

УДК 530.145

НЕКОТОРЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ЧАСТИЦ

В. В. Пупышев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ВВЕДЕНИЕ	843
ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И УГЛОВЫЕ БАЗИСЫ	844
ФИЗИЧЕСКИЕ И ЛОЖНЫЕ СЛАГАЕМЫЕ	850
Остаточные и ложные слагаемые.	850
Анализ ложных слагаемых.	852
Физические слагаемые.	864
ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ЧАСТИЦ	869
Построение и критерий существования точных решений.	871
Примеры точных решений.	876
Приближенные решения.	882
АСИМПТОТИКИ ПРИ МАЛЫХ РАССТОЯНИЯХ	883
Построение асимптотик при $r \rightarrow 0$ в \mathcal{R}^6 .	885
Построение асимптотик при $r \rightarrow 0$ в \mathcal{R}_+^2 .	888
Асимптотики в точках парных столкновений.	895
ВАРИАЦИОННЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ	898
СПЛАЙН-РАЗЛОЖЕНИЯ ФАДДЕЕВСКИХ КОМПОНЕНТ	904
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	910
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	911

УДК 530.145

НЕКОТОРЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ В ЗАДАЧЕ ТРЕХ ЧАСТИЦ

В. В. Пупышев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Анализируются разбиения парных взаимодействий на физические и ложные слагаемые и описывается построение точных решений уравнений Фаддеева с потенциалами центробежного типа. Затем обсуждаются выводы асимптотик трехчастичных волновых функций и их компонент в точках тройного и парных столкновений и поясняются существенные особенности некоторых вариационных и сплайновых аппроксимаций.

In the review, we analyze the splitting of two-body interactions into physical and spurious terms and describe the construction of exact solutions to the Faddeev equations with centrifugal interactions. Then we discuss the derivations of the asymptotics for wave functions and their components at the triple- and double-collision points, and we clarify essential peculiarities of some variational and splines approximations.

ВВЕДЕНИЕ

Настоящая работа является анонсированным продолжением предыдущего обзора [1] и посвящена особым разложениям в задаче трех частиц.

Под разложением (разбиением) числа, оператора, функции или множества обычно понимается их представление в виде суммы двух или большего числа слагаемых, обладающих определенными свойствами, продиктованными особенностями решаемой задачи.

Однозначные и неоднозначные разложения широко применяются в различных разделах математики [2–7], в квантовой механике [8], в теории атомного ядра [9–11], потенциального рассеяния [12, 13] и углового момента [14], в адиабатическом [15] и вариационном [16] подходах, а также в методе гипергармоник [17–19]. На этом методе основаны авторские исследования [20–31] разложений в задаче трех частиц.

Обзор состоит из восьми разделов. В разд. 1 описываются основные обозначения и приводятся уравнения Шредингера [32–36] и Фаддеева [13, 37–40] в базисах бисферических гармоник и D -функций Вигнера [14].

Разложения волновых функций и их компонент на ложные (духовые, запрещенные принципом Паули) слагаемые [9, 12, 41–45] давно известны и хорошо изучены. Разбиения парных взаимодействий на ложные (взаимно компенсирующие друг друга при суммировании в полное взаимодействие)

и остаточные слагаемые [24–26, 46] исследованы не столь подробно. Такие слагаемые анализируются в разд. 2.

Широко используемые для решения задачи трех частиц разложения искомых функций по бисферическим [14] и гиперсферическим [19] гармоникам, как правило, являются бесконечными рядами. Исключение составляют ложные решения [1] уравнений Фаддеева [13] и точные решения этих уравнений в случае взаимодействий осцилляторного [10, 18, 26] и центробежного [27–29, 47] типов. Теорема о существовании и единственности решений уравнений Фаддеева с потенциалами центробежного типа в общем случае не доказана. Данный в разд. 3 анализ известных точных решений [27–29, 47] таких уравнений в некоторой степени восполняет этот пробел.

Знание асимптотических разложений трехчастичных волновых функций при малых и больших расстояниях между частицами является решающим для физически достоверного и математически корректного исследования атомных, мезомолекулярных и ядерных реакций, протекающих в результате двух- и трехчастичных столкновений. Различные подходы к построению асимптотических разложений волновых функций в точках тройного [30, 31, 38, 48–53] и парного [35, 38, 54–61] столкновений обсуждаются в разд. 4. Асимптотики волновых функций и их фаддеевских компонент при больших расстояниях мы не рассматриваем, потому что таким асимптотикам посвящена монография [13] и обзоры [39, 40].

К настоящему времени точность вариационных расчетов энергий связанных состояний трех заряженных частиц не удалось превзойти в рамках других подходов, в том числе в рамках вычислительных алгоритмов, основанных на сплайн-функциях [6, 7]. Существенные особенности вариационных разложений [32, 36, 62–80], обеспечивающих высокую точность вычислений, поясняются в разд. 5.

Наряду с успехами вариационных подходов к решению задачи трех частиц в рамках уравнения Шредингера в последнее время наметился заметный прогресс в численном интегрировании уравнений Фаддеева сеточными методами. Эффективность таких методов, основанных на конечно-разностных аппроксимациях [81–88] и сплайн-разложениях [89–103] фаддеевских компонент обсуждается в разд. 6.

Итоговые замечания и интересные, но не решенные проблемы, связанные с рассмотренными разложениями, приведены в заключительном разделе.

1. ОСНОВНЫЕ ОБОЗНАЧЕНИЯ И УГЛОВЫЕ БАЗИСЫ

В настоящем обзоре полностью сохранены все обозначения, принятые ранее [1]. Поэтому перечислим лишь основные определения.

Используем систему единиц, в которой заряд электрона e^- и константа Планка \hbar равны единице. В трехмерном координатном пространстве \mathcal{R}^3 фиксируем декартову систему координат S с оортами \hat{e}_1, \hat{e}_2 и \hat{e}_3 и начальной точкой O , совпадающей с центром масс исследуемой системы (p_1, p_2, p_3) трех частиц p_1, p_2 и p_3 с массами m_1, m_2, m_3 и зарядами z_1, z_2, z_3 . Пусть в этой системе \mathbf{a}_{ij} — разность радиусов-векторов \mathbf{a}_i и \mathbf{a}_j частиц p_i и p_j , а \mathbf{x}_k и \mathbf{y}_k — векторы Якоби [19]:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{ij}}(\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i), & \mu_{ij} &\equiv \frac{2m_i m_j}{m_i + m_j}, \\ \mathbf{y}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{k,ij}} \left(\frac{m_i \mathbf{a}_i + m_j \mathbf{a}_j}{m_i + m_j} - \mathbf{a}_k \right), & \mu_{k,ij} &\equiv \frac{2m_k(m_i + m_j)}{m_1 + m_2 + m_3}, \end{aligned}$$

где индексы i, j, k образуют циклическую перестановку триады индексов $(1, 2, 3)$: индекс i переходит в k , j — в i , k — в j . Векторы \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i объединим в шестимерные векторы $\mathbf{r}_i = (\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) \in \mathcal{R}^6$ с гиперсферическими координатами (r, Ω_i) , где $r \equiv (x_i^2 + y_i^2)^{1/2}$ — гиперрадиус; $\Omega_i \equiv (\hat{x}_i, \hat{y}_i, \varphi_i)$ — набор из пяти гиперсферических углов: \hat{x}_i и \hat{y}_i — пары сферических углов векторов \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i , $\varphi_i \equiv \text{arctg}(y_i/x_i)$. Обозначим $u_k \equiv \cos \theta_k$, где θ_k — угол между векторами \mathbf{x}_k и \mathbf{y}_k . Отметим, что каждые два $(k \neq i)$ из трех $(k, i = 1, 2, 3)$ декартовых $(\langle \mathbf{r}_i | = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |)$ и соответствующих им гиперсферических $(\langle \mathbf{r}_i | = \langle r_i, \Omega_i |)$ координатных представлений связаны кинематическими преобразованиями [1, 23], зависящими от кинематических углов

$$\gamma_{ki} \equiv g_{ki} \arctg \left[m_j(m_1 + m_2 + m_3)/m_k m_i \right]^{1/2}, \quad (1)$$

которые при $(k, i) = (1, 2), (3, 1), (2, 3)$ удовлетворяют равенствам

$$g_{ki} = -g_{ik} = 1, \quad 0 \leq \gamma_{ki} \leq \pi/2, \quad \sum_{(k,i)} \gamma_{ki} = \pi. \quad (2)$$

Пусть P — оператор инверсии $(\mathbf{r}_i \rightarrow -\mathbf{r}_i)$; \mathbf{l}_{x_i} и \mathbf{l}_{y_i} — операторы угловых моментов, сопряженные векторам \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i ; $\mathbf{l} \equiv \mathbf{l}_{x_i} + \mathbf{l}_{y_i}$ — оператор полного углового момента с проекциями l_i на орты \hat{e}_i системы S ; P_{ij} — оператор перестановки частиц p_i и p_j ; S^+ — оператор симметризации по любым перестановкам в системе (p_1, p_2, p_3) . Символами H_0 и \mathbf{L}^2 обозначим свободный трехчастичный гамильтониан и квадрат оператора гипермомента:

$$H_0(\mathbf{r}_i) = -r^{-5} \partial_r (r^5 \partial_r) + r^{-2} \mathbf{L}^2(\Omega_i),$$

$$\mathbf{L}^2(\Omega_i) = -\partial_{\varphi_i}^2 - 4 \text{ctg} 2\varphi_i \partial_{\varphi_i} + \mathbf{L}_K^2(\Omega_i), \quad \mathbf{L}_K^2(\Omega_i) \equiv \mathbf{l}_{x_i}^2 / \cos^2 \varphi_i + \mathbf{l}_{y_i}^2 / \sin^2 \varphi_i.$$

Для каждой ($k = 1, 2, 3$) пары частиц p_i и p_j определим оператор взаимодействия V_k в его собственном декартовом представлении $\langle \mathbf{r}_k |$:

$$\langle r_k | V_k \rangle = V_k(\mathbf{x}_k) \equiv V_k(x_k) I_k^d, \quad I_k^d \equiv \sum_{b \leq d} P_k^b, \quad (3)$$

$$P_k^b \equiv \sum_{\beta = -b}^b |Y_{b\beta}(\hat{x}_k)\rangle \langle Y_{b\beta}(\hat{x}_k)|,$$

где $Y_{b\beta}$ — сферическая функция [14]. Если $b = 0, 1, \dots, d = \infty$, то I_k^d — сумма всех проекторов P_k^b на состояния частиц p_i и p_j с угловыми моментами $\ell_{x_k} = b$ — единичный оператор: $I_k^d = I$, а V_k — центральное взаимодействие ($V_k(\mathbf{x}_k) = V_k(x_k)$), действующее как оператор умножения на функцию $V_k(x_k)$. В любом другом случае взаимодействие $V_k(\mathbf{x}_k)$ — нецентральное. Например, при $b = d = 0$ это взаимодействие S -волновое.

Состояние $|\varepsilon\rangle$ системы (p_1, p_2, p_3) характеризуется полным набором ε сохраняющихся квантовых чисел. Если хотя бы одно из взаимодействий (3) нецентральное, то сохраняется полная энергия E , квадрат $\ell(\ell + 1)$ полного углового момента и его проекция m на орт \hat{e}_3 , т. е. $\varepsilon = (E, \ell, m)$. Если все три взаимодействия (3) центральные, то сохраняется и собственное значение $\sigma = 1$ или $\sigma = -1$ оператора инверсии. В этом случае $\varepsilon = (E, \ell, m, \sigma)$.

Решение $\Psi^\varepsilon = \langle \mathbf{r}_i | \varepsilon \rangle$ уравнения Шредингера [8]

$$(H - E)\Psi^\varepsilon = (H_0 + V - E)\Psi^\varepsilon = 0, \quad V \equiv \sum_{k=1}^3 V_k \quad (4)$$

и сопоставленное этому решению формулой

$$\Psi^\varepsilon = \sum_{k=1}^3 \Psi_k^\varepsilon \quad (5)$$

решение $(\Psi_1^\varepsilon, \Psi_2^\varepsilon, \Psi_3^\varepsilon)$ системы уравнений Фаддеева [13] в \mathcal{R}^6

$$(H_0 - E)\Psi_i^\varepsilon = -V_i \sum_{k=1}^3 \Psi_k^\varepsilon, \quad i = 1, 2, 3, \quad (6)$$

будем исследовать в классе \mathcal{B}^ε , состоящем из квадратично-интегрируемых на единичной сфере S^5 в \mathcal{R}^6 функций, обладающих данным набором квантовых чисел ε . В \mathcal{B}^ε полные и ортонормированные на четырехмерном торе T_{xy}^4 и гиперсфере S^5 угловые базисы образуют только те бисферические [14]

$$\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \equiv \sum_{\alpha = -a}^a C_{a\alpha b\beta}^{\ell m} Y_{a\alpha}(\hat{y}_i) Y_{b\beta}(\hat{x}_i), \quad \mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{1}, \quad (7)$$

и, соответственно, гиперсферические гармоники [21]

$$\begin{aligned} Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i) &= 2 \operatorname{cosec} 2\varphi_i \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i), \\ L &= a + b + 2n, \quad n = 0, 1, \dots, \end{aligned} \quad (8)$$

$$\tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) \equiv N_{Lab} (\sin \varphi_i)^{a+1} (\cos \varphi_i)^{b+1} P_n^{(a+1/2, b+1/2)}(\cos 2\varphi_i), \quad (9)$$

что индексы ℓ и m те же, что и в наборе ε , а индексы a и b подчиняются дополнительному условию четности $(-1)^{a+b} = \sigma$, если $\varepsilon = (E, \ell, m, \sigma)$.

