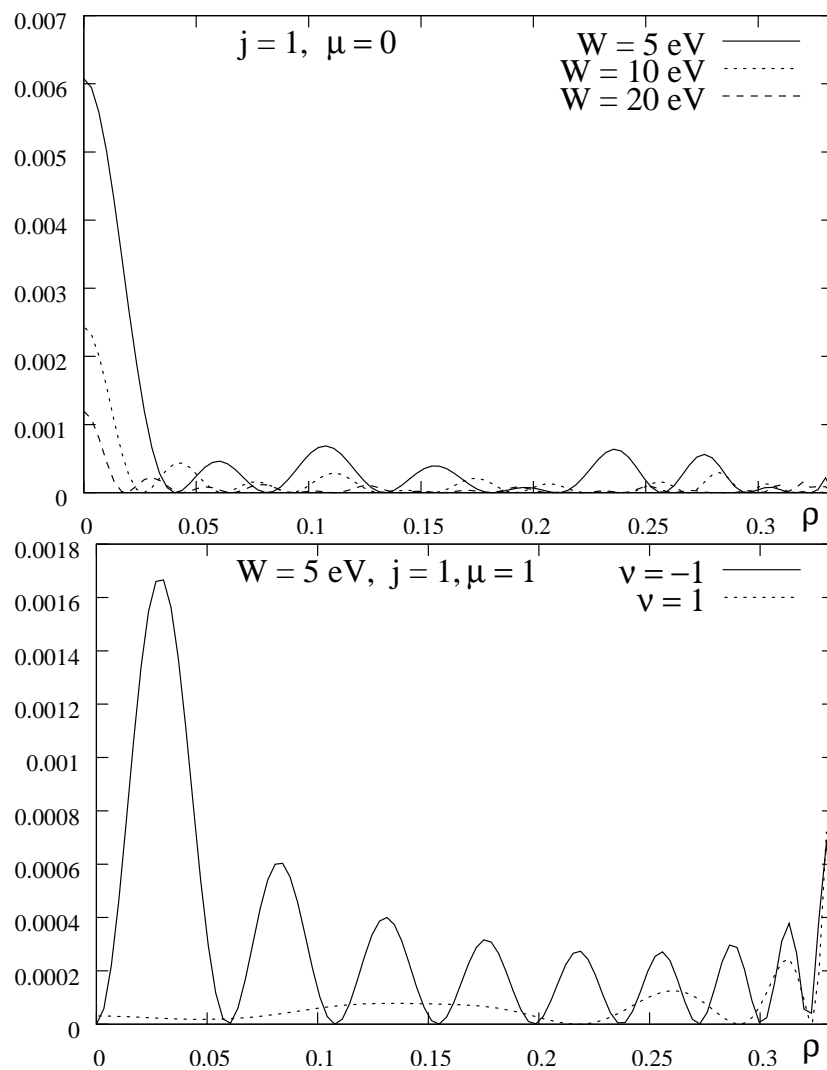


Рис. 2.5. P -мультиполи: $|F_{0,0}^1|^2$ для различных энергий W и мультиполи $|F_{1,\pm 1}^1|^2$ для $W = 5$ эВ.

метричном разлёте фрагментов, соответствующем центру диаграммы. Это обусловлено первым правилом отбора из приведённых в п. 2.2.1.

Начальное состояние с $j = 1$, $\mu = 0$ “вырезает” из конечного состояния один мультиполь $F_{0,0}^1$, который обращается в ноль при коллинеарном распаде, когда импульсы фрагментов параллельны см. рис. 2.5. Это также следует из первого правила отбора для мультиполей в калибровке половинного угла. Вклад D -мультиполей, описывающих распад состояния с $j = 2$, показан на рис. 2.6. В этом случае второе правило отбора приводит к тому, что при симметричном разлёте фрагментов мультиполи $F_{1,-1}^2$, $F_{2,-2}^2$ дают нулевой вклад в сечение.

Диаграммы, изображённые на рис. 2.5 и 2.6 имеют интересную особенность. А именно, величина параметров $|F_{\mu,-\mu}^j|^2$ больше $|F_{\mu,\nu}^j|^2$ с $\nu \neq -\mu$ почти во всех точках диаграммы, за исключением её края. Объяснение этого факта может быть дано в рамках классической механики.

Для простоты ограничимся рассмотрением случая, когда $\mu = j$, что в классической механике соответствует вращению тройки частиц вокруг оси, перпендикулярной плоскости частиц. Таким образом, векторы Якоби $\mathbf{r}_{1,2}$, и сопряжённые им импульсы $\mathbf{q}_{1,2}$ лежат в одной плоскости. В калибровке половинного угла это плоскость xu как вращающейся, так и лабораторной координатных систем, оси z которых совпадают. Поэтому, в классической механике, проекция углового момента \mathbf{j} на ось z ВКС совпадает с проекцией \mathbf{j} на ось z ЛКС. Замечая, что индекс μ является проекцией углового момента на ось z ВКС, взятую с *обратным знаком*, заключаем что мультиполи $F_{j,-j}^j$ “классически разрешены”, в отличие от мультиполей $F_{j,j}^j$, которые не имеют классического аналога.

Далее, на диаграммах видно, что если симметричный разлёт фрагмен-

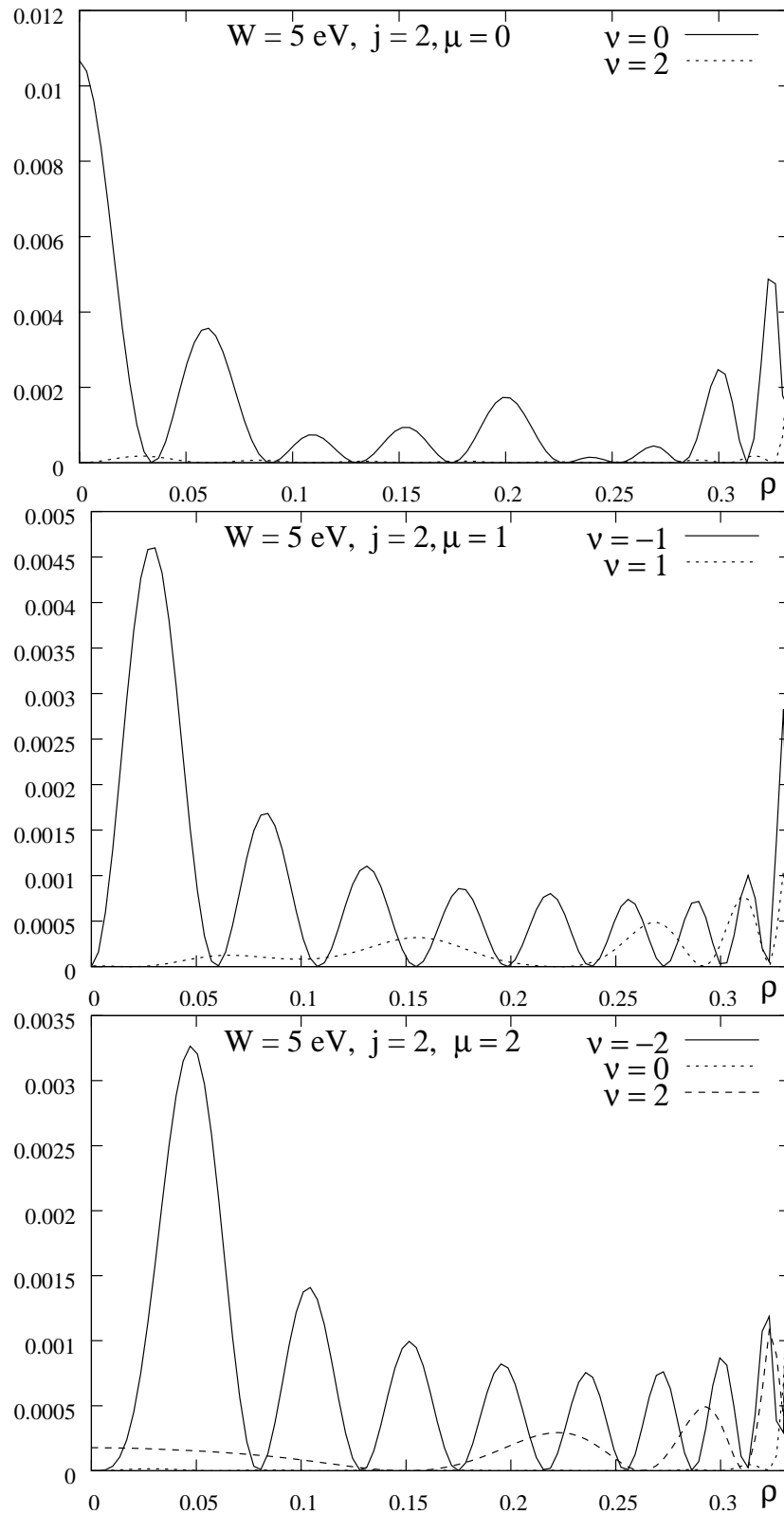


Рис. 2.6. D -мультиполи: $|F_{\mu,\nu}^2|^2$. На графике с $\nu = 0$ кривая для $\mu = -2$ совпадает с кривой для $\mu = 2$.

тов (центр диаграммы) не запрещён правилами отбора, то сечение при этом имеет максимум. В классической механике, частицы с равной массой, вращающиеся вокруг оси симметрии системы, имеют равные по величине скорости, векторная сумма которых равна нулю⁸. Следовательно, импульсы частиц также равны по величине и образуют векторный треугольник, см. рис. 2.3. После того как связи между частицами оборвались, импульсы частиц остаются неизменными и образуют симметричную конфигурацию. Таким образом, в данном случае центр диаграммы Далитца представляет собой классически разрешённую геометрию распада. По всей видимости, возможность данной выше классической интерпретации диаграмм на рис. 2.4–2.6 обусловлена относительно большими массами фрагментов. Однако, классическая интерпретация должна рассматриваться с осторожностью. Например, коллинеарный распад фрагментов классически запрещён, но в квантовой механике его величина может быть весьма существенной, см. диаграмму рис. 2.4. Действительно, классический предел соответствует большим массам и большим угловым моментам $j \gg 1$. Очевидно, в рассматриваемой модели последнее требование не выполняется.

Сечение распада определяется суммой величин $|F_{\mu,\nu}^j|^2$, взятой по индексу проекции ν углового момента на ось z ЛКС. Поскольку основной вклад в дифференциальное сечение дают члены с $\nu = -\mu$, имеет смысл говорить о правилах отбора для $F_{\mu,-\mu}^j$ как о “правилах предпочтения” (propensity rules). Исключением является коллинеарный распад, когда коэффициенты $F_{\mu,\nu}^j$ с различными проекциями ν имеют сравнимую величину.

⁸Подразумевается, что ц.м. системы не движется.

2.4. Выводы

В данном разделе было рассмотрено применение метода ВКС [19, 162] для отыскания коллективных мультипольных разложений волновых функций непрерывного спектра системы трёх тел. В качестве примера было получено коллективное мультипольное разложение волновой функции трёх невзаимодействующих частиц $\exp i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)$. Было показано, что коэффициенты в этом разложении обладают рядом интересных особенностей. Например, S -волновая часть разложения является функцией только *двух* переменных. Хотя форма треугольника, в вершинах которого находятся частицы, описывается *тремя* параметрами.

Коллективные мультипольные разложения данной функции не единственны, и их явный вид зависит от определения ВКС и ЛКС. Выше были рассмотрены две различные калибровки, т.е. варианты выбора координатных систем. В разделе 2.2.1 рассматривалась калибровка половинного угла, а в разделе 2.2.2 – калибровка z -связи. В обоих случаях были получены интегральные представления мультипольных коэффициентов разложения произведения двух плоских волн (см. формулы (2.33) и (2.42)). На базе правила сложения поворотов, в разделе 2.2.3 была получена связь между мультиполями, соответствующими различным калибровкам. Математически, эта связь выражается соотношениями между интегралами, содержащими произведения функций Бесселя (формулы (2.53) – (2.55)).

Важно, что волновая функция системы трёх частиц с короткодействующим потенциалом, в пределе больших расстояний между частицами, стремится к волновой функции невзаимодействующих частиц, т.е. произведению двух плоских волн. Таким образом, мультиполи $F_{\mu,\nu}^j$ разложения функции

$\exp i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)$ можно рассматривать как граничные условия для j -ой мультипольной компоненты волновой функции континуума трёх тел. В этой связи в работе [167] проводилось исследование свойств S -мультиполя в разложении произведения двух плоских волн. Там же была отмечена указанная выше интересная особенность S -мультиполя – его зависимость от двух внутренних переменных вместо трёх.

Вычисление волновой функции рассеяния для трёх тел представляется чрезвычайно сложной задачей, поскольку связано с решением дифференциального уравнения в частных производных в шестимерном пространстве. В то же время, вычисление мультипольных компонент этой функции практически гораздо проще, т.к. размерность соответствующих уравнений равна трём.

В разделе 2.3 было показано, что физический смысл коллективных мультипольных коэффициентов можно понять с помощью простой модели мгновенного распада абсолютно твёрдого тела, состоящего из трёх частиц. В данной “кинематической” модели, мультипольные коэффициенты представляют собой амплитуду процесса, определённую как интеграл перекрытия между начальным связанным состоянием с фиксированным угловым моментом и конечным состоянием континуума трёх невзаимодействующих частиц. Иными словами, коллективные мультиполи есть волновая функция жёсткого трёхчастичного волчка в импульсном представлении⁹.

Кинематическая модель имеет аналогию с экспериментами по кулоновскому взрыву (Coulomb-explosion imaging, CEI), см. работы [168, 169]. В экспериментах CEI, регистрируется угловое распределение фрагментов, возникающих в результате фрагментации молекулярных ионов, пролетающих с боль-

⁹Данные утверждения справедливы, если проекция углового момента на ось z вращающейся системы координат является точным квантовым числом

шой скоростью через тонкие фольги. Прямое использование кинематической модели в данном случае затрудняется далекодействующим характером кулоновского взаимодействия фрагментов. Существуют, однако, возможности обобщить кинематическую модель с целью учёта кулоновского потенциала. Например, можно рассмотреть коллективное мультипольное разложение так называемой ЗС-волновой функции [43, 47, 170, 171], которая является асимптотикой решения уравнения Шрёдингера для системы трёх заряженных частиц.

Разработанная техника может быть применена к задачам об угловых распределениях в процессах молекулярного рассеяния и диссоциации. Теория таких процессов обычно основана на приближении Борна-Оппенгеймера. В этом приближении потенциал взаимодействия молекулярных центров является короткодействующим и представляет собой усреднённое поле, создаваемое электронами. При распаде системы на нейтральные фрагменты может случиться, что кинетическая энергия фрагментов будет значительно больше потенциала их взаимодействия. В таком случае имеет смысл использовать для расчёта волновой функции теорию возмущений по взаимодействию частиц. Такая задача рассмотрена в работе [58], где получены коллективные мультипольные разложения для функции Грина системы трёх невзаимодействующих частиц, и рассмотрена задача о вычислении поправок к волновой функции континуума.

В данном разделе не затрагивался важный вопрос о перестановочной симметрии волновых функций. Этот вопрос должен рассматриваться в рамках конкретной физической задачи. Отметим лишь, что эффекты квантовой статистики могут привести к наложению дополнительных правил отбора на мультипольные коэффициенты.

Четырёхмерные мультипольные разложения и симметрия Фока атома водорода

В данной главе рассматривается задача о вычислении матричных элементов, содержащих нерелятивистские водородные волновые функции. Вычисления проводятся на основе четырёхмерных мультипольных разложений¹ волновых функций атома водорода в импульсном пространстве.

Структура главы следующая. В разделе 3.1 рассматривается связь матричных элементов в координатном и импульсном представлениях. Выражение для матричных элементов оператора электромагнитного взаимодействия в терминах форм-факторных интегралов выведено в п. 3.1.1. Далее, в п. 3.1.2, с помощью метода стереографических проекций изучаются свойства форм-факторов, записанных через четырёхмерные гиперсферические гармоники (ГСГ). Там же показано, что вычисление форм-факторов сводится к задаче о мультипольном разложении ГСГ, умноженной на некоторую скалярную функцию. Такое мультипольное разложение выводится в разделе 3.2. Сначала, в п. 3.2.1, мультипольное разложение получено в тензорном виде, т.е. как неприводимое тензорное произведение нескольких ГСГ. Далее в п. 3.2.2, получены явные выражения для мультипольных коэффициентов. В разделе 3.2 анализируются свойства матричных элементов, исходя из выражений для мультипольных коэффициентов. В п. 3.3.2 исследуется дипольное приближение для мультипольных коэффициентов. Раздел 3.4 содержит обсуждение

¹ Гиперсферические гармоники, коэффициенты Клебша-Гордана и мультипольные разложения в четырёхмерном пространстве рассмотрены в статье [79].

результатов главы.

В Приложении Г.1 вычисляются ряды, возникающие в процессе вывода мультипольных разложений. Замкнутые выражения для функции $P_{nl, n_3 l_3}^{(l_2)}$, определяющей матричные элементы, при некоторых частных значениях квантовых чисел получены в Приложении Г.3. В Приложении Г.2 выводятся явные выражения для функции $P_{nl, n_3 l_3}^{(l_2)}$. Детали вывода рекуррентных соотношений для функций $P_{nl, n_3 l_3}^{(l_2)}$ содержатся в Приложении Г.4.

В данной главе векторы в четырёхмерном пространстве обозначаются буквами с жирным шрифтом \mathbf{p} , \mathbf{k} и т.п.. Единичные четырёхмерные векторы обозначаются буквами со шляпкой, напр. $\hat{\mathbf{x}}$, $\hat{\mathbf{y}}$. Трёхмерные векторы обозначаются буквами со стрелкой: \vec{p} , \vec{k} , и т.п..

3.1. Стереографические проекции и матричные элементы с водородными волновыми функциями

Цель данного раздела – сформулировать задачу о водородных волновых функциях и матричных элементах в терминах четырёхмерных ГСГ.

3.1.1. Матричные элементы в импульсном пространстве

Волновая функция атома водорода в импульсном пространстве $\psi_{nlm}(\vec{p})$ определяется как Фурье-образ координатного представления волновой функции,

$$\begin{aligned}\psi_{nlm}(\vec{p}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{-i\vec{p}\cdot\vec{r}} \psi_{nlm}(\vec{r}) d\vec{r}, \\ \psi_{nlm}(\vec{r}) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int e^{i\vec{p}\cdot\vec{r}} \psi_{nlm}(\vec{p}) d\vec{p},\end{aligned}\tag{3.1}$$

где n – главное квантовое число и l, m – квантовые числа углового момента, $l = 0, 1, \dots, n - 1$ и $m = -l, -l + 1, \dots, l$. Явное выражение волновой функции в импульсном пространстве имеет вид [59],

$$\psi_{nlm}(\vec{p}) = \frac{4\beta^{5/2}}{(\beta^2 + (\vec{p})^2)^2} Y_{n-1,lm}(\hat{\mathbf{y}}), \quad \beta = Z/n, \quad (3.2)$$

где Z – заряд ядра, $Y_{n-1,lm}(\hat{\mathbf{y}})$ – четырёхмерная ГСГ, зависящая от единичного 4-вектора $\hat{\mathbf{y}}$ с компонентами

$$\hat{\mathbf{y}} = \left(\frac{2\beta\vec{p}}{\beta^2 + (\vec{p})^2}, \frac{\beta^2 - (\vec{p})^2}{\beta^2 + (\vec{p})^2} \right). \quad (3.3)$$

Функции Y_{nlm} нормированы на единицу

$$\int Y_{nlm}^*(\hat{\mathbf{a}}) Y_{n'l'm'}(\hat{\mathbf{a}}) d\Omega_a = \delta_{n,n'} \delta_{l,l'} \delta_{m,m'}, \quad (3.4)$$

где $d\Omega_a$ – элемент поверхности 4-сферы.

Из (3.3) можно получить связь элемента поверхности 4-сферы $d\Omega_{\mathbf{y}}$ в окрестности точки $\hat{\mathbf{y}}$ с элементом объема 3-пространства в окрестности трёхмерного вектора \vec{p} ,

$$d\Omega_{\mathbf{y}} = \left(\frac{2\beta}{\beta^2 + (\vec{p})^2} \right)^3 d\vec{p}. \quad (3.5)$$

Важно, что вектор $\hat{\mathbf{y}}$ зависит от ранга n ГСГ (см. определение (3.2) параметра β). Однако, соотношение ортогональности (3.4) содержит ГСГ с одинаковыми аргументами $\hat{\mathbf{a}}$, которые не зависят от рангов n, n' . Это объясняет почему свойства ортогональности ГСГ не могут быть напрямую использованы для вычисления матричных элементов.

Отметим, что метод штурмовских функций (ШФ) широко используется во многих задачах квантовой химии и теории взаимодействия излучения с атомами и молекулами. В отличие от набора волновых функций связанных состояний атома водорода, множество ШФ образует полный набор. ШФ в

импульсном пространстве определены соотношениями (3.2) и (3.3), в которых β – некоторое фиксированное число, не зависящее от n . Таким образом, параметр β одинаков для всех ШФ, принадлежащих одному набору.

Нетрудно убедиться, что существует взаимно-однозначное соответствие между трёхмерным пространством векторов \vec{p} и 4-сферой единичного радиуса. А именно, каждой точке $\hat{\mathbf{x}}$ 4-сферы соответствует *единственный* вектор \vec{p} и наоборот. Отображение $\hat{\mathbf{x}} \leftrightarrow \vec{p}$ называют “стереографической проекцией” гиперплоскости (т.е. трёхмерного пространства импульсов) на гиперсферу единичного радиуса.

Во многих задачах теории рассеяния бывает необходимо вычислить форм-факторный интеграл,

$$F(\vec{k}) = \int \psi_{n_f}^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi_{n_i}(\vec{r}) d\vec{r}, \quad (3.6)$$

где, для краткости, опущено обозначение квантовых чисел углового момента $l'm'$ и lm начального и конечного состояний, соответственно. Используя формулу (3.1), матричный элемент $F(\vec{k})$ можно выразить через волновые функции импульсного пространства $\psi(\vec{p})$,

$$F(\vec{k}) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\vec{r} \int d\vec{p}_1 \int d\vec{p}_2 \psi_{n_f}^*(\vec{p}_1) e^{-i\vec{p}_1\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi_{n_i}(\vec{p}_2) e^{i\vec{p}_2\cdot\vec{r}}. \quad (3.7)$$

Интегралы по \vec{p}_2 и \vec{r} вычисляются в замкнутом виде с помощью определения δ -функции Дирака, что даёт

$$F(\vec{k}) = \int \psi_{n_f}^*(\vec{p}) \psi_{n_i}(\vec{p} - \vec{k}) d\vec{p}. \quad (3.8)$$

Используя явные выражения для волновых функций (3.2) и (3.5) и вводя обозначения $n = n_i - 1$ и $n' = n_f - 1$, форм-фактор можно представить в

виде

$$F_{n'l',nl} \equiv F(\vec{k}) = \frac{2\alpha^{5/2}}{\beta^{1/2}} \int Y_{n'l'm'}^*(\hat{\mathbf{y}}) \frac{\beta^2 + (\vec{p})^2}{(\alpha^2 + (\vec{p} - \vec{k})^2)^2} Y_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) d\Omega_{\mathbf{y}}, \quad (3.9)$$

где параметры α и β определены по формулам

$$\alpha = \frac{Z}{n_i} = \frac{Z}{n+1}, \quad \beta = \frac{Z}{n_f} = \frac{Z}{n'+1}, \quad (3.10)$$

и компоненты единичного вектора $\hat{\mathbf{x}}$ равны

$$\hat{\mathbf{x}} = \left(\frac{2\alpha(\vec{p} - \vec{k})}{\alpha^2 + (\vec{p} - \vec{k})^2}, \frac{\alpha^2 - (\vec{p} - \vec{k})^2}{\alpha^2 + (\vec{p} - \vec{k})^2} \right). \quad (3.11)$$

Геометрический смысл единичных векторов $\hat{\mathbf{y}}$ и $\hat{\mathbf{x}}$ и их связь с трёхмерными векторами \vec{p} и \vec{k} показаны на рис. 3.1.

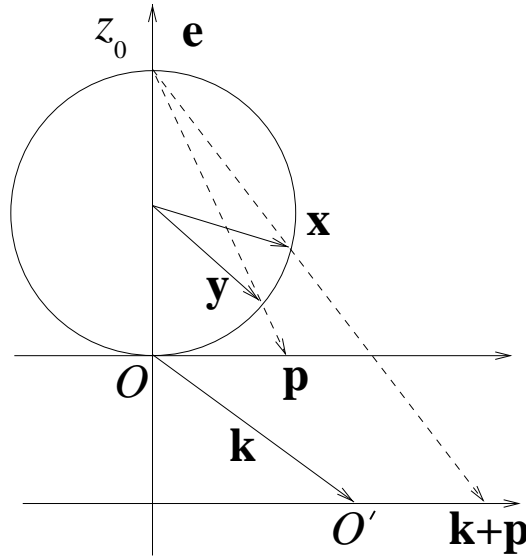


Рис. 3.1. Сечение 4-сферы. Трёхмерное \vec{p} -пространство соответствует горизонтальной оси. \mathbf{e} – базисный вектор оси энергии z_0 ; в начале координат O имеем $\vec{p} = 0$. Точка $\hat{\mathbf{x}}$ на 4-сфере является стереографической проекцией точки \mathbf{p} , сдвинутой на вектор \vec{k}

3.1.2. Свойства стереографической проекции

Как видно из уравнения (3.9), для вычисления форм-факторных интегралов необходимо разложить произведение

$$\frac{\beta^2 + (\vec{p})^2}{(\alpha^2 + (\vec{p} - \vec{k})^2)^2} Y_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) \quad (3.12)$$

по ГСГ, зависящим от вектора $\hat{\mathbf{y}}$. Затем, интеграл $F(\vec{k})$ вычисляется тривиальным образом с использованием свойства ортогональности ГСГ.

Предварительно заметим, что векторы $\hat{\mathbf{y}}$ и $\hat{\mathbf{x}}$ можно переписать в компактном виде,

$$\hat{\mathbf{x}} = -\mathbf{e} + 2\alpha \frac{\mathbf{q}}{q^2}, \quad \hat{\mathbf{y}} = -\mathbf{e} + 2\beta \frac{\mathbf{p}}{p^2}, \quad \mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{k}, \quad (3.13)$$

где \mathbf{e} – единичный вектор с компонентами $\mathbf{e} = (\vec{0}, 1)$ и компоненты 4-векторов \mathbf{p} , \mathbf{k} равны

$$\mathbf{p} = (\vec{p}, \beta), \quad \mathbf{k} = (\vec{k}, \beta - \alpha). \quad (3.14)$$

В новых обозначениях, форм-фактор (3.9) выражается интегралом, содержащим произведение двух ГСГ,

$$F_{n'l',nl} = \frac{2\alpha^{5/2}}{\beta^{1/2}} \int Y_{n'l'm'}^*(\hat{\mathbf{y}}) \frac{p^2}{q^4} Y_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) d\Omega_{\mathbf{y}}. \quad (3.15)$$

Ниже, для краткости, используются модифицированные ГСГ $C_{nlm}(\hat{\mathbf{y}})$, связанные с нормированными ГСГ формулой

$$C_{nlm}(\hat{\mathbf{y}}) = (-1)^{n-l} \sqrt{2\pi^2/(n+1)} Y_{nlm}(\hat{\mathbf{y}}).$$

Ниже будем опускать индексы проекций l, m в обозначениях ГСГ, если это не приведёт к недоразумениям.

Возможность эффективного использования техники мультипольных разложений для вычисления матричного элемента (3.15) следует из того примечательного факта, что, как произведение $p^{-2}C_n(\hat{\mathbf{y}})$, так и произведение $|\mathbf{p} - \mathbf{k}|^{-2}C_n(\hat{\mathbf{x}})$ удовлетворяют четырёхмерному уравнению Лапласа в пространстве векторов \mathbf{p} . То есть,

$$\Delta_{\mathbf{p}} \frac{1}{p^2} C_n(\hat{\mathbf{y}}) = \Delta_{\mathbf{p}} \frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{k}|^2} C_n(\hat{\mathbf{x}}) = 0, \quad (3.16)$$

где $\mathbf{p} = (\vec{p}, p_0)$, единичные векторы $\hat{\mathbf{y}}$ и $\hat{\mathbf{x}}$ определены соотношениями (3.13), в которых β и α не зависят от \mathbf{p} . Отметим, что уравнения (3.16) справедливы для любых векторов \mathbf{k} , не зависящих от \mathbf{p} .

Уравнения (3.16) можно проверить с помощью мультипольных разложений, полученных в работе [79],

$$\begin{aligned} \frac{1}{p^2} C_n(\hat{\mathbf{y}}) &= \frac{2^{n/2}}{p^2} \left\{ -\mathbf{e} + 2\beta \frac{\mathbf{p}}{p^2} \right\}_n = \\ &= \frac{1}{p^2} \sum_{n_1=0}^n \binom{n}{n_1} (-1)^{n-n_1} \left(\frac{2\beta}{p} \right)^{n_1} \{C_{n-n_1}(\mathbf{e}) \otimes C_{n_1}(\hat{\mathbf{p}})\}_n. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Здесь, фигурные скобки обозначают неприводимое тензорное произведение ранга n , образованное четырёхмерными тензорами. Этот объект представляет собой обобщение обычного трёхмерного тензорного произведения [10, 19, 39]. Произведение $p^{-n_1-2}C_{n_1}(\hat{\mathbf{p}})$ в правой части (3.17) является нерегулярным решением уравнения Лапласа. Поэтому, действие 4-мерного оператора Лапласа $\Delta_{\mathbf{p}}$ на уравнение (3.17) даёт ноль,

$$\Delta_{\mathbf{p}} \frac{1}{p^{n_1+2}} C_{n_1}(\hat{\mathbf{p}}) = 0. \quad (3.18)$$

Тем самым доказано первое равенство в (3.16). Второе равенство доказывается аналогично с учётом соотношения

$$\Delta_{\mathbf{p}} F(\mathbf{p} - \mathbf{k}) = \Delta_{\mathbf{q}} F(\mathbf{q}),$$

где F – произвольная функция и $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{k}$.

