

ВОРОНЕЖСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

На правах рукописи

Меремьянин Алексей Васильевич



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

01.04.02 – теоретическая физика

**АВТОРЕФЕРАТ**

диссертации на соискание учёной степени  
доктора физико-математических наук

Воронеж – 2009

Работа выполнена в Воронежском государственном университете.

**Научный консультант:**

доктор физико-математических наук,  
профессор

Манаков Николай Леонидович

**Официальные оппоненты:**

доктор физико-математических наук  
доктор физико-математических наук

Абрамов Дмитрий Иванович

Грум-Гржимайло Алексей Николаевич

доктор физико-математических наук,  
профессор

Кадменский Станислав Георгиевич

**Ведущая организация:**

Лаборатория теоретической физики Объединённого института ядерных исследований.

Защита состоится “11 марта” 2010 г. в 15<sup>40</sup> часов на заседании диссертационного совета Д 212.038.06 при *Воронежском государственном университете*, расположенном по адресу:

*394006, г. Воронеж, Университетская площадь 1.*

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Воронежского государственного университета.

Автореферат разослан “\_\_\_” февраля 2010 г.

Отзывы и замечания по автореферату в двух экземплярах, заверенные печатью, просьба высылать по вышеуказанному адресу на имя учёного секретаря диссертационного совета.

Учёный секретарь  
диссертационного совета

 / Дроздин С.Н./

# Общая характеристика работы

## Актуальность работы

Квантовая теория углового момента является важным рабочим инструментом во многих задачах ядерной, атомной и молекулярной физики. Аппарат теории составляют коэффициенты сложения моментов (коэффициенты Клебша-Гордана), различные  $3nj$ -символы, а также неприводимые тензоры (НТ), к которым относятся, например, хорошо известные сферические функции [1]. Поскольку замкнутая система  $N$  тел инвариантна относительно вращений системы как целого, оператор полного углового момента коммутирует с гамильтонианом системы. Следовательно, волновую функцию можно представить в виде комбинации НТ – собственных функций оператора полного момента. Данный факт позволяет явно выделить зависимость волновой функции от трёх углов, определяющих ориентацию системы в пространстве. Указанные обстоятельства объясняют большую роль, которую играют НТ в квантовой задаче нескольких тел.

Изучение малочастичных систем является ключом к пониманию структуры ядер, атомов и молекул. Это связано с тем, что только в малочастичных задачах возможен достаточно точный учёт межчастичных корреляций. Учёт корреляций в квантовой задаче многих тел представляет большую трудность ввиду чрезвычайной сложности решения многомерных дифференциальных уравнений в частных производных. С увеличением числа частиц растёт размерность таких уравнений, что приводит к экспоненциальному росту вычислительных ресурсов, необходимых для расчёта волновых функций. Снижение размерности уравнений в квантовой задаче нескольких тел приводит к существенному упрощению численных расчётов. Как было отмечено выше, для изолированных систем возможность понижения размерности связана с сохранением полного импульса и углового момента системы.

Устранение трёх коллективных переменных, соответствующих движению центра масс системы, достигается при использовании набора векторов Якоби [2, 3]. Отделение трёх коллективных угловых переменных, описывающих ориентацию системы, более сложно и связано с разложением волновой функции по угловому базису. При этом возникает вопрос о выборе базиса, а также о выводе уравнений на коэффициенты разложения – “обобщённые радиальные функции”. Удачный выбор углового базиса может привести к упрощению решения системы радиальных уравнений. Данный вопрос исследовался многими авторами, начиная с 1930-х годов [4]. Тем не менее, ряд моментов оставался невыясненным. Например, понятно, что общий вид уравнений на радиальные функции не должен зависеть от выбора внутренних переменных, задающих относительное положение частиц. Однако, в рамках известных в литературе методов, вывод выражений для радиальных уравнений связан с фиксированием выбора внутренних переменных. Эта и другие проблемы связаны с отсутствием простой техники векторного дифференцирования НТ, разработка которой представляется актуальной задачей.

Быстрый прогресс в экспериментальной технике измерения угловых распределений в процессах многочастичной фрагментации атомов и молекул, таких как двойная фотоионизация, трёхчастичная диссоциация и т.п., делают актуальными задачи, с одной стороны, построения теории таких процессов, и, с другой стороны, развития теоретических методов анализа угловых распределений, позволяющих объяснять их особенности, вытекающие из общих требований симметрии и не связанные с конкретной моделью процесса. Первая задача, очевидно, сопряжена со значительными трудностями численного решения уравнений на волновые функции непрерывного спектра нескольких тел. Одна из основных сложностей вызвана невозможностью приписать волновой функции континуума определённое значение углового момента. В результате, например, волновая функция непрерывного спектра трёх тел за-

висит от *шести* переменных, что делает её прямое вычисление практически нереализуемой задачей. Однако, использование мультипольных разложений позволяет представить волновую функцию в виде ряда НТ с весами в виде функций, зависящих от *трёх* внутренних переменных. Более того, в ряде случаев (в двойной фотоионизации атома гелия, например) только один член такого разложения даёт вклад в амплитуду. Возникает вопрос о выборе базиса для разложения волновой функции континуума. В литературе о задаче трёх тел наиболее популярны два варианта базиса: биполярные гармоники (тензорное произведение двух сферических функций) и  $D$ -функции Вигнера (матрицы конечных вращений). Интерес представляет анализ общих свойств мультипольных разложений. Такой анализ удобнее всего провести на примере разложения какой-либо функции. Известно много разложений различных функций по биполярным гармоникам [1]. Однако, примеры мультипольных разложений по  $D$ -функциям в литературе отсутствуют (за исключением формул для  $S$ -мультиполя разложения произведения двух плоских волн [5]). В этой связи, интерес представляет изучение высших мультиполей разложения волновой функции трёх невзаимодействующих частиц.

Среди многочастичных угловых распределений наиболее просты для анализа процессы фрагментации, вызванные поглощением одного фотона. Примером такого процесса является двойная фотоионизация атома гелия. Амплитуду процесса фотофрагментации можно представить в виде матричного элемента перехода между начальным связанным состоянием с определённым значением полного углового момента в конечное состояние непрерывного спектра трёх (или более) частиц. При этом оператор перехода является скаляром и линейно зависит от вектора поляризации фотона. В теории фотофрагментации атомов и молекул для оператора перехода обычно используется дипольное приближение. Перечисленные особенности определения амплитуды позволяют делать определённые выводы об её поляризационно-угловой

структуре. Для этого, с помощью теоремы Вигнера-Экарта амплитуду процесса записывают в виде комбинации динамических (не зависящих от углов) и геометрических факторов, определяющих поляризационно-угловую зависимость процесса. Геометрические факторы представляют собой сложные конструкции – тензорные произведения сферических функций, зависящих от направлений вылета фрагментов. Таким образом, проблема параметризации угловых распределений связана с анализом произведений неприводимых тензоров.

В.А. Фок [11] впервые установил, что волновая функция атома водорода в импульсном пространстве пропорциональна четырёхмерной гиперсферической гармонике (ГСГ). Этот факт объясняет вырождение спектра по орбитальному моменту и, казалось бы, должен дать возможность применить обширный аппарат квантовой теории углового момента к вычислению различных величин, содержащих водородные волновые функции. Тем не менее, оказывается, что особенности симметрии Фока не позволяют использовать свойства ГСГ в вычислениях. Причина этого состоит в зависимости аргументов ГСГ от энергии состояния. В этой связи представляет значительный интерес вопрос о выяснении возможности применения симметрии Фока в расчётах матричных элементов с водородными волновыми функциями. Актуальность изучения симметрии Фока связана также с наличием простого выражения для импульсного представления водородной функции Грина в терминах ГСГ.

## **Цели диссертации**

- Развитие универсального метода отделения коллективных угловых переменных в квантовой задаче  $N$  тел. Вывод уравнений на обобщённые радиальные волновые функции, соответствующие различным вариантам выбора углового базиса.