Гипергармоники (8) — собственные функции оператора \mathbf{L}^2 :

$$[\mathbf{L}^2 - L(L+4)] Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i) = 0 \quad (10)$$

и несобственные для оператора кинематического преобразования [23]:

$$K(\gamma_{ki}) = P \exp(-i\gamma_{ki} J), \quad J \equiv -i \sum_{\mu=1}^3 (x_{i\mu} \partial_{y_{i\mu}} - y_{i\mu} \partial_{x_{i\mu}}), \quad x_{i\mu} \equiv (\mathbf{x}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_\mu),$$

сохраняющего квантовые числа L, ℓ, m, σ , но не сохраняющего числа a и b :

$$K(\gamma_{ki}) Y_{La'b'}^{\ell m}(\Omega_i) \equiv Y_{La'b'}^{\ell m}(\Omega_k(\Omega_i; \gamma_{ki})) = \sum_{ab} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i). \quad (11)$$

Функции $\langle \varphi_i | L\tilde{a}b \rangle = \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i)$, заданные формулами (9), ортонормированы на отрезке $0 \leq \varphi_i \leq \pi/2$ и являются собственными функциями дифференциального оператора \tilde{L}_{ab}^2 и интегрального оператора $h_{aba'b'}^\ell$:

$$\langle L\tilde{a}b | L'\tilde{a}b \rangle = \int_0^{\pi/2} d\varphi_i \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) \tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i) = \delta_{LL'},$$

$$[\tilde{L}_{ab}^2 - (L+2)^2] |L\tilde{a}b\rangle = 0, \quad (12)$$

$$\tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i) \equiv -\partial_{\varphi_i}^2 + a(a+1)/\sin^2 \varphi_i + b(b+1)/\cos^2 \varphi_i,$$

$$\langle \varphi_i | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | \tilde{W}_{La'b'}(\varphi_k) \rangle = \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i). \quad (13)$$

Если в уравнениях (6) с центральными взаимодействиями заменить искомые функции Ψ_i^ε , $i = 1, 2, 3$, их рядами

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = 2r^{-2} \operatorname{cosec} 2\varphi_i U_i^\ell(\mathbf{r}_i), \quad U_i^\ell(\mathbf{r}_i) = \sum_{ab} U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{y}_i, \hat{x}_i) \quad (14)$$

и спроектировать каждое из трех получившихся уравнений на его собственный бисферический базис, то в двумерной области

$$\mathcal{R}_+^2 \equiv \{(r, \varphi_i) : 0 \leq r \leq \infty, 0 \leq \varphi_i \leq \pi/2\}$$

получится бесконечная по индексам a, b и a', b' система уравнений [1]:

$$\begin{aligned} & \left(\tilde{H}_{0ab}(r, \varphi_i) + E \right) U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) = \\ & = V_i(r \cos \varphi_i) \left[U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle r, \varphi_i | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'}^\ell(r, \varphi_k) \rangle \right], \quad (15) \end{aligned}$$

$$\tilde{H}_{0ab}(r, \varphi_i) \equiv \partial_r^2 + r^{-1} \partial_r - r^{-2} \tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i), \quad i = 1, 2, 3.$$

Рядам (14) для функций Ψ_i отвечает следующее разложение их суммы (5):

$$\begin{aligned} \Psi^\varepsilon(\mathbf{r}_i) &= 2r^{-2} \operatorname{cosec} 2\varphi_i \sum_{ab} \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \times \\ & \times \left[U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle r, \varphi_i | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'}^\ell(r, \varphi_k) \rangle \right]. \quad (16) \end{aligned}$$

В уравнении (4) с центральными взаимодействиями оператор H инвариантен относительно трехмерных вращений плоскости \mathcal{P} трех частиц и коммутирует с операторами l^2 , l_3 и P . Поэтому, как впервые было показано в [32, 33], верно конечное разложение по угловому базису из собственных для операторов l^2 и l_3 функций Вигнера $D_{mm'}^{\ell*}$:

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} D_{mm'}^{\ell*}(\omega_i) F_{m'}^\ell(\mathbf{q}_i), \quad \varepsilon = (E, \ell, m), \quad i = 1, 2, 3. \quad (17)$$

Здесь $\omega_i = (\alpha_i, \beta_i, \gamma_i)$ — совокупность углов Эйлера [14], описывающая ориентацию подвижной системы координат S_i с ортами $\hat{e}_1^i, \hat{e}_2^i, \hat{e}_3^i$ относительно неподвижной системы S ; \mathbf{q}_i — используемая совокупность трех координат, характеризующих расположение частиц на их плоскости \mathcal{P} и изменяющихся в соответствующей трехмерной области \mathcal{R}_q^3 . Как и в работах [15, 32–36], считаем, что начало O_3 системы S_3 совпадает с центром масс частиц p_1 и p_2 , орт \hat{e}_3^3 и вектор \mathbf{x}_3 коллинеарны, орт \hat{e}_1^3 лежит в плоскости \mathcal{P} и направлен к частице p_3 . Системы S_1 и S_2 определим по аналогии.

В разложении (17) не учитывается закон сохранения четности σ . Функция Ψ^ε , $\varepsilon = (E, \ell, m, \sigma)$, с нормальной или аномальной четностью $\sigma = (-1)^\ell$ или $\sigma = (-1)^{\ell+1}$ представима суммой [15]

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega_i) F_{m'}^{\ell\sigma}(\mathbf{q}_i), \quad \mu(\sigma) \equiv (1 - \sigma(-1)^\ell)/2, \quad (18)$$

по симметризованным и собственным для операторов l^2 , l_3 и P функциям

$$D_{mm'}^{\ell\sigma}(\omega_i) = \left[\frac{2\ell + 1}{16\pi^2(1 + \delta_{m0})} \right] \left[D_{mm'}^\ell(\omega_i) + \sigma(-1)^{\ell-m} D_{m,-m'}^\ell(\omega_i) \right]. \quad (19)$$

Подстановкой (18) и последующим проектированием на базис (19) уравнение Шредингера (4) сводится к конечной системе из ℓ или $\ell - 1$ уравнений в случае нормальной или аномальной четности:

$$\sum_{m''=\mu(\sigma)}^{\ell} [H_{m'm''}^{\ell\sigma}(\mathbf{q}) + \delta_{m'm''}(V(\mathbf{q}) - E)] F_{m''}^{\ell\sigma}(\mathbf{q}) = 0, \quad m' = \mu(\sigma), \dots, \ell. \quad (20)$$

Подробный вывод этой системы (уравнения Шредингера в представлении полного момента и четности) и явные выражения дифференциальных операторов $H_{mm'}^{\ell\sigma}(\mathbf{q})$, $\mathbf{q} = \mathbf{q}_3$, порожденных оператором H_0 , в сфероидальных

гиперсферических $\mathbf{q} = (r, \varphi_3, \theta_3)$ и декартовых

$$\mathbf{q} = (R, \rho, \theta), \quad \theta \equiv \theta_3, \quad \rho \equiv -\mathbf{y}_3/\sqrt{2\mu_{3,12}}$$

координатах имеется в [34–36].

В работе [37] общее ($\varepsilon = E$) решение $(\Psi_1^\varepsilon, \Psi_2^\varepsilon, \Psi_3^\varepsilon)$ уравнений Фаддеева (6) с центральными взаимодействиями представлялось в виде

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \sum_{\ell=0}^{\infty} \sum_{m, m'=-\ell}^{\ell} \Psi_{im'}^{\ell m}(x_i, y_i, \theta_i) D_{mm'}^\ell(\omega_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (21)$$

а для частного ($\varepsilon = (E, \ell, m)$) решения использовались аналоги ряда (17)

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} D_{mm'}^\ell(\omega_i) \Psi_{im'}^{\ell m}(\mathbf{q}_i), \quad \mathbf{q}_i = (x_i, y_i, \theta_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (22)$$

что позволило авторам впервые вывести уравнения Фаддеева в представлении полного углового момента:

$$\begin{aligned} & \sum_{m''=m'-1}^{m'+1} \left[H_{m'm''}^\ell(\mathbf{q}_i) + \delta_{m'm''} (V_i(x_i) - E) \right] \Psi_{im''}^{\ell m}(\mathbf{q}_i) = \\ & = -V_i(x_i) \sum_{k \neq i} \sum_{m''=-\ell}^{\ell} D_{m'm''}^\ell(\omega_{ki}) \Psi_{km''}^{\ell m}(\mathbf{q}_k), \quad (23) \\ & m' = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell; \quad i = 1, 2, 3, \quad \omega_{ki} = (0, \lambda_{ki}, 0). \end{aligned}$$

2. ФИЗИЧЕСКИЕ И ЛОЖНЫЕ СЛАГАЕМЫЕ

В этом разделе мы изложим основные результаты работ [24–26]. Сначала дадим определение ложных слагаемых парных взаимодействий и сформулируем две проблемы, порождаемые их существованием, затем опишем способ построения ложных слагаемых центральных парных взаимодействий и сформулируем определение «физические слагаемые».

2.1. Остаточные и ложные слагаемые. Пусть

$$V_k = V_k^u + V_k^s, \quad k = 1, 2, 3, \quad (24)$$

$$\sum_{k=1}^3 V_k^u \neq 0, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^s \equiv 0. \quad (25)$$

Тогда слагаемые V_k^u и V_k^s парного взаимодействия V_k будем называть остаточными и ложными, потому что первые остаются в полном взаимодействии V , а вторые, подобно призракам, не дают в него никакого вклада, т. е. взаимно компенсируются при суммировании по всем парам частиц:

$$V = \sum_{k=1}^3 V_k = \sum_{k=1}^3 (V_k^u + V_k^s) = \sum_{k=1}^3 V_k^u. \quad (26)$$

Теперь дадим корректную формулировку этого интуитивно понятного определения. Все физические свойства квантового состояния $|\varepsilon\rangle$ рассматриваемой трехчастичной системы не зависят от математического формализма, используемого для их описания, в частности, от того, в каком из трех ($i = 1, 2, 3$) координатных представлений $\langle \mathbf{r}_i |$ записывается волновая функция Ψ^ε этого состояния и уравнение Шредингера (4), которому она подчинена. Поэтому понятие остаточных V_k^u и ложных V_k^s слагаемых взаимодействия V_k

не должно зависеть от выбора координатного представления, в котором записываются соотношения (24). Далее, в квантовой механике [8] взаимодействие V_k , а значит, и компоненты V_k^u и V_k^s его разбиения (24) всегда понимаются как операторы. В математике любой оператор всегда определяется в некотором пространстве или же классе функций. Всем упомянутым выше принципам удовлетворяет следующее определение остаточных и ложных слагаемых парных взаимодействий.

Для рассматриваемого класса функций операторы V_k^u и V_k^s будем называть остаточными и ложными слагаемыми взаимодействия V_k , если соотношения (25) выполняются в любом из трех координатных представлений и для любой функции Ψ этого класса:

$$\left\langle \mathbf{r}_i \left| \sum_{k=1}^3 V_k^u(\mathbf{r}_k) \right| \Psi(\mathbf{r}_i) \right\rangle \neq 0, \quad \left\langle \mathbf{r}_i \left| \sum_{k=1}^3 V_k^s(\mathbf{r}_k) \right| \Psi(\mathbf{r}_i) \right\rangle \equiv 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (27)$$

По определению уравнение Шредингера (4) содержит операторы V_k в виде их суммы V , а каждое ($i = 1, 2, 3$) уравнение Фаддеева (6) содержит один соответствующий оператор V_i . Поэтому в случае (24), (25) ложные слагаемые отсутствуют в уравнении Шредингера

$$(H_0 - E)\Psi^\varepsilon = -V\Psi^\varepsilon = -\left(\sum_{k=1}^3 V_k^u\right)\Psi^\varepsilon, \quad (28)$$

но содержатся в уравнениях Фаддеева наряду с остаточными:

$$(H_0 - E)\Psi_i^\varepsilon = -V_i\Psi^\varepsilon = -(V_i^u + V_i^s)\sum_{k=1}^3 \Psi_k^\varepsilon, \quad i = 1, 2, 3. \quad (29)$$

Поэтому возникает вопрос об эквивалентности уравнения Шредингера (28) и уравнений Фаддеева (29). Как было показано в [25], ложные слагаемые не нарушают эту эквивалентность. В этой же работе отмечалась и следующая, особенно важная с прикладной точки зрения проблема, порождаемая ложными слагаемыми.

Пусть $A = (V_1, V_2, V_3)$ и $\tilde{A} = (\tilde{V}_1, \tilde{V}_2, \tilde{V}_3)$ — два набора парных взаимодействий, одинаково хорошо описывающих все имеющиеся данные по рассеянию и спектрам в каждой паре некоторых частиц p_1, p_2, p_3 . Из таких фазово-эквивалентных наборов принято считать реалистическим тот, используя который удастся лучше описать всю имеющуюся совокупность данных о свойствах трехчастичной системы (p_1, p_2, p_3) . Если оба набора A и \tilde{A} не имеют ложных слагаемых, то упомянутый общепринятый рецепт представляется непротиворечивым.

Пусть набор A имеет ложные слагаемые, а набор \tilde{A} не обладает таковыми. Если для вычислений по уравнениям Шредингера или Фаддеева используется набор \tilde{A} , то исследуемые свойства системы (p_1, p_2, p_3) определяются всеми взаимодействиями $\tilde{V}_1, \tilde{V}_2, \tilde{V}_3$. Если же для аналогичных вычислений используется набор A , то свойства той же системы (p_1, p_2, p_3) определяются не всеми взаимодействиями V_1, V_2, V_3 , а, по крайней мере, их остаточными слагаемыми V_1^u, V_2^u, V_3^u . В рассмотренном случае общепринятый рецепт выбора реалистического набора оказывается некорректным. Действительно, набору \tilde{A} сопоставляется не набор A , а набор $A^u \equiv (V_1^u, V_2^u, V_3^u)$.

Следовательно, для корректного выбора реалистического набора из наборов A и \tilde{A} путем сравнительного анализа трехчастичных данных необходимо, чтобы оба набора либо не имели ложных слагаемых, либо имели одинаковые ложные слагаемые $V_k^s = \tilde{V}_k^s, k = 1, 2, 3$.

Упомянутая проблема выбора является общей для всех подходов к решению задачи трех частиц с модельными парными взаимодействиями. Поэтому анализ ложных слагаемых представляется актуальным.

2.2. Анализ ложных слагаемых. Ложные слагаемые парных взаимодействий V_k и фаддеевских компонент Ψ_k^ε нетрудно построить в частном случае трех тождественных бозонов, когда V — полностью симметричная по всем перестановкам частиц функция:

$$S^+V = V = \sum_{k=1}^3 S^+V_k, \quad (I - S^+)V = \sum_{k=1}^3 (I - S^+)V_k \equiv 0, \quad (30)$$

и поэтому для каждого V_k имеет место разбиение (24):

$$V_k^u = S^+V_k, \quad V_k^s = (I - S^+)V_k, \quad k = 1, 2, 3.$$

Остаточные слагаемые V_k^u — симметричные по всем перестановкам бозонов функции, ложные слагаемые V_k^s такой симметрией не обладают.