Как было отмечено выше (см. (3.16), (3.17)), более удобно работать с произведением $q^{-2}C_n(\hat{\mathbf{x}})$ чем с $q^{-4}C_n(\hat{\mathbf{x}})$. Чтобы получить связь между двумя этими произведениями воспользуемся вспомогательным соотношением

$$\frac{1}{q^4} = \frac{1 + (\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{e})}{2\alpha^2} \frac{1}{q^2},$$

которое можно проверить, возведя в квадрат второе равенство в (3.13) с учётом соотношений $\mathbf{e}^2 = \hat{\mathbf{x}}^2 = 1$. Далее, применяя разложение Клебша-Гордана для произведения двух ГСГ, можно проверить, что

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{x}} \cdot \mathbf{e})C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{1}{\sqrt{2}} C_{100}(\hat{\mathbf{x}})C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} C_{100;nlm}^{(n-1)lm} C_{(n-1)lm}(\hat{\mathbf{x}}) + \frac{1}{\sqrt{2}} C_{100;nlm}^{(n+1)lm} C_{(n+1)lm}(\hat{\mathbf{x}}), \end{aligned} \quad (3.19)$$

где $C_{100;nlm}^{(n\pm 1)lm}$ – четырёхмерные коэффициенты Клебша-Гордана. При данных значениях параметров, выражения для коэффициентов Клебша-Гордана приведены в работе [79]. В результате, произведение $q^{-4}C_n(\hat{\mathbf{x}})$ можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^4} C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{1}{2\alpha^2 q^2} \left(C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) + \frac{\sqrt{(n-l+1)(n+l+2)}}{2(n+1)} C_{(n+1)lm}(\hat{\mathbf{x}}) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\sqrt{(n-l)(n+l+1)}}{2(n+1)} C_{(n-1)lm}(\hat{\mathbf{x}}) \right). \end{aligned} \quad (3.20)$$

Таким образом, задача сводится к вычислению мультипольного разложения функции $q^{-2}C_n(\hat{\mathbf{x}})$. Если такое разложение известно, то разложение функции $q^{-4}C_n(\hat{\mathbf{x}})$ получается с помощью формулы (3.20).

3.2. Мультипольные разложения гиперсферической гармоника

В этом разделе выводится разложение функции $q^{-2}C_n(\hat{\mathbf{x}})$ с \mathbf{q} , $\hat{\mathbf{x}}$, определёнными в (3.13), по ГСГ, зависящим от единичного вектора $\hat{\mathbf{y}}$. В п. 3.2.1 путём последовательного применения мультипольных разложений ГСГ, приведённых в работе [79], получена тензорная форма мультипольного разложения. Явный вид коэффициентов мультипольного разложения получен в п. 3.2.2.

3.2.1. Тензорная форма мультипольных разложений

Как было отмечено выше, достаточно вычислить мультипольное разложение произведения $q^{-2}C_n(\hat{\mathbf{x}})$. Затем, соотношение (3.20) позволяет получить выражения для коэффициентов в мультипольном разложении функции $q^{-4}C_n(\hat{\mathbf{x}})$.

Вычисление будем проводить в три этапа. Сначала, разложим произведение $q^{-4}C_n(\hat{\mathbf{x}})$ по ГСГ, зависящим от углов вектора \mathbf{q} . Затем ГСГ из полученного разложения разложим по ГСГ, зависящим от углов 4-импульса \mathbf{p} . Наконец, разложим эти ГСГ по ГСГ, зависящим от единичного вектора $\hat{\mathbf{y}}$. Очевидно, что на каждом этапе будет возникать ряд неприводимых тензорных произведений ГСГ. Однако, как будет показано ниже, из трёх рядов только один оказывается бесконечным. Более того, оказывается, что все четырёхмерные коэффициенты Клебша-Гордана, определяющие тензорные произведения, вычисляются в замкнутом виде.

Стартуем с записи разложения, аналогичного (3.17),

$$\frac{1}{q^2} C_n(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{1}{q^2} \sum_{n_1=0}^n \binom{n}{n_1} (-1)^{n-n_1} \left(\frac{2\alpha}{q}\right)^{n_1} \{C_{n-n_1}(\mathbf{e}) \otimes C_{n_1}(\hat{\mathbf{q}})\}_n. \quad (3.21)$$

Теперь, нужно переразложить функцию $q^{-n_1-2} C_{n_1}(\hat{\mathbf{q}})$ по ГСГ, зависящим от углов вектора \mathbf{p} . Использование мультипольного разложения (65) работы [79]) даёт,

$$\frac{1}{q^{n_1+2}} C_{n_1}(\hat{\mathbf{q}}) = \sum_{n_2=0}^{\infty} \frac{k^{n_2}}{p^{n_1+n_2+2}} \binom{n_1+n_2+1}{n_2} \{C_{n_2}(\hat{\mathbf{k}}) \otimes C_{n_1+n_2}(\hat{\mathbf{p}})\}_{n_1} \quad (3.22)$$

На третьем этапе, нужно вернуться от векторов \mathbf{p} к векторам $\hat{\mathbf{y}}$. Для этого заметим, что члены, содержащие вектор \mathbf{p} , можно переписать в виде

$$\frac{1}{p^{n_1+n_2}} C_{n_1+n_2}(\hat{\mathbf{p}}) = \frac{2^{(n_1+n_2)/2}}{p^{2n_1+2n_2}} \{\mathbf{p}\}_{n_1+n_2} = 2^{(n_1+n_2)/2} \left\{ \frac{\mathbf{p}}{p^2} \right\}_{n_1+n_2}. \quad (3.23)$$

Связь (3.13) векторов \mathbf{p} и $\hat{\mathbf{y}}$ приводит к цепочке равенств

$$\begin{aligned} 2^{(n_1+n_2)/2} \left\{ \frac{\mathbf{p}}{p^2} \right\}_{n_1+n_2} &= \frac{1}{(\sqrt{2}\beta)^{n_1+n_2}} \{\mathbf{e} + \hat{\mathbf{y}}\}_{n_1+n_2} = \\ &= \frac{1}{(2\beta)^{n_1+n_2}} \sum_{n_3=0}^{n_1+n_2} \binom{n_1+n_2}{n_3} \{C_{n_1+n_2-n_3}(\mathbf{e}) \otimes C_{n_3}(\hat{\mathbf{y}})\}_{n_1+n_2}. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Окончательно, подставляем разложения (3.22), (3.23) и (3.24) в правую часть (3.21). В итоге приходим к равенству

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^2} C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{(-1)^n}{p^2} \sum_{n_1=0}^n \binom{n}{n_1} (-u)^{n_1} \sum_{n_2=0}^{\infty} v^{n_2} \binom{n_1+n_2+1}{n_2} \sum_{n_3=0}^{n_1+n_2} \binom{n_1+n_2}{n_3} \times \\ &\times \{C_{n-n_1}(\mathbf{e}) \otimes \{C_{n_2}(\hat{\mathbf{k}}) \otimes \{C_{n_1+n_2-n_3}(\mathbf{e}) \otimes C_{n_3}(\hat{\mathbf{y}})\}_{n_1+n_2}\}_{n_1}\}_{nlm}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

где введены сокращённые обозначения,

$$u = \frac{\alpha}{\beta}, \quad v = \frac{k}{2\beta} = \frac{\sqrt{(\beta - \alpha)^2 + \vec{k}^2}}{2\beta}. \quad (3.26)$$

Уравнение (3.25) осуществляет связь между ГСГ $C_n(\hat{\mathbf{x}})$ и $C_{n_3}(\hat{\mathbf{y}})$. Как видно, среди трёх суммирований только одно (по индексу n_2) является бесконечным. Дальнейшего упрощения разложения (3.25) средствами алгебры углового момента добиться невозможно.

Отметим, что ортогональность ГСГ приводит к тому, что после подстановки разложения (3.25) в интеграл (3.15) исчезают все члены с $n_3 \neq n'$. Таким образом, матричный элемент будет выражаться в виде двойной суммы, из которых одна бесконечна. Ниже будет показано, что эта бесконечная сумма вычисляется в замкнутом виде через производные от элементарной функции.

3.2.2. Явные выражения для мультипольных разложений

Тензорные произведения в разложении (3.25) имеют важную особенность. Во-первых, как внутреннее, так и внешнее тензорные произведения являются “минимальными”, т.е. ранг произведения равен сумме рангов сомножителей. Во-вторых, промежуточное тензорное произведение ранга n_1 образовано тензорами рангов n_2 и $n_1 + n_2$. Такое тензорное произведение можно понимать как “максимальное”, поскольку его ранг равен разности рангов тензорных сомножителей. Важно, что коэффициенты Клебша-Гордана, входящие в определение минимальных и максимальных тензорных произведений, вычисляются в замкнутом виде, см. статью [79]. Как следствие, тензорную конструкцию в (3.25) можно записать в относительно компактной форме.

Вычисление тройного тензорного произведения в (3.25) упрощается также тем фактом, что ГСГ, зависящие от углов базисного вектора $\mathbf{e} = (\vec{0}, 1)$ имеют простой вид [79],

$$C_{nlm}(\mathbf{e}) = \sqrt{n+1} \delta_{l,0} \delta_{m,0}. \quad (3.27)$$

Используя это уравнение, а также определение тензорного произведения ГСГ

[79], тензорное произведение в правой части (3.25) можно записать как

$$\begin{aligned} T_{nlm}^{(n_1 n_2 n_3)} &\equiv \{C_{n-n_1}(\mathbf{e}) \otimes \{C_{n_2}(\hat{\mathbf{k}}) \otimes \{C_{n_1+n_2-n_3}(\mathbf{e}) \otimes C_{n_3}(\hat{\mathbf{y}})\}_{n_1+n_2}\}_{n_1}\}_{nlm} = \\ &= \sum_{l_2, l_3} \sum_{m_2, m_3} C_{(n-n_1)00; n_1 l m}^{nlm} C_{n_2 l_2 m_2; (n_1+n_2) l_3 m_3}^{m_1 l m} C_{(n_1+n_2) l_3 m_3}^{(n_1+n_2) l_3 m_3} C_{(n_1+n_2-n_3)00; n_3 l_3 m_3} \times \\ &\quad \times \sqrt{(n-n_1+1)(n_1+n_2-n_3+1)} C_{n_2 l_2 m_2}(\hat{\mathbf{k}}) C_{n_3 l_3 m_3}(\hat{\mathbf{y}}), \end{aligned} \quad (3.28)$$

где $C_{n'l'm'; n''l''m''}^{nlm}$ обозначает коэффициент Клебша-Гордана группы $O(4)$. Как отмечалось выше, коэффициенты Клебша-Гордана в написанном выражении вычисляются в замкнутом виде [79].

Чтобы вычислить сумму по n_2 в (3.25) воспользуемся явным выражением для ГСГ² $C_{n_2 l_2 m_2}(\hat{\mathbf{k}})$,

$$C_{n_2 l_2 m_2}(\hat{\mathbf{k}}) = (-i)^{l_2} \sqrt{\frac{2l_2+1}{n_2+1}} \chi_{l_2}^{n_2/2}(2\theta_0) C_{l_2 m_2}(\theta, \phi), \quad (3.29)$$

где $C_{l_2 m_2}(\theta, \phi)$ – обычные (трёхмерные) сферические гармоники, зависящие от сферических углов θ, ϕ вектора \vec{k} . Гиперугол θ_0 определён формулами

$$\cos \theta_0 = \frac{\beta - \alpha}{k} = \frac{\beta - \alpha}{\sqrt{(\beta - \alpha)^2 + \vec{k}^2}}, \quad \sin \theta_0 = \frac{|\vec{k}|}{\sqrt{(\beta - \alpha)^2 + \vec{k}^2}}. \quad (3.30)$$

Функции $\chi_{l_2}^{n_2/2}$ в (3.29) являются обобщёнными характеристиками группы трёхмерных вращений $O(3)$. Явное выражение для четырёхмерной гармоники $C_{n_2 l_2 m_2}$ имеет вид,

$$\begin{aligned} C_{n_2 l_2 m_2}(\hat{\mathbf{k}}) &= (-i)^{l_2} (2l_2)!! \sqrt{\frac{(2l_2+1)(n_2-l_2)!}{(n_2+l_2+1)!}} \times \\ &\quad \times (\sin \theta_0)^{l_2} C_{n_2-l_2}^{l_2+1}(\cos \theta_0) C_{l_2 m_2}(\theta, \phi), \end{aligned} \quad (3.31)$$

²Явные выражения для четырёхмерных ГСГ получены, например, в работе [172].

где $C_{n_2-l_2}^{l_2+1}$ обозначает многочлен Гегенбауэра [165]. Подставляя это равенство и (3.28) в (3.25) получаем мультипольное разложение

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^2} C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{(-1)^n}{p^2} \sum_{n_3=0}^{\infty} \sum_{l_3=0}^{n_3} \sum_{l_2} A_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)} C_{l_0 l_2 0}^{l_3 0} \times \\ &\times \sum_{m_2, m_3} C_{l_2 m_2 l_3 m_3}^{lm} C_{l_2 m_2}(\theta, \phi) C_{n_3 l_3 m_3}(\hat{\mathbf{y}}), \quad (3.32) \end{aligned}$$

где $C_{l_2 m_2 l_3 m_3}^{lm}$ – трёхмерные коэффициенты Клебша-Гордана. В (3.32) индекс l_2 пробегает такие значения от $|l - l_3|$ до $l + l_3$, при которых сумма $l + l_2 + l_3$ – чётное число. Это условие вызвано тем, что коэффициенты $C_{l_0 l_2 0}^{l_3 0}$ обращаются в ноль для нечётных значений суммы $l + l_2 + l_3$. Коэффициенты A в (3.32) определены равенством

$$\begin{aligned} A_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)} &= (2i \sin \theta_0)^{l_2} l_2! (2l_2 + 1) \sqrt{\frac{(n + l + 1)!}{(n - l)! (n_3 + l_3 + 1)! (n_3 - l_3)!}} \times \\ &\times \sum_{n_1} \binom{n - l}{n - n_1} \frac{(-u)^{n_1}}{(n_1 + l + 1)!} \sum_{n_2} v^{n_2} C_{n_2 - l_2}^{l_2 + 1}(\cos \theta_0) \times \\ &\times \frac{(n_1 + n_2 + l_3 + 1)! (n_1 + n_2 - l_3)!}{(n_2 + l_2 + 1)! (n_1 + n_2 - n_3)!}, \quad (3.33) \end{aligned}$$

где суммирование проводится по всем неотрицательным индексам n_1 и n_2 , при которых биномиальные коэффициенты и факториалы имеют конечное значение. Как видно, сумма по n_1 конечна, а сумма по n_2 бесконечна. Сумма по l_2 в (3.32) имеет простой физический смысл – это мультипольное разложение относительно вектора переданного импульса \vec{k} . Суммирование по n_1 и n_2 вычислены в Приложении Г.1.

Как уже было отмечено, мультипольное разложение произведения $q^{-4} C_n(\hat{\mathbf{x}})$ можно получить из разложения функции $q^{-2} C_n(\hat{\mathbf{x}})$ с помощью соотношения

(3.20). В результате, после несложных преобразований приходим к равенству

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^4} C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{(-1)^n}{2\alpha^2 p^2} \sum_{n_3=0}^{\infty} \sum_{l_3=0}^{n_3} \sum_{l_2} (-1)^{n_3} (-i)^{l_2} B_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)} C_{l_0 l_2 0}^{l_3 0} \times \\ &\times \sum_{m_2, m_3} C_{l_2 m_2 l_3 m_3}^{lm} C_{l_2 m_2}(\theta, \phi) C_{n_3 l_3 m_3}(\hat{\mathbf{y}}). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Здесь, коэффициенты $B_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}(\theta_0)$ равны

$$B_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)} = - \left(\frac{|\vec{k}|}{\beta} \right)^{l_2} \frac{l_2! (2l_2 + 1)}{2(n+1)} \sqrt{\frac{(n+l+1)! (n_3+l_3+1)!}{(n-l)! (n_3-l_3)!}} P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}, \quad (3.35)$$

где функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ определены равенством (Г.9) Приложения Г.1.

При нулевом переносе импульса (т.е. при $\vec{k} = 0$, что соответствует дипольному приближению), свойства трёхмерных коэффициентов Клебша-Гордана в разложении (3.34) приводят к исчезновению слагаемых с $l_2 > 0$ и $l \neq l_3$. В результате, (3.34) сводится к виду

$$\frac{1}{q^4} C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) = \frac{1}{2\alpha^2 p^2} \sum_{n_3=l_3}^{\infty} (-1)^{n+n_3} B_{n,l;n_3,l}^{(0)} C_{n_3 l m}(\hat{\mathbf{y}}), \quad (3.36)$$

где параметр $B_{n_0;n_3,0}^{(0)}(\vec{k} = 0)$ вычислен в Приложении Г.3.

Для полноты отметим, что мультипольное разложение (3.25) может быть также записано в виде ряда четырёхмерных *телесных* гармоник, $\mathcal{C}_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{k}) = k^{n_2} C_{n_2 l_2 m_2}(\hat{\mathbf{k}})$,

$$\begin{aligned} \frac{1}{q^2} C_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) &= \frac{(-1)^n}{p^2} \sum_{n_2, n_3, l_2, l_3} C_{l_0 l_2 0}^{l_3 0} C_{l_2 m_2 l_3 m_3}^{lm} C_{n_3 l_3 m_3}(\hat{\mathbf{y}}) \mathcal{C}_{n_2 l_2 m_2}(\mathbf{k}) \times \\ &\times D_{n_2 n_3, l l_3}(\beta, \alpha), \end{aligned} \quad (3.37)$$

где коэффициенты $D_{n_2 n_3, l, l_3}(\beta, \alpha)$ определены формулами

$$D_{n_2 n_3, l, l_3}(\beta, \alpha) = D \sum_{n_1} \frac{(n_1 + n_2 + l_3 + 1)! (n_1 + n_2 - l_3)! (\alpha/\beta)^{n_1}}{(n - n_1)! (n_1 + n_2 - n_3)! (n_1 + l + 1)! (n_1 - l)!},$$

$$D = (-1)^{l_2} (2\beta)^{-n_2} \sqrt{\frac{(n + l + 1)! (n - l)! (2l_2 + 1)}{(n_3 + l_3 + 1)! (n_3 - l_3)! (n_2 + l_2 + 1)! (n_2 - l_2)!}}. \quad (3.38)$$

Сумма по n_1 в (3.38) вычисляется в замкнутом виде через гипергеометрическую функцию ${}_3F_2$, см. книгу [173],

$$D_{n_2 n_3, l, l_3}(\beta, \alpha) = D \frac{(n_2 + l + l_3 + 1)! (n_2 + l - l_3)!}{(n_2 - n_3 + l)! (n - l)! (2l + 1)!} \times$$

$$\times \left(\frac{\alpha}{\beta}\right)^l {}_3F_2 \left(\begin{matrix} l - n, & n_2 + l - l_3 + 1, & n_2 + l + l_3 + 2; & -\frac{\alpha}{\beta} \\ & n_2 - n_3 + l + 1, & 2l + 2 \end{matrix} \right). \quad (3.39)$$

Анализ разложения (3.37) показывает, что сходимость ряда по n_2 определяется двумя условиями,

$$|\alpha| < |\beta|, \quad |(\alpha - \beta)^2 + \vec{k}^2| < 2|\beta|.$$

Ряды в (3.37) расходятся, если один из параметров α , β чисто мнимый, а другой – действительный.

Сходимость разложений (3.34) и (3.37) по индексу n_3 для практических приложений неважна, поскольку суммирование по n_3 обрывается после интегрирования по углам единичного вектора $\hat{\mathbf{y}}$.

3.3. Выражения для матричных элементов

Ниже рассматриваются явные выражения для матричных элементов (3.15) в записи через коэффициенты $B_{n, l; n_3, l_3}^{(l_2)}$ и функции $P_{n, l; n_3, l_3}^{(l_2)}$, введённые в предыдущем разделе (см. (3.35)).

В п. 3.3.1 даны общие формулы, и, в качестве примера, рассмотрены матричные элементы перехода $1s \rightarrow 5l$. Длинноволновое (дипольное) приближение анализируется в п. 3.3.2.

3.3.1. Явный вид матричных элементов

Чтобы получить выражение для форм-фактора, заменим в разложении (3.34) ГСГ C_{nlm} нормированными гармониками Y_{nlm} и подставим результат в формулу (3.15). В итоге получаем,

$$F_{n'l',nl} = \sum_{n_3, l_3, l_2} i^{l_2} \sqrt{\frac{\alpha(n+1)}{\beta(n_3+1)}} B_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)} C_{l_0 l_2 0}^{l_3 0} \times \\ \times \sum_{m_2, m_3} C_{l_2 m_2 l_3 m_3}^{l m} C_{l_2 m_2}(\theta, \phi) \int Y_{n'l'm'}^*(\hat{\mathbf{y}}) Y_{n_3 l_3 m_3}(\hat{\mathbf{y}}) d\Omega_{\mathbf{y}}. \quad (3.40)$$

Поскольку ГСГ нормированы, интеграл по полному телесному углу гиперсферы равен единице при $n_3 = n'$, $l_3 m_3 = l' m'$, и нулю в противном случае. Как следствие, приходим к выражению

$$F_{n'l',nl} = \sqrt{\frac{\alpha(n+1)}{\beta(n'+1)}} \sum_{l_2=|l-l'|}^{l+l'} i^{l_2} C_{l_0 l_2 0}^{l' 0} C_{l_2 m_2 l' m'}^{l m} C_{l_2 m_2}(\theta, \phi) B_{n,l;n',l'}^{(l_2)}, \quad (3.41)$$

где θ, ϕ – сферические углы 3-вектора \vec{k} . Из определения (3.10) параметров α и β следует, что для переходов в атоме водорода коэффициент под знаком корня в (3.41) обращается в единицу.

Приведённую выше формулу для форм-фактора $F_{n'l',nl}$ можно записать через радиальные интегралы. Для этого используем явные выражения для радиальных волновых функций в координатном представлении и разложение

плоской волны в (3.6) по трёхмерным гармоникам,

$$\begin{aligned} & \int_0^{\infty} r^{l+l'+2} e^{-(\alpha+\beta)r} j_{l_2}(|\vec{k}|r) \Phi(l' - n', 2l' + 2; 2\beta r) \Phi(l - n, 2l + 2; 2\alpha r) dr = \\ & = (-1)^{l+l_2+l'+1} \frac{l_2! (2l + 1)! (2l' + 1)!}{(2\alpha)^{l+1} (2\beta)^{l'+2}} \left(\frac{|\vec{k}|}{\beta} \right)^{l_2} P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}(u, w), \end{aligned} \quad (3.42)$$

где параметр w определён формулой (Г.10) Приложения Г.1, $\Phi(l - n, 2l + 2; 2\alpha r)$ обозначает вырожденную гипергеометрическую функцию, и j_{l_2} есть сферическая функция Бесселя. Определение (Г.9) функции $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$ подразумевает следующие ограничения на значения индексов в (3.42),

$$l \leq n, \quad l' \leq n', \quad l - l_2 + l' + 1 \geq 0. \quad (3.43)$$

(Отметим, что равенство (3.42) справедливо для индексов l, l_2, l' произвольной чётности.)

Таким образом получаем, что интегралы вида (3.42) выражаются через производные рациональной функции (см. равенства (3.42) и (Г.9)).

Отметим, что при малых величинах индексов n и l (или n' и l') функции $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$ выражаются в компактном виде через комбинации многочленов Гегенбауэра. Например, матричные элементы переходов из основного состояния $n = l = 0$ можно записать как

$$\begin{aligned} F_{n,l} &= \int_0^{\infty} R_{0,0}(\alpha, r) j_l(kr) R_{n,l}(\beta, r) r^2 dr = \\ &= -\frac{l!}{2} \left(\frac{k}{\beta} \right)^l \sqrt{\frac{\alpha(n+l+1)!}{\beta(n+1)(n-l)!}} P_{0,0;n,l}^{(l)}, \end{aligned} \quad (3.44)$$

где $R_{n,l}$ – нормированные радиальные волновые функции и функции $P_{0,0;n,l}^{(l)}$ определены формулой (Г.22) Приложения Г.3. Напомним, что индекс n равен главному квантовому числу *минус единица*. Для водородных матричных

элементов $\alpha = 1$, $\beta = 1/(n + 1)$, а для штурмовских функций параметры α , β – произвольные числа. В качестве примера на рис. 3.2 представлены параметры $|F_{n,l}|^2$, соответствующие переходу $1s \rightarrow 5l$, как функции величины $\ln |\vec{k}|$. Причина такого выбора функциональной зависимости объясняется в [81, 174].

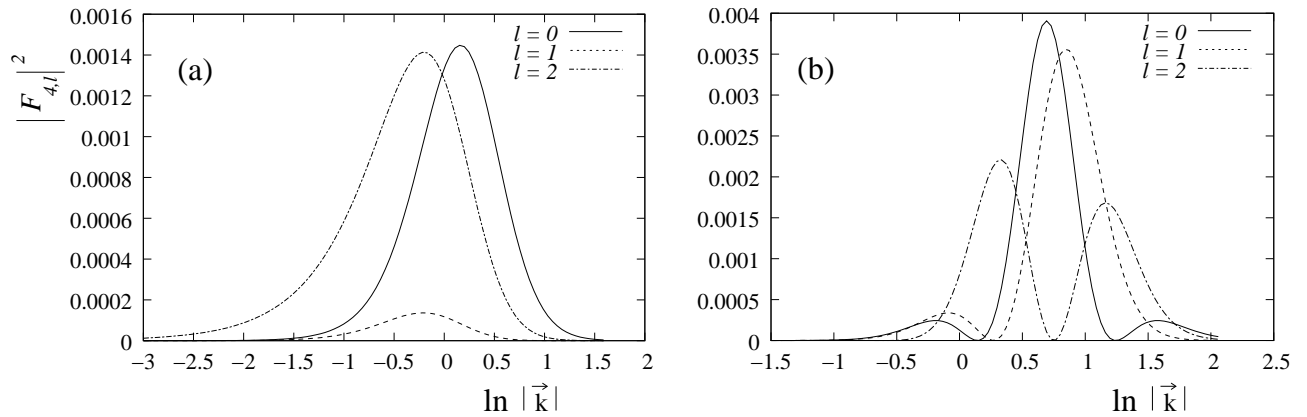


Рис. 3.2. Параметры $|F_{4,l}|^2$. (a) водородные матричные элементы: $\alpha = 1$, $\beta = 1/5$. (b) матричные элементы со штурмовскими функциями: $\alpha = \beta = 1$.

3.3.2. Дипольное приближение

В дипольном приближении (т.е. при $\vec{k} \rightarrow 0$) необходимо учитывать только члены нулевого и первого порядка относительно $|\vec{k}|$. Эти члены соответствуют двум величинам мультипольного момента: $l_2 = 0, 1$. Вычисление длинноволнового предела функций $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$ для таких l_2 рассматривается в Приложении Г.3.

При $l_2 = 0$ функции P вычисляются в замкнутом виде через гипергеомет-

рическую функцию Гаусса,

$$P_{n,l;n',l}^{(0)}(u) = \frac{4(-1)^{n'}}{(2l+1)!} \left(\frac{-4u}{(1-u)^2} \right)^{l+1} \left(\frac{1-u}{1+u} \right)^{n+n'+1} \frac{n'+1-(n+1)u}{(1+u)^2} \times \\ \times {}_2F_1 \left(l-n, l-n'; 2l+2; \frac{-4u}{(1-u)^2} \right). \quad (3.45)$$

Здесь, гипергеометрическая функция является многочленом порядка $\min(n-l, n'-l)$. Легко видно, что при $u = (n'+1)/(n+1)$ (так же как и при $u = 1$) параметр $P_{n,l;n',l}^{(0)}$ равен

$$P_{n,l;n',l}^{(0)} = -2(n+1) \frac{(n-l)!}{(n+l+1)!} \delta_{n,n'}. \quad (3.46)$$

и форм-фактор принимает вид

$$F_{n'l',nl} \Big|_{\vec{k}=0} = \delta_{n,n'}. \quad (3.47)$$

Это уравнение является следствием ортогональности водородных волновых функций (или штурмовских функций при $u = 1$).

Параметр $P_{n,l;n',l-1}^{(1)}$ описывает дипольные переходы и выражается формулой (см. (Г.29) Приложения Г.3)

$$P_{n,l;n',l-1}^{(1)}(u) = \frac{2(-1)^{n'}}{3(2l+1)!} \left(\frac{-4u}{(1-u)^2} \right)^{l+1} \left(\frac{1-u}{1+u} \right)^{n+n'} \left\{ (n'+l+1)(n'+l+2) \times \right. \\ \left. \times f_0 + 2(n'+l+1)(n'-l+1)f_1 + (n'-l+1)(n'-l)f_2 \right\}, \quad (3.48)$$

где коэффициенты f_k определены равенством

$$f_k = \left(\frac{1-u}{1+u} \right)^{2-k} \frac{(n+1)u - n' - 2 + k}{(1+u)^2} \times \\ \times {}_2F_1 \left(l-n, l-1-n'+k; 2l+2; \frac{-4u}{(1-u)^2} \right). \quad (3.49)$$

Для матричных элементов с водородными функциями $u = (n' + 1)/(n + 1)$ и коэффициент f_1 исчезает. Таким образом, в этом случае матричные элементы являются комбинациями гипергеометрических функций Гаусса, что согласуется с хорошо известными формулами Гордона [175].