- Изучение мультипольных разложений волновых функций непрерывного спектра системы трёх тел, включая анализ вариантов выбора углового базиса. Вывод коллективного мультипольного разложения волновой функции трёх невзаимодействующих частиц, т.е. произведения плоских волн.
- Выяснение возможности применения четырёхмерной симметрии Фока к задаче о вычислении матричных элементов с водородными волновыми функциями.
- Построение параметризации амплитуд процессов однофотонной многочастичной фрагментации атомов и простых молекул. Выяснение условий наблюдения недипольных эффектов в многочастичных угловых распределениях.

## Научная новизна и значимость работы

В диссертации впервые с единых позиций теории неприводимых тензоров изучена задача отделения трёх коллективных угловых переменных в квантовой задаче  $N$  тел. Для каждого варианта выбора коллективного углового базиса получены обобщённые радиальные уравнения, которые непосредственно могут быть использованы при расчёте радиальных волновых функций состояний с ненулевым полным угловым моментом. Кроме того, развита математическая техника векторного дифференцирования неприводимых тензоров (включая  $D$ -функции Вигнера), позволяющая легко получать радиальные уравнения для любых вариантов выбора углового базиса.

Впервые получено и детально исследовано разложение волновой функции трёх невзаимодействующих частиц (т.е. произведения двух плоских волн) по базису  $D$ -функций Вигнера. Обнаружены и исследованы свойства симметрии полученных мультипольных разложений. Важность полученных результатов

связана с тем, что произведение плоских волн является асимптотикой волновой функции рассеяния трёх слабо взаимодействующих частиц при больших расстояниях. Такого рода функции необходимы, например, при построении теории трёхатомной диссоциации молекул.

Впервые доказана возможность применения симметрии Фока к расчёту матричных элементов с нерелятивистскими водородными волновыми функциями. Получено новое компактное представление водородного форм-факторного матричного элемента через производные от элементарной функции. Данное представление может быть использовано: (а) для вывода замкнутых выражений для матричных элементов при некоторых частных значениях квантовых чисел, (б) для построения рекуррентных схем вычисления массивов матричных элементов. Кроме того, разработанная техника может быть применена к вычислению матричных элементов со штурмовскими функциями, которые широко используются во многих задачах атомной и молекулярной физики.

Впервые получена универсальная параметризация поляризационной зависимости амплитуды процессов многочастичной фрагментации, вызванных поглощением одного фотона. Структура параметризации сохраняется при любом числе регистрируемых фрагментов,  $N \geq 3$ . Полученные результаты позволяют существенно упростить анализ поляризационной зависимости сечений процессов многочастичной фотофрагментации. Впервые получена параметризация амплитуды процесса двухэлектронной фотоионизации атома с учётом недипольных эффектов. Указаны условия, оптимальные для наблюдения таких эффектов в угловых распределениях. Указаны конфигурации, при которых вклад недипольных эффектов в сечение пренебрежимо мал. Сравнение результатов расчёта с экспериментальными данными указывает на необходимость учёта недипольных эффектов при теоретическом изучении двойного фотоэффекта в атоме гелия при надпороговых энергиях фотона



порядка сотен электрон-вольт.

## Результаты и 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 мультипольное разложение произведения 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 интеграла. 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 фо-

тоионизации атома гелия, указаны условия их наблюдения в угловых распределениях.

## **Апробация работы**

Результаты, содержащиеся в диссертации докладывались на семинарах в Университете Альберта-Людвига (Фрайбург, Германия), Институте физики сложных систем общества Макса Планка (Дрезден, Германия), университетах города Орхус (Дания) и города Перуджа (Италия), представлялись на международных конференциях, среди которых: XI-th International Congress of Quantum Chemistry, Bonn, 2003 (Германия), International Workshop on the Critical Stability of Few-Body Quantum Systems, Dresden, 2005 (Германия), Energiereiche Atomare Stösse, Riezlern, 2006 (Австрия), 37th Meeting of the Division of Atomic, Molecular and Optical Physics, Knoxville, 2006 (США), International Bogolyubov conference – Problems of theoretical and mathematical physics, 2009 (Дубна, Россия).

## **Публикации**

По теме диссертации опубликовано 26 статей в международных и российских реферируемых научных журналах, список которых представлен в конце автореферата.

## **Личный вклад автора**

Автором лично получены все основные результаты, представленные в диссертации.

## Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из Введения, четырёх глав, Заключения, содержит Приложение и список литературы из 224 наименований. Полный текст диссертации изложен на 242 страницах и содержит 18 рисунков.

## Содержание работы

Во **Введении** обоснована актуальность диссертационной работы, дан краткий обзор литературы, относящейся к рассматриваемым вопросам, описана структура диссертации, сформулированы цели исследования и представлены выносимые на защиту положения.

В **главе 1** рассматривается задача об отделении трёх коллективных угловых переменных, описывающих ориентацию системы  $N$  тел как целого в пространстве.

Использование векторов Якоби [2] позволяет представить уравнение Шрёдингера для системы  $N$  тел в виде

$$(H - E) \Psi^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = 0, \quad H = -\frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \nabla_{\alpha}^2 + V(\xi), \quad (1)$$

где  $n \equiv N - 1$ ,  $p$  – чётность состояния и  $V$  – потенциал, зависящий, в отсутствие внешних полей, от набора  $3n - 3$  внутренних переменных  $\xi$ .

Существует целый ряд методов отделения коллективных угловых переменных. Можно показать [A1], что все они эквивалентны использованию разложения волновой функции по базису угловых функций,

$$\Psi^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n) = \sum_{q=-l}^l \psi_{lq}^{(p)}(\xi) T_{lm}^{(q)}(\Omega), \quad (2)$$

где  $T_{lm}^{(q)}(\Omega)$  – набор базисных функций, зависящих от трёх коллективных углов  $\Omega$ , и 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  $T_{lm}^{(q)}(\Omega)$ . Удачный выбор углового базиса может существенно упростить решение системы связанных радиальных уравнений [6], что объясняет важность поставленной задачи. В диссертации не затрагивается вопрос о способах решения радиальных уравнений в задаче нескольких тел. Этот вопрос тесно связан со свойствами рассматриваемой задачи и представляет собой отдельную сложную проблему (см., например, книгу [3]).

В **разделе 1.1** излагаются детали процедуры отделения трёх коллективных углов в уравнении Шрёдингера (1) с помощью матриц конечных вращений (МКВ). МКВ представляют собой матрицу преобразования НТ от вращающейся координатной системы (ВКС), связанной с частицами, к неподвижной лабораторной координатной системе (ЛКС). Поскольку физические характеристики не должны зависеть от выбора ВКС, связь осей ВКС с векторами Якоби системы можно рассматривать как калибровочное соглашение [6]. В методе ВКС зависимость волновой функции системы от коллективных углов параметризуется с помощью соотношения [1]

$$\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n) = \sum_{k=-l}^l \tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi) D_{k,m}^l(\Omega), \quad (3)$$

где МКВ  $D_{k,m}^l(\Omega)$  зависит от трёх параметров  $\Omega$ , описывающих поворот от вращающейся к неподвижной системе координат (т.е. ВКС  $\rightarrow$  ЛКС).

Возникает вопрос о существовании предпочтительной калибровки. Ответ зависит от свойств рассматриваемой системы, т.е. потенциала межчастичного взаимодействия, а также спинов и масс частиц, но, в общем случае, ответ на данный вопрос отрицателен [6].