В силу (30) общее решение Ψ^ε уравнения Шредингера (28) — сумма

$$\Psi^\varepsilon \equiv U + S, \quad U \equiv S^+\Psi^\varepsilon, \quad S \equiv (I - S^+)\Psi^\varepsilon.$$

Функция S , не подчиняющаяся ($S^+S \neq S$) принципу Паули [9], обычно называется духовым или ложным, т. е. физически не реализуемым решением этого уравнения.

Так как ложные слагаемые $(I - S^+)V_k, k = 1, 2, 3$, содержатся в уравнениях Фаддеева (29), то компоненты $\Psi_1^\varepsilon, \Psi_2^\varepsilon$ и Ψ_3^ε , вообще говоря, не являются полностью симметричными: $S^+\Psi_k^\varepsilon \neq \Psi_k^\varepsilon, k = 1, 2, 3$. Поэтому

$$\Psi_k^\varepsilon = U_k + S_k, \quad U_k \equiv S^+\Psi_k^\varepsilon, \quad S_k \equiv (I - S^+)\Psi_k^\varepsilon.$$

При суммировании по всем парам частиц остаточные слагаемые U_k порождают волновую функцию U с разрешенной симметрией, а ложные слагаемые S_k — функцию S , запрещенную принципом Паули:

$$U = \sum_{k=1}^3 U_k, \quad S = \sum_{k=1}^3 S_k.$$

Ложные (запрещенные принципом Паули) слагаемые компонент многочастичной волновой функции неоднократно исследовались при анализе различных уравнений для систем, содержащих тождественные частицы. Например, в [41, 42] ложные компоненты строились при редукции задачи рассеяния для тождественных частиц к системе связанных каналов, а в [43, 44] в рамках метода ортогонального проектирования для итерационного решения многочастичных уравнений в импульсном пространстве было доказано, что расходимость борновских рядов в трехчастичном рассеянии тесно связана с принципом Паули и наличием ложных (духовых) состояний, запрещенных этим принципом.

В работе [45] слагаемые фаддеевских компонент, взаимно компенсирующие друг друга при суммировании по всем парам частиц, были названы ложными и найдены в явном виде для системы тождественных бозонов с осцилляторными взаимодействиями. Необходимость и различные способы исключения ложных (взаимно компенсирующих друг друга) слагаемых из уравнений Фаддеева в конфигурационном пространстве обсуждалась в обзоре [1] на примере системы трех тождественных бозонов. В [46] для системы нескольких тождественных бозонов в основном состоянии было показано, что ложные в аналогичном смысле слагаемые парных взаимодействий необходимо исключать, чтобы правильно решить уравнения фаддеевского типа для двухчастичных амплитуд, описывающих лишь двухчастичные корреляции.

В системе трех тождественных бозонов ложные слагаемые возникают естественным образом как следствие полной перестановочной симметрии полного взаимодействия V . Его разложение в ряд по базису из трехчастичных гипергармоник содержит только полностью симметричные базисные функции. Поэтому уравнение Шредингера имеет симметричные относительно любых перестановок физические решения. Гиперсферические разложения отдельных компонент V_1, V_2 и V_3 полного взаимодействия содержат базисные функции и всех остальных перестановочных симметрий.

Причина появления ложных слагаемых для нетождественных частиц та же, что и в рассмотренном выше случае трех тождественных бозонов: гиперсферические ряды парных взаимодействий содержат, вообще говоря, все базисные гипергармоники, а гиперсферическое разложение полного взаимодействия (при определенных условиях на массы частиц и параметры парных взаимодействий) не содержит гипергармоник с определенными квантовыми

числами. Подсуммы гиперсферических рядов для парных взаимодействий по таким гипергармоникам (запрещенным и кинематикой, и формой парных потенциалов) и будут ложными слагаемыми этих взаимодействий.

Приступим, следуя работе [26], к определению запрещенных значений L для произвольной системы нетождественных частиц с центральными парными взаимодействиями. Используя их ряды по собственным базисам (8)

$$V_k(x_k) = \sum_{L=0,2,\dots} V_k^L(r) Y_{L00}^{00}(\Omega_k), \quad k = 1, 2, 3, \quad (31)$$

и правило (11), получаем функциональное разложение полного взаимодействия в выбранном представлении $\langle \mathbf{r}_i |$:

$$V(\mathbf{r}_i) = \sum_{L=0,2,\dots} \sum_{a=0}^{L/2} {}^i V_a^L(r) Y_{La0}^{00}(\Omega_i), \quad (32)$$

$${}^i V_a^L(r) \equiv \delta_{a0} V_i^L(r) + \sum_{k \neq i} \langle aa | K(\gamma_{ki}) | 00 \rangle_{L0} V_k^L(r). \quad (33)$$

Так как базисные функции Y_{La0}^{00} линейно независимы по обоим индексам L и a , то в любом из трех ($i = 1, 2, 3$) координатных представлений ряд (32) не содержит потенциальных мультиполей V_1^L, V_2^L, V_3^L с некоторым фиксированным L тогда и только тогда, когда все мультиполи (33) этого ряда с индексами $i = 1, 2, 3$ и $a = 0, \dots, L/2$ тождественно равны нулю. Это условие равносильно следующей конечной ($a = 0, \dots, L/2$) цепочке не зацепляющихся друг с другом систем из трех ($i = 1, 2, 3$) тождеств по r :

$$\mathbf{N}^{La} \mathbf{V}^L(r) = 0, \quad a = 0, \dots, L/2, \quad \forall r \geq 0. \quad (34)$$

Здесь \mathbf{V}^L — столбец $(V_1^L, V_2^L, V_3^L)^T$, а \mathbf{N}^{La} — матрица с элементами

$$N_{ii}^{La} \equiv \delta_{a0}, \quad N_{ki}^{La} \equiv \langle aa | K(\gamma_{ki}) | 00 \rangle_{L0}, \quad k \neq i = 1, 2, 3. \quad (35)$$

Если для данного L найдется хотя бы одно значение индекса a , при котором матрица \mathbf{N}^{La} не вырождена, то всей цепочке тождеств (34) будут удовлетворять только тривиальные мультиполи ($V_i^L \equiv 0, i = 1, 2, 3$).

Найдем те значения L , при которых матрицы \mathbf{N}^{La} , $a = 0, \dots, L/2$ вырождены. Заменяя матричные элементы (35) по известным формулам [17]:

$$\begin{aligned} \langle aa | K(\gamma_{ki}) | 00 \rangle_{L0} &= (-1)^a \langle aa | K(\gamma_{ik}) | 00 \rangle_{L0} = \\ &= C_{La} (\sin 2\gamma_{ki})^a P_{L/2-a}^{(a+1/2, a+1/2)}(\cos 2\gamma_{ki}), \quad (36) \\ C_{La} &\equiv N_{La0} / \left[2^a N_{L00} P_{L/2}^{(1/2, 1/2)}(-1) \right] \end{aligned}$$

и положив по определению $(k, i) \equiv (1, 2), (2, 3), (3, 1)$, получим равенство

$$\det \mathbf{N}^{La} = \delta_{a0} - \delta_{a0} C_{L0}^2 \sum_{(k,i)} \left[P_{L/2}^{(1/2, 1/2)}(\cos 2\gamma_{ki}) \right]^2 + \\ + [1 + (-1)^a] C_{La}^3 \prod_{(k,i)} (\sin 2\gamma_{ki})^a P_{L/2-a}^{(a+1/2, a+1/2)}(\cos 2\gamma_{ki}). \quad (37)$$

Пусть $L = 0$, тогда индекс a принимает только одно значение: $a = 0$. Согласно формулам (36), все элементы (35) матрицы \mathbf{N}^{00} равны единице независимо от значений кинематических углов. Поэтому система трех условий (34) с $L, a = 0$ вырождается в одно тождество по переменной r :

$$V_1^0(r) + V_2^0(r) + V_3^0(r) = 0, \quad (38)$$

которому могут подчиняться одновременно нетривиальные мультиполи V_k^0 .

При $L = 2$ имеются две ($a = 0, 1$) системы условий (34). В силу соотношений (2), (36), (35) и (37) при любых значениях кинематических углов

$$N_{ki}^{2a} = \delta_{ki} (-1)^a \cos(2\gamma_{ki} - a\pi/2), \quad \det \mathbf{N}^{2a} = 0, \quad a = 0, 1, \quad k, i = 1, 2, 3.$$

Поэтому обе ($a = 0, 1$) исследуемые системы (34) сводятся к одной и той же системе из двух условий

$$V_1^2(r) \sin 2\gamma_{12} = V_3^2(r) \sin 2\gamma_{23}, \quad V_2^2(r) \sin 2\gamma_{12} = V_3^2(r) \sin 2\gamma_{31}, \quad (39)$$

которым могут подчиняться одновременно нетривиальные мультиполи V_k^2 .

Используя формулу (37), нетрудно показать, что при всех остальных $L = 4, 6, \dots$ цепочка тождеств (34) несовместна.

Пусть \mathcal{E} — множество значений индекса L , для которых справедливы цепочки тождеств (34). Как было доказано, \mathcal{E} может содержать только два элемента: $L = 0$ и $L = 2$, если выполнены условия (38) и (39). Подсуммы

$$V_k^u(\mathbf{r}_k) = \sum_{L \notin \mathcal{E}} V_k^L(r) Y_{L00}^{00}(\Omega_k), \\ V_k^s(\mathbf{r}_k) = \sum_{L \in \mathcal{E}} V_k^{Ls}(\mathbf{r}_k) = \sum_{L \in \mathcal{E}} V_k^L(r) Y_{L00}^{00}(\Omega_k) \quad (40)$$

рядов (31) будут остаточными и ложными слагаемыми парных взаимодействий. Для краткости компоненту $V_k^{Ls} \equiv V_k^L Y_{L00}^{00}$ будем называть частным ложным слагаемым с данным значением L из множества \mathcal{E} .

Ложные слагаемые осцилляторных взаимодействий. Так как в модельных расчетах разнообразных трехчастичных систем [10] часто используются

осцилляторные взаимодействия, то анализ их ложных слагаемых представляется необходимым.

Пусть все три ($k = 1, 2, 3$) парных взаимодействия осцилляторные:

$$V_k(x_k(a_{ij})) = \frac{1}{3}\mu_{ij}(\omega_k a_{ij})^2, \quad V_k(x_k) = c_k x_k^2, \quad c_k = \frac{1}{6}\omega_k^2.$$

Тогда их гиперсферические разложения (31) содержат всего два члена:

$$V_k(x_k) = \frac{\pi^{3/2}}{24}(\omega_k r)^2 (2Y_{000}^{00}(\Omega_k) + Y_{200}^{00}(\Omega_k)), \quad (41)$$

условия (38) не выполняются, а условия (39) сводятся к равенствам

$$(m_1 + m_2)\omega_1^2 = (m_2 + m_3)\omega_3^2, \quad (m_1 + m_2)\omega_2^2 = (m_1 + m_3)\omega_3^2.$$

При таких соотношениях между массами и парными осцилляторными частотами вторые слагаемые сумм (41) являются ложными, полное взаимодействие (32) не зависит от гиперсферических углов как при одинаковых, так и при различных массах частиц:

$$V(\mathbf{r}_i) = \frac{1}{4}(\omega r)^2, \quad \omega^2 \equiv \frac{2}{3} \frac{m_1 + m_2 + m_3}{m_2 + m_3} (\omega_1)^2, \quad i = 1, 2, 3,$$

а уравнение Шредингера (28) имеет полностью симметричные решения, в которых все шесть гиперсферических переменных отделены друг от друга. Эти решения нетрудно выразить через полиномы Лагерра L_p^2 [3]. Например, в случае $\ell = 0$ весь ($p = 0, 1, \dots$) спектр описывается формулами [18]:

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{r}_i; E_p) = s^2 L_p^2(s) \exp(-s/2) Y_{000}^{00}(\Omega_i), \quad E = E_p = (3 + 2p)\omega, \quad s \equiv \omega r^2/2.$$

Ложные слагаемые кулоновских взаимодействий. Кулоновские взаимодействия являются автомодельными и играют исключительно важную роль в трехчастичных системах самых разных типов: ядерных, атомных и молекулярных. При вполне определенных условиях эти взаимодействия имеют ложные слагаемые. Исследуем эти условия.

Итак, пусть все ($k = 1, 2, 3$) парные взаимодействия — кулоновские:

$$V_k(x_k(a_{ij})) = z_i z_j / a_{ij}, \quad V_k(x_k) = c_k / x_k, \quad c_k = z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}}.$$

Тогда достаточные условия (38) и (39) существования ложных слагаемых с $L = 0$ или $L = 2$ сводятся к соответствующим соотношениям

$$z_1 z_2 \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} + z_2 z_3 \sqrt{\frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3}} + z_1 z_3 \sqrt{\frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3}} = 0, \quad (42)$$

$$(z_1\delta_{i2} + z_2\delta_{i1}) \left(\frac{m_i + m_3}{m_1 + m_2} \right)^{3/2} = z_3 \left(\frac{m_3}{m_1\delta_{i2} + m_2\delta_{i1}} \right)^{1/2}, \quad i = 1, 2, \quad (43)$$

а сами ложные слагаемые согласно (31) и (40) таковы:

$$V_k^{Ls}(\mathbf{r}_k) = z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}} \left(1 - \frac{L}{10} \right) \frac{16}{3\pi^2 r} \cos L\varphi_k, \quad k = 1, 2, 3, \quad L = 0, 2. \quad (44)$$

Условия (42) и (43) инвариантны относительно одновременной перестановки масс и зарядов любых двух частиц и могут быть записаны в терминах отношений масс и зарядов двух каких-то частиц к массе и, соответственно, к заряду оставшейся частицы. Для определенности за единицу массы примем массу третьей частицы, т. е. положим $m_3 = 1$ и обозначим $a \equiv z_1/z_3$, $b \equiv z_2/z_3$. Массы m_1 и m_2 считаем неизвестными, а все три заряда заданными, но принимающими любые целые отрицательные или положительные значения. Для конкретных примеров известные значения масс частиц в атомных единицах (а. е. м.) взяты из справочника [11].