Выражение для параметра $P_{n,l;n',l+1}^{(l_2)}$ получается с помощью соотношения симметрии (Г.11), которое в дипольном случае имеет вид

$$P_{n,l;n',l'}^{(1)}(u) = u^{n+n'+2l'+2} P_{n',l';n,l}^{(1)}(1/u). \quad (3.50)$$

3.4. Выводы

В настоящей главе метод стереографических проекций Фока был применён к задаче вычисления матричных элементов с водородными волновыми функциями. Было показано (раздел 3.1), что проблема матричных элементов эквивалентна задаче отыскания мультипольных разложений четырёхмерных гиперсферических гармоник с аргументами, определёнными сдвинутой стереографической проекцией.

Отметим, что имеет место аналогия между предлагаемым методом и работой [176], в которой рассматривались двухфотонные переходы между связанными состояниями атома водорода. В обоих случаях использовались ряды, содержащие два свободных параметра. В рассмотренной задаче, мультипольные разложения (3.32) и (3.34) волновой функции в импульсном пространстве содержат свободные параметры β и \vec{k} . “Настройкой” энергетического параметра β можно перемещать аргумент ГСГ в любую точку 4-сферы так, чтобы обеспечить ортогональность ГСГ, входящих в интеграл. Аналогичный подход использовался в [176], где было получено выражение для кулоновской функции Грина с двумя свободными параметрами. Там же было показано, что

определённый выбор параметров может привести к существенному упрощению вычисления составных матричных элементов. Развитый в данной главе метод можно использовать для обобщения результатов работ [176, 177] с целью учёта недипольных поправок.

Выражение для водородных форм-факторов через мультипольные коэффициенты $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$ было получено в разделе 3.3. Оказывается, что данные коэффициенты эквивалентны радиальным интегралам от произведения водородных радиальных волновых функций и сферической функции Бесселя.

Анализ, проведённый в данной главе показывает, что в общем случае произвольных индексов n, l, n', l', l_2 и параметров α, β и \vec{k} , не существует замкнутого выражения для мультиполей $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$ в терминах специальных функций одного переменного. Только в некоторых частных случаях, как, например, в длинноволновом (дипольном) приближении, а также для переходов из основного $1s$ -состояния, величины $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$ сводятся к гипергеометрической функции Гаусса³. Тем не менее, существует простое дифференциальное представление коэффициентов $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$, заданное равенством (Г.9) Приложения Г.1. С помощью дифференциальной формулы (Г.9) можно получать различные явные выражения для коэффициентов $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$. Кроме того, формулу (Г.9) удобно использовать для вывода рекуррентных соотношений, связывающих параметры $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$. Ряд таких соотношений получен в Приложении Г.4.

Полученные в данной главе результаты могут быть обобщены на случай связанно-свободных переходов. Для этого, в соответствующих формулах необходимо провести замены $n \rightarrow \pm i/\sqrt{E}$, где $E > 0$ – энергия состояния непрерывного спектра. При этом дифференциальные операторы в (Г.9) не определены. Эту проблему, однако, можно обойти с помощью представлений

³Точнее, к полиномам Якоби или Гегенбауэра, см. Приложение Г.3.

производных в виде контурных интегралов.

Отметим, что разработанный формализм позволяет вычислить матричные элементы оператора электромагнитного взаимодействия. В этом случае, в интеграле (3.15) необходимо провести замену $q^{-4} \rightarrow (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{x}})q^{-4}$, где $\boldsymbol{\epsilon} = (\vec{e}, 0)$ и \vec{e} – вектор поляризации фотона. Применяя затем к полученному интегралу теорему Вигнера-Экарта, получим выражения для матричного элемента оператора электромагнитного взаимодействия в виде комбинации функций $P_{n,l;n',l'}^{(l_2)}$.

Метод четырёхмерных мультипольных разложений можно также использовать для вычисления многоцентровых кулоновских интегралов, которые возникают в задаче трёх тел в импульсном пространстве, см. [178, 179]. А именно, применяя преобразование Фурье к функции $1/|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|$, получаем, что кулоновский интеграл преобразуется к форм-факторному виду, который был детально рассмотрен в данной главе.

Параметризация угловых распределений в процессах однофотонной фрагментации

В данной главе рассматривается задача о параметризации амплитуды и сечения распада квантовой системы (атома, молекулы, ядра) на несколько фрагментов в результате поглощения одного фотона. Амплитуда таких процессов линейна по вектору поляризации фотона \mathbf{e} , что даёт возможность представить амплитуду в виде комбинации динамических (т.е. зависящих от взаимодействия частиц) и поляризационных (зависящих от \mathbf{e}) факторов.

В разделе 4.1 получена параметризация амплитуды N -частичной фрагментации, в которой факторизована зависимость амплитуды от поляризации фотона и относительных углов разлёта фрагментов. В качестве примера в п. 4.1.2 рассмотрена полная фрагментация молекулы водорода H_2 . В разделе 4.2 дана параметризация амплитуды однофотонной двухэлектронной ионизации атома с учётом эффектов запаздывания, т.е. недипольных поправок (п. 4.2.1). В п. 4.2.2 рассмотрен процесс двухэлектронной ионизации атома гелия.

4.1. Параметризация дипольной амплитуды N -частичной фрагментации

Полная фрагментация связанной системы N тел, вызванная поглощением одного фотона, является фундаментальным процессом, позволяющим непосредственно оценить величину межчастичных корреляций. Это объясняется

тем, что оператор перехода представляет собой сумму одночастичных операторов. Таким образом, в приближении невзаимодействующих частиц, которое часто используется для вычисления волновых функций, сечение процесса *многочастичной* фрагментации равно нулю. В атомах и молекулах корреляции между электронами и ядрами в конечном состоянии непрерывного спектра велики даже при больших межчастичных расстояниях, что связано с дальнедействующим характером кулоновского взаимодействия.

Отметим, что термин “полная фрагментация” можно интерпретировать по-разному, в зависимости от рассматриваемой задачи. Например, в молекулярной физике диссоциацию молекулы H_3 на три атома водорода называют полной фрагментацией, хотя в атомной физике полной фрагментацией был бы распад H_3 на три протона и три электрона, что потребовало бы увеличения энергии фотона ещё примерно на 40 эВ.

Достижения в технике измерения частиц в схеме совпадений привели к возникновению новой области “фрагментационной спектроскопии”, в которой измеряются переходы системы N частиц в состояния с определёнными значениями асимптотических импульсов $\{\mathbf{p}\} = \mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2, \dots, \mathbf{p}_{N-1}$. Помимо импульсов, часто хорошими квантовыми числами являются спин и чётность состояния. Примерами соответствующих экспериментов могут служить однофотонная двухэлектронная ионизация атома гелия [43], фотофрагментация молекул H_2 и D_2 [44, 45, 180], двукратная ионизация гелия электронным ударом, фотодиссоциация молекулы H_3 на три атома водорода [51].

Теоретический анализ фотофрагментации включает параметризацию матричных элементов переходов и дифференциальных сечений процессов через углы вылета частиц, указанные относительно системы координат связанной с вектором поляризации (или волновым вектором) фотона. Во мно-

гих работах параметризация угловых распределений проводилась с использованием мультипольных разложений волновой функции конечного состояния [39, 158, 181, 182]. Например, в данном подходе были изучены правила отбора для матричных элементов многоэлектронной ионизации [88, 158] и процесса четырёхчастичной фрагментации молекул H_2 , HD и D_2 [183]. Тем не менее, как отмечено в работе [184], простая параметризация процессов однофотонной многочастичной фрагментации отсутствует. Цель данной главы состоит в построении такой параметризации процессов однофотонного распада, которая, с одной стороны была простой, а с другой – позволяла по возможности отделить зависимость амплитуды и сечения от поляризации фотона и взаимной ориентации импульсов фрагментов $\{\mathbf{p}\}$.

4.1.1. Общие выражения для амплитуды фотофрагментации

Во многих исследованиях трёхчастичной фотофрагментации (см., например, обзор работ по двойной фотоионизации атома гелия [43]), использовалось разложение матричного элемента амплитуды перехода по набору БГ. В результате, матричный элемент выражался в виде комбинации факторов, зависящих от внутренних переменных¹ и сферических углов векторов импульса, заданных в системе координат, связанной с вектором поляризации фотона \mathbf{e} . Предлагаемая ниже параметризация

- позволяет избежать использования одночастичных мультипольных разложений волновой функции непрерывного спектра нескольких тел,
- не требует определения системы координат, связанной с вектором поля-

¹Т.е. наблюдаемых параметров $p_1, p_2, \theta_{12} = \arccos(\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{p}}_2)$, где $\mathbf{p}_{1,2}$ – векторы асимптотического импульса электронов.

ризации фотона,

- справедлива для любого числа (>2) фрагментов.

При выборе параметризации необходимо определиться, удобнее ли рассматривать матричный элемент амплитуды или же дифференциальное сечение. Параметры сечения могут быть напрямую использованы для интерпретации экспериментальных данных [185, 186]. Однако, параметры сечения представляют собой квадратичные комбинации матричных элементов перехода, которые, собственно, и представляют интерес с точки зрения теории. Кроме того, правила отбора проще всего находить, анализируя амплитуду процесса, а не сечение [158]. Поэтому, ниже рассматривается только параметризация матричного элемента амплитуды фрагментации.

Матричный элемент процесса фотофрагментации, т.е. перехода из начального связанного состояния $|\Phi_i\rangle$ с угловым моментом $L_i M_i$, в конечное состояние непрерывного спектра $|\{\mathbf{p}\}\rangle$, характеризуемое набором асимптотических импульсов $\{\mathbf{p}\}$, в дипольном приближении имеет вид,

$$T = \langle \{\mathbf{p}\} | \mathbf{e} \cdot \mathbf{d} | \Phi_i \rangle, \quad (4.1)$$

где \mathbf{e} – вектор поляризации фотона (комплексный в общем случае и нормированный условием $(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}^*) = 1$), и \mathbf{d} – оператор полного дипольного момента.

Обычный подход к параметризации амплитуды, используемый, например, в задаче о трёхчастичном распаде [43], состоит в использовании разложения конечного состояния по биполярным гармоникам. Обобщение данного метода на случай N -частичной фрагментации сводится к использованию разложения конечного состояния по мультиполярным гармоникам, в результате чего

матричный элемент перехода выражается равенством [158],

$$T = \sum_{L, \{l\}} \{ \mathbf{e} \otimes C_L(\{\mathbf{p}\}, \{l\}) \}_{L_i M_i} \frac{\langle L \{l\} \| d \| L_i \rangle}{\sqrt{2L_i + 1}}, \quad (4.2)$$

где, согласно правилу треугольника, $|L_i - 1| \leq L \leq L_i + 1$; неприводимый матричный элемент $\langle L \{l\} \| d \| L_i \rangle$ не зависит от углов, и $C_L(\{\mathbf{p}\}, \{l\})$ обозначает мультиполярную гармонику, т.е. неприводимое тензорное произведение ранга L , составленное из $n = N - 1$ сферических гармоник², зависящих от углов импульсов $\{\mathbf{p}\}$, которым соответствуют ранги $\{l\}$. При некоторых частных конфигурациях импульсов, мультиполярная гармоника может обращаться в ноль, что приводит к возникновению (геометрических) правил отбора, т.е. условий, при которых амплитуда (и сечение) фрагментации обращается в ноль. Изложенный метод использовался в работах [43, 55, 158, 187–189]. Преимущество метода состоит в равноправном рассмотрении угловых координат всех фрагментов, а недостаток – в необходимости “привязки” компонент мультиполярной гармоники к некоторой фиксированной системе координат.

В основе предлагаемой параметризации лежит разложение вектора поляризации фотона \mathbf{e} по базису, образованному произвольной парой неколлинеарных векторов импульса, например, \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 ,

$$\mathbf{e} \sin^2 \theta = \kappa_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) - \kappa_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2) + [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2] (\mathbf{e} \cdot [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]), \quad (4.3)$$

где θ – угол между векторами $\hat{\mathbf{p}}_1$ и $\hat{\mathbf{p}}_2$, и введено обозначение $\kappa_j = [\hat{\mathbf{p}}_j \times [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]]$, $j = 1, 2$. Векторы $\kappa_{1,2}$, $\hat{\mathbf{p}}_{1,2}$ лежат в одной плоскости, перпендикулярной векторному произведению $[\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]$. Векторное равенство (4.3) можно проверить, например, вычислив его компоненты в некоторой фиксированной системе координат.

²В общем случае, мультиполярная гармоника зависит от схемы связи гармоник, входящих в её определение, см. Приложение А.

Подставляя (4.3) в выражение (4.1) для матричного элемента, приходим к следующей параметризации амплитуды фотофрагментации,

$$T = \alpha_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) + \alpha_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2) + A (\mathbf{e} \cdot [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]), \quad (4.4)$$

где коэффициенты определены равенствами

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= \frac{\langle \{\mathbf{p}\} | \boldsymbol{\kappa}_2 \cdot \mathbf{d} | \Phi_i \rangle}{\sin^2 \theta}, \\ \alpha_2 &= -\frac{\langle \{\mathbf{p}\} | \boldsymbol{\kappa}_1 \cdot \mathbf{d} | \Phi_i \rangle}{\sin^2 \theta}, \\ A &= \frac{\langle \{\mathbf{p}\} | [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2] \cdot \mathbf{d} | \Phi_i \rangle}{\sin^2 \theta}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Как видно, параметры амплитуды $\alpha_{1,2}$, A не зависят от направления и поляризации фотона и являются функциями углов между векторами импульсов из набора $\{\mathbf{p}\}$. Заметим, что при $L_i = 0$ коэффициенты $\alpha_{1,2}$, A являются вращательными инвариантами, т.е. скалярами или псевдоскалярами, в зависимости от чётности начального состояния и количества фрагментов.

Рассмотрим связь между параметризациями матричного элемента фрагментации (4.4) и (4.2). Чтобы получить выражения для параметров $\alpha_{1,2}$, A через приведённые матричные элементы, необходимо подставить разложение вектора поляризации (4.3) в выражение (4.2) и пересвязать сферические гармоники [10], зависящие от векторов $\hat{\mathbf{p}}_1$, $\hat{\mathbf{p}}_2$. В результате, матричный элемент можно записать в виде

$$T = B_{10} (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) + B_{01} (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2) + B_{11} (\mathbf{e} \cdot [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]), \quad (4.6)$$

где

$$B_{l_1 l_2} = \sum_{\{l\}} \beta_{l_1 l_2}^{\{l\}} C_{L_i M_i}(\{\mathbf{p}\}, \{l\}). \quad (4.7)$$

Таким образом, получаем соотношения: $\alpha_1 = B_{10}$, $\alpha_2 = B_{01}$, $A = B_{11}$. Коэффициенты $\beta_{l_1 l_2}^{\{l\}}$ в (4.7) содержат приведённые матричные элементы и коэффициенты пересвязывания. Таким образом, $\beta_{l_1 l_2}^{\{l\}}$ не зависят от углов между векторами импульсов. Как видно, ранг мультиполярной гармоники, входящей в определение параметров амплитуды, равен моменту начального состояния. Это даёт возможность установить правила отбора, т.е. условия, при которых коэффициенты $\alpha_{1,2}$, A обращаются в ноль.

Формула (4.7) справедлива в приближении LS связи. Обобщение на случай другой схемы связи спиновых и орбитальных моментов можно получить, используя разложение конечного состояния по спин-тензорным гармоникам [10].

Если число частиц в непрерывном спектре больше трёх, то для однозначного определения геометрической конфигурации требуется дополнительная величина, позволяющая различать зеркально-симметричные конфигурации. В качестве такой величины (для неё будем использовать термин “спиральность”) можно выбрать смешанное произведение $h = (\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{p}}_3)$, где векторы $\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2, \hat{\mathbf{p}}_3$ линейно независимы.

Несмотря на общий характер параметризации (4.4), она позволяет получить ряд правил отбора для матричных элементов, обусловленных законом сохранения полного углового момента и чётности. Для их вывода заметим, что углы между векторами импульсов $\hat{\mathbf{p}}_i$ не меняются при преобразовании чётности, $\{\mathbf{p}\} \rightarrow \{-\mathbf{p}\}$, в отличие от спиральности h , которая меняет знак, $h \rightarrow -h$. При определённой чётности конечного состояния $\pi = 0, 1$ (в дипольном приближении, π противоположна чётности начального состояния),

параметры амплитуды должны удовлетворять условиям

$$\alpha_{1,2}(-h) = (-1)^{\pi+1}\alpha_{1,2}(h), \quad (4.8)$$

$$A(-h) = (-1)^\pi A(h), \quad (4.9)$$

поскольку при преобразовании чётности $\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2$ меняют знак, а произведение $[\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]$ – не меняет. (Формулу (4.8) надо понимать как два уравнения: на α_1 и α_2 .) Из приведённых условий следует, что если все векторы импульсов лежат в одной плоскости (т.е. когда $h = 0$ или $n = 2$), то параметры α_1, α_2 обращаются в ноль при положительной чётности $\pi = 0$, и параметр $A = 0$ при отрицательной чётности $\pi = 1$. Это объясняет отсутствие векторного произведения в амплитуде двойной ионизации основного состояния атома гелия, т.к. в этом случае $h = 0$ и $\pi = 1$, так что из (4.4) сразу следует параметризация

$$T = \alpha_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) + \alpha_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2). \quad (4.10)$$

Представленный вывод является гораздо более простым по сравнению с известными в литературе [43, 190]. Отметим также, что если в процессе трёхчастичного распада импульсы частиц коллинеарны, то параметризация (4.4) неприменима.

Волновая функция конечного состояния может обладать дополнительными свойствами, например, определённой симметрией относительно перестановки координат тождественных частиц. Такого рода свойства симметрии приводят к правилам отбора для амплитуды фотофрагментации. Обычно, правила отбора, обусловленные перестановочной симметрией, выводятся на базе мультипольного разложения (4.2) матричного элемента. Ниже будет показано, что векторное представление амплитуды (4.4) также можно использовать для получения правил на коэффициенты α_1, α_2 и A .

4.1.2. Полная фрагментация молекулы водорода

В качестве примера использования инвариантной параметризации (4.4), рассмотрим полную фрагментацию молекулы водорода H_2 , вызванную поглощением одного фотона. В данном случае, конечное состояние характеризуется тремя векторами асимптотического импульса. В качестве наблюдаемых удобно выбрать векторы $\mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b$ импульса электронов относительно ц.м. молекулы и вектор относительного импульса ядер \mathbf{P} . Предположим, что только электроны поглощают фотон и после ионизации ядра “чувствуют” только взаимный кулоновский потенциал отталкивания. В данной модели, направление относительного импульса ядер совпадает с направлением оси, соединяющей ядра в начальном состоянии и потенциальная энергия ядер трансформируется в их кинетическую энергию посредством т.н. “кулоновского взрыва” [191]. Примем, что электроны находились в основном состоянии Σ_g^+ , что соответствует скалярной волновой функции. Можно показать [192], что данные допущения эквивалентны условию равенства нулю полного углового момента молекулы.

Будем использовать представление (4.4) для матричного элемента перехода, где $\mathbf{p}_1 = \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_2 = \mathbf{p}_b$. Из изложенного выше следует, что параметры α_a, α_b и A являются функциями импульсов p_a, p_b, P , относительных угловых переменных $\tau_a = (\mathbf{P} \cdot \mathbf{p}_a), \tau_b = (\mathbf{P} \cdot \mathbf{p}_b), \tau_{ab} = (\mathbf{p}_a \cdot \mathbf{p}_b)$ и спиральности $h = (\mathbf{P}, \mathbf{p}_a, \mathbf{p}_b)$. В задаче присутствует три вида симметрий, что приводит к следующим правилам отбора:

Полная чётность. – Среди внутренних переменных преобразование чёт-

ности затрагивает только спиральность: $h \rightarrow -h$. Отсюда следуют равенства

$$\begin{aligned}\alpha_{a,b}(-h) &= (-1)^{\pi+1} \alpha_{a,b}(h), \\ A(-h) &= (-1)^{\pi} A(h).\end{aligned}\tag{4.11}$$

Перестановка электронов. – Перестановка электронов эквивалента перестановке индексов $a \leftrightarrow b$ и замене $h \rightarrow -h$; откуда

$$\begin{aligned}\alpha_a(p_a, p_b, \tau_a, \tau_b, h) &= (-1)^{S_e} \alpha_b(p_b, p_a, \tau_b, \tau_a, -h), \\ A(p_a, p_b, \tau_a, \tau_b, h) &= (-1)^{S_e+1} A(p_b, p_a, \tau_b, \tau_a, -h),\end{aligned}\tag{4.12}$$

где S_e обозначает спин пары электронов.

Электронная чётность. – Для гомоядерных молекул сохраняется также электронная чётность π_e , преобразование которой эквивалентно замене $\hat{\mathbf{p}}_{a,b} \leftrightarrow -\hat{\mathbf{p}}_{a,b}$, что приводит к условиям

$$\begin{aligned}\alpha_{a,b}(\tau_a, \tau_b) &= (-1)^{\pi_e+1} \alpha_{a,b}(-\tau_a, -\tau_b), \\ A(\tau_a, \tau_b) &= (-1)^{\pi_e} A(-\tau_a, -\tau_b).\end{aligned}\tag{4.13}$$

Условия (4.11) – (4.13) приводят к тому, что, при заданных параметрах π , π_e и S_e , амплитуда процесса обращается в ноль для некоторых конфигураций импульсов фрагментов. Отметим, что для рассматриваемого случая фрагментации молекулы водорода H_2 , квантовые числа чётности и спина равны (см. [187]): $\pi = \pi_e = 1$, $S_e = 0$.

Поскольку в задачу входят три вектора импульса, размерность пространства параметров, определяющих вид угловых распределений, очень велика. Для простоты, ограничимся рассмотрением таких конфигураций, у которых вклад в амплитуду дают только коэффициенты α_a и α_b . Кроме того, фотон будем считать линейно-поляризованным: $\mathbf{e} = \boldsymbol{\epsilon}$, а энергию электронов одинаковой: $E_a = E_b$. Матричные элементы (4.5) вычислялись с помощью техники,

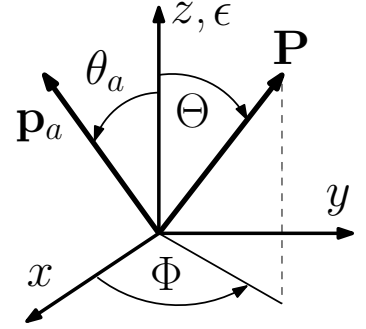


Рис. 4.1. Сечение полной фотофрагментации H_2 для $E_a = E_b = 10$ эВ. Точки обозначают направления вылета электронов.

предложенной в работе [191]. Её ключевой момент состоит в использовании в качестве волновой функции конечного состояния электронов произведения пяти кулоновских волн, соответствующих взаимодействиям электрон-электрон и электроны-ядра. Многомерные интегралы вычислялись с помощью метода Монте-Карло.

Геометрия, для которой проводился расчёт, показана на рис. 4.1. Ось z лабораторной системы координат направлена вдоль вектора поляризации ϵ , электроны вылетают в плоскости zx , и $\theta_{a,b} = \arccos(\epsilon \cdot \hat{p}_{a,b})$. В анализируемой конфигурации направления импульсов электронов фиксированы условием $\theta_a + \theta_b = 180^\circ$. Для данной конфигурации сечение двухэлектронной фотоионизации “объединённого атома” (т.е. гелия) обращается в ноль. На рис. 4.1 показано сечение для $\theta_a = 20^\circ$, $\theta_b = 160^\circ$, $E_a = E_b = 10$ эВ при различных ориентациях импульса \mathbf{P} (параметризованного углами Θ , Φ – см. правую часть рис. 4.1). Вследствие ограничений (4.11), (4.12) и условия $(\epsilon, \hat{p}_a, \hat{p}_b) = 0$, в

амплитуду дают вклад только параметры α_a и α_b :

$$T = \epsilon \cdot (\hat{\mathbf{p}}_a + \hat{\mathbf{p}}_b) \frac{\alpha_a(\tau_a, \tau_b) + \alpha_a(\tau_b, \tau_a)}{2} + \epsilon \cdot (\hat{\mathbf{p}}_a - \hat{\mathbf{p}}_b) \frac{\alpha_a(\tau_a, \tau_b) - \alpha_a(\tau_b, \tau_a)}{2}. \quad (4.14)$$

При $\tau_a = \tau_b$ второе слагаемое в этом равенстве выпадает, и матричный элемент $T \sim \epsilon \cdot (\hat{\mathbf{p}}_a + \hat{\mathbf{p}}_b)$, т.е. при $(\epsilon \cdot \hat{\mathbf{p}}_a) = -(\epsilon \cdot \hat{\mathbf{p}}_b)$ матричный элемент фрагментации обращается в ноль, что соответствует штриховым линиям на рис. 4.1. Как видно, структура углового распределения представляет собой набор максимумов, заполняющих “разрешённые” участки пространства между линиями узлов, обусловленных требованиями симметрии. Данное правило отбора в существующей литературе известно не было. Детальное обсуждение результатов расчёта, а также вывод дополнительных правил отбора содержатся в работе [192].

4.2. Недипольные эффекты в двухэлектронной фотоионизации атомов

В последнее время большое внимание уделяется изучению недипольных эффектов в однократной ($\gamma 1e$) и двойной ($\gamma 2e$) фотоионизации атомов в ультрафиолетовом (УФ) диапазоне энергий фотона.

Хотя первые эксперименты по измерению недипольных поправок проводились в рентгеновском диапазоне энергий (для атома аргона [193, 194]), недавно было установлено наличие заметной асимметрии³ вылета электронов при энергии фотона, лежащей в УФ диапазоне (см., например, результаты для

³Относительно волнового вектора \mathbf{k} фотона, что связано с интерференцией дипольной и квадрупольной амплитуд.

ксенона при $E_\gamma \lesssim 200$ эВ в [195], и для гелия при $E_\gamma \lesssim 160$ эВ в [196]). Наряду с асимметрией угловых распределений, недипольные эффекты приводят к появлению специфических особенностей сечений, наблюдаемых в экспериментах с регистрацией спина фотоэлектрона [197, 198] или атома в начальном состоянии [199].

Большинство экспериментов по двухэлектронной фотоионизации проводятся с атомом гелия [43, 46], представляющего простейшую систему трёх тел, взаимодействующих по закону Кулона. Обычно в экспериментах энергия фотона находится в интервале $100 \div 530$ эВ. Измерения трижды дифференциального сечения (ТДС) при таких энергиях интерпретировались в рамках дипольного приближения. Отметим, что прогресс экспериментальной техники позволяет в настоящее время измерять ТДС очень малой величины порядка $(10^{-2} \div 10^{-3}) \text{ b eV}^{-1} \text{ Sr}^{-2}$.

До сих пор анализ недипольных эффектов в процессах $\gamma 2e$ в литературе отсутствовал. По всей видимости, это связано с двумя обстоятельствами. Во-первых, учёт электронных корреляций в процессах $\gamma 2e$ связан с решением сложных проблем численного расчёта, что даже в дипольном случае было сделано сравнительно недавно (см., например [55, 188, 200–209]). Кроме того, общий анализ структуры ТДС в процессах $\gamma 2e$ гораздо сложнее, чем в процессах $\gamma 1e$ уже в дипольном приближении и требует разработки специальных методов квантовой теории углового момента [43, 46]. Во-вторых, имеющиеся экспериментальные данные находятся в удовлетворительном согласии с теоретическими предсказаниями, основанными на дипольном приближении. Однако, почти все измерения проводились в перпендикулярной геометрии, когда плоскость регистрации фотоэлектронов перпендикулярна направлению

фотонного пучка⁴. В низшем порядке, эффекты запаздывания соответствуют члену $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ в степенном разложении векторного потенциала, который даёт вклад в $\gamma 2e$ -амплитуду и ТДС только в виде скалярных произведений $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_1)$ и $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}_2)$, которые, очевидно, исчезают в перпендикулярной геометрии эксперимента⁵, т.е. при $\mathbf{p}_1, \mathbf{p}_2 \perp \mathbf{k}$.

В данном разделе получена параметризация амплитуды двухэлектронной фотоионизации гелия, учитывающая дипольную ($E1$) и квадрупольную ($E2$) компоненты оператора электромагнитного взаимодействия. Обсуждаются вызванные эффектом запаздывания особенности ТДС, возникающие в результате интерференции амплитуд $E1$ и $E2$. Среди таких особенностей – асимметрия ТДС при изменении знака волнового вектора \mathbf{k} линейно-поляризованного фотона. Также приводятся результаты численных оценок, демонстрирующие, что эффекты запаздывания можно наблюдать уже при надпороговой энергии в 80 эВ.

4.2.1. Параметризация амплитуды с учётом недипольных поправок

Амплитуда процесса $\gamma 2e$, учитывающая недипольные поправки в низшем порядке, имеет вид

$$A = A_d + A_q = \langle \mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2 | (\mathbf{e} \cdot \mathbf{D} + \{\mathbf{e} \otimes \hat{\mathbf{k}}\}_2 \cdot \mathbf{Q}_2) | 0 \rangle, \quad (4.15)$$

где $|\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2\rangle$ – конечное состояние пары электронов в континууме, \mathbf{e} – вектор поляризации фотона (в общем случае, комплексный и нормированный условием $(\mathbf{e} \cdot \mathbf{e}^*) = 1$). В (4.15) операторы дипольного $\mathbf{D} = \mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2$ и квадрупольного

⁴Исключение составляют работы [210, 211], в которых надпороговая энергия не превышала 25 эВ.

