

для $\psi_j(\mathbf{R})$, описывающих движение медленной подсистемы в эфф. потенциалах $\mathcal{E}_i(\mathbf{R})$ и

$$U_{ij}(\mathbf{R}) = \int \varphi_i^*(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \hat{T}_M(\mathbf{R}) \varphi_j(\mathbf{r}; \mathbf{R}) d\mathbf{r},$$

создаваемых движением быстрой подсистемы.

Эта система ур-ний полностью эквивалентна исходному ур-нию Шрёдингера с гамильтонианом $\hat{H}(\mathbf{r}, \mathbf{R})$. Она может быть использована для прецизионных расчётов свойств квантовых систем, точность к-рых сравнима с точностью наилучших расчётов, проведённых вариационными методами. Такое описание квантовых систем получило в англоязычной литературе назв. метода возмущённых стационарных состояний; в совр. литературе используют также термин «адиабатич. представление», наиб. адекватно отражающий суть и особенности обсуждаемого подхода.

Собственно А. п. в его первонач. формулировке, известное в литературе как Борна — Оппенгеймера метод, состоит в предположении, что $U_{ij}(\mathbf{R}) = 0$. В этом случае волновую ψ -цию системы можно приближённо представить в виде произведения:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \psi_i(\mathbf{R}),$$

т. е. движения быстрой и медленной подсистем в данном приближении независимы. Для уточнения такого приближённого решения необходимо учесть неадиабатич. матричные элементы $U_{ij}(\mathbf{R})$, осуществляющие связь между движениями медленной и быстрой подсистем.

«Классич. область» приложения А. п. в квантовой механике — теория молекулярных спектров, а методически наиболее простой случай его использования — молекулярный ион водорода H_2^+ . В теории спектров молекул оператор $\hat{T}_6(\mathbf{r})$ соответствует движению электронов, а оператор $T_M(\mathbf{R})$ — движению ядер в молекуле. Следуя Борну и Оппенгеймеру, можно ввести параметр неадиабатичности $\kappa = (m/M)^{1/4}$, где m — масса электрона, а M — приведённая масса ядер молекулы. Физ. смысл параметра κ — отношение среднеквадратичного отклонения ядер от положения равновесия к размеру молекулы, к-рый определяется протяжённостью электронного облака. Используя параметр κ , полную энергию \mathcal{E} системы можно приближённо представить в виде

$$\mathcal{E} \approx \mathcal{E}_{\text{ад}} = \mathcal{E}_{\text{эл}} + \mathcal{E}_{\text{кол}} + \mathcal{E}_{\text{вр}},$$

где $\mathcal{E}_{\text{эл}} \approx \mathcal{E}_i(R_0)$ — энергия электронов в молекуле, приближённо равная значению термина $\mathcal{E}_i(R)$ при равновесном расстоянии R_0 между ядрами, $\mathcal{E}_{\text{кол}} \approx \kappa^2 \mathcal{E}_{\text{эл}}$ — энергия колебаний ядер вблизи положения равновесия R_0 , $\mathcal{E}_{\text{вр}} \approx \kappa^4 \mathcal{E}_{\text{эл}}$ — вращат. энергия молекулы.

Указанный результат для $\mathcal{E}_{\text{ад}}$ следует из ур-ний адиабатич. подхода при отбрасывании матричных элементов $U_{ij}(\mathbf{R})$ при $i \neq j$. Недиагональные матричные элементы $U_{ij}(\mathbf{R})$ имеют порядок малости $\sim \kappa^4 = m/M$ и описывают связь колебаний с вращениями молекулы и другие, более тонкие эффекты. Их учёт приводит к появлению в разложении для \mathcal{E} по степеням κ членов $\sim \kappa^6$ и более высоких.

А. п. эффективно используется также в квантовой химии для построения волновых ψ -ций многоэлектронных молекул, в атомной физике при описании медленных столкновений атомов и молекул и в теории твёрдых тел.

Лит.: Борн М., Хуан Кунь, Динамическая теория кристаллических решеток, пер. с англ., М., 1958; Давыдов А. С., Квантовая механика, 2 изд., М., 1973; Слэтер Дж., Электронная структура молекул, пер. с англ., М., 1965; Никитин Е. Е., Уманский С. Я., Неадиабатические переходы при медленных атомных столкновениях, М., 1979.