В силу упомянутой перестановочной инвариантности для описания всех возможных соотношений между массами и зарядами трех частиц, при которых выполняется условие (42), достаточно исследовать все положительные решения $m_2 = m_2(m_1; a, b)$ эквивалентного этому условию и безразмерного уравнения

$$ab\sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} + a\sqrt{\frac{m_1}{m_1 + 1}} + b\sqrt{\frac{m_2}{m_2 + 1}} = 0 \quad (45)$$

как функции положительного аргумента m_1 и параметров a и b .

По той же причине для полного описания всех соотношений между массами и зарядами, при которых выполняются условия (43), достаточно исследовать все положительные двухпараметрические решения $(m_1, m_2) = (m_1(a, b), m_2(a, b))$ эквивалентной этим условиям системы уравнений

$$m_1 = \frac{m_2 - (b^2 m_2)^{1/3}}{(b^2 m_2)^{1/3} - 1}, \quad m_2 = \frac{m_1 - (a^2 m_1)^{1/3}}{(a^2 m_1)^{1/3} - 1}. \quad (46)$$

Уравнения (45) и (46) исследовались численными и асимптотическими методами, потому что найти все их решения аналитически не удалось.

Обсудим основные результаты анализа уравнения (45).

Для системы из трех одноименно заряженных частиц ($a, b > 0$), а значит, и в случае трех тождественных частиц уравнение (45) не имеет решений.

При $m_1 = m_2$ и $a^{-1} + b^{-1} < 2^{-1/2}$ имеется одно положительное решение

$$m_2(m_1; a, b) = m_1(a, b) = 2(a^{-1} + b^{-1})^2 - 1, \quad (47)$$

которое в частном случае $|a| = |b|$, т. е. при $|z_1/z_2| = 1$, принимает вид

$$m_2(m_1; a, a) = m_1(a) = 8a^{-2} - 1, \quad (48)$$

поэтому $m_1, m_2 = m_3$, если $|a| = 1/2$, т. е. при $z_1, z_2 = -2z_3$.

Соотношениям (47) и (48) не удовлетворяют массы любых трехчастичных систем типа «два электрона + тяжелый заряженный остов», ибо для таких систем $m_1, m_2 = m_e \ll m_3 = 1$, где $m_e \approx 5 \cdot 10^{-4}$ а. е. м. — масса электрона. Кулоновские взаимодействия в системах указанного типа не имеют ложных слагаемых с $L = 0$.

С относительной точностью порядка m_e/m_3 соотношения $m_1, m_2 = m_3$ и $z_1, z_2 = -2z_3$, а значит, и равенства (48) выполняются для всех трехчастичных систем из двух положительно заряженных ионов A^{++} и отрицательно заряженного иона A^- с одного и того же атома A с массой m_3 . В таких системах с упомянутой точностью кулоновские взаимодействия имеют ложные слагаемые (44) с $L = 0$.

При $|a|, |b| = 1$ соотношения (48) вырождаются в равенства $m_1, m_2 = 7$. В случае $z_1, z_2, -z_3 = \pm 1$ эти равенства с относительной точностью $\approx 0,004$ выполняются для систем, в которых одна частица — антипротон (протон) ($m_3 = m_p \approx 1,007$ а. е. м.), а две другие — положительно (отрицательно) заряженные ионы атома ${}^7\text{Li}$ ($m_1 = m_2 \approx 7,02$ а. е. м.).

Пусть теперь m_1 , вообще говоря, не равно m_2 . Опишем поведение решений $m_2(m_1; a, b)$ уравнения (45) в различных пределах.

Начнем со случая $|a|, |b| \rightarrow 0$, $a/b = \text{const}$, который реализуется, если z_1, z_2 фиксированы, а $|z_3|$ возрастает. В этом случае оба значения m_1 и $m_2(m_1; a, b)$, при которых имеются ложные слагаемые (44) с $L = 0$, монотонно возрастают с увеличением $|z_3|$. Координаты (m_1, m_2) точек на любой кривой $m_2(m_1; a, b)$ таковы, что $m_1, m_2 \gg m_3 = 1$. Для примера, поясняющего указанную зависимость, решения $m_2(m_1; a, b)$ уравнения (45), вычисленные при фиксированных $z_1, z_2 = 1$ и $z_3 = -2, -3, -4$, изображены на рис. 1, а.

В рассмотренном выше случае ложные слагаемые с $L = 0$ могут быть в системах из двух однозарядных ($|z_1|, |z_2| = 1$), но тяжелых ионов ($m_1, m_2 \gg m_3$), и одного многозарядного ($|z_3| > 1$), но легкого иона.

Характер сгущения решений уравнения (45) при $a = \text{const}$ и $|b| \rightarrow \infty$, например при постоянных z_1, z_3 и растущем $|z_2|$, определяется соотношением между величиной $|a|$ и единицей. Возможны три случая.

1. При $|a| = 1$ и $|b| \rightarrow \infty$ решения $m_2(m_1; a, b)$ этого уравнения монотонно сгущаются справа к его предельным ($|b| = \infty$) решениям — полупрямым $m_1 = 1, m_2 > 0$ и $m_1 \geq 1, m_2 = 0$. Для пояснения этой зависимости в качестве примера на рис. 1, б изображены графики решений $m_2(m_1; a, b)$, вычисленных при фиксированных $z_1, -z_3 = 1$ и $z_2 = 1, 2, 3$.

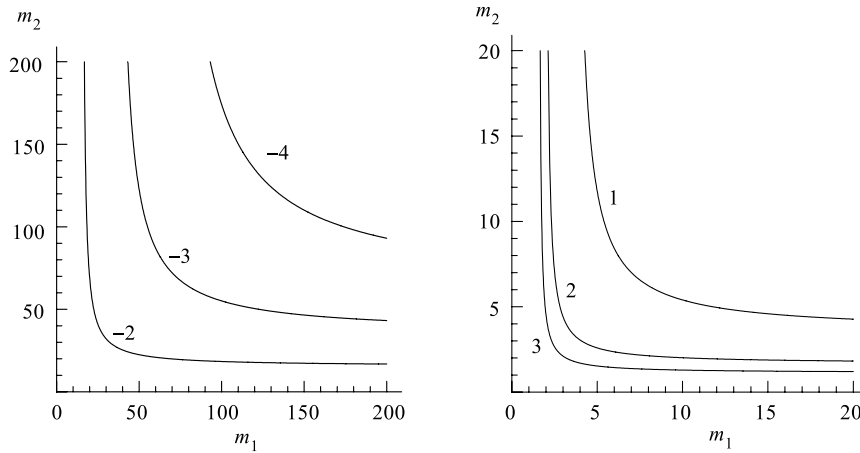


Рис. 1. Решения $m_2(m_1; a, b)$ уравнения (45) при $z_1 = 1$: а) $z_2 = 1$, значения z_3 указаны цифрами над кривыми; б) $z_3 = -1$, значения z_2 указаны цифрами

В рассмотренном случае ($|a| = 1$) массы двух частиц, при которых могут быть ложные слагаемые с $L = 0$, ограничены снизу условиями $m_1 > m_3$ и $m_2 > 0$. Такие условия могут реализоваться для систем из двух одинаково заряженных ($|z_1| = |z_3|$) частиц, сравнимых по массе ($m_1 \sim m_3$), и третьей частицы с меньшей массой, но большим зарядом ($|z_2| > |z_1|$).

2. Если $|a| < 1$, то с ростом $|b|$ решения уравнения (45) монотонно сгущаются справа к его предельному ($|b| = \infty$, т. е. $|z_2| = \infty$) решению:

$$m_2(m_1; a, \pm\infty) = \frac{1 - a^2}{a^2 m_1 - 1} m_1, \quad m_1 \geq a^{-2}, \quad (49)$$

которое имеет ненулевые асимптоты $m_1 = a^{-2}$ и $m_2 = a^{-2} - 1$. Для наглядного примера на рис. 2 сплошными кривыми изображены решения $m_2(m_1; a; b)$, вычисленные при фиксированных $z_1 = 1, z_3 = -2$ и $z_2 = 2, 3, 6$, а штриховой линией показано предельное ($z_2 = \infty$) при тех же z_1 и z_3 решение (49).

В описанном случае ($|a| < 1, \forall b$) ложные слагаемые с $L = 0$ могут быть, если массы двух частиц ограничены снизу условиями $m_1 > a^{-2}$ и $m_2 > a^{-2} - 1$ и поэтому превышают массу третьей частицы.

3. В случае $|a| > 1$ при некотором достаточно большом $|b|$ решения уравнения (45) становятся двухзначными и при дальнейшем увеличении $|b|$

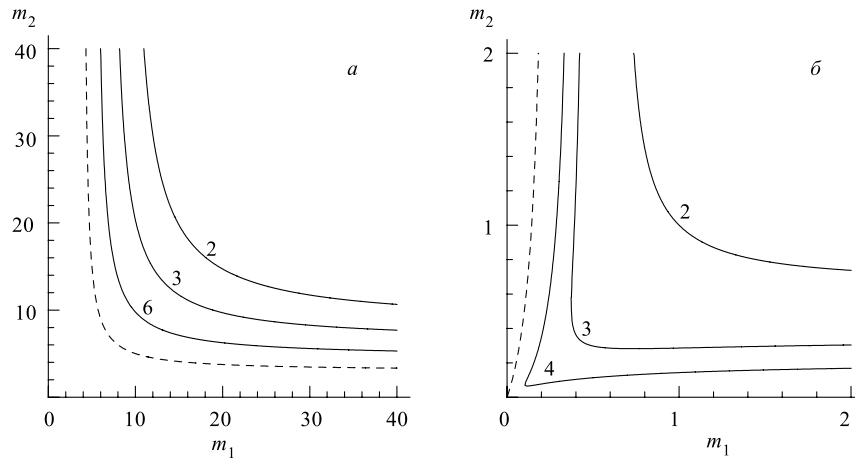


Рис. 2. Решения $m_2(m_1; a, b)$ уравнения (45) (сплошные кривые): *а*) $z_1 = 1, z_3 = -2$, значения z_2 указаны цифрами над кривыми; штриховая кривая — предельное ($z_2 = \infty$) решение (49); *б*) $z_1 = 2, z_3 = -1$, значения z_2 указаны цифрами; штриховая кривая — первое предельное ($z_2 = \infty$) решение (50)

монотонно сходятся справа к его предельным ($|b| = \infty$) решениям

$$m_2(m_1; a, \pm\infty) = \frac{a^2 - 1}{1 - a^2 m_1} m_1, \quad m_1 \leq a^{-2}, \quad (50)$$

$$m_2(m_1; a, \pm\infty) = 0, \quad m_1 > 0.$$

Чтобы продемонстрировать переход от однозначных решений к двухзначным, на рис. 2, *б* сплошными кривыми изображены решения $m_2(m_1; a; b)$, вычисленные при фиксированных $z_1 = 2, z_3 = -1$ и $z_2 = 2, 3, 4$, а штриховой линией показано первое предельное ($z_2 \rightarrow \infty$) при тех же z_1 и z_3 решение (50).

Обоим предельным решениям (50) удовлетворяют сколь угодно малые массы m_1 и m_2 . Следовательно, в случае $|a| > 1$ ложные слагаемые с $L = 0$ могут быть в системах из двух легких ($m_1, m_2 \ll m_3$), по сравнению с третьей, частиц, причем заряд второй частицы должен быть достаточно большим ($|z_2| > |z_3|$).

Обсудим основные результаты анализа системы уравнений (46).

Эта система имеет положительные решения, если все три частицы одноименно заряжены ($a, b > 0$). Решения не зависят от знака зарядов z_1, z_2 и z_3 . Поэтому ограничимся исследованием случая $z_1, z_2, z_3 > 0$.

При $a, b = 1$, т.е. при $z_1, z_2 = z_3$, имеется единственное решение $(m_1, m_2) = (1, 1)$. Значит, в любой системе из трех тождественных частиц кулоновские взаимодействия имеют ложные слагаемые (44) с $L = 2$.

Пусть $a = b \neq 1$, т.е. $z_1 = z_2 \neq z_3$. При $m_1 \neq m_2$ исследуемая система (46) несовместна. Если положить $m_1 = m_2$, то ее оба уравнения подстановкой $x = 1/m_1$ сведутся к кубическому уравнению

$$x^3 + 3x^2 + (3 - 8a^{-2})x + 1 = 0.$$

Его нетрудно решить известным способом [3]. Действительные положительные решения $x = x^+$ и $x = x^-$ существуют только при условии $a \leq \sqrt{32/27} \approx 1,08866$. Им отвечают следующие два решения системы (46):

$$(m_1, m_2) = (m^\pm, m^\pm), \quad m^\pm \equiv \frac{1}{x^\mp} = \left[\frac{2}{a} \sqrt{\frac{2}{3}} (\cos \alpha \mp \sqrt{3} \sin \alpha) - 1 \right]^{-1}, \quad (51)$$

$$\alpha \equiv \frac{1}{3} \operatorname{arctg} \left(\frac{32}{27a^2} - 1 \right)^{1/2}.$$

Компоненты m^\pm при всех рациональных a подчиняются соотношениям

$$0 < m^- < 2, \quad 2 < m^+ < \infty,$$

$$m^- = (2\sqrt{2}a^{-1} - 1)^{-1} (1 + o(1)), \quad m^+ = 8a^{-2} + O(a^{-3}), \quad a \rightarrow 0.$$

Поэтому ложные слагаемые кулоновских взаимодействий с $L = 2$ могут быть в системах из двух одинаковых легких и однозарядных частиц и одной тяжелой многозарядной частицы ($m_1, m_2 = m^- \ll m_3$) или же в системах из двух одинаковых тяжелых частиц и третьей легкой, но опять же многозарядной частицы ($m_1, m_2 = m^+ \gg m_3$).

Для справки: значения m^\pm , вычисленные по формулам (51) при фиксированных $z_1, z_2 = 1$ и разных z_3 , приведены во втором и третьем столбцах табл. 1. Эти данные позволяют к двум данным и одинаковым частицам подобрать такую третью частицу, чтобы кулоновские взаимодействия в получившейся системе из трех частиц имели бы ложные слагаемые с $L = 2$. Приведем два поясняющих примера.