⁵В этом случае отличны от нуля недипольные поправки следующего порядка малости $\sim \alpha\omega$, которые не проявляются в экспериментальных данных, имеющихся для атома гелия.

$Q_{2m} = (i/2)\alpha\omega (\{\mathbf{r}_1 \otimes \mathbf{r}_1\}_{2m} + \{\mathbf{r}_2 \otimes \mathbf{r}_2\}_{2m})$ моментов соответствуют амплитудам A_d и A_q в калибровке длины. (Калибровка скорости получается с помощью замен $\mathbf{D} \rightarrow -i(\nabla_1 + \nabla_2)$ и $Q_{2m} \rightarrow \alpha\omega (\{\mathbf{r}_1 \otimes \nabla_1\}_{2m} + \{\mathbf{r}_2 \otimes \nabla_2\}_{2m})$.) Отметим, что магнитный дипольный момент не даёт вклад в амплитуду перехода из начального 1S_0 состояния $|0\rangle$.

Для выделения зависимости квадрупольной амплитуды A_q от фотонных параметров \mathbf{e} , \mathbf{k} и относительного угла θ между импульсами \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 , воспользуемся методом параметризации дипольной амплитуды $\gamma 2e$, предложенной в работе [39]. Запишем мультипольное разложение волновой функции конечного состояния по биполярным гармоникам $C_{lm}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2)$, зависящим от углов единичных векторов $\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2$,

$$|\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2\rangle = \sum_{l_1 l_2 l m} C_{lm}^{l_1 l_2*}(\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2) |p_1 p_2; (l_1 l_2) l m\rangle. \quad (4.16)$$

Подставим теперь это равенство в выражение (4.15) для амплитуды и применим теорему Вигнера-Экарта. В результате, получаем представление квадрупольной амплитуды A_q в виде скалярного произведения неприводимых тензоров 2-го ранга,

$$A_q = \frac{1}{\sqrt{5}} \sum_{l_1 l_2} (\{\mathbf{e} \otimes \hat{\mathbf{k}}\}_2 \cdot C_2^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{p}}_1, \hat{\mathbf{p}}_2)) \langle p_1 p_2; (l_1 l_2) 2 \| Q_2 \| 0 \rangle, \quad (4.17)$$

где $\langle p_1 p_2; (l_1 l_2) 2 \| Q_2 \| 0 \rangle$ – приведённый матричный элемент оператора квадрупольного момента Q_2 , взятый между начальным 1S_0 -состоянием $|0\rangle$ и D -компонентой волновой функции двухэлектронного континуума с индивидуальными моментами l_1 и $l_2 = l_1, l_1 \pm 2$.

В [39] показано, что БГ второго ранга в (4.17) сводятся к комбинациям производных многочленов Лежандра $P_l(\cos \theta)$ и трёх тензоров второго ранга $\{\hat{\mathbf{p}}_i \otimes \hat{\mathbf{p}}_j\}_2$, где $(i, j) = (1, 1), (1, 2), (2, 2)$. После вычисления скалярных про-

изведений данных тензоров с тензором $\{\mathbf{e} \otimes \hat{\mathbf{k}}\}_2$, амплитуда A_q может быть представлена в инвариантном виде

$$A_q = g_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1)(\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + g_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2)(\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + g_s [(\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1)(\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2)(\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}})], \quad (4.18)$$

где коэффициенты выражаются через две скалярные функции:

$g_s \equiv g_s(p_1, p_2, \cos \theta) = g_s(p_2, p_1, \cos \theta)$ и $g(p, p', \cos \theta)$, причём $g_1 = g(p_1, p_2, \cos \theta)$ и $g_2 = g(p_2, p_1, \cos \theta)$. Функции $g(p, p', \cos \theta)$ и $g_s(p_1, p_2, \cos \theta)$ определены равенствами [90],

$$g_s(p, p', \cos \theta) = - \sum_{l=1}^{\infty} \left[\sum_{l'=l \pm 2} Q_{ll'}(p, p') P_{(l+l')/2}^{(2)}(\cos \theta) + \sqrt{6} Q_{ll'}(p, p') \left(P_{l+1}^{(2)}(\cos \theta) - \frac{2l+3}{2} P_l^{(1)}(\cos \theta) \right) \right], \quad (4.19)$$

$$g(p, p', \cos \theta) = \sum_{l=2}^{\infty} \left[\sum_{l'=l \pm 2} Q_{ll'}(p, p') + \sqrt{6} Q_{ll'}(p, p') \right] P_l^{(2)}(\cos \theta),$$

где $P_l^{(n)}(x) = (d^n/dx^n) P_l(x)$ – n -я производная от многочлена Лежандра $P_l(x)$, и введено обозначение

$$Q_{ll'}(p, p') = 2(-1)^l \sqrt{\frac{(l+l'-2)!}{(l+l'+3)!}} \langle p_1 p_2; (ll') 2 \| Q_2 \| 0 \rangle. \quad (4.20)$$

Аналогичная параметризация дипольной амплитуды A_d хорошо известна [43, 46], и имеет вид,

$$A_d = f_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) + f_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2), \quad (4.21)$$

где коэффициенты выражаются через одну функцию f согласно равенствам,

$$f_1 = f(p_1, p_2, \cos \theta), \quad f_2 = f(p_2, p_1, \cos \theta).$$

Определение функции $f(p, p', \cos \theta)$ имеет вид,

$$f(p, p', \cos \theta) = \sum_{l=1}^{\infty} \left[\sum_{l'=l \pm 1} D_{ll'}(p, p') \right] P_l^{(1)}(\cos \theta). \quad (4.22)$$

Здесь было введено обозначение

$$D_W(p, p') = (-1)^{l'} \frac{\langle p_1 p_2; (ll') 1 \| D \| 0 \rangle}{\sqrt{(2l+1)(2l'+1) \max(l, l')}}. \quad (4.23)$$

Результаты (4.18) – (4.23) являются общими и представляют собой параметризацию амплитуды, не зависящую от выбора динамической модели, используемой для вычисления приведённых матричных элементов⁶ (4.20), (4.23). Таким образом, измерения недипольных эффектов в двойной фотоионизации основного состояния атома гелия позволяют получить информацию об электронных корреляциях в D -волновой части волновой функции континуума $|\mathbf{p}_1 \mathbf{p}_2\rangle$, что в принципе невозможно в рамках дипольного приближения.

4.2.2. Недипольные поправки к ионизации гелия

Для оценки величины недипольных эффектов вычисление динамических факторов $D_W(p, p')$ и $Q_W(p, p')$ проводилось в рамках теории возмущений по межэлектронному взаимодействию. Аналогично работе [55], электронные корреляции в конечном состоянии учитывались в низшем неисчезающем порядке, а для начального основного состояния атома гелия была взята вариационная (некоррелированная) волновая функция с эффективным зарядом $Z = 27/16$. В [55] показано, что данное приближение адекватно описывает ТДС для надпороговых энергий в несколько десятков эВ в дипольном приближении и находится в хорошем согласии с результатами интенсивных численных теоретических расчётов в большом диапазоне значений относительно угла вылета электронов θ (за исключением малых θ , $\theta \lesssim 60^\circ$). Численные расчёты показывают, что для надпороговой энергии в 80 эВ, определяющий

⁶Параметризация дипольной амплитуды A_d в терминах симметризованных амплитуд, $a_{g,a} = (f_1 \pm f_2)/2$, аналогичная (4.21) – (4.23), получена в [190].

вклад в квадрупольные факторы g и g_s дают парциальные состояния с моментами $(l, l') \leq 6$, а в дипольные факторы f – состояния с $(l, l') \leq 4$.

Ниже, для краткости, рассматривается простейшая и наиболее важная ситуация линейно поляризованного фотона, $\mathbf{e} = \boldsymbol{\epsilon}$. В этом случае ТДС с учётом квадрупольной поправки выражается формулой

$$\frac{d\sigma}{dE_1 d\Omega_1 d\Omega_2} \equiv \sigma = \mathcal{A} |A_d + A_q|^2, \quad (4.24)$$

где $\mathcal{A} = 4\pi^2 \alpha p_1 p_2 / \omega$. Отметим, что при раскрытии квадрата модуля амплитуды учёт членов $E2 - E2$ не имеет смысла, поскольку является превышением точности. Таким образом, ТДС можно представить в виде

$$\sigma = \sigma_d + \mathcal{A} [\alpha_1 (\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + \alpha_2 (\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{k}})]. \quad (4.25)$$

Здесь, $\sigma_d = \mathcal{A} |A_d|^2$ – ТДС в дипольном приближении, параметры $\alpha_{1,2}$ не зависят от $\hat{\mathbf{k}}$ и описывают дипольно-квадрупольную интерференцию:

$$\begin{aligned} \alpha_1 &= 2\text{Re} \{ A_d^* [g_1 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) + g_s (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2)] \}, \\ \alpha_2 &= 2\text{Re} \{ A_d^* [g_2 (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2) + g_s (\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1)] \}. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Отметим, что если энергии фотоэлектронов равны, а направления вылета противоположны (т.е. при $\mathbf{p}_1 = -\mathbf{p}_2$), параметры α_1 и α_2 обращаются в ноль, т.к. в этом случае $A_d = 0$, см. (4.21).

Для определения параметров α_1 и α_2 достаточно провести два эксперимента с неортогональной геометрией и разными направлениями волнового вектора фотона \mathbf{k} .

Как следует из (4.25) и (4.26), интерференция $E1 - E2$ максимальна когда все четыре вектора \mathbf{k} , $\boldsymbol{\epsilon}$, \mathbf{p}_1 и \mathbf{p}_2 лежат в одной плоскости (копланарная геометрия). Согласно (4.25), разность Δ двух ТДС, соответствующих разным

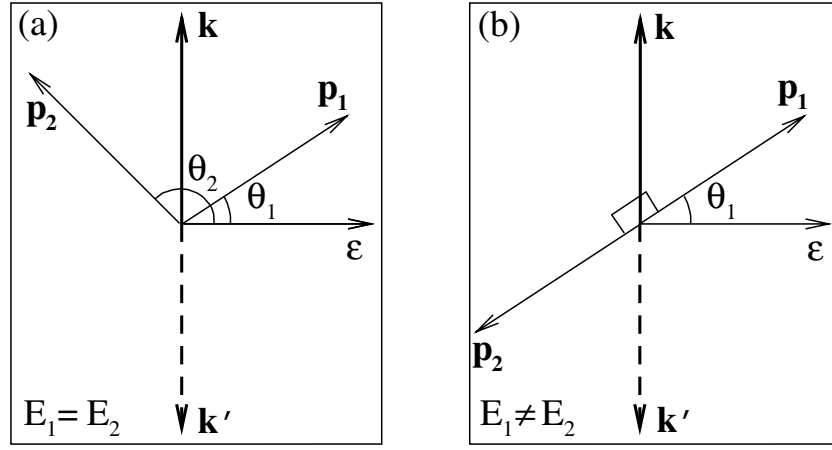


Рис. 4.2. Геометрии эксперимента, удобные для наблюдения недипольных эффектов в двойной ионизации гелия. Векторы ϵ , $\hat{\mathbf{k}}$, \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2 лежат в одной плоскости. Проводятся два измерения: одно для $(\epsilon, \hat{\mathbf{k}})$, другое для $(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}' = -\hat{\mathbf{k}})$. (a) равная энергия электронов; (b) неравная энергия электронов ($\hat{\mathbf{p}}_2 = -\hat{\mathbf{p}}_1$, т.е. $\theta = 180^\circ$)

направлениям фотонного пучка $\hat{\mathbf{k}}$ и $\hat{\mathbf{k}}'$ (при фиксированных векторах ϵ , \mathbf{p}_1 , \mathbf{p}_2), т.е. $\Delta = \sigma(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}) - \sigma(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}')$, равна

$$\Delta = \mathcal{A} [\alpha_1 (\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot [\hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{k}}']) + \alpha_2 (\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot [\hat{\mathbf{k}} - \hat{\mathbf{k}}'])]. \quad (4.27)$$

Величина $|\Delta|$ имеет максимум при $\hat{\mathbf{k}} = -\hat{\mathbf{k}}'$. Иными словами, различие ТДС максимально, когда второй эксперимент проводится при обратном направлении фотонного пучка (направление вектора поляризации ϵ в обоих экспериментах должно совпадать). На рис. 4.2 изображены геометрии эксперимента по измерению недипольных поправок для случаев равной и неравной энергии фотоэлектронов.

Для равной энергии электронов (см. рис. 4.2(a)), эксперимент состоит из двух измерений ТДС, как функции угла θ_2 , при фиксированном θ : первое с параметрами фотонного пучка $(\epsilon, \hat{\mathbf{k}})$, и второе с $(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}' = -\hat{\mathbf{k}})$, в котором направление пучка изменено на обратное (или, эквивалентно, плоскость детектирования повернута на угол 180° относительно вектора поляризации ϵ).

При этом, разность измеренных ТДС определяется по формуле (см. (4.27)): $\Delta = 2\mathcal{A}[\alpha_1 (\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + \alpha_2 (\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{k}})]$.

Вычисление ТДС, соответствующих изображённым на рис. 4.2 геометриям, проводилось для двух значений угла θ_1 и для двух противоположных направлений фотонов $\hat{\mathbf{k}}$. Недипольные поправки (т.е. величина параметра Δ) максимальны при $\theta_1 \lesssim 30^\circ$, хотя при $\theta_1 = 90^\circ$ эффект также имеет заметную величину. На рис. 4.3 представлены результаты расчёта ТДС и параметров Δ и Δ_{rel} , где

$$\Delta_{rel} = \frac{\sigma(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}) - \sigma(\epsilon, -\hat{\mathbf{k}})}{\sigma(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}) + \sigma(\epsilon, -\hat{\mathbf{k}})} \quad (4.28)$$

для надпороговой энергии в 80 эВ ($E_\gamma = 159$ эВ) как функции угла θ_2 для двух фиксированных значений θ_1 : на рис. 4.3(a)-(c), $\theta_1 = 0^\circ$, и на рис. 4.3(d)-(f), $\theta_1 = 15^\circ$. Как видно, различие между двумя ТДС при их максимуме составляет примерно 15% – 20% от величины ТДС. Относительные эффект ещё больше при $\theta \approx 180^\circ$, хотя в этом диапазоне углов ТДС имеет маленькую величину, поскольку дипольная амплитуда A_d исчезает при эмиссии электронов равной энергии и противоположными направлениями импульсов⁷.

При неравных энергиях электронов, преимущества имеет геометрия эксперимента, в которой регистрируются электроны с противоположными импульсами, см. рис. 4.2(b). В данном случае, необходимо провести измерения ТДС, как функции угла θ_1 , при двух направлениях фотонного пучка $\hat{\mathbf{k}}$ и $-\hat{\mathbf{k}}$, соответственно. При этом разность измеренных ТДС определяется формулой

$$\Delta = 4\mathcal{A}(\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}) (\epsilon \cdot \hat{\mathbf{p}}_1)^2 \text{Re} [(f_1^* - f_2^*) (g_1 + g_2 - 2g_s)], \quad (4.29)$$

⁷Отметим, что в пренебрежении членами $E_2 - E_1$, относительная разность Δ_{rel} расходится при $A_d = 0$. По этой причине, представленные численные расчёты Δ_{rel} включают члены $E_2 - E_1$ в (4.24) и (4.28), так что величина Δ_{rel} конечна при $\theta_2 = 180^\circ$ и $\theta_2 = 195^\circ$ на рис. 4.3.

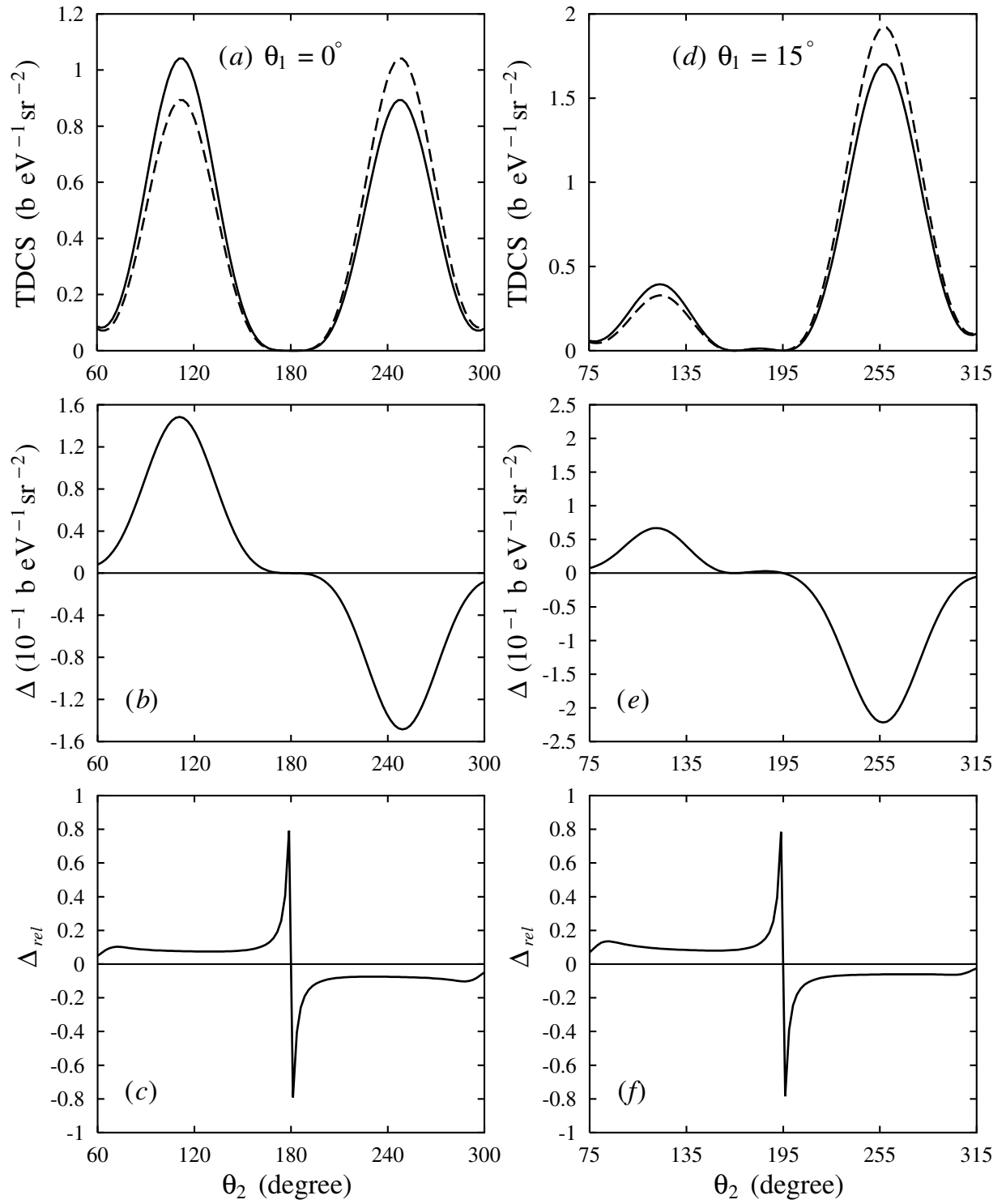


Рис. 4.3. Данные расчёта дипольно-квадрупольного ТДС (см. (4.24), (4.25)) и параметров Δ и Δ_{rel} (см. (4.27), (4.28)) для двойной ионизации атома гелия неполяризованным фотоном с надпороговой энергией 80 эВ в геометрии 4.2(a). Сплошные кривые на (a) и (d) соответствуют $\sigma(\epsilon, \hat{\mathbf{k}})$; пунктирные соответствуют $\sigma(\epsilon, -\hat{\mathbf{k}})$. На (a)–(c): $\theta_1 = 0^\circ$; на (d)–(f): $\theta_1 = 15^\circ$.

где $(\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}})(\boldsymbol{\epsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1)^2 = \sin \theta_1 \cos^2 \theta_1$ для геометрии рис. 4.2(b). Максимум выражения (4.29) достигается при $\theta_1 = \arcsin(1/\sqrt{3}) \approx 35.26^\circ$ и $\theta_1 = \pi - \arcsin(1/\sqrt{3}) \approx 144.7^\circ$

Результаты расчётов в рамках теории возмущений для ТДС, соответствующего противоположным направлениям вылета электронов $\hat{\mathbf{p}}_1 = -\hat{\mathbf{p}}_2$, представлены на рис. 4.4 для надпороговой энергии фотона, равной 80 эВ, и двух вариантах её распределения: $E_1 = 50$ эВ, $E_2 = 30$ эВ и $E_1 = 45$ эВ, $E_2 = 35$ эВ. Как видно из графиков, недипольные эффекты относительно велики при небольшом различии энергий электронов, т.к. в этом случае дипольная амплитуда A_d мала. И наоборот, при увеличении асимметрии распределения энергии (например, для $E_1 = 70$ эВ и $E_2 = 10$ эВ), относительная величина недипольных поправок уменьшается, поскольку дипольная амплитуда в данной ситуации больше квадрупольной. Более детальное обсуждение недипольных поправок в двойной ионизации, включая эффекты фотонной поляризации, приведено в работах [90, 91, 189]. Отметим также, что полученные результаты находятся в хорошем согласии с данными, рассчитанными в рамках более точного метода сильной связи [189].

Таким образом, анализ показывает, что недипольные эффекты в двойной ионизации атомов можно достаточно уверенно наблюдать с помощью существующих методов уже при небольшой надпороговой энергии фотона порядка 80 эВ, при условии копланарной геометрии эксперимента. Использование метода сильной связи (ССС – convergent close coupling) для расчёта сечения двойной ионизации гелия при энергии фотона 529 эВ показывает [212] (см. рис. 4.5), что учёт недипольных поправок приводит к лучшему согласию с экспериментальными данными, приведёнными в работе [89].

В заключение отметим, что расчёты, проведённые в недавней работе [213],

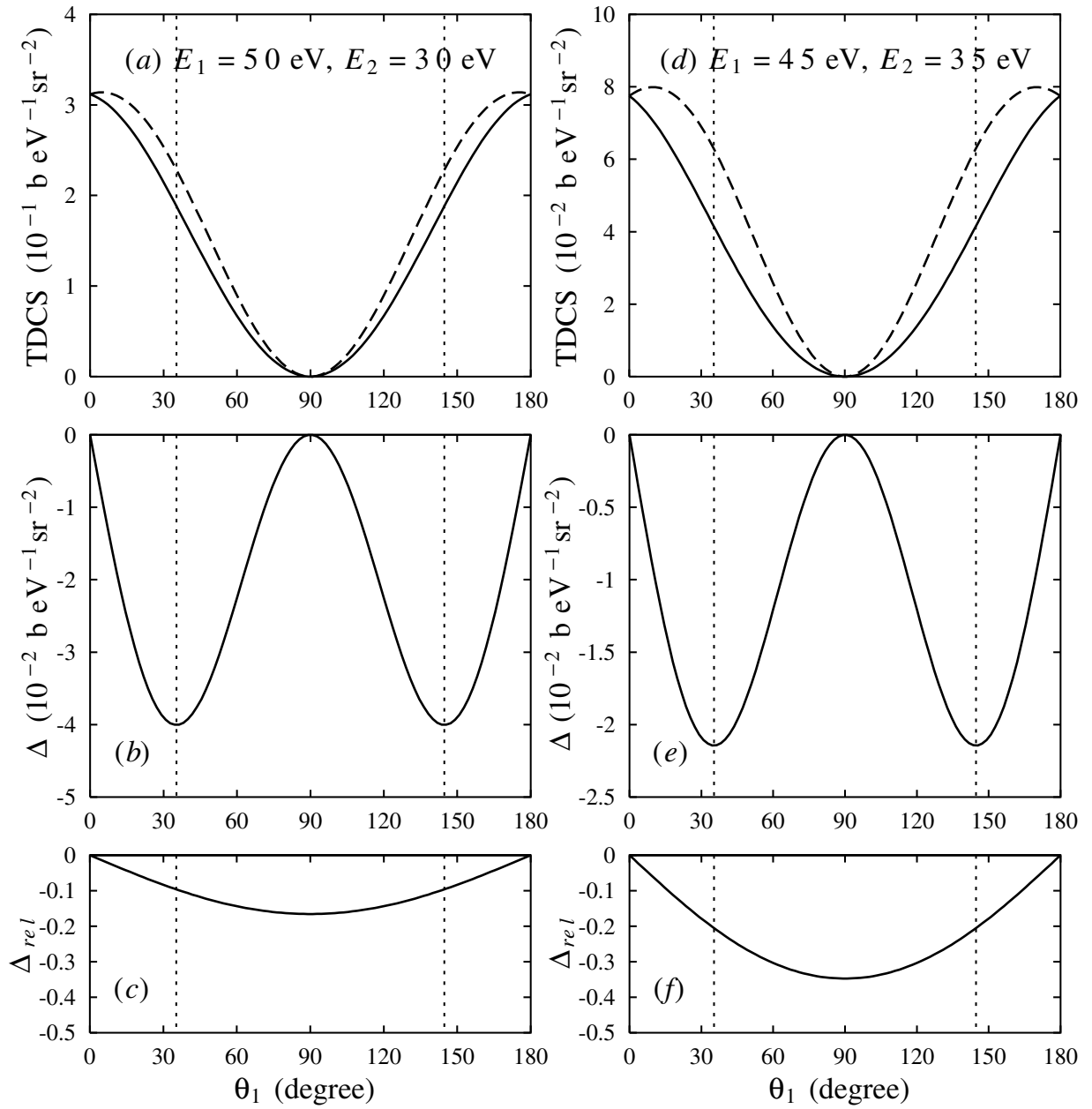


Рис. 4.4. То же, что и рис. 4.3, но для геометрии, показанной на рис. 4.2(b) для двух случаев неравной энергии электронов (прерывистые линии на (a) и (d)). Пунктирные вертикальные линии соответствуют углам $\theta_1 = 35.26^\circ$ и $\theta_1 = 144.7^\circ$, при которых параметр Δ максимален.

показали, что величина квадрупольных поправок в *полном сечении* двойной ионизации гелия при энергии фотона в 800 эВ составляет примерно 6%.

4.3. Выводы

В данной главе с помощью методов квантовой теории углового момента были получены параметризации амплитуд процессов однофотонной фрагментации атомов и молекул.

Особенность предлагаемого метода состоит в использовании разложения (4.3) вектора поляризации фотона по паре векторов импульса фрагментов. В результате, становится возможным выделять поляризационную зависимость амплитуды произвольного процесса однофотонной фрагментации. В качестве примера в п. 4.1.2 получена параметризация процесса полной фрагментации молекулы H_2 . Отметим, что разложение (4.3) вектора поляризации фотона можно также использовать для параметризации поляризационной зависимости амплитуд двух- и трёхфотонных переходов. Разложение (4.3) не даёт, конечно, возможности установить связь между динамическими (не зависящими от поляризации) факторами амплитуд и матричными элементами оператора электромагнитного взаимодействия. Для этого должны использоваться методы теории углового момента, такие как теорема Вигнера-Экарта [10] и формулы упрощения тензорных произведений сферических гармоник [39, 40].

Представляет интерес параметризация амплитуд многочастичной фрагментации при учёте недипольных поправок, поскольку в этом случае сечения процессов зависят не только от поляризации, но и от направления фотонного пучка. В разделе 4.2.1 получена параметризация амплитуды процесса фотоионизации 1S_0 -состояния двух электронов сверх заполненной оболочки. При

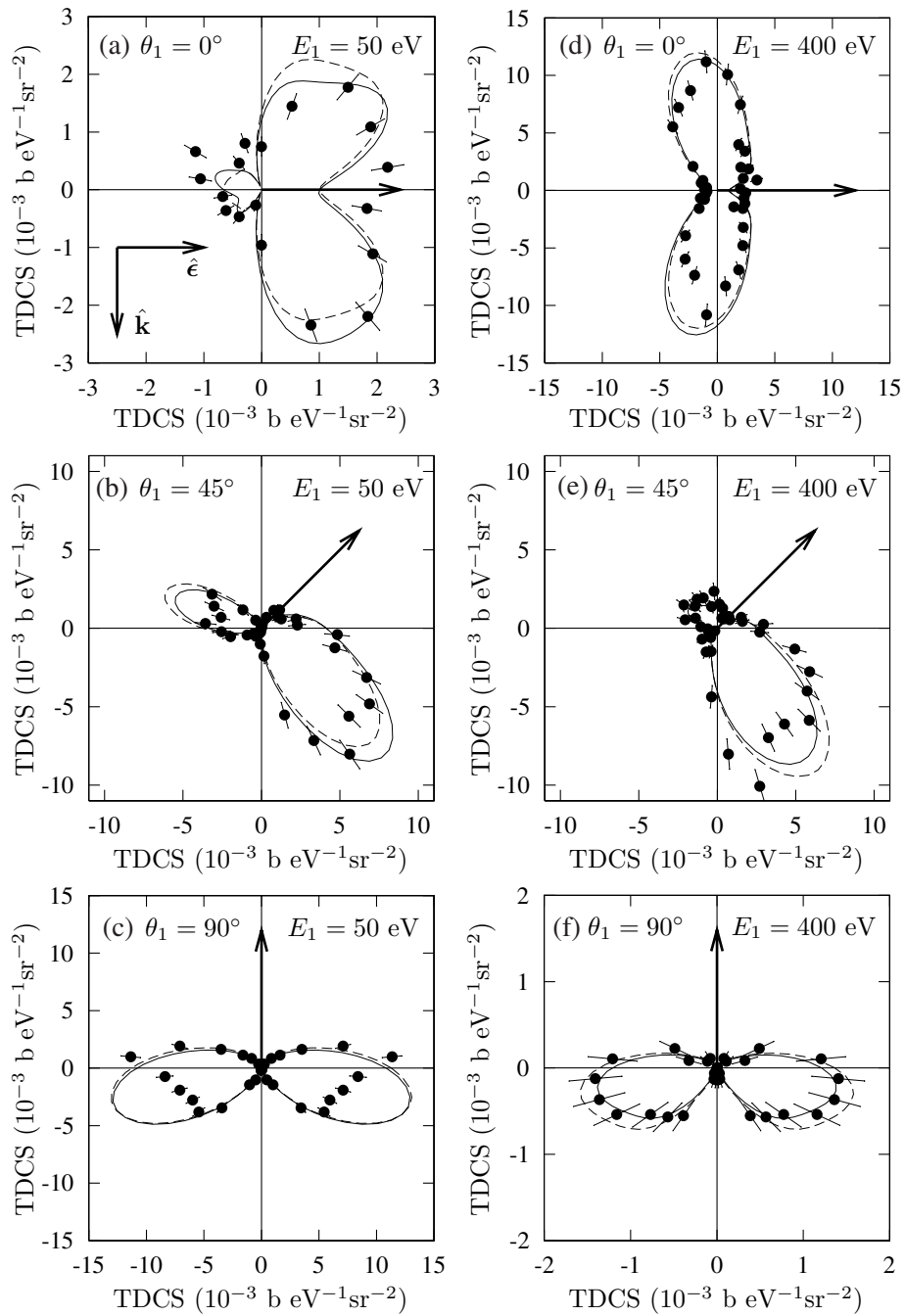


Рис. 4.5. ТДС при энергии линейной поляризованного фотона, равной 529 эВ. Энергии электронов 50 эВ и 400 эВ. Направление векторов \mathbf{k} и $\boldsymbol{\epsilon}$ указано на рис. (а). Угол θ_1 вылета электрона с энергией E_1 относительно вектора поляризации $\boldsymbol{\epsilon}$ показан стрелкой. Полярные диаграммы отображают угловое распределение второго электрона как функцию угла θ_2 . Сплошные линии: дипольно-квадрупольное сечение в методе CCC; прерывистые линии: дипольное приближение. Точки с интервалами погрешностей: экспериментальные данные [89]

этом, установлена связь динамических факторов амплитуды с приведёнными матричными элементами операторов дипольного и квадрупольного моментов. Результаты расчётов с использованием теории возмущений по межэлектронному взаимодействию, приведённые в разделе 4.2.2, показывают, что недипольные поправки в двойной фотоионизации основного состояния атома гелия возможно наблюдать уже при надпороговой энергии фотона $\sim 80 \div 100$ эВ. Дальнейшие результаты, относящиеся к двойной фотоионизации атома гелия, опубликованы в статьях [90, 92, 188, 189].