Предлагаемый в диссертации метод получения уравнений на функции

$\tilde{\Psi}_{lk}^{(p)}(\xi)$ , основан на использовании тензорного представления МКВ [A2],

$$D_{k,m}^l(\Omega) = A_{lk} \{ \{ \mathbf{e}_{-1} \}_k \otimes \{ \mathbf{e}_0 \}_{l-k} \}_{lm}, \quad k \geq 0, \quad (4)$$

где  $A_{lk}$  – нормировочный коэффициент и запись  $\{ \mathbf{e}_{-1} \}_{k\mu}$  обозначает неприводимое тензорное произведение [1]  $k$  одинаковых векторов  $\mathbf{e}_{-1} = (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)/\sqrt{2}$ , где  $\mathbf{e}_{x,y}$  – базисные векторы осей  $x, y$  ВКС,

$$\{ \mathbf{e}_{-1} \}_{k\mu} = \{ \dots \{ \{ \mathbf{e}_{-1} \otimes \mathbf{e}_{-1} \}_2 \otimes \mathbf{e}_{-1} \}_3 \dots \otimes \mathbf{e}_{-1} \}_{k\mu}. \quad (5)$$

Важнейшим свойством этого тензорного произведения является его независимость от схемы связи образующих его векторов [A3]. Использование представления (4) позволяет радикально упростить вычисление действия операторов градиента из (1) на угловую часть разложения (3). В результате, полный гамильтониан системы можно представить в виде

$$H = H_0 + H_{cor} + H_{rot}, \quad (6)$$

где  $H_0$  – колебательный,  $H_{cor}$  – кориолисов,  $H_{rot}$  – вращательный гамильтонианы. Отметим, что  $H_0$  зависит только от выбора внутренних переменных  $\xi$  и не зависит от выбора ВКС.

Введя обозначения  $B_{ij}^{(s)}$  и  $B_{ij}^{(as)}$  для симметричной и антисимметричной частей матрицы вторых производных базисных векторов ВКС,  $B_{ij} = (\mathbf{e}_i \cdot \sum_{\alpha=1}^n \Delta_\alpha \mathbf{e}_j)$ , приведём полученные выражения для гамильтонианов  $H_{cor}$  и  $H_{rot}$ ,

$$H_{cor} = i \sum_{k=1}^3 L_k \left( \sum_{\gamma=1}^{3n-3} C_{\gamma k}(\xi) \frac{\partial}{\partial \xi_\gamma} + B_k(\xi) \right), \quad (7)$$

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

где  $\epsilon_{ijk}$  – полностью антисимметричный единичный тензор,  $B_1(\xi) = B_{23}^{(as)}$  ( $B_{2,3}$  получаются циклической перестановкой индексов 1, 2, 3, соответствующих осям  $x, y, z$  ВКС),  $L_k = (\mathbf{e}_k \cdot \mathbf{L})$  –  $k$ -я компонента оператора полного

углового момента системы  $\mathbf{L}$  в осях ВКС, и параметры  $C_{\gamma k}$  определяются первыми производными базисных векторов

$$C_{\gamma k} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^n \sum_{i,j,l} \epsilon_{ijk} [\mathbf{e}_i \cdot (\mathbf{e}_l \cdot \nabla_{\alpha}) \mathbf{e}_j] (\mathbf{e}_l \cdot \nabla_{\alpha}) \xi_{\gamma}, \quad (8)$$

где оператор  $\nabla_{\alpha}$  в квадратных скобках действует только на вектор  $\mathbf{e}_j$ .

Таким образом, показано, что колебательно-вращательное разложение (6) определяется первыми и вторыми производными базисных векторов ВКС, взятыми по координатам векторов Якоби.

Согласно Экарту [7], наиболее общее определение ВКС состоит в наложении трёх ограничений на координаты частиц в ВКС,

$$Y^{(i)} = 0, \quad i = 1, 2, 3, \quad (9)$$

где “производящие функции”  $Y^{(i)}$  зависят от  $3n$  параметров  $y_{\alpha k} = (\mathbf{r}_{\alpha} \cdot \mathbf{e}_k)$ , являющихся декартовыми координатами векторов Якоби в ВКС. Например, производящие функции для ВКС мгновенных главных осей инерции можно представить в виде

$$Y^{(i)} = \sum_{\alpha=1}^n y_{\alpha j} y_{\alpha k} = 0, \quad (10)$$

где индексы  $ijk$  обозначают три циклические перестановки набора  $(1, 2, 3)$ . Результаты п. 1.1.3 позволяют выразить параметры  $B_k$ ,  $C_{\gamma k}$ ,  $B_{ij}^{(s)}$ , входящие в (7) через производные производящих функций  $Y^{(i)}$ . В качестве примера в пп. 1.1.4-5 получены колебательно-вращательные разложения, соответствующие ВКС главных осей инерции и ВКС  $z$ -связи, у которой ось  $z$  направлена вдоль вектора  $\mathbf{r}_1$  и плоскость  $zx$  определена плоскостью векторов  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}_2$ . Полученные результаты совпадают с приведёнными в литературе [8, 9], что указывает на правильность разработанного метода.

Далее, в разделе 1.2 разработанный формализм применён к ВКС, опре-

делённой условиями Экарта [7],

$$\sum_{\alpha=1}^n [\mathbf{r}_\alpha^{(eq)} \times \mathbf{r}_\alpha] = 0. \quad (11)$$

где  $\mathbf{r}_\alpha^{(eq)}$  соответствует вектору Якоби  $\mathbf{r}_\alpha$  в положении равновесия. Дифференцируя (11) по времени, легко убедиться, что условие Экарта (11) эквивалентно требованию малости компонент оператора полного углового момента относительно вращающихся осей в пределе малых амплитуд отклонений от положения равновесия. Это свойство выгодно отличает ВКС Экарта от системы главных осей инерции, для которой кориолисов гамильтониан не является малым при малых колебаниях. ВКС Экарта широко используется в молекулярной физике при изучении колебаний молекул.

В разделе 1.2 ВКС Экарта впервые изучена исчерпывающим образом. А именно: получены явные выражения для базисных векторов  $\mathbf{e}_{x,y,z}$ , а также коэффициентов вращательного  $H_{rot}$  и кориолисова гамильтонианов  $H_{cor}$ . Там же рассмотрен квантовомеханический предел малых колебаний и доказана тождественность предельных свойств системы Экарта в классическом и квантовом случаях. Детально исследован случай задачи трёх тел и получены в явном виде выражения для  $H_{cor}$  и  $H_{rot}$  для набора внутренних переменных  $r_1, r_2, \cos \theta$ , где  $\theta$  – угол между векторами  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ . В частности, для кориолисова гамильтониана имеем,

$$H_{cor} \sim L_z \frac{r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \sin(\theta - \theta_{eq})}{\mathcal{F}^2} \left( r_2 \frac{\partial}{\partial r_1} - r_1 \frac{\partial}{\partial r_2} \right) + L_z \frac{\sin \theta}{r_1 r_2 \mathcal{F}^2} \times \\ \times \left\{ \frac{r_1^{(eq)} r_2^{(eq)}}{r_1 r_2} (r_2^2 - r_1^2) \cos(\theta - \theta_{eq}) + (r_1^{(eq)})^2 - (r_2^{(eq)})^2 \right\} \frac{\partial}{\partial \cos \theta}, \quad (12)$$

где  $\mathcal{F}^2 = (r_1 r_1^{(eq)})^2 + (r_2 r_2^{(eq)})^2 + 2r_1 r_2 r_1^{(eq)} r_2^{(eq)} \cos(\theta - \theta_{eq})$ . Для малых колебаний, когда  $\theta \sim \theta_{eq}$ ,  $r_{1,2} \sim r_{1,2}^{(eq)}$ , коэффициенты перед производными пропорциональны амплитудам колебаний, что означает малость кориолисова гамильтониана для малых отклонений от положения равновесия.

Поскольку полная волновая функция не должна зависеть от величины свободных параметров равновесной конфигурации  $r_1^{(eq)}, r_2^{(eq)}, \theta_{eq}$ , варьируя их можно изменять величину кориолисова гамильтониана, и, следовательно, управлять запутыванием уравнений на радиальные функции.

Отметим, что разработанный в **разделах 1.1-2** метод получения колебательно-вращательных разложений (и, тем самым, уравнений на радиальные функции) является универсальным и применим к произвольной калибровке (т.е. выбору ВКС).