П. И. Пономарёв.
АДИАБАТИЧЕСКОЕ РАЗМАГНИЧИВАНИЕ — см. Магнитное охлаждение.

АДРОННЫЕ АТОМЫ — атомоподобные системы, в к-рых положительно заряж. ядро за счёт кулоновского притяжения удерживает отрицат. адрон. Наблюдались пионные (π^-), каонные (K^-), антипротонные (\bar{p}) и гиперонные (Σ^-) атомы. Изучение А. а. даёт информацию и об адроне и о ядре (масса и магн. момент адрона, распределение вещества в ядре, поляризуемость адрона и ядра), а также об их взаимодействии (рассеяние и поглощение адрона ядром).

А. а. образуется при замедлении отрицат. адрона в веществе. Адрон захватывается атомом с образованием высоковозбуждённого состояния с главным квантовым числом $n > (m/m_e)^{1/2}$, где m — масса адрона, m_e — масса электрона (при таких n радиус атомной орбиты адрона, обратно пропорциональный его массе, сравним с радиусами электронных орбит). Возбуждение атома снимается за счёт каскада оже-переходов и электрич. дипольных переходов адрона с одного уровня на другой, сопровождающихся испусканием рентг. излучения (см. Мультипольное излучение, оже-спектроскопия). При этом преимущественно заселяются круговые орбиты, т. е. состояния с $l = n - 1$, где l — момент кол-ва движения. Когда адрон достигает состояний с небольшими n , становятся существ. эффекты сильного взаимодействия, что приводит к захвату адрона ядром.

Атомные уровни, между к-рыми происходит переход адрона, сопровождаемый рентг. излучением, имеют в осн. такую же природу, что и уровни в обычных электронных атомах. Их положение приближённо описывается решением Клейна — Гордона уравнения для пионных атомов или Дирака уравнения для K^- , \bar{p} и Σ^- -атомов в случае точечного ядра с зарядом Z . Т. к. масса адрона много больше массы электрона, то в состояниях с $n < 5-6$ адрон находится внутри самой глубокой электронной оболочки, где экранирование поля ядра несущественно, т. е. имеет место водородоподобная система (поправки на экранирование существенны лишь при больших n). Небольшие поправки возникают из-за учёта конечности размеров ядра и поляризации вакуума. Кроме того, для низких орбит существенны эффекты, связанные с сильным адрон-ядерным взаимодействием. Радиус орбиты адрона, как правило, много больше размера ядра, напр. для ${}^7\text{Li}$ радиусы $1s$ -состояний пионного и антипротонного атомов составляют 67 фм и 10 фм (для обычного атома $1,8 \cdot 10^4$ фм). Тем не менее с нек-рой долей вероятности адрон находится внутри ядра, что приводит к сдвигу и уширению уровня энергии за счёт сильного взаимодействия. Сдвиг уровня $\Delta\mathcal{E}$ связан с длиной адрон-ядерного рассеяния a (т. е. с амплитудой рассеяния при нулевой энергии системы, см. Рассеяние микрочастиц) соотношением, к-рое для s -состояний имеет вид

$$\Delta\mathcal{E} = -\frac{2\pi}{\mu} a |\psi(0)|^2. \quad (1)$$

Здесь μ — приведённая масса адрона и ядра, а $\psi(0)$ — значение кулоновской волновой ψ -ции адрона в центре ядра. Уширение уровня позволяет определить вероятность захвата адрона ядром.

При эксперим. исследовании А. а. измеряется энергия рентг. излучения (с помощью полупроводниковых детекторов либо кристалл-дифракц. спектрометров). Достигнутая точность в определении положения линии составляет 2 эВ. Как правило, ширины $\Gamma > 100$ эВ определяются непосредственно, а $\Gamma \sim 0,1-10$ эВ — из соотношения интенсивностей разл. линий (рис. 1). Из рис. видно, как линия $2p-1s$ пионного атома выделяется среди интенсивных линий, принадлежащих мюонным атомам, возникновение к-рых неизбежно вследствие распада π^- -мезонов на лету (слева — калибровочная линия).

Наиб. изучены пионные атомы. Измерения сдвигов и ширины переходов (обусловленных сдвигом и ушире-