1) Пусть две частицы — протоны ($z_1, z_2 = 1$ и $m_1, m_2 \approx 1,007$ а.е.м.), а заряд искомой третьей частицы $z_3 = 2$. Положим $m_1, m_2 = m^- = 1,007$ а.е.м. Из табл. 1 при $z_3 = 2$ находим $m^- = 0,224581m_3$. Следовательно, $m_3 \approx 4,0966$ а.е.м. Масса 4,0026 а.е.м. двухзарядного иона ${}^4\text{He}^{++}$ близка к найденной.

2) Если две частицы — дейтроны ($z_1, z_2 = 1$ и $m_1, m_2 = 2,0141$ а.е.м.) и заряд третьей искомой частицы $z_3 = 2$, то, используя табл. 1 аналогичным

Таблица 1. Решения (m_1, m_2) системы уравнений (46) при разных z_3 . В случае $z_1 = 1, z_2 = 1$ решения (51): $(m_1, m_2) = (m^-, m^-), (m^+, m^+)$. В случае $z_1 = 1, z_2 = 2$ решения $(m_1, m_2) = (m_1^-, m_2^-), (m_1^+, m_2^+)$

z_3	$z_1 = 1, z_2 = 1$		$z_1 = 1, z_2 = 2$			
	m^-	m^+	m_1^-	m_2^-	m_1^+	m_2^+
2	0,24581	28,8949	0,46758	0,04182	11,1812	23,9129
3	0,14424	68,9563	0,29378	0,03792	28,0961	57,7122
4	0,10229	124,976	0,21404	0,03278	51,7430	104,979
5	0,07928	196,988	0,16432	0,02898	82,1148	165,737
6	0,06473	284,989	0,13413	0,02473	119,244	239,990
7	0,05470	388,993	0,11319	0,02189	163,118	327,743
8	0,04737	508,994	0,09786	0,01959	213,745	428,995
9	0,04177	644,995	0,08617	0,01772	271,122	543,746
10	0,03735	796,995	0,07696	0,01617	335,248	671,997
15	0,02443	1796,99	0,05011	0,01118	757,124	1515,75
20	0,01816	3196,99	0,03713	0,00854	1347,82	2697,02
∞	0,00000	∞	0,00000	0,00000	∞	∞

образом, получаем $m_3 \approx 8,19366$ а.е.м. Двухзарядный ион ${}^8\text{Be}^{++}$ имеет массу 8,005 а.е.м., примерно равную найденной.

Если $a = 1 \neq b$, т.е. $z_1 = z_3 \neq z_2$, и $b \geq \sqrt{27/32} \approx 0,91856$, то система уравнений (46) имеет только два решения $(m_1, m_2) = (1, m^\pm)$, где

$$m^\pm \equiv 2b \sqrt{\frac{2}{3}} (\cos \beta \pm \sqrt{3} \sin \beta) - 1, \quad \beta \equiv \frac{1}{3} \arctg \left(\frac{32}{27} b^2 - 1 \right)^{1/2}.$$

Их вторые компоненты m^\pm обладают асимптотиками

$$m^- = 1/8b^2 + O(b^{-3}), \quad m^+ = 2\sqrt{2}b - 1 + O(b^{-1}), \quad b \rightarrow \infty.$$

Случай $a \neq b = 1$ рассматривается аналогичным образом.

Пусть теперь $a \neq b$ и $a, b \neq 1$, т.е. все три заряда разные, тогда система уравнений (46) всегда имеет два положительных решения $(m_1, m_2) = (m_1^\pm, m_2^\pm)$. Опишем их поведение в различных предельных случаях.

Если $a, b \rightarrow 0$, но $c \equiv a/b = \text{const}$ (например, z_1 и z_2 фиксированы, а z_3 увеличивается), то обе компоненты m_1^- и m_2^- первого решения сходятся к

нулю, а обе компоненты m_1^+ и m_2^+ второго решения неограниченно растут:

$$\begin{aligned} m_1^- &= \frac{a}{(1+c)^{3/2}} + O(a^2), & m_2^- &= \frac{b}{(1+c)^{3/2}} + O(b^2), \\ m_1^+ &= a^{-2}(1+c)^3 + O(a^3), & m_2^+ &= b^{-2}(1+c)^3 + O(b^3), \quad a, b \rightarrow 0. \end{aligned}$$

Следовательно, ложные слагаемые кулоновских взаимодействий с $L = 2$ могут возникнуть в системах двух типов. Системы первого типа состоят из двух легких частиц с массами $m_i = m_i^- \ll m_3$, $i = 1, 2$, и третьей тяжелой и многозарядной частицы. Системы второго типа (m_1^+, m_2^+) образуют две тяжелые частицы с массами $m_i = m_i^+ \gg m_3$, $i = 1, 2$, превышающими массу третьей частицы, заряд которой достаточно велик.

Для справочных целей значения масс m_1^\pm и m_2^\pm , полученные численным решением системы уравнений (46) при фиксированных $z_1 = 1, z_2 = 2$ и различных z_3 , приведены в последних четырех столбцах табл. 1.

Осталось описать поведение двух решений этой системы при $b \rightarrow \infty$ и $a = \text{const} \neq 1$, например, при фиксированных z_1 и z_3 и увеличивающемся z_2 . Компонента m_1^- первого решения сходится к точке a слева, если $a < 1$, и справа, если $a > 1$, а компонента m_2^- этого же решения в любом случае стремится к нулю:

$$\begin{aligned} m_1^- &= a \left[1 + \frac{3}{2} \frac{a^2}{b^2} \frac{a-1}{(1+a)^3} \right] + O(b^{-4}), \\ m_2^- &= \frac{a^3}{b^2} \frac{1}{(1+a)^3} + O(b^{-4}), \quad b \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Компонента m_1^+ второго решения сходится справа или слева к точке a^{-2} , если $a < 1$ и, соответственно, $a > 1$, а компонента m_2^+ этого же решения всегда неограниченно возрастает:

$$\begin{aligned} m_1^+ &= a^{-2} \left[1 + 3 \frac{a}{b} \frac{1-a^2}{(1+a^2)^{3/2}} \right] + O(b^{-2}), \\ m_2^+ &= a^{-3} b (1+a^2)^{3/2} + 4a^{-2} - 2 + O(b^{-1}), \quad b \rightarrow \infty. \end{aligned}$$

Следовательно, ложные слагаемые кулоновских взаимодействий с $L = 2$ могут возникнуть в системах двух типов. К первому типу относятся системы, в которых две частицы сравнимы по массам и зарядам ($m_1 = m_1^- \sim m_3$, $z_1 \sim z_3$), а третья частица — легкая ($m_2 = m_2^- \ll m_3$), но многозарядная ($z_2 > z_1$). Системы второго типа состоят из двух легких ($m_1 = m_1^+ \sim m_3$) и одной тяжелой ($m_2 = m_2^+ \gg m_3$) и многозарядной частицы.

Значения численных решений (m_1^\pm, m_2^\pm) системы уравнений (46) при различных z_2 и фиксированных $z_1 = 1, z_3 = 2$ или $z_1 = 2, z_3 = 1$ приведены в

Таблица 2. Решения $(m_1, m_2) = (m_1^\pm, m_2^\pm)$ системы уравнений (46) при разных z_2 в случаях $z_1 = 1, z_3 = 2$ и $z_1 = 2, z_3 = 1$

z_2	$z_1 = 1, z_3 = 2$				$z_1 = 2, z_3 = 1$			
	m_1^-	m_2^-	m_1^+	m_2^+	m_1^-	m_2^-	m_1^+	m_2^+
2	0,46758	0,04181	11,1812	23,9129	2,13866	0,08944	0,08944	2,13866
3	0,48683	0,01733	7,74749	26,3706	2,05410	0,03559	0,12907	3,40375
4	0,49281	0,00953	6,45574	30,5375	2,02920	0,01933	0,15489	4,73027
5	0,49544	0,00603	5,80685	35,3366	2,01835	0,01278	0,17222	6,08560
6	0,49686	0,00417	5,42262	40,4295	2,01262	0,00838	0,18441	7,45570
7	0,49772	0,00305	5,17085	46,6801	2,00922	0,00613	0,19339	8,83415
8	0,49824	0,00233	4,99372	51,0241	2,00703	0,00468	0,20025	10,2176
9	0,49862	0,00184	4,86261	56,4288	2,00554	0,00369	0,20565	11,6046
10	0,49884	0,00149	4,76178	61,8737	2,00448	0,00298	0,20998	12,9935
15	0,49952	0,00066	4,47991	89,4068	2,00198	0,00132	0,22322	19,9573
20	0,49972	0,00037	4,34995	117,159	2,00112	0,00074	0,22989	26,9333
∞	0,50000	0,00000	4,00000	∞	2,00000	0,00000	0,25000	∞

табл. 2. Если заданы заряды z_1, z_3 и масса m_3 третьей частицы, то с помощью этой таблицы можно определить массы m_1 и m_2 двух других частиц и заряд z_2 , при которых кулоновские взаимодействия имеют ложные слагаемые с $L = 2$.

2.3. Физические слагаемые. Перейдем к понятию «физические слагаемые». Слагаемые V_k^s взаимно компенсируют друг друга при суммировании по всем парам частиц и, как видно из соотношений (26), не дают никакого вклада в полное взаимодействие. Поэтому такие слагаемые логично называть ложными. Называть физическими слагаемыми взаимодействия V_k^u , сумма которых по всем парам частиц отлична от нуля, представляется не совсем корректным, так как слагаемые, обладающие только таким свойством, сами могут содержать ложные компоненты; кроме того, если существует хотя бы одно разбиение (24) со свойствами (25), то существует бесконечное множество разбиений такого же типа.

Проиллюстрируем эти замечания простыми примерами, поясняющими, как нужно сформулировать дополнительное к соотношениям (25) условие, обеспечивающее одновременно и корректность термина «физические слагаемые», и однозначность разбиения парных взаимодействий на физические и ложные компоненты.

Пусть существует разбиение (24) на компоненты со свойствами (25). Предположим, что каждая компонента V_k^s — сумма двух ложных слагаемых:

$$V_k^s = V_k^{s1} + V_k^{s2}, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^{si} \equiv 0, \quad i = 1, 2.$$

Тогда наряду с разбиением (24) имеется еще два ($i = 1, 2$) разбиения

$$V_k = V_k^{ui} + V_k^{si}, \quad V_k^{u1} \equiv V_k^u + V_k^{s2}, \quad V_k^{u2} = V_k^u + V_k^{s1}, \quad k = 1, 2, 3,$$

в которых V_k^{ui} и V_k^{si} подчиняются условиям того же типа, что и условия (25):

$$\sum_{k=1}^3 V_k^{ui} = \sum_{k=1}^3 V_k^u \neq 0, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^{si} \equiv 0, \quad i = 1, 2,$$

а V_k^{u1} и V_k^{u2} сами содержат ложные слагаемые V_k^{s2} и, соответственно, V_k^{s1} . Компоненты V_k^{s1} и V_k^{s2} естественно называть частными ложными слагаемыми по отношению к их суперпозиции V_k^s . Суперпозицию такого типа всегда можно построить, положив, например,

$$V_k^{s1} \equiv \alpha V_k^s, \quad V_k^{s2} \equiv (1 - \alpha)V_k^s, \quad k = 1, 2, 3,$$

где α — некоторое отличное от нуля число. Значит, существует бесконечное множество разбиений ложных слагаемых V_k^s на суммы частных ложных слагаемых. Следовательно, если имеется хотя бы одно разбиение (24) на слагаемые со свойствами (25), то заведомо существует бесконечное несчетное множество \mathcal{T} разбиений t того же типа:

$$V_k = V_k^{ut} + V_k^{st}, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^{ut} \neq 0, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^{st} \equiv 0, \quad k = 1, 2, 3, \quad t \in \mathcal{T}.$$

Предположим, что это множество содержит особое разбиение τ :

$$V_k = V_k^{u\tau} + V_k^{s\tau}, \quad k = 1, 2, 3,$$

такое, что для всех остальных разбиений $t \in \mathcal{T}, \tau \neq t$, кроме очевидных тождеств

$$V_k^t \equiv V_k^{u\tau} + V_k^{s\tau} - V_k^{st}, \quad k = 1, 2, 3,$$

выполняются неравенства

$$V_k^{s\tau} - V_k^{st} \neq 0, \quad k = 1, 2, 3.$$

Эти тождества и неравенства означают, что слагаемые V_k^{ut} любого разбиения $t \neq \tau$ содержат нетривиальные ложные компоненты $V_k^{s\tau} - V_k^{st}$, в то время как

слагаемые $V_k^{u\tau}$ особого разбиения τ не содержат никаких ложных компонент. Докажем, что может существовать лишь одно такое разбиение. Предположим противное: пусть наряду с разбиением τ имеется еще одно разбиение $\gamma \in \mathcal{T}$, слагаемые которого $V_k^{u\gamma}$ также не содержат никаких ложных компонент. Тогда имеет место представление

$$V_k^{u\gamma} = V_k^{u\tau} + (V_k^{s\tau} - V_k^{s\gamma}), \quad k = 1, 2, 3.$$

Иследуем его. Если $V_k^{s\tau} = V_k^{s\gamma}$, то разбиения τ и γ одинаковые. В противном случае слагаемые $V_k^{u\gamma}$ содержат ложные компоненты $V_k^{s\tau} - V_k^{s\gamma}$. В обоих случаях получаем противоречие с исходным предположением о разбиении γ .

Таким образом, доказано следующее важное утверждение: может существовать лишь одно особое разбиение (24), (25) парных взаимодействий V_k на слагаемые V_k^s , не дающие никакого вклада в полное взаимодействие, и слагаемые V_k^u , не содержащие никаких ложных компонент:

$$V_k^u \neq V_k^{uu} + V_k^{us}, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^{uu} \neq 0, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^{us} \equiv 0. \quad (52)$$

Компоненты V_k^u этого разбиения называем физическими слагаемыми. Соотношения (24), (25) и (52), однозначно определяющие такие слагаемые, следует понимать в том же смысле, что определение (27) остаточных и ложных слагаемых. Для рассматриваемого класса функций операторы V_k^u и V_k^s будем называть физическими и ложными слагаемыми взаимодействия V_k , если эти операторы подчиняются условию (27) и условию (52), означаящему, что каждый из трех операторов V_k^u , $k = 1, 2, 3$, не содержит никаких ложных компонент в любом координатном представлении и для любой функции Ψ данного класса:

$$\left\langle \mathbf{r}_i \left| \sum_{k=1}^3 V_k^{uu}(\mathbf{r}_k) \right| \Psi(\mathbf{r}_i) \right\rangle \neq 0, \quad (53)$$

$$\left\langle \mathbf{r}_i \left| \sum_{k=1}^3 V_k^{us}(\mathbf{r}_k) \right| \Psi(\mathbf{r}_i) \right\rangle \equiv 0, \quad i = 1, 2, 3.$$

Построенные выше остаточные слагаемые (40) центральных взаимодействий являются физическими. Действительно, по построению подсуммы (40) рядов (31) подчиняются соотношениям (27), а из ряда V_k^u нельзя выделить подсуммы V_k^{uu} и V_k^{us} со свойствами (53).