В **разделе 1.3** в качестве базиса для отделения коллективных угловых переменных выбраны минимальные биполярные гармоники (МБГ). Обычные биполярные гармоники представляют собой тензорное произведение двух сферических функций [1],

$$Y_{lm}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \equiv \{Y_{l_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes Y_{l_2}(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{lm} = \sum_{m_1 m_2} C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm} Y_{l_1 m_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{l_2 m_2}(\hat{\mathbf{r}}_2). \quad (13)$$

где  $C_{l_1 m_1 l_2 m_2}^{lm}$  – коэффициенты Клебша-Гордана и  $Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}})$  – сферические функции. МБГ являются *минимальным* произведением сферических функций,

$$\mathcal{Y}_{lm}^{k, \lambda}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \equiv \{Y_{l-k}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes Y_{k+\lambda}(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{lm}, \quad k = 0, 1, \dots, l. \quad (14)$$

где  $\lambda = 0$  ( $\lambda = 1$ ) для полярных (аксиальных) МБГ. В работе [A2] показано, что МБГ могут использоваться в качестве базиса для разложения *произвольных* неприводимых тензоров. Например, биполярные гармоники можно представить в виде [A3],

$$Y_{lm}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = \sum_k F_k(\theta) \mathcal{Y}_{lm}^{k, \lambda}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2),$$

где  $\cos \theta = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2)$  и  $\lambda = 0$  для чётной комбинации  $l_1 + l_2 + l$ , иначе  $\lambda = 1$ . Явный вид функций  $F(\theta)$  получен в [A3].



Разложение волновой функции системы трёх тел по МБГ имеет вид

$$\Psi_{lm}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{k=0}^{l-\lambda_p} f_k^{(l, \lambda_p)}(\xi) \mathcal{Y}_{lm}^{k, \lambda_p}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2),$$

где  $\lambda_p = 0$  для состояний, чётность  $p$  которых совпадает с чётностью  $l$ , в противном случае  $\lambda = 1$ . В п. 1.3.2 показано, что подстановка данного разложения в уравнение Шрёдингера задачи трёх тел приводит к системе радиальных уравнений,

$$H_{lk}^{(\lambda_p)} f_k^{(l, \lambda_p)} + \sum_{\alpha=-1}^1 \hat{V}_\alpha^{(\lambda_p)} f_{k+\alpha}^{(l, \lambda_p)} = 0, \quad (15)$$

где  $H_{lk}^{(\lambda_p)}$  и “калибровочные потенциалы”  $\hat{V}_\alpha^{(\lambda_p)}$ , запутывающие уравнения, действуют только на внутренние переменные  $\xi$ . Приведём выражение для калибровочного потенциала  $\hat{V}_0^{(\lambda_p)}$ ,

$$\hat{V}_0^{(\lambda_p)} = i \frac{\cos \theta}{\sin^2 \theta} [\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2] \cdot \left( \frac{l-k}{r_1^2} \mathbf{l}_1 - \frac{k+\lambda_p}{r_2^2} \mathbf{l}_2 \right),$$

где  $\mathbf{l}_\alpha = -i[\mathbf{r}_\alpha \times \nabla_\alpha]$  – операторы одночастичного углового момента,  $\alpha = 1, 2$ . В п. 1.3.3 получены уравнения типа (15) для задачи  $N$  тел.

Отделение коллективных углов приводит к возникновению в радиальных уравнениях членов, расходящихся при определённых конфигурациях частиц. Разным угловым базисам соответствуют разные расходящиеся конфигурации. Например, в методе МБГ калибровочные потенциалы расходятся при  $r_1 = 0$ ,  $r_2 = 0$ ,  $\theta = 0, \pi$ . Первые две расходимости присутствуют и в колебательном гамильтониане  $H_{lk}^{(\lambda_p)}$ , их называют точечными расходимостями [6]; они являются аналогами центробежной расходимости в задаче двух тел. Расходимость  $\theta = 0, \pi$  возникает только при ненулевом полном угловом моменте  $l > 0$ . Вид расходимостей такого рода определяется калибровкой (выбором) углового базиса; их поэтому называют калибровочными расходимостями [6]. Фундаментальной причиной возникновения калибровочных расходимостей

является то, что из  $n$  векторов задачи  $\mathbf{r}_\alpha$  невозможно равноправным образом выбрать пару векторов, определяющих вид углового базиса как в методе ВКС, так и МБГ. В практических вычислениях обойти проблему калибровочных расходимостей можно, используя радиальные уравнения, соответствующие разным угловым базисам, с последующей сшивкой решений. Кроме того, в задаче трёх тел в методе МБГ калибровочные расходимости вообще сокращаются. Тем не менее, возникает вопрос о принципиальной возможности отделения коллективных углов, свободного от калибровочных расходимостей. В **разделе 1.4** на этот вопрос дан положительный ответ. В основе предлагаемого способа отделения углов лежит использование переполненного базиса. Например, рассмотрим  $P$ -состояние системы  $N$  тел. В этом случае  $l = 1$  и волновая функция представляет собой вектор, который, для нечётного состояния, может быть комбинацией всех векторов задачи:

$$\Psi_{1m}^{(p)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \dots \mathbf{r}_n) = \sum_{q=1}^n Y_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_q) \chi_1^{(q)}(\xi). \quad (16)$$

Подчеркнём, что это разложение справедливо при любых конфигурациях частиц. В данном подходе, однако, число неизвестных радиальных функций равно  $n$ , хотя, в обычных методах, для  $P$ -состояния число радиальных функций равно  $2l + 1 = 3$ . Радиальные уравнения можно получить, подставляя (16) в уравнение Шрёдингера и проектируя результат на функции  $Y_{1m}(\hat{\mathbf{r}}_{q'})$ .

В результате имеем,

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

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

Написанные уравнения свободны от калибровочных расходимостей. Приве-

дём также “равноправное” разложение волновой функции  $D$ -состояния,

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

Здесь, тензорное произведение эквивалентно МБГ второго ранга. Соответствующие радиальные уравнения получены в **разделе 1.4**. Общий случай произвольного углового момента рассмотрен в обзоре [A1].

Результаты первой главы опубликованы в статьях [A1, A2, A3, A4, A5, A6, A7, A8].

В **главе 2** изучаются свойства мультипольных разложений волновой функции континуума трёх тел. Мультипольные разложения приходится использовать ввиду того, что волновая функция задачи рассеяния не является собственной функцией оператора полного углового момента. Таким образом, волновая функция зависит от шести переменных, которыми могут быть, например, компоненты векторов Якоби  $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ , заданные относительно системы координат, определённой векторами асимптотических импульсов частиц  $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2$ . Возникает вопрос о выборе углового базиса для разложения волновой функции непрерывного спектра системы трёх тел.

В задаче трёх тел часто используется разложение по базису биполярных гармоник (БГ) (13). Разложение по БГ эквивалентно разложению волновой функции по базису одночастичных состояний, что приводит к возникновению дополнительного бесконечного суммирования, сходимость которого не всегда удовлетворительна. В **главе 2** в качестве углового базиса выбраны  $D$ -функции Вигнера, описывающие поворот  $\Omega$  от системы координат, связанной с импульсами (это неподвижная система, т.е. ЛКС), к системе координат, связанной с векторами Якоби (ВКС),

$$\Psi_{\mathbf{q}_1 \mathbf{q}_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{\mu, \nu=-j}^j \psi_{\mu, \nu}^{(j)}(\xi_r, \xi_q) D_{\mu, \nu}^j(\Omega), \quad (17)$$

где  $\xi_q$  – три скалярных параметра, зависящие от  $\mathbf{q}_{1,2}$  и  $\xi_r$  – три скалярных внутренних параметра, зависящие от  $\mathbf{r}_{1,2}$ , например,  $\xi_r = r_1, r_2, \cos \theta$ .