Отметим, что инвариантные (т.е. не зависящие от выбора системы координат) параметризации процессов рассеяния фотонов атомами, аналогичные полученным выше параметризациям (4.4), (4.18), были получены в работах [214–217].

Заключение

В диссертации рассмотрен ряд приложений квантовой теории углового момента к задаче нескольких тел. Математическая техника, используемая в диссертации, основана на новых тензорных представлениях сферических и гиперсферических функций и матриц конечных вращений.

В диссертации получены следующие основные результаты:

1. В главе 1 разработан универсальный метод отделения коллективных угловых переменных в квантовой задаче N тел, основанный на технике векторного дифференцирования минимальных тензорных произведений. Получены выражения для коэффициентов колебательно-вращательного разложения гамильтониана, справедливые для произвольного выбора вращающейся координатной системы (раздел 1.1).
2. Получены явные выражения для базисных векторов, вращательного и кориолисова гамильтонианов, соответствующих вращающейся системе координат Экарта в задаче N тел (раздел 1.2).
3. Минимальные биполярные гармоники использованы для отделения коллективных углов в задаче N тел; получены уравнения для соответствующих радиальных функций (раздел 1.3).
4. Приведён способ отделения коллективных угловых переменных, свободный от калибровочных расходимостей (раздел 1.4).

Результаты главы 1 опубликованы в статьях [19, 40, 162, 218, 219].

5. В главе 2 анализировался вопрос о выборе углового базиса для разложения волновой функции континуума трёх тел. В разделе 2.2 получены

коллективные мультипольные разложения произведения двух плоских волн. Показано, что коэффициенты разложения соответствуют импульсному представлению волновой функции трёхчастичного симметричного волчка. Изучены свойства симметрии и правила отбора для мультипольных коэффициентов. В разделе 2.3 предложено интерпретировать мультиполи как амплитуду мгновенного распада молекулы типа симметричного волчка на три нейтральных фрагмента. Результаты главы 2 опубликованы в статьях [57, 58, 212].

6. В главе 3 построена техника расчёта матричных элементов с водородными волновыми функциями на основе симметрии Фока. Получено компактное дифференциальное представление матричного элемента оператора $\exp i(\vec{k} \cdot \vec{r})$; получены замкнутые выражения для матричного элемента для нескольких частных значений квантовых чисел; получены рекуррентные соотношения для матричных элементов. Результаты главы 3 опубликованы в статьях [41, 79, 172, 220].
7. В главе 4 предложена универсальная параметризация поляризационной зависимости амплитуд процессов многочастичной ($N \geq 3$) однофотонной фрагментации атомов и молекул. В качестве примера рассмотрена задача полной фрагментации молекулы водорода H_2 (раздел 4.1.2).
8. Получена параметризация сечения процесса двухэлектронной фотоионизации атома с учётом недипольных эффектов (раздел 4.2). Указаны условия, оптимальные для наблюдения таких эффектов в угловых распределениях фотоэлектронов. В качестве примера рассмотрена задача об ионизации атома гелия (раздел 4.2.2).

Результаты главы 4 опубликованы в статьях [39, 90, 91, 188, 189, 192, 221].

Приложения

А. Неприводимые тензоры и их свойства

В трёхмерном пространстве неприводимым тензором ранга l называют совокупность $2l + 1$ величин T_{lm} , $m = -l, -l + 1, \dots, l$, преобразующихся при поворотах системы координат по линейному закону

$$T'_{lm} = \sum_{k=-l}^l T_{lk} R_{k,m}^l(\Omega), \quad (\text{A.1})$$

где T'_{lm} – компоненты тензора T в повернутой системе координат; $R_{k,m}^l(\Omega)$ – элементы матрицы конечных вращений, зависящие от трёх параметров поворота Ω . При параметризации поворота углами Эйлера $\alpha\beta\gamma$, МКВ известны как D -функции Вигнера; их можно представить в виде [10],

$$R_{k,m}^l(\Omega) = D_{k,m}^l(\alpha, \beta, \gamma) = e^{-ik\alpha} d_{k,m}^l(\beta) e^{-im\gamma}. \quad (\text{A.2})$$

Здесь, функции $d_{k,m}^l(\beta)$ можно выразить через многочлен Якоби [10]. Ряд альтернативных выражений для МКВ получен в работах [40, 219, 222] (см. также [223]).

Из двух неприводимых тензоров $T_{a\alpha}$ и $P_{b\beta}$ можно образовать неприводимые тензоры с помощью операции тензорного произведения [10],

$$\{T_a \otimes P_b\}_{c\gamma} = \sum_{\alpha,\beta} C_{a\alpha b\beta}^{c\gamma} T_{a\alpha} P_{b\beta}, \quad (\text{A.3})$$

где $C_{a\alpha b\beta}^{c\gamma}$ – трёхмерный коэффициент Клебша-Гордана.

Тензорное произведение двух сферических функций называется *биполярной гармоникой*,

$$C_{lm}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = \sum_{m_1 m_2} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm} C_{l_1 m_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) C_{l_2 m_2}(\hat{\mathbf{r}}_2), \quad (\text{A.4})$$

где $C_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = \sqrt{4\pi/(2l+1)} Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$ – модифицированная сферическая функция.

Минимальным тензорным произведением назовём произведение тензоров, ранг которого равен суммарному рангу образующих его тензоров, т.е.

$$\{T_a \otimes P_b\}_{a+b,\gamma}. \quad (\text{A.5})$$

Важным свойством минимальных произведений является их независимость от схемы связи [39, 215]. Например,

$$\{\{T_a \otimes P_b\}_{a+b} \otimes Q_c\}_{a+b+c,\gamma} = \{T_a \otimes \{P_b \otimes Q_c\}_{b+c}\}_{a+b+c,\gamma}. \quad (\text{A.6})$$

Минимальное произведение l единичных векторов $\hat{\mathbf{r}}$ пропорционально сферической функции [10, 39],

$$C_{lm}(\hat{\mathbf{r}}) = \sqrt{\frac{(2l-1)!!}{l!}} \{\hat{\mathbf{r}}\}_{lm}, \quad (\text{A.7})$$

где использовано сокращённое обозначение,

$$\{\hat{\mathbf{r}}\}_{lm} = \{\hat{\mathbf{r}} \otimes \{\hat{\mathbf{r}} \otimes \dots \otimes \{\hat{\mathbf{r}} \otimes \{\hat{\mathbf{r}} \otimes \hat{\mathbf{r}}\}_2\}_3 \dots\}_{l-1}\}_{lm}. \quad (\text{A.8})$$

Минимальные биполярные гармоники (МБГ) определены формулой

$$C_{lm}^{k,\lambda}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = C_{lm}^{l-k,k+\lambda}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2), \quad \lambda = 0, 1, \quad k = 0, 1, \dots, l. \quad (\text{A.9})$$

МБГ – полярные (истинные) тензоры при $\lambda = 0$. При $\lambda = 1$, МБГ – аксиальные тензоры (псевдотензоры), что видно из соотношения

$$C_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = i \sqrt{\frac{(2k+1)(2l-2k-1)}{l+1}} \{C_{l-1}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]\}_{lm}, \quad (\text{A.10})$$

которое можно проверить прямым вычислением в подходящей системе координат (см. уравнения (5) работы [222], и (В.6) из [39]). Из (A.10) следует, что при коллинеарных векторах $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2$, псевдотензорные гармоники обращаются в ноль, т.е. $C_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}, \pm\hat{\mathbf{r}}) = 0$.

Б. Отделение координат вектора центра масс в задаче

N тел

Выберем вместо радиус-векторов частиц \mathbf{R}_i , $i = 1, 2, \dots, N$, набор, состоящий из радиус-вектора ц.м. системы $\mathbf{R}_0 = \sum_i m_i \mathbf{R}_i / \sum_i m_i$ и $n \equiv N - 1$ векторов Якоби $\boldsymbol{\rho}_\alpha$, $\alpha = 1, 2, \dots, n$. Набор векторов Якоби определяется путём последовательного разбиения множества частиц на группы, центры масс которых соединяются векторами $\boldsymbol{\rho}_\alpha$. В результате, оператор кинетической энергии преобразуется к **диагональному** виду [12–14],

$$T = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \Delta_i = - \frac{\Delta_0}{2M} - \sum_{\alpha=1}^n \frac{1}{2\mu_\alpha} \Delta_\alpha, \quad (\text{Б.1})$$

где полная масса $M = \sum_{i=1}^N m_i$; Δ_0 обозначает оператор Лапласа, действующий на координаты вектора ц.м.; приведённые массы μ_α выражаются формулой

$$\frac{1}{\mu_\alpha} = \frac{1}{M_\alpha} + \frac{1}{M'_\alpha}, \quad (\text{Б.2})$$

где M_α и M'_α – массы групп частиц, ц.м. которых соединены вектором $\boldsymbol{\rho}_\alpha$.

Каждому разбиению множества частиц на группы соответствует определённый набор векторов Якоби. Операция перестановки частиц эквивалентна линейному преобразованию, связывающему соответствующие наборы,

$$\boldsymbol{\rho}_\alpha^{(a)} = \sum_{\beta=1}^n O_{\alpha\beta}(ab) \boldsymbol{\rho}_\beta^{(b)}, \quad (\text{Б.3})$$

где ортогональная матрица преобразования $O_{\alpha\beta}(ab)$ описывает связь набора векторов $\boldsymbol{\rho}_\alpha^{(a)}$ с набором векторов $\boldsymbol{\rho}_\alpha^{(b)}$. Таким образом, перестановку частиц можно интерпретировать как некоторое вращение в n -мерном пространстве векторов Якоби. В литературе преобразования (Б.3) обозначают термином “кинематическое вращение”, см., например, [156, 224].

Часто используются масс-масштабированные векторы Якоби [12], представляющие собой набор n векторов $\mathbf{r}_\alpha \equiv \sqrt{\mu_\alpha} \boldsymbol{\rho}_\alpha$, что позволяет представить оператор кинетической энергии в виде оператора Лапласа в $(3N - 3)$ -мерном пространстве,

$$T = -\frac{\Delta_0}{2M} - \frac{\Delta_{3N-3}}{2}, \quad \Delta_{3N-3} = \sum_{\alpha=1}^n \Delta_\alpha. \quad (\text{Б.4})$$

Как видно, кинетическая энергия внутреннего движения системы не зависит от масс частиц, которые, очевидно, будут входить в выражение для потенциальной энергии.

Варианты выбора векторов Якоби в задаче трёх и четырёх тел показаны на рис. Б.1. Выражения для приведённых масс, соответствующие наборам векторов Якоби, изображённым на рис. Б.1, имеют вид

$$\frac{1}{\mu_1} = \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}, \quad \frac{1}{\mu_2} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{M_{23}}, \quad \frac{1}{\mu_3} = \frac{1}{m_4} + \frac{1}{M_{123}}, \quad (\text{Б.5})$$

$$\frac{1}{\mu_1} = \frac{1}{m_2} + \frac{1}{m_3}, \quad \frac{1}{\mu_2} = \frac{1}{M_{23}} + \frac{1}{M_{14}}, \quad \frac{1}{\mu_3} = \frac{1}{m_1} + \frac{1}{m_4}, \quad (\text{Б.6})$$

где первая строка соответствует рис. Б.1(a), а вторая – рис. Б.1(b); и $M_{23} = m_2 + m_3$ и т.д..

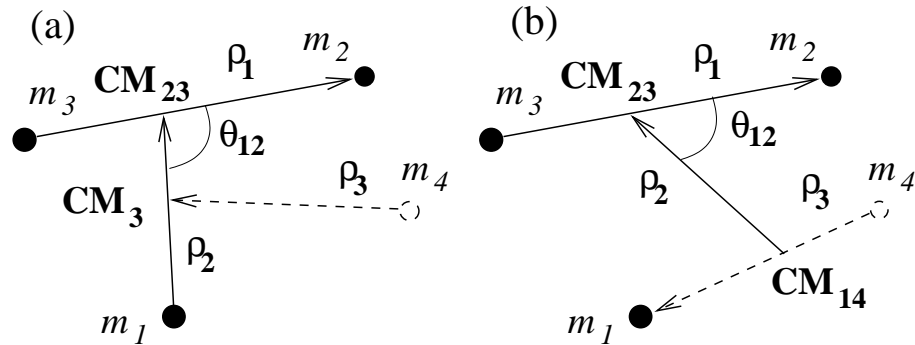


Рис. Б.1. Векторы Якоби в задаче трёх и четырёх тел. CM_{23} обозначает положение ц.м. частиц 2 и 3, CM_3 – ц.м. тройки частиц 1, 2, 3. Угол между $\boldsymbol{\rho}_1$ и $\boldsymbol{\rho}_2$ (или, эквивалентно, между \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2) равен $\theta = \theta_{12}$.

Отметим, что использование векторов Якоби не является единственной возможностью сохранить диагональный вид выражения для оператора кинетической энергии. Диагональность сохраняется также при использовании координат Радó (Radau coordinates), см. [16–18].

В. Приложения к Главе 1

В.1. Дифференциальные операции с матрицами конечных вращений

При вычислении производных от МКВ удобно пользоваться их инвариантным представлением (1.9) в виде минимального тензорного произведения. Свойства минимальных тензорных произведений (см. Приложение А) позволяют записать производную по направлению $(\mathbf{c} \cdot \nabla) R_{k,m}^l$ в виде,

$$\begin{aligned} (\mathbf{c} \cdot \nabla) R_{k,m}^l &= k \{ \{ \{ \mathbf{e}_{-1} \}_{k-1} \otimes \{ \mathbf{e}_0 \}_{l-k} \}_{l-1} \otimes (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_{-1} \}_{lm} \\ &\quad + (l - k) \{ \{ \{ \mathbf{e}_{-1} \}_k \otimes \{ \mathbf{e}_0 \}_{l-k-1} \}_{l-1} \otimes (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_0 \}_{lm}. \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

Теперь проблема состоит в том, чтобы представить правую часть данного равенства снова в виде комбинации МКВ. Для этого разложим векторы $(\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_{-1,0}$ по векторам циклического базиса \mathbf{e}_m , $m = 0, \pm 1$. Коэффициенты этого разложения вычисляются с помощью свойств ортогональности векторов \mathbf{e}_m , что даёт,

$$\begin{aligned} (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_0 &= -\mathbf{e}_1 (\mathbf{e}_{-1} \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_0) - \mathbf{e}_{-1} (\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_0), \\ (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_{-1} &= -\mathbf{e}_0 (\mathbf{e}_{-1} \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_0) - \mathbf{e}_{-1} (\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_{-1}). \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

Подстановка этих равенств в (B.1) приводит к появлению вектора \mathbf{e}_1 в тензорных произведениях, что мешает переписать их через МКВ, определённые

формулой (1.9). Проблема решается с помощью вспомогательного соотношения

$$\{\mathbf{e}_{-1} \otimes \mathbf{e}_1\}_{2m} = \frac{1}{2}\{\mathbf{e}_0 \otimes \mathbf{e}_0\}_{2m}, \quad (\text{B.3})$$

которое можно проверить прямым вычислением тензорного произведения с учётом определения (1.10) векторов $\mathbf{e}_{\pm 1}$.

В итоге, тензорные произведения в правой части (B.1) можно выразить через МКВ $R_{q,m}^l$ с $q = k, k \pm 1$. После несложных преобразований получаем,

$$\begin{aligned} (\mathbf{c} \cdot \nabla) R_{k,m}^l &= -k R_{k,m}^l (\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_{-1}) - \frac{l+k}{2} R_{k-1,m}^l (\mathbf{e}_{-1} \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_0) \\ &\quad - (l-k) R_{k+1,m}^l (\mathbf{e}_1 \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla) \mathbf{e}_0). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Отметим также, что свойство ортонормированности векторов декартового базиса $(\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j) = \delta_{i,j}$ приводит к следующему соотношению симметрии для скалярного произведения $(\mathbf{e}_i (\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{e}_j)$,

$$(\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{e}_j) = -(\mathbf{e}_j \cdot (\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{e}_i). \quad (\text{B.5})$$

Таким образом, производная произвольного вектора \mathbf{a} постоянной длины по любому направлению есть вектор, перпендикулярный данному, т.е.: $(\mathbf{c} \cdot \nabla_\alpha) \mathbf{a} = [\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{a}]$ где вектор $\boldsymbol{\omega}$ определяется дифференциальными свойствами векторного поля \mathbf{a} .

Равенство (B.4) и разложение (1.4) оператора Лапласа по векторному базису позволяют вычислить действие оператора Лапласа на МКВ, $\nabla^2 R_{k,m}^l$. Опуская детали несколько громоздких преобразований, приведём окончательный результат

$$\nabla^2 R_{k,m}^l = \sum_{\kappa=-2}^2 G_\kappa^{lk} R_{k+\kappa,m}^l, \quad (\text{B.6})$$

где коэффициенты G_{κ}^{lk} определены равенствами

$$\begin{aligned}
G_0^{lk} &= \sum_{i=1}^3 \left(k^2 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_{-1})^2 + [l(l+1) - k^2] (\mathbf{e}_{-1} \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_0) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_0) \right. \\
&\quad \left. - k \mathcal{O}_i (\mathbf{e}_1 \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_{-1}) \right), \\
G_{\pm 1}^{lk} &= 2 \frac{l \mp k}{3 \mp 1} \sum_{i=1}^3 \left((2k \pm 1) (\mathbf{e}_1 \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_{-1}) (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_0) - \mathcal{O}_i (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_0) \right), \\
G_{\pm 2}^{lk} &= 2 \frac{(l \mp k)(l \mp k - 1)}{5 \mp 3} \sum_{i=1}^3 (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_0)^2.
\end{aligned} \tag{B.7}$$

Выше использовалось краткое обозначение $\mathcal{O}_i = (\mathbf{c}_i \cdot \nabla)$, где \mathbf{c}_i – произвольный набор трёх ортонормированных векторов. Чтобы избавиться от операторов \mathcal{O}_i в (B.7), вычислим действие оператора Лапласа на скалярное произведение $(\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_{m'})$,

$$\begin{aligned}
\nabla^2 (\mathbf{e}_m \cdot \mathbf{e}_{m'}) &= (\mathbf{e}_m \cdot \nabla^2 \mathbf{e}_{m'}) + (\mathbf{e}_{m'} \cdot \nabla^2 \mathbf{e}_m) \\
&\quad + 2 \sum_{i=1}^3 \sum_{n=0, \pm 1} (-1)^n (\mathbf{e}_n \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_m) (\mathbf{e}_{-n} \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_{m'}) = 0.
\end{aligned} \tag{B.8}$$

Перепиывая это соотношения по компонентам, получаем набор равенств, позволяющих избавиться от операторов \mathcal{O}_i в равенствах (B.7). Приведём некоторые из них,

$$\begin{aligned}
\sum_{i=1}^3 \mathcal{O}_i (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_0) &= \frac{1}{2} (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \nabla^2 \mathbf{e}_0) - \frac{1}{2} (\mathbf{e}_0 \cdot \nabla^2 \mathbf{e}_{\pm 1}), \\
\sum_{i=1}^3 (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_0)^2 &= - (\mathbf{e}_{\pm 1} \cdot \nabla^2 \mathbf{e}_{\pm 1}), \\
\sum_{i=1}^3 (\mathbf{e}_1 \cdot \mathcal{O}_i \mathbf{e}_{-1})^2 &= - \frac{1}{2} \sum_{m=-1}^1 (\mathbf{e}_m \cdot \nabla^2 \mathbf{e}_{-m}).
\end{aligned} \tag{B.9}$$

Остальные члены в (B.7), содержащие операторы \mathcal{O}_i , преобразуются аналогично. В результате получаем уравнения (1.15) и (1.17) основного текста.

Хотя изложенное выше рассмотрение проводилось в предположении $k \geq 0$ в $R_{k,m}^l$, можно проверить, что окончательные результаты справедливы также и при $k < 0$.

В.2. Параметры для калибровки z -связи

Базисные векторы \mathbf{e}_i ВКС в калибровке z -связи определены равенствами (1.79). Ниже вычисляются производные по направлению от базисных векторов, а также матрица вторых производных $B_{ij} = \sum_{\alpha=1}^n (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_{\alpha} \mathbf{e}_j)$.

Среди n операторов ∇ , действующих на базисные векторы, ненулевой результат дают только два оператора: ∇_1 и ∇_2 . После несложных преобразований имеем,

$$\begin{aligned} (\Delta_1 + \Delta_2)\mathbf{e}_x &= -\frac{1}{\sin^2 \theta_{12}} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \mathbf{e}_x + 2 \frac{\text{ctg} \theta_{12}}{r_1^2} \mathbf{e}_z, \\ (\Delta_1 + \Delta_2)\mathbf{e}_y &= -\frac{1}{\sin^2 \theta_{12}} \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) \mathbf{e}_y, \\ (\Delta_1 + \Delta_2)\mathbf{e}_z &= -\frac{2}{r_1^2} \mathbf{e}_z, \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

где $\cos \theta_{12} = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2)$, и было использовано вспомогательное соотношение $\Delta_i \sin^{-1} \theta_{12} = r_i^{-2} \sin^{-3} \theta_{12}$, $i = 1, 2$, легко проверяемое прямым вычислением.

Как следствие (B.10) получаем следующее выражение для матрицы B_{ij} ,

$$B_{ij} = - \begin{pmatrix} \frac{r_1^{-2} + r_2^{-2}}{\sin^2 \theta_{12}} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{r_1^{-2} + r_2^{-2}}{\sin^2 \theta_{12}} & 0 \\ -\frac{2 \text{ctg} \theta_{12}}{r_1^2} & 0 & 2r_1^{-2} \end{pmatrix}. \quad (\text{B.11})$$

Как видно, матрица B в калибровке z -связи недиагональна для конфигураций с $\theta_{12} \neq \pi/2$.

Выражения для производных по направлению легко получить прямым

дифференцированием равенств (1.79),

$$\begin{aligned}
(\mathbf{c} \cdot \nabla_2) \mathbf{e}_z &= 0, \\
(\mathbf{c} \cdot \nabla_1) \mathbf{e}_z &= \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_x)}{r_1} \mathbf{e}_x + \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_y)}{r_1} \mathbf{e}_y, \\
(\mathbf{c} \cdot \nabla_1) \mathbf{e}_j &= (-1)^j \operatorname{ctg} \theta_{12} \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_y)}{r_1} \mathbf{e}_{3-j} - \frac{(\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_j)}{r_1} \mathbf{e}_z, \\
(\mathbf{c} \cdot \nabla_2) \mathbf{e}_j &= \frac{(-1)^{j+1} (\mathbf{c} \cdot \mathbf{e}_y)}{r_2 \sin \theta_{12}} \mathbf{e}_{3-j}, \quad j = 1, 2,
\end{aligned} \tag{B.12}$$

где $\mathbf{e}_{1,2}$ соответствует $\mathbf{e}_{x,y}$.

В калибровке zzx , действие операторов Лапласа на D -функцию получается с помощью соотношений (1.15), (1.17) и (B.11),

$$\begin{aligned}
(\Delta_1 + \Delta_2) D_{k,m}^l(\Omega_{zzx}) &= - \left(k^2 \left(\frac{1}{r_1^2} + \frac{1}{r_2^2} \right) + \frac{l(l+1) - 2k^2}{r_1^2} \right) D_{k,m}^l(\Omega_{zzx}) - \\
&\quad - \frac{\operatorname{ctg} \theta_{12}}{r_1^2} k \left(a_{k,1}^{(l)} D_{k+1,m}^l(\Omega_{zzx}) + a_{-k,1}^{(l)} D_{k-1,m}^l(\Omega_{zzx}) \right). \tag{B.13}
\end{aligned}$$

Заметим, что при $k = 0$ имеем $D_{0,m}^l(\Omega_{zzx}) = C_{lm}(\mathbf{e}_z)$, и приведённое выше выражение сводится к виду

$$(\Delta_1 + \Delta_2) D_{0,m}^l(\Omega_{zzx}) = - \frac{l(l+1)}{r_1^2} D_{0,m}^l(\Omega_{zzx}).$$

Колебательно-вращательная часть кинетической энергии (1.8) в калибровке z -связи определяется формулой

$$\begin{aligned}
\hat{T}_{cor}^{(zzx)} &\equiv - \sum_{i=x,y,z} \left([(\mathbf{e}_i \cdot \nabla_1) D_{k,m}^l(\Omega_{zzx})] (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_1) + \right. \\
&\quad \left. + [(\mathbf{e}_i \cdot \nabla_2) D_{k,m}^l(\Omega_{zzx})] (\mathbf{e}_i \cdot \nabla_2) \right). \tag{B.14}
\end{aligned}$$

Подставляя сюда выражения (B.12), после несложных преобразований, полу-

чаем,

$$\begin{aligned} \hat{T}_{cor}^{(zzx)} &= \frac{k}{\sin^2 \theta_{12}} D_{k,m}^l(\Omega_{zzx}) \left(\cos \theta_{12} \frac{(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1)}{r_1^2} + \frac{(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2)}{r_2^2} \right) + \\ &+ \frac{i}{2r_1^2 \sin \theta_{12}} \left(a_{k,1}^{(l)} D_{k+1,m}^l(\Omega_{zzx}) - a_{-k,1}^{(l)} D_{k-1,m}^l(\Omega_{zzx}) \right) (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_1) + \\ &+ \frac{1}{2r_1^2 \sin \theta_{12}} \left(a_{k,1}^{(l)} D_{k+1,m}^l(\Omega_{zzx}) + a_{-k,1}^{(l)} D_{k-1,m}^l(\Omega_{zzx}) \right) (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1), \quad (\text{B.15}) \end{aligned}$$

где коэффициенты $a_{k,\nu}^{(l)}$ определены равенствами (1.18).

В.3. Вычисление действия оператора Лапласа на разложения по минимальным биполярным гармоникам

Для вычисления действия операторов Лапласа на правую часть разложения (1.168) заметим, что оператор Δ_2 (Δ_1) коммутирует со сферической функцией $C_{l-k,\mu}(\hat{\mathbf{r}}_1)$ ($C_{l-k,\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2)$). Далее, согласно правилу дифференцирования произведений пишем,

$$\begin{aligned} \Delta_2 f_k^{(l,\lambda_p)} C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2) &= C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2) \nabla_2^2 f_k^{(l,\lambda_p)} + \\ &+ 2 \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f_k^{(l,\lambda_p)}}{\partial x_i^{(2)}} \frac{\partial C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2)}{\partial x_i^{(2)}} + f_k^{(l,\lambda_p)} \nabla_2^2 C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2), \quad (\text{B.16}) \end{aligned}$$

где $x_i^{(2)}$ – компоненты вектора $\mathbf{r}_2 = (x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, x_3^{(2)})$. Третье слагаемое в (B.16) даёт центробежный член

$$\nabla_2^2 C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2) = -\frac{k(k+1)}{r_2^2} C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2). \quad (\text{B.17})$$

Второе слагаемое в (B.16) приводит к связи уравнений для функций $f_k^{(l,\lambda_p)}$ с разными k . Для анализа этого слагаемого удобно воспользоваться соотноше-

нием

$$\frac{\partial f_k^{(l, \lambda_p)}}{\partial \mathbf{r}_2} = \frac{1}{r_1^2 r_2^2 \sin^2 \theta_{12}} \left(\mathbf{r}_2 ([\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot [\mathbf{r}_1 \times \nabla_2]) - \mathbf{r}_1 ([\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot [\mathbf{r}_2 \times \nabla_2]) + [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) \right) f_k^{(l, \lambda_p)}, \quad (\text{B.18})$$

которое следует из векторного равенства

$$\mathbf{d}(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}) = \mathbf{a}(\mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}) - \mathbf{b}(\mathbf{a}, \mathbf{c}, \mathbf{d}) + \mathbf{c}(\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{d}). \quad (\text{B.19})$$

представляющего собой разложение произвольного вектора \mathbf{d} по базису трёх неколлинеарных и некомпланарных векторов \mathbf{a} , \mathbf{b} и \mathbf{c} (в (B.18) эти векторы равны $\mathbf{a} = \mathbf{r}_1$, $\mathbf{b} = \mathbf{r}_2$, и $\mathbf{c} = [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]$).