Для примера приведем в явном виде ложные и физические слагаемые кулоновских взаимодействий. Согласно (44) при условии (42)

$$V_k^s(x_k, y_k) = z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}} \frac{16}{3\pi^2} \frac{1}{\sqrt{x_k^2 + y_k^2}},$$

$$V_k^u(x_k, y_k) = z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}} \left[\frac{1}{x_k} - \frac{16}{3\pi^2} \frac{1}{\sqrt{x_k^2 + y_k^2}} \right],$$

а при условиях (43)

$$V_k^s(x_k, y_k) = z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}} \frac{64}{15\pi^2} \frac{x_k^2 - y_k^2}{(x_k^2 + y_k^2)^{3/2}},$$

$$V_k^u(x_k, y_k) = z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}} \left[\frac{1}{x_k} - \frac{64}{15\pi^2} \frac{x_k^2 - y_k^2}{(x_k^2 + y_k^2)^{3/2}} \right].$$

Рассмотрим случай трех тождественных частиц. Так как теперь парные взаимодействия описываются одной и той же функцией F :

$$V_k(x_k) = F(x_k) = \sum_{L=0}^{\infty} F^L(r) Y_{L00}^{00}(\Omega_k), \quad k = 1, 2, 3,$$

частицы имеют равные массы ($m_1, m_2 = m_3$) и согласно (1), (2) и (31)

$$\gamma_{12}, \gamma_{23}, \gamma_{31} = \pi/3, \quad V_1^L(r), V_2^L(r), V_3^L(r) = F^L(r), \quad L = 0, 2, \dots,$$

то условие (38) не выполняется, а условия (39) выполняются. Следовательно, для любых центральных парных взаимодействий в системе трех тождественных частиц всегда существует разбиение на физические и ложные слагаемые, причем гиперсферические ряды физических слагаемых содержат все потенциальные гипергармоники за исключением гипергармоники Y_{200}^{00} , а ряды ложных слагаемых содержат только эту гипергармонику:

$$V_k = V_k^u + V_k^s,$$

$$V_k^u(\mathbf{r}_k) = F^0(r) Y_{000}^{00}(\Omega_k) + \sum_{L=4,6,\dots} F^L(r) Y_{L00}^{00}(\Omega_k), \quad (54)$$

$$V_k^s(\mathbf{r}_k) = F^2(r) Y_{200}^{00}(\Omega_k), \quad k = 1, 2, 3.$$

Как было показано выше, из существования такого разбиения следует его единственность: никакого другого разбиения на слагаемые, подчиняющиеся одновременно и условиям (27), и условиям (53), не существует.

Для полноты остается показать, что в случае трех тождественных частиц остаточные слагаемые $(I - S^+)V_k$ центральных взаимодействий не являются физическими. В этом случае полное взаимодействие симметрично по

любым перестановкам частиц — и парным, и циклическим: $S^+V = V$ и $(I - S^+)V = 0$. Парные взаимодействия не симметричны относительно циклических перестановок, поэтому для каждого из них существует разбиение

$$V_k = A_k + B_k, \quad A_k \equiv S^+V_k, \quad B_k \equiv (I - S^+)V_k, \quad k = 1, 2, 3, \quad (55)$$

на нетривиальные слагаемые A_k и B_k , заведомо удовлетворяющие первому условию определения физических и ложных слагаемых, т. е. условиям (27):

$$V = \sum_{k=1}^3 V_k = \sum_{k=1}^3 A_k \neq 0, \quad \sum_{k=1}^3 B_k \equiv 0.$$

Исследуем, подчиняются ли слагаемые A_k второму условию, т. е. соотношениям (53). Как следует из известного представления симметризованных гипергармоник [19], среди всех гипергармоник Y_{Laa}^{00} только одна гипергармоника Y_{200}^{00} отображается оператором S^+ в тождественный нуль: $S^+Y_{200}^{00} = 0$. Значит, $(I - S^+)Y_{200}^{00} = Y_{200}^{00}$. Поэтому только такая гипергармоника отсутствует в разложении слагаемого A_k и содержится с единичным коэффициентом в разложении слагаемого B_k :

$$\begin{aligned} A_k(\mathbf{r}_k) &= \frac{1}{3} \sum_{L=0,4,6,\dots} F^L(r) (Y_{L00}^{00}(\Omega_1) + Y_{L00}^{00}(\Omega_2) + Y_{L00}^{00}(\Omega_3)), \\ B_k(\mathbf{r}_k) &= F^2(r)Y_{200}^{00}(\Omega_k) + C_k(\mathbf{r}_k), \\ C_k(\mathbf{r}_k) &\equiv \frac{1}{3} \sum_{L=4,6,\dots} F^L(r) (2Y_{L00}^{00}(\Omega_k) - Y_{L00}^{00}(\Omega_i) - Y_{L00}^{00}(\Omega_j)). \end{aligned} \quad (56)$$

Из соотношений $S^+Y_{200}^{00} = 0$ и $B_1 + B_2 + B_3 \equiv 0$ следует, что $C_1 + C_2 + C_3 \equiv 0$. Ряды (56) исследуемых функций A_k перепишем в виде

$$A_k(\mathbf{r}_k) = \sum_{L=0,4,6,\dots} \sum_{a=0}^{L/2} F^L(r) Y_{La0}^{00}(\Omega_k) + C_k(\mathbf{r}_k).$$

Как видно, функции A_k , $k = 1, 2, 3$, содержат нетривиальные компоненты C_k , взаимно компенсирующиеся при суммировании по всем парам частиц. Значит, условие (53) не выполняется. Следовательно, остаточные слагаемые A_k не являются физическими. Вычтем из функций A_k слагаемые C_k и добавим их к функциям B_k . В итоге получим искомые физические и ложные слагаемые, подчиняющиеся и условиям (27) и (53):

$$V_k^u = A_k - C_k, \quad V_k^s = B_k + C_k, \quad k = 1, 2, 3.$$

Разложения таких слагаемых имеют вид (54), что и требовалось доказать.

Отметим, что в случае тождественных частиц разбиения (54) и (55), (56) эквивалентны в смысле суммирования по всем парам частиц:

$$V = \sum_{k=1}^3 V_k^u = \sum_{k=1}^3 A_k.$$

Однако называть физическими слагаемые A_k , содержащие нефизические компоненты C_k , представляется некорректным, а для анализа свойств полного взаимодействия удобнее использовать физические слагаемые V_k^u , потому что их разложения более просты, чем разложения симметризованных слагаемых A_k .

3. ТОЧНЫЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ТРЕХ ЧАСТИЦ

Точными решениями далее называем функции, удовлетворяющие **шести-мерным** уравнениям Шредингера (4) или Фаддеева (6) и представимые в виде **конечных** произведений и (или) сумм, содержащих только числовые коэффициенты и известные элементарные или специальные функции. Такие решения интересны как модельные для аналитических исследований и как эталонные для отладки численных алгоритмов, но они известны лишь в исключительных случаях.

Самое простое точное решение — ложное решение уравнений Фаддеева [1]. Так как ложное решение не несет никакой информации о координатной зависимости парных взаимодействий и отвечает тривиальному решению уравнения Шредингера, то близость ложных решений, найденных аналитически, и ложных решений, вычисленных интегрированием уравнений Фаддеева, не является критерием точности проверяемого численного алгоритма.

Точными являются известные решения уравнений Фаддеева и Шредингера с осцилляторными взаимодействиями [1, 10, 18, 26]. В этом случае имеются только связанные трехчастичные состояния с положительной полной энергией E . Поэтому осцилляторные фаддеевские компоненты могут быть модельными для приближенного описания трехчастичных связанных состояний и эталонными только при тестах алгоритмов численного решения задачи на трехчастичные связанные состояния с $E > 0$. Класс таких задач слишком узок и состоит из задач с парными взаимодействиями запирающего типа: $V_k(\mathbf{x}_k) \rightarrow \infty$, $x_k \rightarrow \infty$, $k = 1, 2, 3$.

В случае взаимодействий (3) центробежного типа

$$V_k(\mathbf{x}_k) \equiv c_k x_k^{-2} I_k^d, \quad I_k^d \equiv \sum_{b \leq d} P_k^b, \quad P_k^b \equiv \sum_{\beta=-b}^b |Y_{b\beta}(\hat{x}_k)\langle Y_{b\beta}(\hat{x}_k)|, \quad (57)$$

где $k = 1, 2, 3$; c_k — ненулевая действительная константа; известны [27–29, 47] лишь факторизованные точные решения уравнений Фаддеева — функции типа $\Psi_i^\varepsilon = Z_p(z)F_i(\Omega_i; p^2)$, где $i = 1, 2, 3$; Z_p — функция Бесселя [3]; а $z \equiv r\sqrt{E}$. Если в качестве Z_p выбрать функцию Ханкеля $H_p^{(1)}(z)$ или модифицированную функцию Бесселя $K_p(|z|)$, то в пределе $r \rightarrow \infty$ факторизованные точные решения будут иметь качественно похожие на физические [13], осциллирующие в случае $E > 0$ или экспоненциально убывающие в случае $E < 0$ асимптотики. Поэтому такие точные решения и их линейные комбинации можно использовать и как модельные, и как эталонные для тестирования численных алгоритмов интегрирования уравнений Фаддеева и Шредингера для задачи рассеяния и задачи на связанные трехчастичные состояния. Ввиду отмеченной универсальности и значимости точных решений $\Psi_i^\varepsilon = Z_p(z)F_i^\varepsilon(\Omega_i; p^2)$, $i = 1, 2, 3$, как эталонных, исследование их гиперугловой зависимости актуально и интересно.

В работе [47] для построения функции F_1^ε в случае трех тождественных бозонов с S -волновыми взаимодействиями (57) и $\ell = 0$ численно решалось одномерное интегродифференциальное уравнение Фаддеева. Позже в работе [27] для уравнения такого типа, но в общем случае ($\ell = 0$ или $\ell \neq 0$), был доказан критерий существования точных решений, представимых в виде конечных линейных комбинаций базисных функций (9) и коэффициентов, подчиненных системам линейных уравнений.

Предложенный в работе [27] метод построения и доказательства критерия существования точных решений является аналитическим и достаточно простым, так как в его рамках исходная система уравнений Фаддеева сводится к анализу на совместность и последующему решению конечных систем линейных уравнений. Поэтому и для дальнейшего развития теории Фаддеева, и для прикладных аналитических исследований представлялось интересным обобщение этого метода для систем из трех не обязательно тождественных частиц с центральными ($d = \infty$) или нецентральными ($d < \infty$) взаимодействиями (57). Такое обобщение [28] излагается в п. 3.1.

Как известно [8], радиальное двухчастичное уравнение Шредингера с потенциалом $v(x) = cx^{-2}$ и угловым моментом b при положительной энергии e и константе c , подчиненной условию $c > c_b \equiv -(b + 1/2)^2$, имеет слабо сингулярное на малых расстояниях x , но физически допустимое ($x\psi^b \rightarrow 0, x \rightarrow 0$) решение ψ^b , описывающее рассеяние. При $c < c_b$ это же уравнение имеет и дискретный спектр, причем основное состояние отвечает энергии $e = -\infty$. В этом состоянии частицы находятся в бесконечно малой окрестности их центра масс ($x = 0$), поэтому говорят, что происходит «падение» частиц в точку $x = 0$.

Условия «падения» в системе трех частиц с центробежными взаимодействиями (57), т. е. ограничения на константы c_1, c_2, c_3 , в общем случае

неизвестны. Поэтому в п. 3.2 особое внимание уделяется данному в работе [29] анализу простейших точных решений (случай S -волновых взаимодействий (57) и $\ell = 0$): описывается построение таких решений при всех допустимых конечных константах, в физически интересных пределах одной и двух бесконечно больших по модулю констант и исследуется разбиение точных фаддеевских компонент на физические и ложные слагаемые.

В п. 3.3 исследуются на достоверность численные результаты работы [47].

3.1. Построение и критерий существования точных решений. Поставим задачу следующим образом: в случае взаимодействий (57) доказать в классе \mathcal{B}^ε , $\varepsilon = (E, \ell, m)$, критерий существования и сформулировать метод построения всех решений уравнения Шредингера (4) типа

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{r}_i; p^2) = r^{-2} Z_p(z) F^\varepsilon(\Omega_i; p^2), \quad z \equiv r\sqrt{E}, \quad (58)$$

$$F^\varepsilon(\Omega_i; p^2) = \sum_{L=s}^t \sum_{ab}^i B_{Lab}^\ell Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad (59)$$

где s — минимально возможное при данном ε значение гипермомента; $t < \infty$; а ${}^i B_{Lab}^\ell$ и p — некоторые постоянные.