В качестве примера, в **разделе 2.2** рассматривается мультипольное разложение произведения двух плоских волн, которое представляет собой волновую функцию трёх невзаимодействующих частиц,

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

Используя свойства ортогональности  $D$ -функций, для коэффициентов имеем

$$F_{\mu, \nu}^j = \frac{2j+1}{8\pi^2} \int e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} D_{\mu, \nu}^{j*}(\Omega) d\Omega. \quad (18)$$

Как видно, мультиполь  $F_{\mu, \nu}^j$  можно понимать как импульсное представление волновой функции жёсткого трёхчастичного симметричного волчка. К сожалению, даже  $S$ -мультиполь  $F_{0,0}^0(\xi_r, \xi_q)$  не удаётся выразить в замкнутом виде через известные специальные функции. Кроме того, оказывается, что  $F_{0,0}^0(\xi_r, \xi_q)$  зависит всего от двух внутренних параметров [5]. Установлено, что такое явление наблюдается также в случае мультиполя  $F_{0,0}^j$ , соответствующего определённой калибровке. Например, при  $j = 1$  мультиполь можно представить в виде векторного интеграла

$$\int e^{i(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1 + \mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \frac{[\hat{\mathbf{r}}_1 \times \hat{\mathbf{r}}_2]}{\sin \theta} d\Omega = -8\pi \frac{[\hat{\mathbf{q}}_1 \times \hat{\mathbf{q}}_2]}{\sin \chi} \int_0^\pi \frac{\sin \sqrt{A - B \cos \gamma}}{\sqrt{A - B \cos \gamma}} \cos \gamma d\gamma, \quad (19)$$

где  $\cos \theta = (\hat{\mathbf{r}}_1 \cdot \hat{\mathbf{r}}_2)$ ,  $\cos \chi = (\hat{\mathbf{q}}_1 \cdot \hat{\mathbf{q}}_2)$ , а также

$$A = (q_1 r_1)^2 + (q_2 r_2)^2 + 2(\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{r}_1)(\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{r}_2),$$

$$B = 2|\mathbf{q}_1 \times \mathbf{r}_1| |\mathbf{q}_2 \times \mathbf{r}_2|.$$

В общем случае, мультиполи  $F_{\mu, \nu}^j$  зависят от трёх параметров  $\xi_r$ ; для них получено несколько интегральных представлений, соответствующих двум калибровкам.

В диссертации предложено интерпретировать интеграл (18) как амплитуду мгновенного трёхчастичного распада (преддиссоциации) жёсткой молекулы типа симметричного волчка на невзаимодействующие атомы. Иными словами, мультипольные коэффициенты разложения произведения плоских волн представляют “кинематическую модель” процесса преддиссоциации (**раздел 2.3**). Мультиполи  $F_{\mu,\nu}^j$  удобно графически изображать в виде диаграмм Далитца [10], т.е. диаграмм интенсивности в осях  $x = (\epsilon_2 - \epsilon_1)/\sqrt{3}$  и  $y = \epsilon_3 - 1/3$ , где  $\epsilon_i$  – энергия  $i$ -той частицы в единицах полной энергии  $W = \sum_{i=1}^3 E_i$ .

На рис. 1 показана диаграмма, соответствующая  $S$ -мультиполю. Особенностью диаграммы является круговая симметрия. Отметим, что такая симметрия имеет место только для распада симметричного волчка.

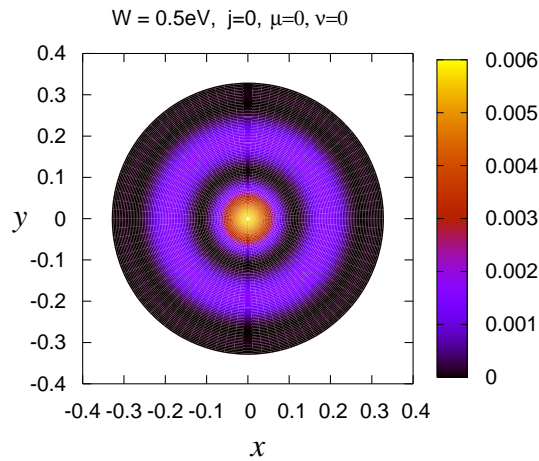


Рис. 1. Диаграмма Далитца для  $S$ -мультиполя  $|F_{0,0}^0|^2$ , соответствующего полной энергии  $W = 0.5$  эВ и одинаковым массам частиц, равным массе протона. Центру диаграммы соответствует симметричный разлёт частиц, краям – коллинеарный.

Если кинетическая энергия частиц велика по сравнению с межчастичным взаимодействием, то имеет смысл учитывать потенциал взаимодействия по теории возмущений. Коллективные мультипольные разложения поправочных членов, аналогичные (17), а также матричные элементы с ними, приведены

в статье [A9].

Результаты второй главы опубликованы в статьях [A10, A11, A9].

В **главе 3** рассматривается применение 4-мерной симметрии Фока к задаче о вычислении матричных элементов, содержащих водородные функции. В.А. Фок установил [11], что в импульсном пространстве волновая функция атома водорода пропорциональна 4-мерной гиперсферической гармонике (ГСГ). Известно, что основная трудность практического применения фоковской симметрии состоит в зависимости аргументов ГСГ от энергии состояния [12]. В диссертации показано, что использование полученных в работе [A12] мультипольных разложений ГСГ позволяет обойти данную проблему. Для определённости, в диссертации рассматривалась задача о вычислении факторного интеграла<sup>1</sup>,

$$F(\vec{k}) = \int \psi_f^*(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \psi_i(\vec{r}) d\vec{r}. \quad (20)$$

В **разделе 3.1** задача о вычислении матричного элемента сформулирована в терминах интеграла, содержащего ГСГ,

$$F(\vec{k}) = \frac{2\alpha^{5/2}}{\beta^{1/2}} \int Y_{n'l'm'}^*(\hat{\mathbf{y}}) \frac{p^2}{q^4} Y_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) d\Omega_{\hat{\mathbf{y}}},$$

где  $Y_{n'l'm'}(\hat{\mathbf{y}})$  – 4-мерная ГСГ, зависящая от единичного вектора  $\hat{\mathbf{y}}$ , см. рис. 2, и  $\alpha = \frac{Z}{n+1}$ ,  $\beta = \frac{Z}{n'+1}$ , где  $n$  – главное квантовое число минус единица,  $lm$  – квантовые числа углового момента. Остальные обозначения:  $\hat{\mathbf{x}} = -\mathbf{e} + 2\alpha \frac{\mathbf{q}}{q^2}$ ,  $\mathbf{q} = \mathbf{p} - \mathbf{k}$ , где  $\mathbf{p} = (p, \beta)$ ,  $\mathbf{k} = (k, \beta - \alpha)$ .

В **разделе 3.2** получено мультипольное разложение функции  $q^{-2}Y_{nlm}(\hat{\mathbf{x}})$ , позволяющее вычислить интеграл (20) с помощью свойств ортогональности

---

<sup>1</sup>Буквы со стрелками обозначают 3-векторы, жирный шрифт – 4-векторы.

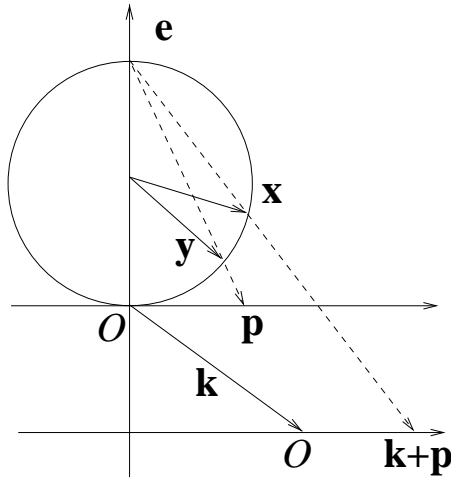


Рис. 2. Сечение 4-сферы. Точка  $\hat{\mathbf{x}}$  – стереографическая проекция точки  $\mathbf{p}$ , сдвинутая на вектор  $\mathbf{k}$ . Ось энергии направлена вдоль вектора  $\mathbf{e} = (\vec{0}, 1)$ .

ГСГ. Приведём тензорный вид этого разложения,

$$\frac{1}{q^2} Y_{nlm}(\hat{\mathbf{x}}) = \sum_{n_1, n_2, n_3} A_{n_1 n_2 n_3} \times \{Y_{n-n_1}(\mathbf{e}) \otimes \{Y_{n_2}(\hat{\mathbf{k}}) \otimes \{Y_{n_1+n_2-n_3}(\mathbf{e}) \otimes Y_{n_3}(\hat{\mathbf{y}})\}_{n_1+n_2}\}_{n_1}\}_{nlm}, \quad (21)$$

где символ  $\otimes$  обозначает неприводимое тензорное произведение в 4-пространстве и коэффициенты  $A$  скалярны. Оказывается, что в (21) все четырёхмерные коэффициенты Клебша-Гордана вычисляются в замкнутом виде [A12], что резко упрощает вычисление тензорных произведений. Отметим также, что фактически в (21) бесконечна только одна сумма – она соответствует мультипольному разложению функции  $\exp i(\vec{k} \cdot \vec{r})$ . В итоге, интеграл (20) выражается в виде комбинации функций  $P_{n,l;n'l'}^{(l_2)}$ , для которых получено компактное дифференциальное представление.