Первый член в (B.18) можно опустить, т.к. его подстановка в (B.16) даёт $(\mathbf{r}_2 \cdot \nabla_2) C_k(\hat{\mathbf{r}}_2) = 0$. Третий член выпадает в задаче трёх тел, поскольку результат действия оператора ∇_2 на скалярную функцию двух переменных \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 есть комбинация тех же векторов \mathbf{r}_1 и \mathbf{r}_2 , а смешанное произведение обращается в ноль, $([\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \cdot \mathbf{r}_1) = 0$. Первый член в (B.18) пропорционален оператору орбитального момента $\mathbf{l}_2 = -i[\mathbf{r}_2 \times \nabla_2]$. Таким образом, второе слагаемое в правой части (B.16) можно представить в виде

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial f_k^{(l, \lambda_p)}}{\partial x_i^{(2)}} \frac{\partial C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2)}{\partial x_i^{(2)}} = -\frac{i}{r_1^2 r_2^2 \sin^2 \theta_{12}} \left((\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{l}_2) f_k^{(l, \lambda_p)} \right) (\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) C_{k\mu}(\hat{\mathbf{r}}_2), \quad (\text{B.20})$$

где оператор \mathbf{l}_2 действует только на функцию $f_k^{(l, \lambda_p)}$. Вычисление производной по направлению от сферической функции в правой части этого уравнения можно провести согласно стандартным правилам векторного дифференцирования [39, 41]. Простые, но несколько громоздкие преобразования, приводят к

следующему результату (детали вычислений приведены в Приложении В.4):

$$(\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = \frac{r_1}{r_2} a_{k-1}^{(l, \lambda_p)} \mathcal{C}_{lm}^{k-1, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) - \frac{k + \lambda_p}{r_2^2} \cos \theta_{12} \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (\text{B.21})$$

$$(\mathbf{r}_2 \cdot \nabla_1) \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = \frac{r_2}{r_1} a_{l-k-\lambda_p-1}^{(l, \lambda_p)} \mathcal{C}_{lm}^{k+1, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) - \frac{l-k}{r_1^2} \cos \theta_{12} \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (\text{B.22})$$

где числовые коэффициенты a_k^{l, λ_p} определены равенством

$$a_k^{(l, \lambda_p)} = \sqrt{\frac{(k+1)(2[k+\lambda_p]+1)(l-k-\lambda_p)}{2l-2k-1}}. \quad (\text{B.23})$$

Используя выражения (B.20) и (B.21), перекрёстное слагаемое в выражении (B.16) можно представить в виде

$$\sum_{k=0}^{l-\lambda_p} \sum_{i=1}^3 \frac{\partial f_k^{(l, \lambda_p)}}{\partial x_i^{(2)}} \frac{\partial \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)}{\partial x_i^{(2)}} = \frac{i}{r_2^2 \sin^2 \theta_{12}} \sum_{k=0}^{l-\lambda_p} \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \times \left((k + \lambda_p) \cos \theta_{12}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_2) f_k^{(l, \lambda_p)} - a_k^{(l, \lambda_p)} f_{k+1}^{(l, \lambda_p)} \right). \quad (\text{B.24})$$

Вычисление действия оператора Δ_1 на разложение (1.168) проводится аналогично. Таким образом, действие оператора кинетической энергии на разложение (1.168) волновой функции по базису МБГ выражается в виде комбинации МБГ.

В.4. Градиенты минимальных биполярных гармоник

В этом приложении проведено вычисление действия некоторых дифференциальных операторов на минимальные биполярные гармоники, определённые формулой (A.9).

Предварительно запишем полезное соотношение для оператора градиента [10],

$$\nabla = \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial}{\partial r} - [\hat{\mathbf{r}} \times [\hat{\mathbf{r}} \times \nabla]]. \quad (\text{B.25})$$

Для вычисления производной $(\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ используем тензорное представление сферической функции (A.7), разложение оператора градиента (B.25), и свойства минимальных тензорных произведений, указанные в п. B.1. В результате можно проверить, что при $\lambda_p = 0$ справедлива цепочка равенств

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= r_1 \sqrt{\frac{(2l-2k-1)!!(2k-1)!!}{(l-k)!k!}} \times \\ &\quad \times ([\hat{\mathbf{r}}_2 \times [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]] \cdot \nabla_2) \{ \{ \hat{\mathbf{r}}_1 \}_{l-k} \otimes \{ \hat{\mathbf{r}}_2 \}_k \}_{lm} = \\ &= -k \frac{r_1}{r_2} \sqrt{\frac{(2l-2k-1)!!(2k-1)!!}{(l-k)!k!}} \{ \{ \{ \hat{\mathbf{r}}_1 \}_{l-k} \otimes \{ \hat{\mathbf{r}}_2 \}_{k-1} \}_{l-1} \otimes [\hat{\mathbf{r}}_2 \times [\hat{\mathbf{r}}_2 \times \hat{\mathbf{r}}_1]] \}_{lm} = \\ &= -k \frac{\cos \theta_{12}}{r_2^2} \mathcal{C}_{lm}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) + \frac{r_1}{r_2} \frac{\Pi_{k-1}}{\Pi_{l-k}} \sqrt{k(l-k+1)} \mathcal{C}_{lm}^{k-1,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (\text{B.26}) \end{aligned}$$

где введено обозначение $\Pi_a = \sqrt{2a+1}$ (ниже $\Pi_{a,b} = \sqrt{(2a+1)(2b+1)}$) и при выводе использовалась известная формула $[\hat{\mathbf{r}}_2 \times [\hat{\mathbf{r}}_2 \times \hat{\mathbf{r}}_1]] = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2) \hat{\mathbf{r}}_2 - \hat{\mathbf{r}}_1$.

Случай псевдотензорной чётности $\lambda_p = 1$ более громоздкий,

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= i \frac{\Pi_{l-k-1,k}}{\sqrt{l+1}} (\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) \{ \mathcal{C}_{l-1}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \}_{lm} = \\ &= -\frac{ik}{r_2^2} \frac{\Pi_{l-k-1,k}}{\sqrt{l+1}} \cos \theta_{12} \{ \mathcal{C}_{l-1}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \}_{lm} + \\ &+ i \frac{r_1}{r_2} \Pi_{k-1,k} \sqrt{\frac{k(l-k)}{l+1}} \{ \mathcal{C}_{l-1}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \}_{lm} - \\ &- ir_1 \frac{\Pi_{l-k-1,k}}{\sqrt{l+1}} \{ \mathcal{C}_{l-1}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times [\hat{\mathbf{r}}_2 \times [\hat{\mathbf{r}}_2 \times \hat{\mathbf{r}}_1]]] \}_{lm}, \quad (\text{B.27}) \end{aligned}$$

где первое равенство в цепи следует из уравнения (A.10). Определение сферической функции (A.7) и свойства минимального тензорного произведения

позволяют переписать (B.27) в виде,

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= -\frac{k+1}{r_2^2} \cos \theta_{12} \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) + \\ &+ \frac{r_1}{r_2} \frac{\Pi_{k-1}}{\Pi_{l-k-1}} \sqrt{k(l-k)} \mathcal{C}_{lm}^{k-1,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2). \end{aligned} \quad (\text{B.28})$$

Выражение для производной $(\mathbf{r}_1 \cdot \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,\lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ можно получить, производя в (B.26) и (B.28) замены $\mathbf{r}_1 \rightarrow \mathbf{r}_2$, $\nabla_2 \rightarrow \nabla_1$, $k \rightarrow l-k$. Учитывая определение (B.23) коэффициентов $a_k^{(l,\lambda_p)}$, приходим к уравнениям (B.21) и (B.22).

Производную $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,\lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ можно вычислить с помощью уравнений (A.10) и свойства перестановочности сомножителей в минимальных тензорных произведениях. В случае тензорной чётности $\lambda_p = 0$, имеем

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) \sqrt{\frac{(2k-1)!!}{k!}} \{C_{l-k}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes \{\hat{\mathbf{r}}_2\}_k\}_{lm} = \\ &= r_1 \Pi_{k-1} \sqrt{k} \{ \{C_{l-k}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes C_{k-1}(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{l-1} \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \}_{lm} = \\ &= -ir_1 \frac{\sqrt{k(l+1)}}{\Pi_{l-k}} \mathcal{C}_{lm}^{k-1,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2). \end{aligned} \quad (\text{B.29})$$

Здесь, первое равенство следует из выражения для сферической гармоник (A.7), второе – из свойств минимального тензорного произведения, и третье – из (A.10).

Вычисление производной $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_1) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ проводится аналогично. Приведём окончательный результат:

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_1) \mathcal{C}_{lm}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = -ir_2 \frac{\sqrt{(l-k)(l+1)}}{\Pi_k} \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2). \quad (\text{B.30})$$

В случае псевдотензорной чётности $\lambda_p = 1$, имеем

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= ir_1 \frac{\Pi_{l-k-1,k}}{\sqrt{l+1}} \left(\{C_{l-1}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]]\}_{lm} + \right. \\ &\left. + \Pi_{k-1} \sqrt{k} \{C_{l-2}^{k-1,0} \otimes \{[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \otimes [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]\}_2\}_{lm} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.31})$$

Первое слагаемое в правой части этого уравнения можно переписать через МБГ с помощью второго равенства в цепи (В.26). Для вычисления второго слагаемого в (В.31) применим формулу

$$\{[\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2] \otimes [\mathbf{r}_1 \times \mathbf{r}_2]\}_2 = 2(\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2)\{\mathbf{r}_1 \otimes \mathbf{r}_2\}_2 - \{\mathbf{r}_1 \otimes \mathbf{r}_1\}_2 - \{\mathbf{r}_2 \otimes \mathbf{r}_2\}_2, \quad (\text{В.32})$$

которую можно проверить прямым вычислением. Подставляя (В.32) в (В.31) и используя формулы изменения схемы связи в тензорных произведениях [10], приходим к равенству

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_2) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= \frac{ir_1}{\sqrt{l+1}} \left((2k+1)^{3/2} \sqrt{l-k} \cos \theta_{12} \mathcal{C}_{lm}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) - \right. \\ &\quad \left. - \Pi_{l-k-1} (k+1)^{3/2} \mathcal{C}_{lm}^{k+1,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Pi_{k-1,k}}{\Pi_{l-k}} \sqrt{k(l-k)(l-k+1)} \mathcal{C}_{lm}^{k-1,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \right). \quad (\text{В.33}) \end{aligned}$$

Вычисление производной $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_1) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)$ проводится аналогичным образом. Окончательный результат имеет вид,

$$\begin{aligned} (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \nabla_1) \mathcal{C}_{lm}^{k,1}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) &= \frac{ir_2}{\sqrt{l+1}} \left((2l-2k-1)^{3/2} \sqrt{k+1} \cos \theta_{12} \mathcal{C}_{lm}^{k+1,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\Pi_{l-k-1, l-k-2}}{\Pi_{k+1}} \sqrt{(l-k-1)(k+1)(k+2)} \mathcal{C}_{lm}^{k+2,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) - \right. \\ &\quad \left. - \Pi_k (l-k)^{3/2} \mathcal{C}_{lm}^{k,0}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \right). \quad (\text{В.34}) \end{aligned}$$

В.5. Дифференциальные операции в пространстве внутренних переменных системы четырёх тел

Рассмотрим действие оператора градиента на скалярные функции, зависящие от внутренних координат ξ . Использование представления (В.25) опе-

ратора градиента и следующего легко проверяемого соотношения

$$\nabla_1(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2) = -\frac{1}{r_1}[\hat{\mathbf{r}}_1 \times [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]] \quad (\text{B.35})$$

приводит к выражению для оператора ∇_1 через координаты (1.89), а именно

$$\nabla_1 = \hat{\mathbf{r}}_1 \left(\frac{\partial}{\partial r_1} - \frac{1}{r_1} \left[\tau_2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \tau_3 \frac{\partial}{\partial \tau_3} \right] \right) + \frac{1}{r_1} \left[\hat{\mathbf{r}}_2 \frac{\partial}{\partial \tau_3} + \hat{\mathbf{r}}_3 \frac{\partial}{\partial \tau_2} \right]. \quad (\text{B.36})$$

Умножая это уравнение векторно на $\hat{\mathbf{r}}_1$, получаем выражение для оператора углового момента \mathbf{l}_1 :

$$\mathbf{l}_1 = -i \left([\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \frac{\partial}{\partial \tau_3} + [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_3] \frac{\partial}{\partial \tau_2} \right). \quad (\text{B.37})$$

Выражения для ∇_α и \mathbf{l}_α , при $\alpha = 2, 3$ записываются аналогично приведённым выше формулам (B.36) и (B.37).

Выражение для оператора Лапласа Δ_1 можно получить, взяв скалярное произведение уравнения (B.36) с оператором ∇_1 . После некоторых преобразований получаем

$$\Delta_1 = \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial r_1} r_1^2 \frac{\partial}{\partial r_1} + \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial \tau_2} (1 - \tau_2^2) \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \frac{1}{r_1^2} \frac{\partial}{\partial \tau_3} (1 - \tau_3^2) \frac{\partial}{\partial \tau_3} + 2 \frac{\tau_1 - \tau_2 \tau_3}{r_1^2} \frac{\partial^2}{\partial \tau_2 \partial \tau_3}. \quad (\text{B.38})$$

Как видно, выражение для оператора Лапласа содержит смешанные производные $\frac{\partial^2}{\partial \tau_2 \partial \tau_3}$ и, следовательно, набор координат (1.89) не является ортогональным.

Отметим также, что приведённые выше уравнения (B.36) – (B.38) справедливы только в пространстве скалярных (не псевдоскалярных!) радиальных функций. Поэтому, действие оператора Лапласа на псевдоскалярные радиальные функции нуждается в специальном рассмотрении.

Псевдоскалярные функции можно представить в виде произведения $D\phi_{l,k}(\xi)$, где $D \equiv (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3)$ – смешанное произведение единичных векторов $\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \hat{\mathbf{r}}_3$ и $\phi_{l,k}(\xi)$ – скалярная радиальная функция. В соответствии с правилом дифференцирования произведения, пишем

$$\Delta_1 D\phi_{l,k} = D\Delta_1\phi_{l,k} + \phi_{l,k}\Delta_1 D + 2(\nabla_1 D)\nabla_1\phi_{l,k}. \quad (\text{B.39})$$

Используя вспомогательные соотношения

$$\Delta_1 D = -\frac{2}{r_1^2}D, \quad \nabla_1 D = -\frac{2}{r_1}([\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]\tau_2 - [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_3]\tau_3), \quad (\text{B.40})$$

и представление (B.36) оператора ∇_1 , после несложных преобразований получаем,

$$\Delta_1 D\phi_{l,k} = D \left(\Delta_1 - \frac{2}{r_1^2} \left[1 + \tau_2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} + \tau_3 \frac{\partial}{\partial \tau_3} \right] \right) \phi_{l,k}. \quad (\text{B.41})$$

Действие дифференциальных операторов, содержащихся в калибровочных потенциалах $\hat{V}_{cor}^{(paf)}$ и $\hat{V}_{rot}^{(paf)}$ (см. (1.78), (1.77)), на псевдоскалярные радиальные функции вычисляются с помощью представления (B.36) оператора ∇_1 . Например,

$$\begin{aligned} (\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1)D\phi_{l,k} &= -i \left(\tau_2 - \tau_1\tau_3 - D^2 \frac{\partial}{\partial \tau_2} \right) \phi_{l,k}, \\ (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2)D\phi_{l,k} &= -i \left(\tau_1 - \tau_2\tau_3 - D^2 \frac{\partial}{\partial \tau_1} \right) \phi_{l,k}, \\ (\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_1)D\phi_{l,k} &= iD \left(\tau_3 - (1 - \tau_3^2) \frac{\partial}{\partial \tau_3} + (\tau_1 - \tau_2\tau_3) \frac{\partial}{\partial \tau_2} \right) \phi_{l,k}. \end{aligned}$$

Отметим, что $D^2 = r_1^2 r_2^2 r_3^2 + 2\tau_1\tau_2\tau_3 - \sum_{i=1}^3 r_i^2 \tau_i^2$. Действие операторов углового момента на скалярные радиальные функции $\psi_{lk}^{(p)}$ вычисляется также с помощью представления (B.36) для ∇_1 и аналогичного выражения для ∇_2 .

Приведём окончательные выражения,

$$\begin{aligned}
(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2, \mathbf{l}_1)\psi_{l,k}^{(p)} &= -i \left((1 - \tau_3^2) \frac{\partial}{\partial \tau_3} + (\tau_1 - \tau_2 \tau_3) \frac{\partial}{\partial \tau_2} \right) \psi_{l,k}^{(p)}, \\
(\hat{\mathbf{r}}_2 \cdot \mathbf{l}_1)\psi_{l,k}^{(p)} &= iD \frac{\partial}{\partial \tau_2} \psi_{l,k}^{(p)}, \\
(\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \mathbf{l}_2)\psi_{l,k}^{(p)} &= -iD \frac{\partial}{\partial \tau_1} \psi_{l,k}^{(p)}.
\end{aligned} \tag{B.42}$$

Г. Приложения к Главе 3

Г.1. Вычисление сумм в (3.33)

Ниже вычисляются две суммы в (3.33). Вычислим сначала сумму по n_2 , которую обозначим как S_{n_1} ,

$$S_{n_1} = \sum_{n_2=l_2}^{\infty} v^{n_2} C_{n_2-l_2}^{l_2+1}(\cos \theta_0) \frac{(n_1 + n_2 + l_3 + 1)! (n_1 + n_2 - l_3)!}{(n_1 + n_2 - n_3)! (n_2 + l_2 + 1)!}. \tag{Г.1}$$

Заменяя индекс суммирования по формуле $k = n_2 - l_2$, получаем

$$S_{n_1} = v^{l_2} \sum_{k=0}^{\infty} v^k C_k^{l_2+1}(\cos \theta_0) \frac{(k + n_1 + l_2 + l_3 + 1)! (k + n_1 + l_2 - l_3)!}{(k + n_1 - n_3 + l_2)! (k + 2l_2 + 1)!}. \tag{Г.2}$$

От факториалов в этом равенстве можно избавиться, используя дифференциальные соотношения

$$\begin{aligned}
&\frac{(k + n_1 + l_2 + l_3 + 1)! (k + n_1 + l_2 - l_3)!}{(k + n_1 - n_3 + l_2)! (k + 2l_2 + 1)!} \\
&= (-1)^{n_1+n_3+l_2} \partial_t^{n_3-l_3} t^{n_3+l_3+1} \partial_\tau^{n_1-l_2+l_3} (t + \tau)^{-(k+2l_2+2)} \Big|_{t=1, \tau=0}, \tag{Г.3}
\end{aligned}$$

где $\partial_t = \partial/\partial t$ и $\partial_\tau = \partial/\partial \tau$. Подставляя (Г.3) в (Г.2) приходим к ряду, который суммируется с помощью производящей функции для многочленов Гегенбауэ-

ра [165],

$$(t + \tau)^{-(2l_2+2)} \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{v}{t + \tau} \right)^k C_k^{l_2+1}(\cos \theta_0) = \left(1 - \frac{2v \cos \theta_0}{t + \tau} + \frac{v^2}{(t + \tau)^2} \right)^{-l_2-1} \times \\ \times (t + \tau)^{-(2l_2+2)} = [v^2 - 2v \cos \theta_0(t + \tau) + (t + \tau)^2]^{-l_2-1}. \quad (\Gamma.4)$$

Таким образом, сумму S_{n_1} можно представить в виде

$$S_{n_1} = (-1)^{n_1+n_3+l_2} v^{l_2} \partial_t^{n_3-l_3} t^{n_3+l_3+1} \times \\ \times \partial_\tau^{n_1-l_2+l_3} [v^2 - 2v \cos \theta_0(t + \tau) + (t + \tau)^2]^{-l_2-1} \Big|_{t=1, \tau=0}. \quad (\Gamma.5)$$

Теперь вычислим сумму по n_1 в (1.16),

$$S_n = \sum_{n_1=l}^n \binom{n-l}{n-n_1} \frac{(-u)^{n_1}}{(n_1+l+1)!} S_{n_1} = \sum_{n_1=0}^{n-l} \binom{n-l}{n_1} \frac{(-u)^{n_1+l}}{(n_1+2l+1)!} S_{n_1+l}. \quad (\Gamma.6)$$

Используя (Г.5) запишем S_n в явном виде,

$$S_n = (-1)^{n_3+l_2} v^{l_2} \partial_t^{n_3-l_3} t^{n_3+l_3+1} \sum_{n_1=0}^{n-l} \binom{n-l}{n_1} \frac{u^{n_1+l}}{(n_1+2l+1)!} \\ \times \partial_\tau^{n_1+l-l_2+l_3} [v^2 - 2v(t + \tau) \cos \theta_0 + (t + \tau)^2]^{-l_2-1} \Big|_{t=1, \tau=0}. \quad (\Gamma.7)$$

Используя правила дифференцирования произведений, после несложных преобразований получаем замкнутое выражение для S_n ,

$$S_n = (-1)^{n_3+l_2} \frac{v^{l_2} u^{-l-1}}{(n+l+1)!} \partial_t^{n_3-l_3} t^{n_3+l_3+1} \partial_\tau^{n-l} (u + \tau)^{n+l+1} \partial_\tau^{l-l_2+l_3} \\ \times [v^2 - 2v(t + \tau) \cos \theta_0 + (t + \tau)^2]^{-l_2-1} \Big|_{t=1, \tau=0}. \quad (\Gamma.8)$$

Таким образом, мы получили дифференциальное представление двойной суммы, содержащейся в (3.33).

Чтобы получить коэффициенты в разложении (3.34) произведения $q^{-4}C_n(\hat{\mathbf{x}})$, необходимо вычислить комбинацию функций S_n в соответствии с (3.20). Опуская детали преобразований, окончательное выражение для параметров $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ в (1.16) можно представить в виде,

$$P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}(u, w) = \frac{u^{-l}}{(n+l+1)!(n_3+l_3+1)!} \partial_\tau^{n-l}(u+\tau)^{n+l+1} \partial_t^{n_3-l_3}(1+t)^{n_3+l_3+1} \times \partial_\tau^{l-l_2+l_3+1} [w^2 + (1+u)(t+\tau) + (t+\tau)^2]^{-l_2-1} \Big|_{t,\tau=0}, \quad (\text{Г.9})$$

где $u = \alpha/\beta$ и введено сокращённое обозначение

$$w = \sqrt{1 - 2v \cos \theta_0 + v^2} = \frac{\sqrt{(\alpha + \beta)^2 + \vec{k}^2}}{2\beta}, \quad (\text{Г.10})$$

Производя замены $t \rightarrow u\tau$ и $\tau \rightarrow ut$ в определении (Г.9) функций $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}(u, w)$, получаем для них следующее свойство симметрии,

$$P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}(u, w) = u^{n+n_3+2l_3+2} P_{n_3,l_3;n,l}^{(l_2)}(1/u, w/u). \quad (\text{Г.11})$$

Г.2. Явные выражения для функций $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$

Чтобы вычислить функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ в (Г.9) в явном виде, используем производящую функцию для многочленов Гегенбауэра,

$$\begin{aligned} [w^2 - 2\xi w(t+\tau) + (t+\tau)^2]^{-l_2-1} &= \\ &= \sum_{q=0}^{\infty} w^{-2l_2-2-q} (t+\tau)^q C_q^{l_2+1} \left(-\frac{u+1}{2w} \right). \end{aligned} \quad (\text{Г.12})$$

При вычислении производных от этого равенства члены с $q < l - l_2 + l_3 + 1$ выпадают ввиду наличия оператора $\partial_\tau^{l-l_2+l_3+1}$. Таким образом, функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ можно записать в виде комбинации многочленов Гегенбауэра,

$$P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}(u, w) = \frac{u^{l+1}}{w^{l+l_2+l_3+3}} \sum_{q=0}^{q_{max}} w^{-q} C_q(u) C_{l-l_2+l_3+q+1}^{l_2+1} \left(-\frac{u+1}{2w} \right), \quad (\text{Г.13})$$

где $q_{max} = n + n_3 - l - l_3$ и параметры C_q являются многочленами по переменной u ,

$$C_q(u) = \sum_{m=0}^{q_{max}} \binom{n-l}{m} \binom{n_3-l_3}{q-m} \frac{(l-l_2+l_3+q+1)!}{(2l+1+m)!(2l_3+q+1-m)!} u^m, \quad (\Gamma.14)$$

где индекс m пробегает ряд неотрицательных целых значений при которых факториалы конечны. Отметим, что параметры $C_q(u)$ можно представить также в дифференциальном виде

$$C_q(u) = (-1)^q \frac{(n-l)!(n_3-l_3)!(l-l_2+l_3+q+1)!}{(n+l+1)!(n_3+l_3+1)!q!} \left. \partial_t^q L_{n-l}^{(2l+1)}(ut) L_{n_3-l_3}^{(2l_3+1)}(t) \right|_{t=0},$$

где $L_{n-l}^{(2l+1)}$ – полиномы Лагерра [165]. Приведённое равенство можно проверить прямым вычислением. Как видно, параметр $C_q(u)$ пропорционален q -той степени произведения двух многочленов Лагерра.

Можно также получить явное выражение для параметров $C_q(u)$ в терминах обобщённых гипергеометрических функций ${}_3F_2$. При этом возможны два варианта. Для $q \leq n_3 - l_3$ индекс m в (Г.14) пробегает от 0 до $\min(q, n-l)$. Это приводит к соотношению

$$C_q(u) = \binom{n_3-l_3}{q} \frac{(l-l_2+l_3+q+1)!}{(2l_3+q+1)!(2l+1)!} \times \\ \times {}_3F_2 \left(\begin{matrix} -q, & l-n, & -q-2l_3-1; & -u \\ & 2l+2, & n_3-l_3-q+1 & \end{matrix} \right). \quad (\Gamma.15)$$

Для $q > n_3 - l_3$ имеем, что $q - n_3 + l_3 \leq m \leq n - l$. В этом случае приведённая выше формула не работает, и правильное выражение имеет вид,

$$C_q(u) = \binom{n-l}{q-n_3+l_3} \frac{(l-l_2+l_3+q+1)!}{(2l-n_3+l_3+q+1)!(n_3+l_3+1)!} u^{q-n_3+l_3} \times \\ \times {}_3F_2 \left(\begin{matrix} l+l_3-n-n_3+q, & l_3-n_3, & -l_3-n_3-1; & -u \\ & 2l+2, & l_3-n_3+q+1 & \end{matrix} \right). \quad (\Gamma.16)$$

В заключение отметим, что параметр $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ можно представить также в виде тройной (конечной) суммы.

Г.3. Функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ в частных случаях

Покажем, что при некоторых значениях квантовых чисел параметры $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ вычисляются в замкнутом виде через специальные функции. Рассмотрение основано на следующем вспомогательном дифференциальном соотношении,

$$\partial_t^n (\alpha + \beta t)^{n+\gamma} f(t) \Big|_{t=0} = \alpha^{2\gamma+n+1} \partial_t^n (\alpha - \beta t)^{-\gamma-1} f\left(\frac{\alpha t}{\alpha - \beta t}\right) \Big|_{t=0}, \quad (\text{Г.17})$$

где $\alpha, \beta, \gamma = \text{const}$ и $f(t)$ – произвольная функция. Формулу (Г.17) можно проверить разлагая функцию f в ряд Тэйлора и сравнивая коэффициенты при одинаковых степенях.