Приступим к построению. Умножив уравнение Шредингера (4), записанное в представлении $\langle r, \Omega_i |$, на r^2 , получаем уравнение

$$\left[r^{-3} \partial_r (r^5 \partial_r) + r^2 E \right] \Psi^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \left[\mathbf{L}^2(\Omega_i) + \sum_{k=1}^3 I_k^d c_k \sec^2 \varphi_k \right] \Psi^\varepsilon(\mathbf{r}_i). \quad (60)$$

В его левой части все операторы действуют только на аргумент r , а в правой — на все остальные переменные Ω_i . Дифференциальные уравнения такого типа могут иметь факторизованные решения, которые строятся методом разделения переменных [2]. Применим этот метод к уравнению (60): подстановкой (58) сведем его к двум уравнениям, связанным посредством пока не известной постоянной разделения p^2 переменных r и Ω_i . Первое уравнение — хорошо изученное при всех комплексных z и p уравнение Бесселя [3] с пока не определенным p :

$$(z^2 \partial_z^2 + z \partial_z + z^2 - p^2) Z_p(z) = 0, \quad (61)$$

а второе уравнение можно интерпретировать как трехчастичное уравнение Шредингера на \mathcal{S}^5 с параметром $p^2 - 4$ в качестве энергии:

$$\left[\mathbf{L}^2(\Omega_i) + \sum_{k=1}^3 I_k^d c_k \sec^2 \varphi_k - (p^2 - 4) \right] F^\varepsilon(\Omega_i; p^2) = 0. \quad (62)$$

Сведем это уравнение к уравнениям фаддеевского типа. Ясно, что фаддеевские компоненты искомой функции (58) имеют вид

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i; p^2) = r^{-2} Z_p(z) F_i^\varepsilon(\Omega_i; p^2), \quad i = 1, 2, 3, \quad (63)$$

поэтому функция F^ε представляется суммой своих компонент F_k^ε :

$$F^\varepsilon(\Omega_i; p^2) = F_i^\varepsilon(\Omega_i; p^2) + \sum_{k \neq i} F_k^\varepsilon(\Omega_k(\Omega_i; \gamma_{ki}); p^2). \quad (64)$$

Используя (63) и (64) и тот факт, что Z_p — решение уравнения (61), выводим из уравнений Фаддеева (6) в \mathcal{R}^6 уравнения фаддеевского типа на \mathcal{S}^5 :

$$\cos^2 \varphi_i \left[\mathbf{L}^2(\Omega_i) + 4 - p^2 \right] F_i^\varepsilon(\Omega_i; p^2) = -c_i I_i^d \sum_{k=1}^3 F_k^\varepsilon(\Omega_k; p^2), \quad i = 1, 2, 3. \quad (65)$$

Для их редукции будем использовать анзацы

$$F_i^\varepsilon(\Omega_i; p^2) = \sum_{L=s}^t \sum_{ab} B_{Lab}^{i\ell} Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (66)$$

с постоянными t и $B_{Lab}^{i\ell}$ и две ключевые формулы. Первая из них связывает коэффициенты разложений функции $F^\varepsilon(\mathbf{r}_i; p^2)$ и ее компонент $F_k^\varepsilon(\mathbf{r}_k; p^2)$:

$${}^i B_{Lab}^\ell = B_{Lab}^{i\ell} + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} B_{La'b'}^{k\ell} \quad (67)$$

и получается подстановкой (59) и (66) в (64) и последующим применением правила (11). Вторая ключевая формула

$$\cos^2 \varphi_i Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i) = \sum_{L'=L_-(L)}^{L+2} C_{L'L}^{ab} Y_{L'ab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad (68)$$

где $L_-(L) \equiv L - 2(1 - \delta_{Ls})(1 - \delta_{L,a+b})$; $L = a + b + 2n$;

$$C_{LL}^{ab} = \frac{1}{2} \left[1 + \frac{(b-a)(a+b+1)}{(L+1)(L+3)} \right], \quad C_{LL'}^{ab} = C_{L'L}^{ab};$$

$$C_{L,L-2}^{ab} = \frac{1}{4} \left[\left(1 - \frac{a+b}{L} \right) \left(1 + \frac{a+b}{L+2} \right) \right]^{1/2} \left[1 - \left(\frac{a-b}{L+1} \right)^2 \right]^{1/2};$$

следует из (8) и известного выражения [3] функции ${}_q P_n^{(a+1/2, b+1/2)}(q)$ аргумента $q \equiv \cos 2\varphi$ через функции $P_m^{(a+1/2, b+1/2)}(q)$ с $m = n, n \pm 1$.

Приступим к редукции системы (65) в самом общем случае трех центральных взаимодействий (57), когда $I_k^d = I$, $k = 1, 2, 3$. Используя анзац (66) и формулы (10), (67), (68), сводим исследуемую систему (65) к трем равным нулю линейным комбинациям гипергармоник $Y_{Lab}^{\ell m}$ с $L = s, s+2, \dots, t+2$. Приравнявая нулю коэффициент перед каждой гипергармоникой, получаем искомого систему линейных уравнений для неизвестных $B_{Lab}^{i\ell}$. Коэффициенты перед всеми гипергармониками $Y_{t+2,ab}^{\ell m}$ равны нулю, если $p^2 = (t+2)^2$. Используя эту связь и обозначения (67), остальные линейные уравнения записываем в порядке возрастания индекса L . Тогда для неизвестных $B_{Lab}^{i\ell}$ с $L = s, s+2, \dots, t-2$ получится система с ленточной матрицей \mathbf{A}^t конечной размерности $3N$:

$$\sum_{L'=L-(L)}^{L+2} [(L'+2)^2 - p^2] C_{L'L}^{ab} B_{L'ab}^{i\ell} + c_i B_{Lab}^{\ell} = 0, \quad (69)$$

а для неизвестных $B_{tab}^{i\ell}$ — система уравнений с неразряженной матрицей \mathbf{M}^t :

$$c_i B_{tab}^{\ell} = c_i \left[B_{tab}^{i\ell} + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{t\ell} B_{ta'b'}^{k\ell} \right] = \\ = 4(t+1) C_{t,t-2}^{ab} B_{t-2,ab}^{i\ell}. \quad (70)$$

Матрица \mathbf{M}^t вырождена, так как однородная система (70) имеет нетривиальное решение

$$B_{tab}^{1\ell} = - \sum_{k=2}^3 \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{k1}) | a'b' \rangle_{t\ell} B_{ta'b'}^{k\ell}, \quad \forall B_{tab}^{k\ell}, \quad \forall a, b,$$

в чем нетрудно убедиться, используя свойства (2) и известные соотношения симметрии, ортонормированности и правила сумм [23] для матричных элементов оператора $K(\gamma_{ki})$. Следовательно, по известной в линейной алгебре теореме [4] неоднородная система (70) не совместна.

Итак, уравнение Шредингера (4) с центральными взаимодействиями (57) не имеет нетривиальных решений типа (58), (59).

Пусть все взаимодействия нецентральные и определены суммами (57), где $b = 0, 1, \dots, d < \infty$. Если в искомым рядах (66) $t \leq d$, то $I_i^d = I$ для всех функций $Y_{Lab}^{\ell m}$ с $L \leq t$, а в системах (69) и (70) индексы a, a' и b, b' принимают любые допустимые значения. Поэтому $\det \mathbf{M}^t = 0$, и, как и в рассмотренном выше случае, точных решений типа (66) нет. Если же $t > d$, то $I_i^d Y_{Lab}^{\ell m} = 0$ при $b > d$. Поэтому в системах (69) и (70) индексы b и b' не превышают d , а индексы a и a' ограничены условиями треугольника.

При таких ограничениях матрица \mathbf{M}^t может быть невырожденной, а матрица \mathbf{A}^t — вырожденной. Тогда обе системы (69) и (70) нетривиально совместны.

Итак, если в случае нецентральных взаимодействий (57) с индексом $b = 0, 1, \dots, d < \infty$ выполняются условия

$$p^2 = (t + 2)^2, \quad t > d, \quad \det \mathbf{A}^t = 0, \quad \det \mathbf{M}^t \neq 0, \quad (71)$$

а постоянные $B_{Lab}^{i\ell}$ удовлетворяют системам (69) и (70), то функция Ψ^ε , заданная формулами (58), (59) и (67), есть решение уравнения Шредингера (60).

Докажем, что эти же условия являются необходимыми. Пусть функция Ψ^ε типа (58), (59) удовлетворяет уравнению Шредингера (60). Дословно повторим вывод соотношения $p^2 = (t + 2)^2$ и систем (69), (70). Теперь коэффициенты $B_{Lab}^{i\ell}$ удовлетворяют этим системам по определению. Так как однородная система (69) имеет решение, то ее матрица \mathbf{A}^t вырождена. Неоднородная система (70) тоже имеет решение. Следовательно, $\det \mathbf{M}^t \neq 0$, что, как было показано, возможно только при $t > d$.

Опишем одну из возможных схем вычисления коэффициентов $B_{Lab}^{i\ell}$.

Так как элементы матриц \mathbf{A}^t и \mathbf{M}^t зависят от отношений масс посредством кинематических углов (1) и от констант взаимодействий, то условия (71) выполняются при определенных значениях этих масс и констант. Из всех $3N$ строк матрицы \mathbf{A}^t только N строк содержат параметр $q = c_k$ одного из взаимодействий (57). Поэтому $\det \mathbf{A}^t$ можно представить полиномом степени N по целым степеням аргумента $q = c_k$ с коэффициентами C_n , зависящими от двух других параметров c_i, c_j и двух отношений масс частиц. Массу одной из частиц можно принять за единицу масс. При нашем выборе $q = c_2$ и $m_3 = 1$ получается характеристическое уравнение

$$\det \mathbf{A}^t = \sum_{n=0}^N C_n(c_1, c_3, m_1, m_2) c_2^n = 0, \quad (72)$$

а анализ условия $\det \mathbf{A}^t = 0$ сводится к исследованию всех его действительных корней $c_2^\nu = c_2(c_1; c_3, m_1, m_2)$, $\nu = 1, 2, \dots$, как функций аргумента c_1 и параметров c_3, m_1, m_2 , причем параметры m_1 и m_2 берутся лишь такими, при которых $\det \mathbf{M}^t \neq 0$.

Пусть при данных и конечных c_1, c_3 и m_1, m_2 найден некоторый ограниченный корень c_2^ν уравнения (72). Положим $c_2 = c_2^\nu$, тогда по крайней мере одно из уравнений системы (69) будет линейно зависимым от всех остальных, поэтому одно неизвестное $B_{Lab}^{1\ell}$ всегда можно выбрать произвольным образом. Для определенности полагаем $B_{Lab}^{1\ell} = 1$ при $L = a + b = s$. Далее из системы (69) находим все неизвестные $B_{Lab}^{i\ell}$ с $L \leq t - 2$. Найденные коэффициенты $B_{t-2,ab}^{i\ell}$ подставляем в правые части уравнений (70) и решаем их относительно $B_{tab}^{i\ell}$. Таким образом, находим все коэффициенты $B_{Lab}^{i\ell}$, отвечающие выбранному корню c_2^ν .

Теперь опишем только те пределы одной или двух бесконечно больших по модулю констант c_1 и $c_2 = c_2'$, в которых при конечных постоянных c_3 и m_1, m_2 решения уравнений (69) и (70) ограничены: $|B_{Lab}^{i\ell}| < \infty$ при всех возможных индексах. Во всех иных пределах ($|B_{Lab}^{i\ell}| = \infty$ хотя бы для одной совокупности индексов) разложения (66) искомым компонент F_i теряют смысл, ибо имеют хотя бы один бесконечный коэффициент $B_{Lab}^{i\ell}$.

Пусть при $c_1 \rightarrow \infty$ некоторый корень c_2' имеет конечный предел c_2^s . При небольших t такой корень и все соответствующие ему неизвестные $B_{Lab}^{i\ell}$ удается выразить явно простыми функциями аргумента c_1 и всех параметров: $c_2' = c_2'(c_1; c_3, m_1, m_2)$, $B_{Lab}^{i\ell}(1; c_3, m_1, m_2)$, а затем перейти к пределу $c_1 = \infty$. При больших t таких выражений не существует, но можно вычислить предельные значения корня c_2' и соответствующие ему предельные коэффициенты $B_{Lab}^{i\ell}$ без экстраполяции. Опишем такой алгоритм.

В уравнениях (69) и (70) положим $c_2 = c_2^s$. Уравнения, содержащие параметр c_1 , сначала поделим на c_1 , а затем перейдем к пределу $c_1 = \infty$. Тогда такие уравнения примут вид

$${}^i B_{Lab} = B_{Lab}^{1\ell} + \sum_{k \neq 1} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{k1}) | a'b' \rangle B_{La'b'}^{k\ell} = 0, \quad \forall L < t - 2, a, b, \quad (73)$$

где $i = 1$, а остальные не изменятся. Далее, решив данные системы уравнений, сразу получаем предельные коэффициенты $B_{Lab}^{i\ell}$. Заметим, что в силу (73) ряд (59) предельной функции F в представлении Ω_1 не содержит гипергармоник с $a + b < d$:

$$F(\Omega_i; p^2) = \sum_{L=s}^t \sum_{ab}^{L/2} {}^i B_{Lab} Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i). \quad (74)$$

Анализ других предельных решений принципиально не отличается от данного выше: если $|c_2'| \rightarrow \infty$ при $c_1 \rightarrow c_1^s$ и $|c_1^s| < \infty$, то в формулах (73) и (74) полагаем $i = 2$; если же $|c_2'| \rightarrow \infty$ при $|c_1| \rightarrow \infty$, то в этих же формулах $i = 1, 2$, а $k = 3$.

Итак, случай взаимодействий (57) с индексом $b = 1, 2, \dots, d < \infty$ полностью рассмотрен. Все остальные случаи, когда индекс b пробегает произвольную, но конечную последовательность ($b \leq d < \infty$), можно исследовать тем же способом и показать, что независимо от выбора такой последовательности сформулированный выше критерий остается в силе.

Если две или все три частицы тождественные, то из-за условий перестановочной симметрии на коэффициенты B_{ab}^{iL} накладываются дополнительные ограничения, что никак не влияет на окончательные выводы о существовании точных решений.

Например, пусть частицы p_1, p_2, p_3 — тождественные бозоны. Известные условия полной перестановочной симметрии [13]

$$\Psi_i^\varepsilon = P_{ki}\Psi_k^\varepsilon, \quad \Psi^\varepsilon = P_{ki}\Psi^\varepsilon = (I + P_{12}P_{23})\Psi_i^\varepsilon, \quad k \neq i = 1, 2, 3, \quad (75)$$

выполняются для искомым фаддеевских компонент (63)–(66) и отвечающей им функции (58), если положить $B_{Lab}^{k\ell} = B_{Lab}^{1\ell}$ и $B_{Lab}^{1\ell} = 0$ при нечетных b .

3.2. Примеры точных решений. Для пояснения описанного выше метода приведем точные решения в самом простом случае, когда все взаимодействия (57) S -волновые ($d = 0$), а полный угловой момент нулевой.