В разделе 3.3 изучаются свойства полученных выражений для матричных элементов. В частности, показано, что в длинноволновом приближении полученные выражения для матричных элементов совпадают с известными формулами Гордона [13].

Одним из ключевых результатов главы 3 является дифференциальное

представление интеграла с водородными радиальными волновыми функциями,

$$\int_0^{\infty} R_{n',l'}(\alpha, r) j_{l_2}(kr) R_{n,l}(\beta, r) r^2 dr \sim$$

$$\sim \partial_t^{n-l} (1+t)^{n+l+1} \partial_\tau^{n'-l'} (u+\tau)^{n'+l'+1} \partial_\tau^{l'-l_2+l+1} \times$$

$$\times [w^2 + (1+u)(t+\tau) + (t+\tau)^2]^{-l_2-1} \Big|_{t=\tau=0}, \quad (22)$$

где  $\partial_t = \partial/\partial t$ ,  $u = \alpha/\beta$  и  $w = \frac{\sqrt{(\alpha+\beta)^2 + k^2}}{2\beta}$ . Представление (22) позволяет получить замкнутые выражения для радиального интеграла в случае малых значений квантовых чисел (**Приложение Г.3**). Кроме того, дифференциальное представление (22) даёт возможность легко получать разного рода рекуррентные соотношения для радиальных интегралов. Несколько таких соотношений приведено в **Приложении Г.4**.

Отметим также, что разработанная техника может быть использована для вычисления двухцентровых кулоновских интегралов, а также интегралов со штурмовскими функциями.

Результаты **главы 3** опубликованы в статьях [[A12](#), [A13](#), [A14](#), [A15](#)].

В **главе 4** рассматривается параметризация поляризованной зависимости амплитуд и сечений процессов однофотонной фрагментации атомов и молекул. В **разделе 4.1** получена параметризация амплитуды  $T$  однофотонной фрагментации в дипольном приближении,

$$T = \langle \{\mathbf{p}\} | \mathbf{d} \cdot \mathbf{e} | \Phi_i \rangle,$$

где  $\Phi_i$  – начальное состояние,  $\mathbf{e}$  и  $\mathbf{d}$  – векторы поляризации фотона и дипольного момента,  $\{\mathbf{p}\}$  обозначает набор асимптотических импульсов фрагментов. Параметризация основана на использовании разложения вектора поляризации фотона по базису пары векторов асимптотических импульсов фрагмен-



тов,

$$\mathbf{e} \sin^2 \theta = \kappa_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) - \kappa_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2) + [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2] (\mathbf{e} \cdot [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]),$$

где  $\kappa_{1,2} = [\hat{\mathbf{p}}_{1,2} \times [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]]$  и  $\theta$  – угол между  $\hat{\mathbf{p}}_1$  и  $\hat{\mathbf{p}}_2$  (при  $\theta = 0$  для разложения вектора поляризации надо выбрать другую пару импульсов). В итоге, амплитуду любого процесса однофотонной  $N$ -частичной фрагментации можно записать в виде

$$T = \alpha_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1) + \alpha_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2) + A (\mathbf{e} \cdot [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2]), \quad (23)$$

где скалярные коэффициенты амплитуды равны

$$\begin{aligned} \alpha_{j+1} &= (-1)^j \frac{\langle \{\mathbf{p}\} | \kappa_{2-j} \cdot \mathbf{d} | \Phi_i \rangle}{\sin^2 \theta}, \quad j = 0, 1, \\ A &= \frac{\langle \{\mathbf{p}\} | [\hat{\mathbf{p}}_1 \times \hat{\mathbf{p}}_2] \cdot \mathbf{d} | \Phi_i \rangle}{\sin^2 \theta}. \end{aligned}$$

Параметры  $\alpha_1, \alpha_2, A$  не зависят от направления и поляризации фотона и являются функциями углов между векторами импульсов.

Отметим, что для двухэлектронной фотоионизации основного состояния гелия  $A = 0$  из-за закона сохранения чётности.

Параметризация (23) является универсальной и применима для описания произвольных процессов однофотонной фрагментации. В качестве примера, в п. 4.1.2 рассматривается полная фрагментация молекулы водорода:  $H_2 + \hbar\omega \rightarrow p + p + e + e$ . Там же приведены результаты численного расчёта, основанного на использовании представления волновой функции конечного состояния в виде произведения кулоновских волн [A16].

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 эВ [14]. В п. 4.2.1 на основе метода вычисления тензорных произведений, развитого в работах [A2, A3, A13, A17], получены выражения

для динамических (т.е. не зависящих от поляризации фотона) факторов амплитуды. Динамические факторы представлены в виде рядов, содержащих производные от многочленов Лежандра и приведённые матричные элементы операторов дипольного и квадрупольного моментов. Например, для ионизации  $^1S_0$ -состояния квадрупольная амплитуда имеет вид,

$$A_q = g_1 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1)(\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + g_2 (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2)(\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + g_s [(\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_1)(\hat{\mathbf{p}}_2 \cdot \hat{\mathbf{k}}) + (\mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{p}}_2)(\hat{\mathbf{p}}_1 \cdot \hat{\mathbf{k}})],$$

где  $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$  ( $\mathbf{k}$  – волновой вектор фотона),  $g_1 = g(p_1, p_2, \cos \theta)$  и  $g_2 = g(p_2, p_1, \cos \theta)$  и функция  $g$  определена равенством

$$g(p, p', \cos \theta) = \sum_{l=2}^{\infty} \left[ \sum_{l'=l\pm 2} Q_{ll'}(p, p') + \sqrt{6} Q_{ll}(p, p') \right] P_l^{(2)}(\cos \theta),$$

где параметры  $Q_{ll'}$  выражаются через приведённый матричный элемент оператора квадрупольного взаимодействия,

$$Q_{ll'} \sim \langle p_1 p_2, (ll')2 || Q_2 || 0 \rangle.$$

(Выражение для функции  $g_s$  дано в [A18].)

В п. 4.2.2 рассмотрены недипольные эффекты в двойной ионизации атома гелия. Там же указаны условия, оптимальные для наблюдения недипольных эффектов в угловых распределениях, см. рис. 3. 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 в угловых распределениях можно наблюдать уже при суммарной энергии фотоэлектронов  $\sim 80$  эВ [A18, A19, A20]. Учёт недипольных эффектов в методе сильной

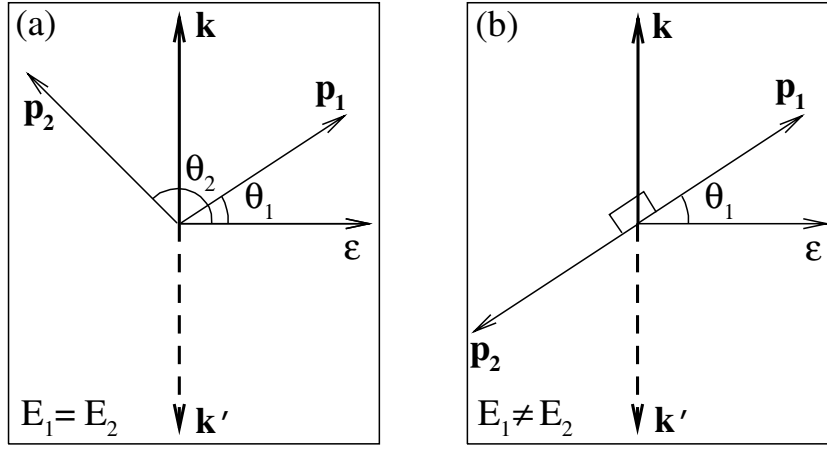


Рис. 3. Геометрии эксперимента, удобные для наблюдения недипольных эффектов в двойной ионизации гелия. Векторы  $\epsilon$ ,  $\hat{\mathbf{k}}$ ,  $\mathbf{p}_1$ ,  $\mathbf{p}_2$  лежат в одной плоскости. Проводятся два измерения: одно для  $(\epsilon, \hat{\mathbf{k}})$ , другое для  $(\epsilon, \hat{\mathbf{k}}' = -\hat{\mathbf{k}})$ . (a) равная энергия электронов; (b) неравная энергия электронов (для  $\hat{\mathbf{p}}_2 = -\hat{\mathbf{p}}_1$ , т.е.  $\theta = 180^\circ$ )

связи (ССС, [A19]) приводит к улучшению согласия с экспериментальными данными (см. рис. 4), что подтверждает важность недипольных эффектов в двойной ионизации гелия при энергии фотона в несколько сот электрон-вольт.