Рассмотрим функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$, соответствующие переходам из основного $1s$ -состояния. В этом случае $n = l = 0$ и, следовательно, $l_2 = l_3 \equiv l$. В соответствии с определением (Г.9) пишем,

$$P_{0,0;n,l}^{(l)} = \frac{u}{(n+l+1)!} \partial_t^{n-l} (1+t)^{n+l+1} \partial_t [w^2 + (u+1)t + t^2]^{-l-1} \Big|_{t=0}. \quad (\text{Г.18})$$

Для вычисления действия дифференциальных операторов в этом равенстве используем операторное соотношение

$$(1+t)^{n+l+1} \partial_t = \partial_t (1+t)^{n+l+1} - (n+l+1)(1+t)^{n+l}. \quad (\text{Г.19})$$

В результате, параметр $P_{0,0;n,l}^{(l)}$ можно представить в виде,

$$P_{0,0;n,l}^{(l)} = \frac{u}{(n+l+1)!} \left(\partial_t^{n-l+1} (1+t) - (n+l+1) \partial_t^{n-l} \right) \times \\ \times (1+t)^{n+l} [w^2 + (u+1)t + t^2]^{-l-1} \Big|_{t=0}. \quad (\text{Г.20})$$

Применяя к этому уравнению дифференциальное преобразование (Г.17), приходим к выражению,

$$P_{0,0;n,l}^{(l)} = \frac{u}{(n+l+1)!} (\partial_t^{n-l+1} - (n+l+1) \partial_t^{n-l}) (1-t) \times \\ \times [w^2 - 2at + (tv)^2]^{-l-1} \Big|_{t=0}, \quad (\text{Г.21})$$

где $a = w^2 - (u+1)/2$ и параметр v определен формулой (3.26). Вычисление производных в (Г.21) можно провести, разлагая член в квадратных скобках по формуле для производящей функции многочленов Гегенбауэра (см. (Г.12)). После несложных алгебраических преобразований получаем,

$$P_{0,0;n,l}^{(l)} = \frac{(n-l)!}{(n+l+1)!} \frac{u}{w^{2l+3}} \left(\frac{v}{w}\right)^{n-l} \left(-2(n+1)(w-xv)C_{n-l}^{l+1}(x) + \right. \\ \left. + (n+l+1) \frac{w^2 - v^2}{v} C_{n-l-1}^{l+1}(x) \right), \quad (\text{Г.22})$$

где аргумент многочлена Гегенбауэра равен

$$x = \frac{w^2 - (u+1)/2}{vw} = \frac{\alpha^2 - \beta^2 + \vec{k}^2}{4\beta^2 vw}. \quad (\text{Г.23})$$

Дипольное приближение

Рассмотрим функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ в пределе малых $|\vec{k}|$, что соответствует дипольному приближению. В этом пределе учитываются только члены нулевого и первого порядка по $|\vec{k}|$. Отсюда следует, что в дипольном приближении $w = (u+1)/2$ и нужно оставлять только члены с $l_2 = 0$ и $l_2 = 1$.

Вычислим сначала функцию $P_{n,l;n_3,l}^{(0)}$. Поскольку $\vec{k} = 0$, член в квадратных скобках в (Г.9) сводится к $[w+t+\tau]^{-2}$ и первое дифференцирование по τ проводится элементарно,

$$P_{n,l;n_3,l}^{(0)} = \frac{-u^{-l} (2l+2)!}{(n+l+1)! (n_3+l+1)!} \partial_\tau^{n-l} (u+\tau)^{n+l+1} \times \\ \times \partial_t^{n_3-l} (1+t)^{n_3+l+1} (w+t+\tau)^{-2l-3} \Big|_{t,\tau=0}. \quad (\text{Г.24})$$

Последний сомножитель в этом уравнении удобно представить как $(w + t + \tau)^{-2l-3} = -(1/(2l+2)) \partial_w (w + t + \tau)^{-2l-2}$. В результате, (Г.24) принимает вид,

$$P_{n,l;n_3,l}^{(0)} = \frac{u^{-l} (2l+1)!}{(n+l+1)! (n_3+l+1)!} \partial_w \partial_\tau^{n-l} (u+\tau)^{n+l+1} \times \\ \times \partial_t^{n_3-l} (1+t)^{n_3+l+1} (w+t+\tau)^{-2l-2} \Big|_{t,\tau=0}. \quad (\text{Г.25})$$

Производные по t можно вычислить в замкнутом виде с помощью вспомогательного соотношения (Г.17),

$$\partial_t^{n_3-l} (w+\tau+t)^{-2l-2} (1+t)^{n_3+l+1} \Big|_{t=0} = \frac{(n_3+l+1)!}{(2l+1)!} (w+\tau)^{-n_3-l-2} (w-1+\tau)^{n_3-l}. \quad (\text{Г.26})$$

Производные по τ вычисляются аналогично. В итоге получаем гипергеометрическую функцию Гаусса,

$$P_{n,l;n_3,l}^{(0)} = \frac{u^{n+1}}{(2l+1)!} \partial_w w^{-n-n_3-2} (w-1)^{n_3-n} \times \\ \times z^{l-n} {}_2F_1(l-n, l-n_3; 2l+2; z), \quad (\text{Г.27})$$

где $z = u/[(w-u)(w-1)]$. Вычисление производных по w упрощается тем фактом, что $\partial_w z(w) = 0$ в точке $w = (u+1)/2$. В результате, приходим к замкнутому выражению для $P_{n,l;n_3,l}^{(0)}$,

$$P_{n,l;n_3,l}^{(0)} = \frac{u^{n+1}}{(2l+1)!} \frac{(w-1)^{n_3-n-1}}{w^{n+n_3+3}} [n_3 - n + 2(n+1)(1-w)] \times \\ \times z^{l-n} {}_2F_1(l-n, l-n_3; 2l+2; z), \quad (\text{Г.28})$$

В случае $l_2 = 1$, сумма $l + l_2 + l_3$ должна быть чётным числом. Таким образом, возможны два варианта: $l_3 = l \pm 1$. Ниже рассматривается только параметр $P_{n,l;n_3,l-1}^{(1)}(u, w)$. (Выражение для $P_{n,l-1;n_3,l}^{(1)}$ можно получить затем

из соотношения симметрии (Г.11).) Процедура вычисления аналогична приведённой выше и окончательное выражение имеет вид,

$$P_{n,l;n_3,l-1}^{(1)} = \frac{u^{n_3+2}}{6(2l+1)!} \partial_w w^{-n-n_3-3} (w-u)^{n-n_3-1} \partial_t^2 t^{n_3+l+2} \times \\ \times z^{l-1-n_3} {}_2F_1(l-n, l-1-n_3; 2l+2; z) \Big|_{t=1}, \quad (\text{Г.29})$$

где $z = ut/[(w-u)(w-t)]$. После несложных преобразований получаем окончательный результат – формулу (3.48) раздела 3.3.

Г.4. Рекуррентные соотношения для функций $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$

Дифференциальное представление (Г.9) удобно использовать для вывода рекуррентных соотношений, связывающих функции $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ с разными индексами. Рекуррентные соотношения можно получить используя свойства операции дифференцирования. Например, прямым вычислением можно проверить следующее операторное равенство,

$$(n_3 - l_3) \partial_t^{n_3-1-l_3} (1+t)^{n_3+l_3} + \partial_t^{n_3-l_3} (1+wt)^{n_3+l_3} = \\ = (n_3 + l_3 + 1) \partial_t^{n_3-l_3-1} (1+wt)^{n_3+l_3} + \partial_t^{n_3-l_3-1} (1+wt)^{n_3+l_3+1} \partial_t. \quad (\text{Г.30})$$

Аналогичное соотношение можно записать для операторов ∂_τ . Эти два соотношения приводят к паре рекурсий для функций $P_{n,l;n_3,l_3}^{(l_2)}$ с фиксированным мультипольным индексом l_2 ,

$$(n_3 + l_3 + 1) P_{n,l;n_3,l_3} - (n_3 - l_3) P_{n,l;n_3-1,l_3} = P_{n,l;n_3,l_3-1} - P_{n,l;n_3-1,l_3-1}, \quad (\text{Г.31}) \\ (n + l + 1) P_{n,l;n_3,l_3} - (n - l) P_{n-1,l;n_3,l_3} = P_{n,l-1;n_3,l_3} - P_{n-1,l-1;n_3,l_3},$$

где для краткости было опущено обозначение индекса l_2 .

Рекурсии, связывающие функции с разными индексами l_2 можно получить при помощи дифференциального соотношения,

$$\partial_\tau^{l-l_2+l_3+2} R_{l_2} = 2(l_2+1) [(\xi-t-\tau) \partial_\tau^{l-l_2+l_3+1} R_{l_2+1} - (l-l_2+l_3+1) \partial_\tau^{l-l_2+l_3} R_{l_2+1}], \quad (\text{Г.32})$$

где $\xi = -(1+u)/(2w)$ и $R_{l_2} = [1 - 2\xi(t+\tau) + (t+\tau)^2]^{-l_2-1}$. После несложных преобразований данное равенство приводит к рекурсии, связывающей функции P с индексами l_2, l_2+1 ,

$$\begin{aligned} (n+l+2) P_{n+1, n_3}^{(l_2)} + (n-l) P_{n-1, n_3}^{(l_2)} - 2(n+1) P_{n, n_3}^{(l_2)} = \\ = (l_2+1) \left((n+l+2)(1-u) P_{n+1, n_3}^{(l_2+1)} + (n-l)(1+u) P_{n-1, n_3}^{(l_2+1)} + \right. \\ \left. + 2[u(n_3+l_2+2) - n-1] P_{n, n_3}^{(l_2+1)} - 2(n_3+l_3+2)u P_{n, n_3+1}^{(l_2+1)} \right). \quad (\text{Г.33}) \end{aligned}$$

где $P_{n, n_3}^{l_2} = P_{n, l; n_3, l_3}^{(l_2)}$, *и т.д.*

Рекурсии, связывающие функции P с фиксированными угловыми моментами l, l_2, l_3 можно получить заметив, что $\partial_\tau R_{l_2} = \partial_t R_{l_2}$. Опуская несущественные детали преобразований, приведём окончательный результат,

$$\begin{aligned} (n_3+l_3+2) u P_{n, n_3+1} + (n_3-l_3) u P_{n, n_3-1} - (n+l+2) P_{n+1, n_3} - \\ - (n-l) P_{n-1, n_3} + 2[n+1-u(n_3+1)] P_{n, n_3} = 0, \quad (\text{Г.34}) \end{aligned}$$

где были опущены обозначения индексов углового момента, $P_{n, n_3} \equiv P_{n, l; n_3, l_3}^{(l_2)}$.

В заключение отметим, что возможно получить также два рекуррентных соотношения, связывающие функции P_{n, n_3} с разными индексами n, n_3 . Обе эти рекурсии содержат восемь членов и образуют полный набор по отношению к индексам n и n_3 . Это значит, что, имея десять “соседних” параметров, можно получить параметры P_{n, n_3} с любыми n и n_3 . Однако такие рекурсии имеют довольно громоздкий вид и поэтому здесь не представлены.

Литература

- [1] Measurements of interaction cross sections and nuclear radii in the light P -shell region / I. Tanihata, H. Hamagaki, O. Hashimoto et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1985. — Vol. 55, no. 24. — Pp. 2676–2679.
- [2] Nuclear charge radii of $^{7,9,10}\text{Be}$ and the one-neutron halo nucleus ^{11}Be / W. Nörtershäuser, D. Tiedemann, M. Žáková et al. // *Physical Review Letters*. — 2009. — Vol. 102, no. 6. — P. 062503.
- [3] *Frank, F. C.* Hypothetical alternative energy sources for the “second meson” events / F. C. Frank // *Nature*. — 1947. — Vol. 160. — Pp. 525–527.
- [4] *Jackson, J. D.* Catalysis of nuclear reactions between Hydrogen isotopes by μ -mesons / J. D. Jackson // *Phys. Rev.* — 1957. — Vol. 106, no. 2. — Pp. 330–339.
- [5] *Герштейн, С. С.* Мюонный катализ и ядерный бридинг / С. С. Герштейн, Ю. В. Петров, Л. И. Пономарев // *Успехи физических наук*. — 1990. — Vol. 160, no. 8. — Pp. 3–46.
- [6] Molecular aspects of electron correlation in quantum dots / P. A. Macsym, H. Imamura, G. P. Mallon, H. Aoki // *J. Phys. Condens. Matter*. — 2000. — Vol. 12. — Pp. R299–R334.
- [7] *Macsym, P. A.* Eckardt frame theory of interacting electrons in quantum dots / P. A. Macsym // *Phys. Rev. B*. — 1996. — Vol. 53. — Pp. 10871–10886.

- [8] *Puente, A.* Roto-vibrational spectrum and Wigner crystallization in two-electron parabolic quantum dots / A. Puente, L. Serra, R. G. Nazmitdinov // *Phys. Rev. B (Condensed Matter and Materials Physics)*. — 2004. — Vol. 69, no. 12. — P. 125315.
- [9] *Л. Д. Ландау.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. — Москва: Наука, 1989.
- [10] *Варшалович, Д. А.* Квантовая теория углового момента / Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. — Ленинград: Наука, 1975.
- [11] *Biedenharn, L. C.* Angular Momentum in Quantum Physics. Theory and Applications / L. C. Biedenharn, J. D. Louck. — Addison-Wesley, 1981. — рус. перев.: Л. Биденхарн, Дж. Лаук. Угловой момент в квантовой физике. М.: «Мир», 1984.
- [12] *Littlejohn, R. G.* Gauge fields in the separation of rotations and internal motions in the N-body problem / R. G. Littlejohn, M. Reinsch // *Rev. Mod. Phys.* — 1997. — Vol. 69, no. 1. — Pp. 213–275.
- [13] *Смирнов, Ю. Ф.* Метод К-гармоник и модель оболочек / Ю. Ф. Смирнов, К. В. Шитикова // *Физика элементарных частиц и атомного ядра* — 1977. — Т. 8, вып. 4. — Сс. 847–910.
- [14] *Меркурьев, С. П.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц / С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев. — Москва: Наука, 1985.
- [15] *Джибутти Р.И.* Метод гиперсферических функций в атомной и ядерной

физике / Джибути Р.И., Шитикова К.В. — Москва: Энергоатомиздат, 1993.

- [16] *Smith, F. T.* Modified heliocentric coordinates for particle dynamics / F. T. Smith // *Phys. Rev. Lett.* — 1980. — Vol. 45, no. 14. — Pp. 1157–1160.
- [17] *Wei, H.* An exact Eckart-embedded kinetic energy operator in Radau coordinates for triatomic molecules / H. Wei, T. Carrington Jr. // *Chem. Phys. Lett.* — 1998. — Vol. 287. — Pp. 289–300.
- [18] *Aquilanti, V.* The quantum-mechanical hamiltonian for tetraatomic systems in symmetric hyperspherical coordinates / V. Aquilanti, S. Cavalli // *Journal of the Chemical Society-Faraday Transactions.* — 1997. — Vol. 93. — Pp. 801–809.
- [19] *Meremianin, A. V.* The irreducible tensor approach in the separation of collective angles in the quantum N-body problem / A. V. Meremianin, J. S. Briggs // *Phys. Rep.* — 2003. — Vol. 384, no. 4-6. — Pp. 121–195.
- [20] *Herold, H.* Microscopic theory of nuclear collective rotation. I. General description of rotations / H. Herold, H. Ruder // *Journal of Physics G: Nuclear Physics.* — 1979. — Vol. 5, no. 3. — Pp. 341–350.
- [21] *Meyer, H.* The molecular Hamiltonian / H. Meyer // *Ann. Rev. Phys. Chem.* — 2002. — Vol. 53. — Pp. 141–172.
- [22] *Eckart, C.* Some studies concerning rotating axes and polyatomic molecules / C. Eckart // *Phys. Rev.* — 1935. — Vol. 47. — Pp. 552–558.
- [23] *Eckart, C.* The kinetic energy of polyatomic molecules / C. Eckart // *Phys. Rev.* — 1934. — Vol. 46. — Pp. 383–387.

- [24] *Van Vleck, J. H.* The rotational energy of polyatomic molecules / J. H. Van Vleck // *Phys. Rev.* — 1935. — Vol. 47. — Pp. 487–494.
- [25] *Darling, B. T.* The water vapor molecule / B. T. Darling, D. M. Dennison // *Phys. Rev.* — 1940. — Vol. 57. — Pp. 128–139.
- [26] *Nielsen, H. H.* The vibration-rotation energies of molecules / H. H. Nielsen // *Rev. Mod. Phys.* — 1951. — Vol. 23, no. 2. — P. 90.
- [27] *Watson, J. K. J.* Simplification of the molecular vibration-rotation Hamiltonian / J. K. J. Watson // *Mol. Phys.* — 1968. — Vol. 15, no. 5. — Pp. 479–490.
- [28] *Rowe, D. J.* How do deformed nuclei rotate? / D. J. Rowe // *Nuclear Physics A.* — 1970. — Vol. 152. — Pp. 273–294.
- [29] *Villars, F.* A note on rotational energy levels in nuclei / F. Villars // *Nuclear Physics.* — 1957. — Vol. 3. — Pp. 240–254.
- [30] *Villars, F.* Unified theory of nuclear rotations / F. Villars, G. Cooper // *Annals of Physics.* — 1970. — Vol. 56. — Pp. 224–258.
- [31] *Bohr, A.* Nuclear Structure / A. Bohr, B. R. Mottelson. — New York: W.A. Benjamin, Inc., 1969. — Vol. 2.
- [32] *Villars, F.* The collective model of nuclei / F. Villars // *Annual Review of Nuclear Science.* — 1957. — Vol. 7. — Pp. 185–230.
- [33] *Buck, B.* Collective variables for the description of rotational motion in many particle systems / B. Buck, L. C. Biedenharn, R. Y. Cusson // *Nucl. Phys. A: Math. Gen.* — 1979. — Vol. 317. — Pp. 205–241.

- [34] *Abraham, P. M.* Rotational levels of deformed doubly even nuclei / P. M. Abraham, E. Rost // *Nuclear Physics A.* — 1971. — Vol. 162. — Pp. 173–192.
- [35] *Herold, H.* Microscopic theory of nuclear collective rotation. II. Microscopic description of deformed nuclei / H. Herold // *Journal of Physics G: Nuclear Physics.* — 1979. — Vol. 5, no. 3. — Pp. 351–357.
- [36] *Herold, H.* Microscopic theory of nuclear collective rotation. III. Test of the SDHFB and the HFBP method in an exactly solvable realistic model / H. Herold, M. Reinecke, H. Ruder // *Journal of Physics G: Nuclear Physics.* — 1979. — Vol. 5, no. 7. — Pp. 907–913.
- [37] *Herold, H.* Microscopic theory of nuclear collective rotation. IV. Specific decoupling for strongly deformed nuclei / H. Herold, H. Ruder // *Journal of Physics G: Nuclear Physics.* — 1980. — Vol. 6, no. 11. — Pp. 1347–1358.
- [38] Microscopic theory of nuclear collective rotation. V. Connection between nuclear moments of inertia and the definition of a body-fixed frame / G. Wunner, H. Ruder, H. Herold, M. Reinecke // *Journal of Physics G: Nuclear Physics.* — 1980. — Vol. 6, no. 11. — Pp. 1359–1374.
- [39] *Manakov, N. L.* A new technique in the theory of angular distributions in atomic processes: the angular distribution of photoelectrons in single and double photoionization / N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. V. Meremianin // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1996. — Vol. 29. — Pp. 2711–2737.
- [40] *Manakov, N. L.* Invariant representations of finite rotation matrices and

some applications / N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace // *Phys. Rev. A.* — 1998. — Vol. 57. — Pp. 3233–3244.

- [41] *Manakov, N. L.* Multipole expansions of irreducible tensor sets and some applications / N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2002. — Vol. 35. — Pp. 77–91.
- [42] Body frames and frame singularities for three-atom system / R. G. Littlejohn, K. A. Mitchell, V. Aquilanti, S. Cavalli // *Phys. Rev. A.* — 1998. — Vol. 58. — Pp. 3705–3717.
- [43] *Briggs, J. S.* Differential cross sections for photo-double-ionization of the Helium atom / J. S. Briggs, V. Schmidt // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2000. — Vol. 33. — Pp. R1–R48.
- [44] Double photoionization of spatially aligned D_2 / R. Dörner, H. Bräuning, O. Jagutzki et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 81, no. 26. — Pp. 5776–5779.
- [45] *Reddish, T. J.* Photo double ionization of molecular Deuterium / T. J. Reddish, J. M. Feagin // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1999. — Vol. 32. — Pp. 2473–2486.
- [46] *King, G. C.* Double-excitation and double-escape processes studied by photoelectron spectroscopy near threshold / G. C. King, L. Avaldi // *Journal of Physics B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2000. — Vol. 33, no. 16. — Pp. R215–R284.
- [47] *Brauner, M.* Triply-differential cross sections for ionisation of Hydrogen atoms by electrons and positrons / M. Brauner, J. S. Briggs, H. Klar // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1989. — Vol. 22. — P. 2265.

- [48] *Avaldi, L.* Electron impact ionisation of argon at intermediate energy and momentum transfer: an (e,2e) investigation / L. Avaldi, I. E. McCarthy, G. Stefani // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1989. — Vol. 22, no. 20. — Pp. 3305–3314.
- [49] *Gelebart, F.* Experimental triple differential cross sections on an absolute scale for electron impact ionisation of Helium in a symmetric coplanar geometry / F. Gelebart, P. Defrance, J. Peresse // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* — 1990. — Vol. 23, no. 8. — Pp. 1337–1344.
- [50] An energetic (e, 2e) reaction away from the Bethe ridge: recoil versus binary / A. S. Kheifets, A. Naja, E. M. S. Casagrande, A. Lahmam-Bennani // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2009. — Vol. 42, no. 16. — P. 165204 (5pp).
- [51] Fragment correlation in the three-body breakup of triatomic Hydrogen / U. Müller, T. Eckert, M. Braun, H. Helm // *Phys. Rev. Lett.* — 1999. — Vol. 83. — Pp. 2718–2721.
- [52] The role of excited-state topology in three-body dissociation of sym-triazine / J. D. Savee, V. A. Mozhayskiy, J. E. Mann et al. // *Science Magazine.* — 2008. — Vol. 321, no. 5890. — Pp. 826–830.
- [53] *Galster, U.* Maps of nonadiabatic coupling in triatomic Hydrogen / U. Galster, U. Müller, H. Helm // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92. — P. 073002.
- [54] Experimental and quantum-chemical studies on the three-particle fragmentation of neutral triatomic Hydrogen / U. Galster, F. Baumgartner, U. Müller et al. // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72. — P. 062506.

- [55] *Istomin, A. Y.* Perturbative analysis of the triply differential cross section and circular dichroism in photo double ionization of He / A. Y. Istomin, N. L. Manakov, A. F. Starace // *Phys. Rev. A.* — 2004. — Vol. 69. — P. 032713.
- [56] Double photoionization: II. Analysis of experimental triple differential cross sections in Helium and Neon / L. Malegat, P. Selles, P. Lablanque et al. // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1997. — Vol. 30. — Pp. 263–276.
- [57] *Meremianin, A. V.* The kinematical model of the sudden break-up of the three-body rigid rotator / A. V. Meremianin // *Few-body Systems.* — 2006. — Vol. 38, no. 2-4. — Pp. 199–203.
- [58] *Meremianin, A. V.* Collective multipole expansions and the perturbation theory in the quantum three-body problem / A. V. Meremianin // *Few-Body Systems.* — 2009. — Vol. 45, no. 1. — Pp. 11–23.
- [59] *Fock, W.* Zur Theorie des Wasserstoffatoms / W. Fock // *Z. Phys.* — 1935. — Vol. 98. — P. 145.
- [60] *Lieber, M.* O(4) symmetry of the Hydrogen atom and the Lamb shift / M. Lieber // *Phys. Rev.* — 1968. — Vol. 174. — Pp. 2037–2054.
- [61] *Bander, M.* Group theory and the Hydrogen atom (i) / M. Bander, C. Itzykson // *Rev. Mod. Phys.* — 1966. — Vol. 38, no. 2. — Pp. 330–345.
- [62] *Schwinger, J.* Coulomb Green's function / J. Schwinger // *J. Math. Phys.* — 1964. — Vol. 5. — Pp. 1606–1608.
- [63] *Maquet, A.* Use of the Coulomb Green's function in atomic calculation / A. Maquet // *Phys. Rev. A.* — 1977. — Vol. 15, no. 3. — Pp. 1088–1108.

- [64] Hyperspherical harmonics as Sturmian orbitals in momentum space: a systematic approach to the few-body Coulomb problem / V. Aquilanti, S. Cavalli, C. Coletti et al. // *Int. Reviews in Physical Chemistry*. — 2001. — Vol. 20, no. 4. — Pp. 673–709.
- [65] *Shibuya, T.* Molecular orbitals in momentum space / T. Shibuya, C. E. Wulfman // *Proc Roy Soc A*. — 1965. — Vol. 286. — Pp. 376–389.
- [66] *Avery, J.* Many-center Coulomb Sturmians and Shibuya-Wulfman integrals / J. Avery // *Int. J. Quantum Chem.* — 2004. — Vol. 100. — Pp. 121–130.
- [67] *Avery, J.* Hyperspherical Harmonics and Generalized Sturmians / J. Avery; Ed. by J. Maruani, S. Wilson. — Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 2000. — Vol. 4 of *Progress in Theoretical Chemistry and Physics*.
- [68] *Aquilanti, V.* Hyperspherical symmetry of hydrogenic orbitals and recoupling coefficients among alternative bases / V. Aquilanti, S. Cavalli, C. Coletti // *Phys. Rev. Lett.* — 1998. — Vol. 80. — Pp. 3209–3212.
- [69] Hydrogenic orbitals in momentum space and hyperspherical harmonics: Elliptic Sturmian basis sets / V. Aquilanti, A. Caligiana, S. Cavalli, C. Coletti // *Int. J. Quantum Chem.* — 2003. — Vol. 92. — Pp. 212–228.
- [70] *Aquilanti, V.* The D-dimensional Hydrogen atom: Hyperspherical harmonics as momentum space orbitals and alternative Sturmian basis sets / V. Aquilanti, S. Cavalli, C. Coletti // *Chem. Phys.* — 1997. — Vol. 214. — Pp. 1–13.

- [71] Alternative Sturmian bases and momentum space orbitals: An application to the Hydrogen molecular ion / V. Aquilanti, S. Cavalli, C. Coletti, G. Grossi // *Chem. Phys.* — 1996. — Vol. 209. — Pp. 405–419.
- [72] *Avery, J.* Generalized Sturmian solutions for many-particle Schrodinger equations / J. Avery, J. Avery // *J. Phys. Chem. A.* — 2004. — Vol. 108. — Pp. 8848–8851.
- [73] *Avery, J.* Molecular Sturmians. part 1 / J. Avery, R. Shim // *Int. J. Quantum Chem.* — 2001. — Vol. 83. — Pp. 1–10.
- [74] *Avery, J.* Many-particle Sturmians / J. Avery // *J. Math. Chem.* — 1997. — Vol. 21. — Pp. 285–304.
- [75] *Avery, J.* A momentum-space picture of the chemical bond / J. Avery, T. B. Hansen // *Int. J. Quantum Chem.* — 1996. — Vol. 60. — Pp. 201–211.
- [76] Sturmian basis sets in momentum space / J. Avery, T. B. Hansen, M. C. Wang, F. Antonsen // *Int. J. Quantum Chem.* — 1996. — Vol. 57. — Pp. 401–411.
- [77] Hyperspherical theory of anisotropic exciton / E. A. Muljarov, A. L. Yablonskii, S. G. Tikhodeev et al. // *J. Math. Phys.* — 2000. — Vol. 41. — Pp. 6026–6041.
- [78] *Aquilanti, V.* Sturmian approach to one-electron many-center systems: integrals and iteration schemes / V. Aquilanti, A. Caligiana // *Chem. Phys. Lett.* — 2002. — Vol. 366. — Pp. 157–164.

- [79] *Meremianin, A. V.* Multipole expansions in four-dimensional hyperspherical harmonics / A. V. Meremianin // *J. Phys. A: Math. Gen.* — 2006. — Vol. 39. — Pp. 3099–3112.
- [80] *Bethe, H.* Theory of the passage of rapid corpuscular rays through matter / H. Bethe // *Ann. Physik.* — 1930. — Vol. 5. — Pp. 325–400.
- [81] *Inokuti, M.* Inelastic collisions of fast charged particles with atoms and molecules – the Bethe theory revisited / M. Inokuti // *Rev. Mod. Phys.* — 1971. — Vol. 43. — Pp. 297–347.
- [82] *Mott, N. F.* The theory of atomic collisions / N. F. Mott, H. S. W. Massey. — Oxford University Press, 1965. — Vol. II.
- [83] *Jetzke, S.* Calculation of Hydrogenic form factors / S. Jetzke, J. T. Broad // *J. Phys. B: At Mol Phys.* — 1986. — Vol. 19. — Pp. L199–L202.
- [84] *Parzyński, R.* Beyond the long-wavelength approximation in electromagnetic Rydberg-Rydberg couplings / R. Parzyński, M. Sobczak // *Opt. Comm.* — 2003. — Vol. 225, no. 1-3.
- [85] *Holt, A. R.* Matrix elements for bound-free transitions in atomic Hydrogen / A. R. Holt // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* — 1969. — Vol. 2. — Pp. 1209–1213.
- [86] *Datta, S.* Evaluation of Coulomb integrals with hydrogenic and Slater-type orbitals / S. Datta // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* — 1985. — Vol. 18. — Pp. 853–857.
- [87] *Malegat, L.* Double photoionization: I. A new parametrization of the triple differential cross section from first principles / L. Malegat, P. Selles,

- A. Huetz // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1997. — Vol. 30. — Pp. 251–261.
- [88] *Maulbetsch, F.* Selection rules for transitions to two-electron continuum states / F. Maulbetsch, J. S. Briggs // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1995. — Vol. 28. — Pp. 551–564.
- [89] Photo double ionization of Helium 100 Ev and 450 Ev above threshold: I. linearly polarized light / A. Knapp, A. Kheifets, I. Bray et al. // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2005. — Vol. 38, no. 6. — Pp. 615–633.
- [90] Nondipole effects in the triply differential cross section for double photoionization of He / A. Y. Istomin, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 71. — P. 052702.
- [91] Nondipole effects in photo double ionization of He by a VUV photon / A. Y. Istomin, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92. — P. 063002.
- [92] Nondipole effects in double photoionization of He at 450 Ev excess energy / A. Y. Istomin, A. F. Starace, N. L. Manakov et al. // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* — 2006. — Vol. 39, no. 2. — Pp. L35–L43.
- [93] *T Pack, R.* Choosing body-fixed axes in arrangement channels approaches to reactive scattering / R. T Pack // *Advances in molecular vibrations and collision dynamics* / Ed. by J. M. Bowman. — Greenwich, CT: JAI Press Inc., 1994. — Vol. 2A. — Pp. 111–145.