Результаты четвертой главы опубликованы в статьях [A17, A21, A22, A23, A24, A16, A18, A19, A20, A25, A26].

В **Заключении** приведена сводка результатов диссертации.

## Основные результаты диссертации

1. Разработан универсальный метод отделения коллективных угловых переменных в квантовой задаче  $N$  тел, основанный на технике векторного дифференцирования матриц конечных вращений. Получены выражения для коэффициентов колебательно-вращательного разложения гамильтониана, справедливые для произвольного выбора вращающейся координатной системы.
2. Получены явные выражения для базисных векторов, вращательного и

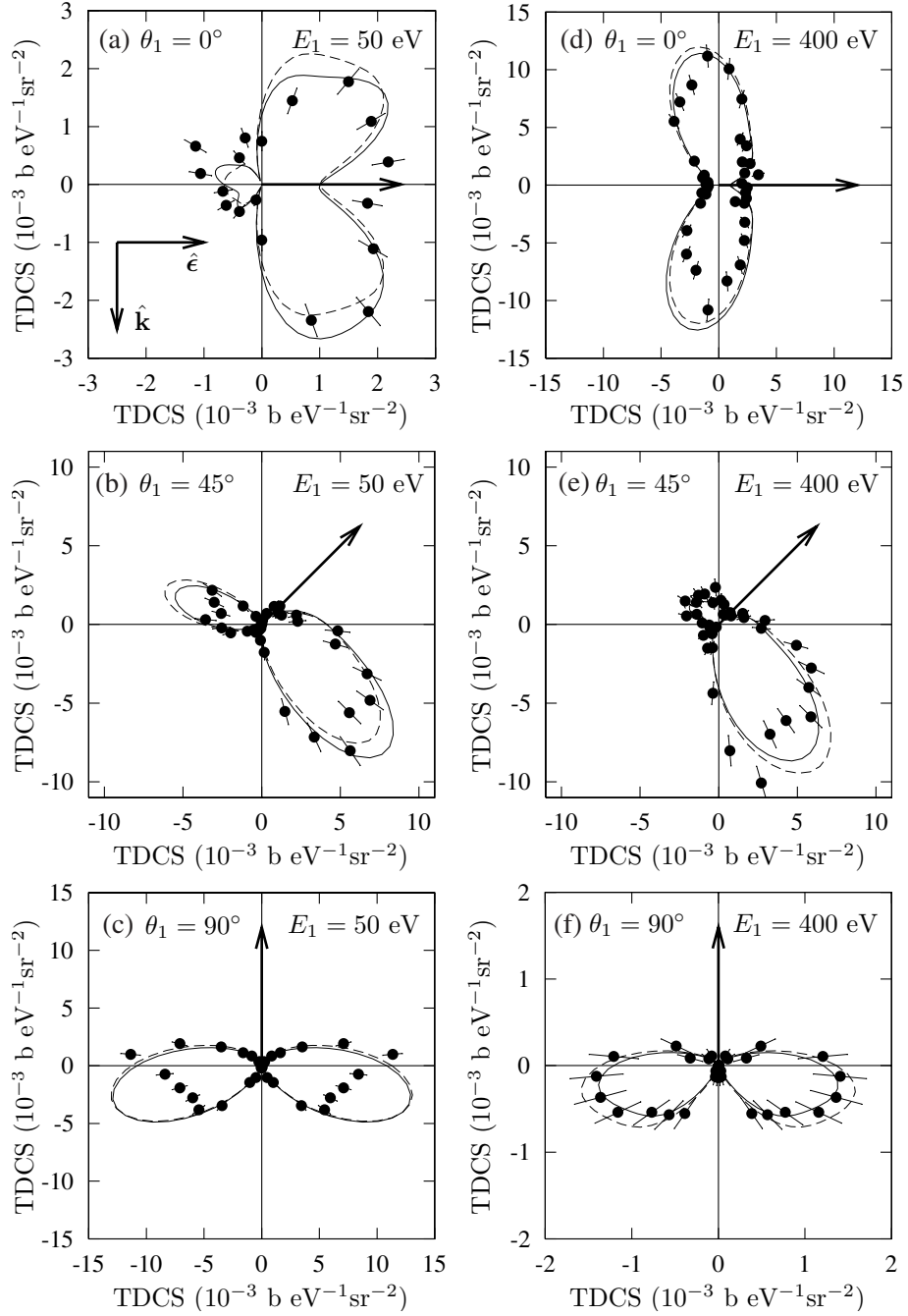


Рис. 4. Дифференциальное сечение (TDCS) двойной ионизации гелия линейно поляризованным фотоном для суммарной энергии фотоэлектронов  $E_1 + E_2 = 450$  эВ. Направление векторов  $\mathbf{k}$  и  $\boldsymbol{\epsilon}$  указано на рис. (а). Угол  $\theta_1$  вылета электрона с энергией  $E_1$  относительно вектора поляризации  $\boldsymbol{\epsilon}$  показан стрелкой. Показано угловое распределение второго электрона как функция угла  $\theta_2$ . Сплошные линии: дипольно-квадрупольное сечение в методе ССС; прерывистые линии: дипольное приближение. Точки с интервалами погрешностей: экспериментальные данные [14]

кориолисова гамильтонианов, соответствующих вращающейся системе координат Экарта в задаче  $N$  тел.

3. Минимальные биполярные гармоники использованы для отделения коллективных углов в задаче  $N$  тел; получены уравнения для соответствующих радиальных функций.
4. Приведён способ отделения коллективных угловых переменных, свободный от калибровочных расходимостей.
5. Получены коллективные мультипольные разложения произведения двух плоских волн, что соответствует импульсному представлению волновой функции трёхчастичного симметричного волчка. Изучены свойства симметрии и правила отбора для мультипольных коэффициентов.
6. Построена техника расчёта матричных элементов с водородными волновыми функциями на основе симметрии Фока. Получено компактное дифференциальное представление матричного элемента оператора  $\exp i(\vec{k} \cdot \vec{r})$  с волновыми функциями атома водорода; получены рекуррентные соотношения для матричных элементов.
7. Предложена универсальная параметризация поляризационной зависимости амплитуд процессов многочастичной ( $N \geq 3$ ) фрагментации, вызванной поглощением одного фотона. Структура параметризации сохраняется при любом числе регистрируемых фрагментов,  $N \geq 3$ .
8. Получена параметризация сечения процесса двухэлектронной фотоионизации атома с учётом недипольных эффектов. Указаны условия, оптимальные для наблюдения таких эффектов в угловых распределениях.