- [94] *Ezra, G. S.* Symmetry Properties of Molecules / G. S. Ezra. — Berlin Heidelberg: Springer Verlag, 1982. — Vol. 28 of *Lecture Notes in Chemistry*.
- [95] *Casimir, H. B. G.* The Rotation of a Rigid Body in Quantum Mechanics / H. B. G. Casimir. // *Ned. Akad. Wetenschap. Proc.* — 1931. — Vol. 34. — P. 844.
- [96] *Wei, H.* The triatomic Eckart-frame kinetic energy operator in bond coordinates / H. Wei, T. Carrington Jr. // *J. Chem. Phys.* — 1997. — Vol. 107. — Pp. 9493–9501.
- [97] *Natanson, G. A.* The Eckart-frame Hamiltonian of a triatomic molecule in terms of the bond lengths and the intrabond angle / G. A. Natanson // *Molecular Physics*. — 1989. — Vol. 66, no. 1. — Pp. 129–41.
- [98] *Adler-Golden, S. M.* Formulas for transforming from internal coordinates to Eckart frame coordinates of a symmetric triatomic molecule / S. M. Adler-Golden, G. D. Carney // *Chem. Phys. Lett.* — 1985. — Vol. 113, no. 6. — Pp. 582–4.
- [99] *Mardis, K. L.* Derivation of rotation-vibration Hamiltonians that satisfy the Casimir condition / K. L. Mardis, E. L. Sibert III // *J. Chem. Phys.* — 1997. — Vol. 106. — Pp. 6618–6621.
- [100] *Wei, H.* Eckart frames for planar molecules / H. Wei // *J. Chem. Phys.* — 2003. — Vol. 118. — Pp. 7202–7207.
- [101] *Wei, H.* An Eckart-frame kinetic energy operator for tetra-atomic planar molecules / H. Wei // *J. Chem. Phys.* — 2003. — Vol. 118. — Pp. 7208–7214.

- [102] *Redding, R. W.* On the relation of the Eckart frame to the Eulerian angles / R. W. Redding, F. O. Meyer // *J. Mol. Spectr.* — 1979. — Vol. 74, no. 3. — Pp. 486–7.
- [103] *Meyer, F. O.* Molecular symmetry and motions of the Eckart frame / F. O. Meyer, R. W. Redding // *J. Mol. Spectr.* — 1978. — Vol. 70, no. 3. — Pp. 410–19.
- [104] *Winnewisser, B. P.* The *A* matrix in molecular vibration-rotation theory / B. P. Winnewisser, J. K. J. Watson // *J. Mol. Spectr.* — 2001. — Vol. 205. — Pp. 227–231.
- [105] *Okuno, Y.* Expressing kinetic-energy for vibration-rotation motions in general rotating systems of axes and introducing quasirectilinear vibrational coordinates to simplify Hamiltonian forms / Y. Okuno // *Int. J. Quant. Chem.* — 2001. — Vol. 83. — Pp. 22–29.
- [106] *Tachibana, A.* Complete molecular Hamiltonian based on the Born-Oppenheimer adiabatic approximation / A. Tachibana, T. Iwai // *Phys. Rev. A.* — 1986. — Vol. 33, — Pp. 2262–9.
- [107] *Jorgensen, F.* Orientation of the Eckart frame in a polyatomic molecule by symmetric orthonormalization / F. Jorgensen // *International Journal of Quantum Chemistry.* — 1978. — Vol. 14. — Pp. 55–63.
- [108] *Киселев, А. А.* Отделение электронных и ядерных движений в молекуле / А. А. Киселев // *Оптика и спектроскопия.* — 1968. — Т. 24. — Сс. 181–185.

- [109] Hyperspherical surface functions for nonzero total angular momentum. I. Eckart singularities / B. K. Kendrick, R. T Pack, R. B. Walker, E. F. Hayes // *J. Chem. Phys.* — 1999. — Vol. 110, no. 14. — Pp. 6673–6693.
- [110] *Felker, P. M.* Calculation of rovibrational states of weakly bound complexes by transformation from an Eckart frame: Benzene-N₂ / P. M. Felker // *J. Chem. Phys.* — 2001. — Vol. 114. — Pp. 7901–7910.
- [111] *Felker, P. M.* Efficient calculation of molecular constants and transition intensities in weakly bound species from J=0 eigenstates: Benzene-Ar as test case / P. M. Felker, D. Neuhauser, W. Kim // *J. Chem. Phys.* — 2001. — Vol. 114. — Pp. 1233–1241.
- [112] *Cejchan, A.* Transforming from internal coordinates to Cartesian displacements in the Eckart frame: a Taylor series expansion approach / A. Cejchan, V. Spirko // *J. Mol. Spectr.* — 2003. — Vol. 217. — Pp. 142–145.
- [113] *Lee, S.-H.* The Casimir-Eckart condition and the transformation of dipole moment derivatives revisited / S.-H. Lee, K. Palmo, S. Krimm // *Journal of Molecular Structure: THEOCHEM.* — 2001. — Vol. 546, no. 1-3. — Pp. 217–230.
- [114] *Benderskii, V. A.* Tunneling splittings in vibrational spectra of non-rigid molecules - V. Reconstruction of the Hamiltonian from quantum chemical data / V. A. Benderskii, E. V. Vetoshkin, H. P. Trommsdorff // *Chem. Phys.* — 1999. — no. 244. — Pp. 273–297.
- [115] *Natanson, G.* The Eckart-frame hamiltonian of a triatomic molecule in

- terms of the bond lengths and the intrabond angle / G. Natanson // *Molecular Physics*. — 1989. — Vol. 66. — Pp. 129–141.
- [116] *Robert, J.* A molecular description of molecular collisions / J. Robert, J. Baudon // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* — 1986. — Vol. 19. — Pp. 171–83.
- [117] *Natanson, G. A.* Analytical formula for direction cosines of the Eckart frame of a planar molecule / G. A. Natanson // *Chemical physics letters*. — 1985. — Vol. 121. — Pp. 343–346.
- [118] *Pont, M.* Decomposition of the two-electron-atom eigenvalue problem / M. Pont, R. Shakeshaft // *Phys. Rev. A*. — 1995. — Vol. 51, no. 1. — Pp. 257–265.
- [119] *Breit, G.* Separation of angles in the two-electron problem / G. Breit // *Phys. Rev.* — 1930. — Vol. 35, no. 6. — Pp. 569–578.
- [120] *Gu, X.-Y.* Independent eigenstates of angular momentum in a quantum N-body system / X.-Y. Gu, B. Duan, Z.-Q. Ma // *Phys. Rev. A*. — 2001. — Vol. 64. — Pp. 042108–1–14.
- [121] *Meremianin, A. V.* Elimination of body-frame singularities in the separation of three collective angles in quantum N-body problems / A. V. Meremianin, J. S. Briggs // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 89, no. 20. — P. 200405.
- [122] *Curtiss, C. F.* The quantum mechanics of collisions between diatomic molecules / C. F. Curtiss // *J. Chem. Phys.* — 1953. — Vol. 21. — P. 2045.
- [123] *Curtiss, C. F.* The scattering of atoms from diatomic molecules / C. F. Curtiss, F. T. J. Adler // *J. Chem. Phys.* — 1952. — Vol. 20. — P. 249.

- [124] *Lukka, T. J.* A simple method for the derivation of exact quantum-mechanical vibration-rotation Hamiltonians in terms of internal coordinates / T. J. Lukka // *J. Chem. Phys.* — 1995. — Vol. 102, no. 10. — Pp. 3945–3955.
- [125] *Pack, R. T.* Space-fixed vs body-fixed axes in atom-diatom molecule scattering. sudden approximations / R. T. Pack // *J. Chem. Phys.* — 1974. — Vol. 60. — P. 633.
- [126] *Tennyson, J.* The ab initio calculation of the vibrational-rotational spectrum of triatomic systems in the close-coupling approach, with *RCN* and *H₂Ne* as examples / J. Tennyson, B. T. Sutcliffe // *J. Chem. Phys.* — 1982. — Vol. 77. Pp. 4061–4072.
- [127] *Виницкий, С. И.* Адиабатическое представление в задаче трёх тел с кулоновским взаимодействием / С. И. Виницкий, Л. И. Пономарёв // *Физика элементарных частиц и атомного ядра.* — 1982. — Т. 13, н. 6. — Сс. 1336–1418.
- [128] *Скалозуб, А. С.* Колебательно-вращательный гамильтониан полиатомных нежестких молекул. Общий метод / А. С. Скалозуб, А. Я. Цауне // *Оптика и спектроскопия* — 1981. — Т. 50. — Сс. 458–466.
- [129] *Скалозуб, А. С.* Колебательно-вращательный гамильтониан полиатомных нежестких молекул. Отделение вращений / А. С. Скалозуб, А. Я. Цауне // *Оптика и спектроскопия* — 1981. — Т. 50. — Сс. 545–547.
- [130] *Bhatia, A. K.* Symmetric Euler-angle decomposition of the two-electron fixed-nucleus problem / A. K. Bhatia, A. Temkin // *Rev. Mod. Phys.* — 1964. — Vol. 36. — Pp. 1050–1064.

- [131] *Nikitin, S. I.* Vibro-rotational states of the two-electron atom: I. Euler angles coordinate basis / S. I. Nikitin, V. N. Ostrovsky // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1985. — Vol. 18. — Pp. 4349–4369.
- [132] *Nikitin, S. I.* Vibro-rotational states of the two-electron atom: II. Two interacting particles on the sphere / S. I. Nikitin, V. N. Ostrovsky // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1985. — Vol. 18, no. 22. — Pp. 4371–4382.
- [133] *Hirschfelder, J. O.* Separation of rotational coordinates from the Schrödinger equation for N particles / J. O. Hirschfelder, E. Wigner // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* — 1935. — Vol. 21. — Pp. 113–119.
- [134] *Fano, U.* Real representations of coordinate rotations / U. Fano // *J. Math. Phys.* — 1960. — Vol. 1, no. 5. — P. 417.
- [135] *Feagin, J. M.* Molecular-orbital description of the states of two-electron systems / J. M. Feagin, J. S. Briggs // *Phys. Rev. A.* — 1988. — Vol. 37. — Pp. 4599–4613.
- [136] *Wiberg, D. M.* Theory and problems of state space and linear systems / D. M. Wiberg. Schaum's outline series. — McGraw-Hill Book Company, 1971.
- [137] *Квицинский, А. А.* Квантовая теория рассеяния для систем трёх частиц с фиксированным полным орбитальным моментом / А. А. Квицинский, В. В. Кострыкин, С. П. Меркурьев // *Физика элементарных частиц и атомного ядра.* — 1990. — Т. 21. — Сс. 1301–1359.
- [138] *Chapuisat, X.* Principal-axis hyperspherical description of n-particle system:

- Quantum-mechanical treatment / X. Chapuisat // *Phys. Rev. A.* — 1992. — Vol. 45, no. 7. — Pp. 4277–4292.
- [139] *Tsaune, A. Y.* Nonrelativistic Hamiltonian in the principal central moving axes for N-particle system / A. Y. Tsaune // *J. Math. Chem.* — 2001. — Vol. 29. — Pp. 95–125.
- [140] The Fourier method for tri-atomic systems in the search for the optimal coordinate system / G. Katz, K. Yamashita, Y. Zeiri, R. Kosloff // *J. Chem. Phys.* — 2002. — Vol. 116. — Pp. 4403–4414.
- [141] *Wilson, E. B.* The vibration-rotation energy levels of polyatomic molecules. I. Mathematical theory of semirigid asymmetrical top molecules. / E. B. Wilson, J. B. Howard // *J. Chem. Phys.* — 1936. — Vol. 4. — Pp. 260–268.
- [142] *Wei, H.* Explicit expressions for triatomic Eckart frames in Jacobi, Radau, and bond coordinates / H. Wei, T. Carrington Jr. // *J. Chem. Phys.* — 1997. — Vol. 107. — Pp. 2813–2818.
- [143] *Natanson, G. A.* Analytical formula for direction cosines of the Eckart frame of a planar molecule / G. A. Natanson // *Chem. Phys. Lett.* — 1985. — Vol. 121, no. 4-5. — Pp. 343–6.
- [144] *Louck, J. D.* Eckart vectors, Eckart frames, and polyatomic molecules / J. D. Louck, H. W. Galbraith // *Rev. Mod. Phys.* — 1976. — Vol. 48, no. 1. — Pp. 69–106.
- [145] *Gamboa, J. M.* Rotating frames and gauge invariance in two-dimensional many-body quantum systems / J. M. Gamboa, A. O. Bouzas // *J. Phys. A.: Math. Gen.* — 2003. — Vol. 36. — Pp. 7061–7080.

- [146] *Iwai, T.* A geometric setting for classical molecular dynamics / T. Iwai // *Annales de l'Institut Henri Poincaré Physique Théorique.* — 1987. — Vol. 47, no. 2. — Pp. 199–219.
- [147] *Ferigle, S. M.* The Eckart conditions for a polyatomic molecule / S. M. Ferigle, A. Weber // *American Journal of Physics.* — 1953. — Vol. 21, no. 2. — Pp. 102–107.
- [148] *Wang, D.* Hyperspherical harmonics for tetraatomic systems / D. Wang, A. Kuppermann // *J. Chem. Phys.* — 2001. — Vol. 115. — Pp. 9184–9208.
- [149] *Aquilanti, V.* Three-body problem in quantum mechanics: Hyperspherical elliptic coordinates and harmonic basis sets / V. Aquilanti, S. Tonzani // *J. Chem. Phys.* — 2004. — Vol. 120. — Pp. 4066–4073.
- [150] *Abramov, D. I.* Hyperspherical Coulomb spheroidal representation in the Coulomb three-body problem / D. I. Abramov // *J. of Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2008. — Vol. 41. — P. 175201 (10pp).
- [151] *T Pack, R.* Conformally Euclidean internal coordinate space in the quantum three-body problem / R. T Pack // *Chem. Phys. Lett.* — 1991. — Vol. 230. — Pp. 223–227.
- [152] *Matveenko, A. V.* Spheroidal and hyperspheroidal coordinates in the adiabatic representation of scattering states for the Coulomb three-body problem / A. V. Matveenko, E. O. Alt, H. Fukuda // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2009. — Vol. 42. — P. 165003 (5pp).
- [153] *Fano, U.* Symmetries in Quantum Physics / U. Fano, A. R. P. Rau. — Academic Press, 1996.

- [154] *Kuppermann, A.* A new look at symmetrized hyperspherical harmonics / A. Kuppermann // *Advances in molecular vibrations and collision dynamics* / Ed. by J. M. Bowman. — Greenwich, CT: JAI Press Inc., 1994. — Vol. 2B. — Pp. 117–186.
- [155] *Museth, K.* Asymptotic analysis of state-to-state tetraatomic reactions using row-orthonormal hyperspherical coordinates / K. Museth, A. Kuppermann // *J. Chem. Phys.* — 2001. — Vol. 115. — Pp. 8285–8297.
- [156] Internal spaces, kinematic rotations, and body frames for four-body system / R. G. Littlejohn, K. A. Mitchell, M. Reinsch et al. // *Phys. Rev. A.* — 1998. — Vol. 58. — Pp. 3718–3738.
- [157] *Littlejohn, R. G.* Quantum dynamics of kinematic invariants in tetra- and polyatomic systems / R. G. Littlejohn, K. A. Mitchell, V. Aquilanti // *Phys. Chem. Chem. Phys.* — 1999. — Vol. 1. — Pp. 1259–1264.
- [158] *Malcherek, A. W.* The n-electron Coulomb continuum / A. W. Malcherek, J. S. Briggs // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1997. — Vol. 30. — Pp. 4419–4433.
- [159] *Ruud, K.* An efficient approach for calculating vibrational wave functions and zero-point vibrational corrections to molecular properties of polyatomic molecules / K. Ruud, P. O. Astrand, P. R. Taylor // *J. Chem. Phys.* — 2000. — Vol. 112. — Pp. 2668–2683.
- [160] *Wiesenfeld, L.* Rotational transition states: relative equilibrium points in inelastic molecular collisions / L. Wiesenfeld, A. Faure, T. Johann // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2003. — Vol. 36. — Pp. 1319–1335.

- [161] *Natanson, G. A.* Quantum reactive scattering for A+BCD to AB+CD reactions: Coupled channel distorted wave theory / G. A. Natanson, G. C. Schatz // *J. Chem. Phys.* — 1986. — Vol. 85. — Pp. 2038–53.
- [162] *Meremianin, A. V.* Body frames in the separation of collective angles in quantum N-body problems / A. V. Meremianin // *J. Chem. Phys.* — 2004. — Vol. 120. — Pp. 7861–7876.
- [163] *Wen, Z.-Y.* Some properties of hyperspherical harmonics / Z.-Y. Wen, J. Avery // *J. Math. Phys.* — 1985. — Vol. 26. — Pp. 396–403.
- [164] *Dalitz, R. H.* On the analysis of τ -meson data and the nature of the τ -meson / R. H. Dalitz // *Philos. Mag.* — 1953. — Vol. 44. — P. 1068.
- [165] Higher transcendental functions. Bateman manuscript project / A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi. — McGraw-hill book company, Inc, 1953. — Vol. II.
- [166] Four-particle Dalitz plots to visualize atomic break-up processes / M. Schulz, D. Fischer, T. Ferger et al. // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2007. — Vol. 40. — Pp. 3091–3099.
- [167] *А. А. Квицинский.* Плоская волна в системе трех частиц с нулевым полным орбитальным моментом / А. А. Квицинский, С. П. Меркурьев // *Алгебра и анализ.* — 1990. — Т. 2. — Сс. 182–200.
- [168] *Vager, Z.* Coulomb Explosion Imaging of Small Molecules / Z. Vager, R. Naaman, E. P. Kanter // *Science.* — 1989. — Vol. 244. — P. 426.
- [169] Coulomb-explosion imaging of CH_2^+ : Target-polarization effects and

- bond-angle distribution / L. Lammich, H. Buhr, H. Kreckel et al. // *Phys. Rev. A*. — 2004. — Vol. 69. — P. 062904.
- [170] *С. П. Меркурьев*. Координатная асимптотика волновых функций ($3 \rightarrow 3$) для системы трех заряженных частиц / *С. П. Меркурьев* // *ТМФ*. — 1977. — Т. 32. — Сс. 187–207.
- [171] *С. П. Меркурьев*. Координатная асимптотика волновой функции для системы трех частиц / *С. П. Меркурьев* // *ТМФ*. — 1971. — Т. 8. — Сс. 235–250.
- [172] *Meremianin, A. V.* Hyperspherical harmonics with arbitrary arguments / *A. V. Meremianin* // *J. Math. Phys.* — 2009. — Vol. 50, no. 1. — P. 013526.
- [173] Higher transcendental functions / *A. Erdelyi, W. Magnus, F. Oberhettinger, F. G. Tricomi*. — McGraw-hill book company, Inc, 1953. — Vol. I.
- [174] *Miller, W. F.* On the theory of the inelastic scattering of electrons by Helium atoms / *W. F. Miller, R. L. Platzman* // *Proc. Phys. Soc. A*. — 1957. — Vol. 70. — Pp. 299–303.
- [175] *Gordon, W.* The calculation of matrices with the Hydrogen atom / *W. Gordon* // *Ann. Phys.* — 1929. — Vol. 2, no. 8. — Pp. 1031–1056.
- [176] *Крыловецкий, А. А.* Обобщенные штурмовские разложения кулоновской функции Грина и двухфотонные формулы Гордона / *А. А. Крыловецкий, Н. Л. Манаков, С. И. Мармо* // *ЖЭТФ*. — 2001. — Т. 119, Вып. 1. — Pp. 45.
- [177] *Манаков, Н. Л.* Динамические гиперполяризуемости возбужденных

состояний водорода / Н. Л. Манаков, С. И. Мармо, Е. А. Пронин // *ЖЭТФ*. — 2004. — Т. 125, Вып. 2. — Рр. 288.

- [178] *McWeeny, R.* The computation of wave functions in momentum space - I: The Helium atom / R. McWeeny, C. A. Coulson // *Proc Phys Soc A*. — 1949. — Vol. 62. — Рр. 509–518.
- [179] *McWeeny, R.* The computation of wave functions in momentum space - II: The Hydrogen molecule ion / R. McWeeny // *Proc Phys Soc A*. — 1949. — Vol. 62. — Рр. 519–528.
- [180] Photo-double ionization of H_2 / M. Gisselbrecht, M. Lavollee, A. Huetz et al. // *Journal of Physics: Conference Series*. — 2007. — Vol. 88. — P. 012006.
- [181] Wannier theory for double photoionization of noble gases / A. Huetz, P. Selles, D. Waymel, J. Mazeau // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1991. — Vol. 24, no. 8. — Рр. 1917–1933.
- [182] *Argenti, L.* A general algorithm for fitting efficiently triple differential cross sections of atomic double photoionization / L. Argenti, R. Colle // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2008. — Vol. 41, no. 24. — P. 245205 (11pp).
- [183] *Walter, M.* Selection rules and isotope effects in the full fragmentation of the Hydrogen molecule / M. Walter, J. S. Briggs // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Vol. 85, no. 8. — Рр. 1630–1633.
- [184] Photodouble ionization differential cross sections for D_2 with various electron energy sharing conditions / D. P. Seecombe, S. A. Collins, T. J. Reddish

- et al. // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2002. — Vol. 35, no. 17. — Pp. 3767–3780.
- [185] *Klar, H.* Parametrization of multiply differential cross sections / H. Klar, M. Fehr // *Z. Phys. D.* — 1992. — Vol. 23. — Pp. 295–300.
- [186] *Blum, K.* Density matrix theory and applications / K. Blum. — New-York: Plenum Press, 1981.
- [187] *Walter, M.* Selection rules and isotope effects in the full fragmentation of the Hydrogen molecule / M. Walter, J. S. Briggs // *Phys. Rev. Lett.* — 2000. — Aug. — Vol. 85, no. 8. — Pp. 1630–1633.
- [188] Circular dichroism at equal energy sharing in photo-double-ionization of He / A. Y. Istomin, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace // *Phys. Rev. A.* — 2004. — Vol. 70. — P. 010702(R).
- [189] Parametrizations and dynamical analysis of angle-integrated cross sections for double photoionization including nondipole effects / A. Y. Istomin, A. F. Starace, N. L. Manakov et al. // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Nov. — Vol. 72, no. 5. — P. 052708.
- [190] *Malegat, L.* Double photoionization: I. A new parametrization of the triple differential cross section from first principles / L. Malegat, P. Selles, A. Huetz // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1997. — Vol. 30, no. 2. — Pp. 251–261.
- [191] *Walter, M.* Photo-double ionization of molecular Hydrogen / M. Walter, J. Briggs // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1999. — Vol. 32. — Pp. 2487–2501.

- [192] *Walter, M.* Multi-particle photoionization by a single photon / M. Walter, A. V. Meremianin, J. S. Briggs // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2003. — Vol. 36. — Pp. 4561–4579.
- [193] Nondipolar asymmetries of photoelectron angular distributions / B. Krässig, M. Jung, D. S. Gemmell et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 75, no. 26. — Pp. 4736–4739.
- [194] Experimental determination of nondipolar angular distribution parameters for photoionization in the Ar *K* and Kr *L* shells / M. Jung, B. Krässig, D. S. Gemmel et al. // *Phys. Rev., A*. — 1996. — Vol. 54, no. 3. — Pp. 2127–2136.
- [195] Dramatic nondipole effects in low-energy photoionization: Experimental and theoretical study of Xe 5*s* / O. Hemmers, R. Guillemin, E. P. Kanter et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 91, no. 5. — P. 053002.
- [196] E1-E2 interference in the VUV photoionization of He / E. P. Kanter, B. Krässig, S. H. Southworth et al. // *Phys. Rev. A*. — 2003. — Vol. 68. — P. 012714.
- [197] *Cherepkov, N. A.* Non-dipole effects in spin polarization of photoelectrons from Xe 4*p* and 5*p* shells / N. A. Cherepkov, S. K. Semenov // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2001. — Vol. 34, no. 7. — Pp. L211–L217.
- [198] Experimental verification of quadrupole-dipole interference in spin-resolved photoionization / T. Khalil, B. Schmidtke, M. Drescher et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 89, no. 5. — P. 053001.

- [199] *Grum-Grzhimailo, A. N.* Non-dipole effects in magnetic dichroism in atomic photoionization / A. N. Grum-Grzhimailo // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2001. — Vol. 34, no. 11. — Pp. L359–L365.
- [200] Mechanisms of photo double ionization of Helium by 530 eV photons / A. Knapp, A. Kheifets, I. Bray et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 89, no. 3. — P. 033004.
- [201] *Malcherek, A. W.* Triply differential cross sections for the photo-double ionization of Neon / A. W. Malcherek, F. Maulbetsch, J. S. Briggs // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* — 1996. — Vol. 29, no. 18. — Pp. 4127–4138.
- [202] Angular distributions for double photoionization of Helium: a comparative study / F. Maulbetsch, M. Pont, J. S. Briggs, R. Shakeshaft // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1995. — Vol. 28, no. 10. — Pp. L341–L347.
- [203] *Maulbetsch, F.* Double photoionization in the case of unequal energy sharing / F. Maulbetsch, J. S. Briggs // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1994. — Vol. 27, no. 18. — Pp. 4095–4104.
- [204] *Kheifets, A.* On different mechanisms of the two-electron atomic photoionization / A. Kheifets // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2001. — Vol. 34, no. 8. — Pp. L247–L252.
- [205] Photodouble ionization of Helium at an excess energy of 40 eV / S. Cvejanovic, J. P. Wightman, T. J. Reddish et al. // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2000. — Vol. 33, no. 2. — Pp. 265–283.

- [206] Experimental and theoretical study of linear and circular dichroism in Helium double photoionization / A. Kheifets, I. Bray, K. Soejima et al. // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1999. — Vol. 32, no. 17. — Pp. L501–L509.
- [207] *Otranto, S.* Charge and energy-dependence of the Gaussian description of the triply differential cross sections for equal-energy sharing photo-double-ionization of two-electrons ions / S. Otranto, C. R. Garibotti // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Mar. — Vol. 71, no. 3. — P. 034703.
- [208] *Kazansky, A. K.* Hyperspherical time-dependent method with semiclassical outgoing waves for double photoionization of Helium / A. K. Kazansky, P. Selles, L. Malegat // *Phys. Rev. A.* — 2003. — Vol. 68, no. 5. — P. 052701.
- [209] *Malegat, L.* Double photoionization of Helium: The hyperspherical *R*-matrix method with semiclassical outgoing waves / L. Malegat, P. Selles, A. Kazansky // *Phys. Rev. A.* — 1999. — Vol. 60, no. 5. — Pp. 3667–3676.
- [210] Effect of electron energy sharing on the double photoionization of Helium near threshold / P. Lablanquie, J. Mazeau, L. Andric et al. // *Phys. Rev. Lett.* — 1995. — Vol. 74, no. 12. — Pp. 2192–2195.
- [211] Multicoincidence measurements of double photoionization in Helium / A. Huetz, P. Lablanquie, L. Andric et al. // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 1994. — Vol. 27, no. 1. — Pp. L13–L18.
- [212] *Meremianin, A. V.* The three-body rigid rotator and multipole expansions of the three-body continuum / A. V. Meremianin // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 2005. — Vol. 38. — Pp. 757–775.

- [213] Double photoionization of Helium including quadrupole radiation effects / J. A. Ludlow, J. Colgan, T.-G. Lee et al. // *J. Phys. B: At. Mol. and Opt. Phys.* — 2009. — Vol. 42, no. 22. — P. 225204 (5pp).
- [214] Circular dichroism effects in atomic X-ray scattering / N. L. Manakov, A. V. Meremianin, J. P. J. Carney, R. H. Pratt // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61. — P. 032711.
- [215] Манаков, Н. Л. Поляризационно-угловая структура и эллиптический дихроизм в трёхфотонных связанно-связанных переходах в атомах / Н. Л. Манаков, А. В. Меремьянин // *ЖЭТФ.* — 1997. — Т. 84. — С. 1984.
- [216] Manakov, N. L.. Circular dichroism in VUV- and X-ray atom scattering caused by virtual photoionization / N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. V. Meremjanin // *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* — 1996. — Vol. 79. — P. 331.
- [217] Manakov, N. L. Photon-polarization effects and their angular dependence in relativistic two-photon bound-bound transitions / N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. Maquet, J. P. J. Carney // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* — 2000. — Vol. 33. — P. 4425.
- [218] Dependence of photon-atom scattering on energy resolution and target angular momentum / J. P. J. Carney, R. H. Pratt, N. L. Manakov, A. V. Meremianin // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61. — P. 042704.
- [219] Manakov, N. L. Invariant spinor representations of finite rotation matrices / N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace // *Phys. Rev. A.* — 2001. — Vol. 64. — P. 032105.

- [220] *Meremianin, A. V.* Multipole expansions and Fock symmetry of the Hydrogen atom / *A. V. Meremianin, J-M. Rost // J. Phys. A: Math. Gen.* — 2006. — Vol. 39. — P. 12427.
- [221] *Walter, M.* Shape-Amplitude Representation of N-Particle Photofragmentation Processes / *M. Walter, A. Meremianin, J. S. Briggs // Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 90. — P. 233001.
- [222] *Manakov, N. L.* Factorized representation for parity-projected Wigner $d^j(\beta)$ -matrices / *N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace // Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61. — P. 022103.
- [223] *Matveenko, A. V.* Three-body angular basis and simple expression for Wigner $d(b)$ matrices / *A. V. Matveenko // Phys. Rev. A.* — 1999. — Vol. 59, no. 2. — Pp. 1034–7.
- [224] Hyperspherical harmonics for polyatomic systems: Basis set for kinematic rotations / *V. Aquilanti, A. Beddoni, A. Lombardi, R. Littlejohn // Int. J. Quantum Chem.* — 2002. — Vol. 89. — Pp. 277–291.