## Список публикаций

- [A1] *A. V. Meremianin, J. S. Briggs.* The irreducible tensor approach in the separation of collective angles in the quantum N-body problem // *Phys. Rep.* — 2003. — Vol. 384, no. 4-6. — Pp. 121–195.
- [A2] *N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace.* Invariant representations of finite rotation matrices and some applications // *Phys. Rev. A.* — 1998. — Vol. 57. — Pp. 3233–3244.
- [A3] *N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. V. Meremianin.* A new technique in the theory of angular distributions in atomic processes: the angular distribution of photoelectrons in single and double photoionization // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* — 1996. — Vol. 29. — Pp. 2711–2737.
- [A4] *J. P. J. Carney, R. H. Pratt, N. L. Manakov, A. V. Meremianin.* Dependence of photon-atom scattering on energy resolution and target angular momentum // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61. — P. 042704.
- [A5] *N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace.* Factorized representation for parity-projected Wigner  $d^j(\beta)$ -matrices // *Phys. Rev. A.* — 2000. — Vol. 61. — P. 022103.
- [A6] *N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace.* Invariant spinor representations of finite rotation matrices // *Phys. Rev. A.* — 2001. — Vol. 64. — P. 032105.
- [A7] *A. V. Meremianin, J. S. Briggs.* Elimination of Body-Frame Singularities in the Separation of Three Collective Angles in Quantum N-Body Problems // *Phys. Rev. Lett.* — 2002. — Vol. 89, no. 20. — P. 200405.
- [A8] *A. V. Meremianin.* Body frames in the separation of collective angles

in quantum N-body problems // *J. Chem. Phys.* — 2004. — Vol. 120. — Pp. 7861–7876.

- [A9] *A. V. Meremianin*. Collective Multipole Expansions and the Perturbation Theory in the Quantum Three-Body Problem // *Few-Body Systems*. — 2009. — Vol. 45, no. 1. — Pp. 11–23.
- [A10] *A. V. Meremianin*. The Kinematical Model of the Sudden Break-up of the Three-Body Rigid Rotator // *Few-body Systems*. — 2006. — Vol. 38, no. 2-4. — Pp. 199–203.
- [A11] *A. V. Meremianin*. The three-body rigid rotator and multipole expansions of the three-body continuum // *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2005. — Vol. 38. — Pp. 757–775.
- [A12] *A. V. Meremianin*. Multipole expansions in four-dimensional hyperspherical harmonics // *J. Phys. A: Mathematical and General*. — 2006. — Vol. 39. — Pp. 3099–3112.
- [A13] *N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace*. Multipole expansions of irreducible tensor sets and some applications // *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2002. — Vol. 35. — Pp. 77–91.
- [A14] *A. V. Meremianin, J-M. Rost*. Multipole expansions and Fock symmetry of the Hydrogen atom // *J. Phys. A: Mathematical and General*. — 2006. — Vol. 39. — Pp. 12427–12445.
- [A15] *A. V. Meremianin*. Hyperspherical harmonics with arbitrary arguments // *Journal of Mathematical Physics*. — 2009. — Vol. 50, no. 1. — P. 013526.
- [A16] *M Walter, A. V. Meremianin, J. S. Briggs*. Multi-particle photoionization

by a single photon // *J. Phys. B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2003. — Vol. 36. — Pp. 4561–4579.

- [A17] *Н. Л. Манаков, А. В. Меремьянин*. Поляризационно-угловая структура и эллиптический дихроизм трёхфотонных связанно-связанных переходов в атомах // *ЖЭТФ*. — 1997. — Т. 84. — С. 1984.
- [A18] *А. Y. Istomin, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace*. Nondipole effects in photo double ionization of He by a vuv photon // *Phys. Rev. Lett.* — 2004. — Vol. 92. — P. 063002.
- [A19] *А. Y. Istomin, A. F. Starace, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. S. Kheifets, I. Bray*. Nondipole effects in double photoionization of He at 450 eV excess energy // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2006. — Vol. 39, no. 2. — Pp. L35–L43.
- [A20] *А. Y. Istomin, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace*. Nondipole effects in the triply differential cross section for double photoionization of He // *Phys. Rev. A*. — 2005. — Vol. 71. — P. 052702.
- [A21] *N. L. Manakov, S. I. Marmo, A. V. Meremjanin*. Circular dichroism in VUV- and X-ray atom scattering caused by virtual photoionization // *J. Electron Spectrosc. Relat. Phenom.* — 1996. — Vol. 79. — Pp. 331–334.
- [A22] *N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. Maquet, J. P. J. Carney*. Photon-polarization effects and their angular dependence in relativistic two-photon bound-bound transitions // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics*. — 2000. — Vol. 33, no. 20. — Pp. 4425–4446.
- [A23] *N. L. Manakov, A. V. Meremianin, J. P. J. Carney, R. H. Pratt*. Circular dichroism effects in atomic x-ray scattering // *Phys. Rev. A*. — 2000. — March. — Vol. 61. — P. 032711.



- [A24] *M. Walter, A. Meremianin, J. S. Briggs.* Shape-Amplitude Representation of N-Particle Photofragmentation Processes // *Phys. Rev. Lett.* — 2003. — Vol. 90. — P. 233001.
- [A25] *A. Y. Istomin, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. F. Starace.* Circular dichroism at equal energy sharing in photo-double-ionization of He // *Phys. Rev. A.* — 2004. — Vol. 70. — P. 010702(R).
- [A26] *A. Y. Istomin, A. F. Starace, N. L. Manakov, A. V. Meremianin, A. S. Kheifets, I. Bray.* Parametrizations and dynamical analysis of angle-integrated cross sections for double photoionization including nondipole effects // *Phys. Rev. A.* — 2005. — Vol. 72, no. 5. — P. 052708.

## Цитированная литература

- [1] *Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский.* Квантовая теория углового момента. — Ленинград: Наука, 1975.
- [2] *Yu. F. Smirnov, K. V. Shitikova.* The K-harmonics method and shell model [for nuclei with mass  $> 4$ ] // *Sov. J. Part. Nucl.* — 1977. — Vol. 8, no. 4. — Pp. 344–370.
- [3] *С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. — Москва: Наука, 1985.
- [4] *G. Breit.* Separation of Angles in the Two-Electron Problem // *Phys. Rev.* — 1930. — Vol. 35, no. 6. — Pp. 569–578.
- [5] *А. А. Квицинский, С. П. Меркурьев.* Плоская волна в системе трёх частиц с нулевым полным орбитальным моментом // *Алгебра и анализ.* — 1990. — Т. 2, no. 4. — Сс. 182–200.

- [6] *R. G. Littlejohn, M. Reinsch.* Gauge fields in the separation of rotations and internal motions in the n-body problem // *Rev. Mod. Phys.* — 1997. — Vol. 69, no. 1. — Pp. 213–275.
- [7] *C. Eckart.* Some Studies Concerning Rotating Axes and Polyatomic Molecules // *Phys. Rev.* — 1935. — Vol. 47. — Pp. 552–558.
- [8] *J. O. Hirschfelder, E. Wigner.* Separation of rotational coordinates from the Schrödinger equation for N particles // *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* — 1935. — Vol. 21. — Pp. 113–119.
- [9] *J. Tennyson, B. T. Sutcliffe.* The ab initio calculation of the vibrational-rotational spectrum of triatomic systems in the close-coupling approach, with RCN and  $H_2Ne$  as examples // *J. Chem. Phys.* — 1982. — Vol. 77, no. 7. — Pp. 4061–4072.
- [10] *R. H. Dalitz.* On the analysis of  $\tau$ -meson data and the nature of the  $\tau$ -meson // *Philos. Mag.* — 1953. — Vol. 44. — P. 1068.
- [11] *W. Fock.* Zur Theorie des Wasserstoffatoms // *Z. Phys.* — 1935. — Vol. 98. — P. 145.
- [12] *M. Lieber.* O(4) Symmetry of the Hydrogen Atom and the Lamb Shift // *Phys. Rev.* — 1968. — Vol. 174. — Pp. 2037–2054.
- [13] *W. Gordon.* The calculation of matrices with the Hydrogen atom // *Ann. Phys.* — 1929. — Vol. 2, no. 8. — Pp. 1031–1056.
- [14] *A. Knapp, A. Kheifets, I. Bray et al.* Photo double ionization of helium 100 eV and 450 eV above threshold: I. Linearly polarized light // *Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics.* — 2005. — Vol. 38, no. 6. — Pp. 615–633.

Полный текст диссертации доступен в сети Интернет по адресу:

[http://www.phys.vsu.ru/~meremianin/Meremianin\\_DSc.pdf](http://www.phys.vsu.ru/~meremianin/Meremianin_DSc.pdf)