Так как $\ell = 0$, то $\varepsilon = (0, 0, 1)$, индексы a', b', a, b подчинены условиям $a' = b'$ и $a = b$, а индексы L и t — всегда четные числа: $L = 2(n - 1)$, $t = 2(m - 1)$, где m и n — натуральные, $s \equiv \min L = 0$. Из-за того, что $d = 0$, полный угловой базис для разложения фаддеевских компонент Ψ_i^ε и F_i^ε образует гипергармоники $Y_{L00}^{00}(\Omega_i)$, а для разложения решений Ψ^ε и F^ε уравнений Шредингера (4), (60) — гипергармоники $Y_{La a}^{00}$.

По той же причине индексы a', b', a и b могут принимать в уравнениях (69) и (70) только нулевые значения ($B_{Lab}^{i0} = 0$, если $a \neq 0$ или $b \neq 0$). Для сокращения записи опустим индексы ε и ℓ и обозначим $B_L^i \equiv B_{L00}^{i\ell}$ и ${}^i B_{La} \equiv {}^i B_{La a}$. В этих обозначениях искомые компоненты (66) — однократные суммы

$$F_i(\Omega_i; p^2) = \sum_{L=0}^t B_L^i Y_{L00}^{00}(\Omega_i) = \pi^{-3/2} \sum_{n=1}^m B_L^i \frac{\sin 2n\varphi_i}{\sin 2\varphi_i}, \quad i = 1, 2, 3, \quad (76)$$

зависящие только от соответствующих углов φ_i . Уравнения (65), которым подчиняются такие компоненты, подстановкой

$$F_i(\Omega_i; p^2) = \frac{4}{\sqrt{\pi}} \operatorname{cosec} 2\varphi_i U_i(\varphi_i; p^2) \mathcal{Y}_{00}^{00}(\Omega_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (77)$$

и последующим проектированием на бисферические гармоники $\mathcal{Y}_{00}^{00} = (4\pi)^{-1}$ сводятся к одномерным интегродифференциальным уравнениям

$$\begin{aligned} \left[\partial_{\varphi_i}^2 + p^2 - \frac{c_i}{(\cos \varphi_i)^2} \right] U_i(\varphi_i; p^2) = \\ = \frac{c_i}{(\cos \varphi_i)^2} \sum_{k \neq i} \frac{1}{|\sin 2\gamma_{ki}|} \int_{C_-(\varphi_i; \gamma_{ki})}^{C_+(\varphi_i; \gamma_{ki})} d\varphi_k U_k(\varphi_k; p^2), \end{aligned} \quad (78)$$

$$C_-(\varphi_i; \gamma_{ki}) \equiv |\varphi_i - |\gamma_{ki}||, \quad C_+(\varphi_i; \gamma_{ki}) \equiv \min \{ \varphi_i + \gamma_{ki}, \pi - \varphi_i - |\gamma_{ki}| \}.$$

Если ряды (76) удовлетворяют уравнениям (65), то в силу связей (77) решениями уравнений (78) будут ряды

$$U_i(\varphi_i; p^2) = \sum_{L=0}^t B_L^i \sin 2n\varphi_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad n = L/2 + 1, \quad (79)$$

а множитель $F^\varepsilon \equiv F$ соответствующего точного решения (58)

$$\Psi(\mathbf{r}_i; p^2) = \sum_{k=1}^3 \Psi_k(\mathbf{r}_k; p^2) = r^{-2} Z_p(z) F(\Omega_i; p^2) \quad (80)$$

можно будет вычислить как функцию двух переменных φ_i и $u_i = \mathbf{x}_i \mathbf{y}_i / x_i y_i$:

$$F(\Omega_i; p^2) \equiv F_i(\varphi_i; p^2) + \sum_{k \neq i} F_k(\varphi_k(\varphi_i, u_i; \gamma_{ki}); p^2), \quad (81)$$

$$\varphi_k(\varphi_i, u_i; \gamma_{ki}) = \arccos \left[\cos^2(\gamma_{ki} - \varphi_i) + \frac{1}{2}(u_i - 1) \sin 2\gamma_{ki} \sin 2\varphi_i \right]^{1/2},$$

или же как двукратную сумму

$$F(\Omega_i; p^2) = \sum_{L=0}^t \sum_{a=0}^{L/2} {}^i B_{La} Y_{La}^{00}(\Omega_i), \quad (82)$$

$${}^i B_{La} \equiv \delta_{a0} B_L^i + \sum_{k \neq i} \langle aa | K(\gamma_{ki}) | 00 \rangle_{L0} B_L^k. \quad (83)$$

Согласно формулам (36), (70) матрица $\mathbf{M}^t = 0$ вырождена при $t = 0, 2$ и всегда не вырождена, если $t \geq 4$. Следовательно, при $t = 0, 2$ точных решений нет. При $t = 4$ разложения (76), (79) и (82) точных решений содержат минимальное число слагаемых. Поэтому в качестве эталонных предлагается использовать именно такие решения. Опишем их свойства в случае разных частиц, а затем в случае трех тождественных бозонов.

Случай трех разных частиц. При $t = 4$ уравнение (72) — квадратное:

$$\det \mathbf{A}^4 = \det (\mathbf{D}^2 \mathbf{D}^1 - \mathbf{I}) = A c_2^2 + B c_2 + C = 0. \quad (84)$$

При любых действительных c_1, c_3 и m_1, m_2 его коэффициенты

$$\begin{aligned}
 A &\equiv 15 + 2(t_1^2 - 1)c_1 + 2(t_3^2 - 1)c_3, \\
 B &\equiv 2(t_1^2 - 1)c_1^2 + 2(t_3^2 - 1)c_3^2 - 390 - \\
 &\quad - 2(16t_1^2 + 5t_1 - 36)c_1 - 2(16t_3^2 + 5t_3 - 36)c_3 + \\
 &\quad + \frac{2}{3}[4(t_1^2 + t_2^2 + t_3^2) + t_1 + t_2 + t_3 - 12]c_1c_3 - \\
 &\quad - \frac{2}{3}[\cos 2(\gamma_{12} - \gamma_{31}) + \cos 2(\gamma_{12} - \gamma_{23}) + \cos 2(\gamma_{31} - \gamma_{23})]c_3, \\
 C &\equiv 15(c_1^2 + c_3^2) + 2[(t_2^2 - 1)(c_1 + c_3) - 16t_2^2 - 5t_2 + 36]c_1c_3 - \\
 &\quad - 390(c_1 + c_3) + 1800, \\
 t_1 &\equiv \cos 2\gamma_{12}, \quad t_2 \equiv \cos 2\gamma_{31}, \quad t_3 \equiv \cos 2\gamma_{23}
 \end{aligned} \tag{85}$$

таковы, что дискриминант $D \equiv B^2 - 4AC$ положителен. Поэтому всегда имеются два различных действительных корня c_2^+ и c_2^- :

$$c_2^\pm(c_1; c_3, m_1, m_2) = -\frac{B}{2A} \left[1 \pm \text{sign}(c_1^s - c_1) \left(1 - 4\frac{AC}{B^2} \right)^{1/2} \right]. \tag{86}$$

В координатной плоскости (c_1, c_2) (для примера см. рис. 3) график всюду непрерывной функции c_2^- имеет наклонную асимптоту

$$\begin{aligned}
 c_2 = -c_1 - \frac{1}{3} \left[7 + 4 \frac{2m_1 + 2m_2 + 1}{(m_1 + m_2)^2} \right] c_3 + \\
 + \frac{1}{2} \left(37 + 5 \frac{m_1 + m_2 + 1}{m_1 m_2} \right), \tag{87}
 \end{aligned}$$

а график разрывной в нуле c_1^s коэффициента A функции c_2^+ имеет вертикальную и горизонтальную асимптоты:

$$c_1 = c_1^s \equiv \frac{15 + 2(t_3^2 - 1)c_3}{2(1 - t_1^2)}, \quad c_2 = c_2^s \equiv \frac{15 + 2(t_2^2 - 1)c_3}{2(1 - t_1^2)}. \tag{88}$$

Точка их пересечения (c_1^s, c_2^s) лежит на прямой

$$c_2 = \frac{1 - t_2^2}{1 - t_3^2} c_1 + \frac{15}{2} \frac{t_2^2 - t_3^2}{(1 - t_1^2)(1 - t_3^2)}. \tag{89}$$

При любых фиксированных m_1, m_2 и c_3 верны неравенства $c_2^+ < c_2^s$, если $c_1 < c_1^s$, и $c_2^+ > c_2^s$, если $c_1 > c_1^s$. Поэтому если c_3 возрастает или убывает, то точка (c_1^s, c_2^s) смещается по этой прямой вниз или, соответственно, вверх. Таким же образом при изменении c_3 смещаются и графики функций c_2^\pm .

В частном случае $m_1=10, m_2=20, c_1 = -2, c_3 = -40$ корни c_2^\pm , вычисленные по формулам (85) и (86), таковы: $c_2^+ = 14,7647, c_2^- = 90,3522$; а компоненты $U_i^\pm(\varphi_i; 36)$ изображены на рис.4 как функции угла $\varphi \equiv \varphi_i, i = 1, 2, 3$. Рисунок 4 иллюстрирует существование двух типов точных решений уравнений (78). Опишем эти типы.

При небольших значениях $c_2 = c_2^+ \ll |c_3|$ существуют решения первого типа (U_1^+, U_2^+, U_3^+) . В разложениях (79) всех их компонент U_i^+ доминирует $(B_L^{i+} \ll B_t^{i+}, i = 1, 2, 3; L = 0, 2)$ базисная функция $\sin 2n\varphi_i$ с максимально возможным при данном $t = 4$ значением $n = 3$ (см. рис. 4, а).

Решения второго типа (U_1^-, U_2^-, U_3^-) существуют при больших по модулю значениях $c_2 = c_2^-$ и c_3 по сравнению с $|c_1|$. В разложениях компонент U_i^- таких решений все функции $\sin 2n\varphi_i,$

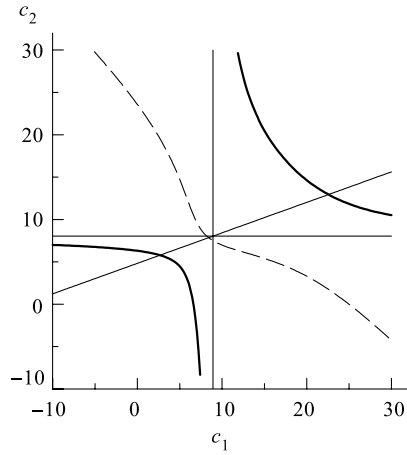


Рис. 3. Корни $c_2^\pm(c_1; c_3, m_1, m_2)$ уравнения (84) с коэффициентами (85) как функции аргумента c_1 в случае $c_3 = -2, m_1 = 2$ и $m_2 = 4$: сплошные кривые — c_2^+ ; штриховая — c_2^- . Тонкие сплошные линии — асимптоты (88) и наклонная прямая (89), образованная точками их пересечения

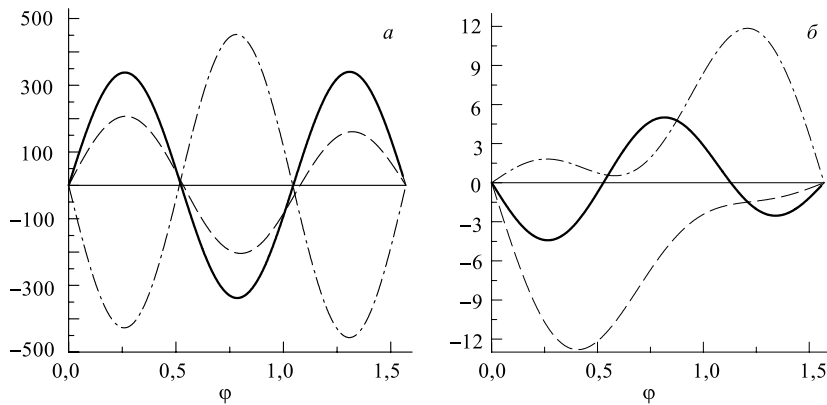


Рис. 4. Компоненты (79) в случае $m_1 = 10, m_2 = 20, c_1 = -2, c_3 = -40$. а) $c_2 = c_2^+ = 14,76474$: сплошная кривая — $U_1^+(\varphi; 36)$; штриховая — $U_2^+(\varphi; 36)$; штриховая с точками — $U_3^+(\varphi; 36)$; б) $c_2 = c_2^- = 90,3522$: сплошная кривая — $U_1^-(\varphi; 36)$; штриховая — $U_2^-(\varphi; 36)/3$; штриховая с точками — $U_3^-(\varphi; 36)/3$

$n = 1, 2, 3$, содержатся с коэффициентами, сравнимыми по порядку величины ($|B_L^{i-}| \sim |B_4^{i-}|, i = 1, 2, 3; L = 0, 2$), но компонента U_1^- подавлена ($|U_1^-| \ll |U_k^-|, k = 2, 3$) по сравнению с другими (см. рис. 4, б).

Решения (U_1^+, U_2^+, U_3^+) порождают решение Ψ^+ уравнения Шредингера (4), близкое к решению отвечающего ему свободного ($c_k = 0, k = 1, 2, 3$) уравнения. Действительно, пренебрегая коэффициентами $B_L^{i+}, L = 0, 2$, по формулам (76), (80), (82) и (83) получаем

$$\Psi^+(\mathbf{r}_i; 36) \approx r^{-2} Z_6(z) \sum_{a=0,1,2}^i B_{4a}^+ Y_{4aa}^{00}(\Omega_i).$$

Решению (U_1^-, U_2^-, U_3^-) отвечает решение Ψ^- уравнения Шредингера, обладающее другим физическим свойством: функция $|\Psi^-|^2$ выталкивается из области конфигурационного пространства \mathcal{R}^6 , где полное взаимодействие V отталкивающее, и локализуется в той области, где это взаимодействие притягивающее. Это свойство — следствие особой угловой зависимости компонент U_1^-, U_2^- и U_3^- . Ее иллюстрирует рис. 4, б. Компонента U_2^- пары сильно отталкивающихся ($c_2 = c_2^- \approx 90$) частиц p_1 и p_3 локализована в области $\varphi_2 < \pi/4$, далекой от окрестности точки их столкновения $\varphi_2 = \pi/2$, и, наоборот, компонента U_3^- пары сильно притягивающихся ($c_3 = -40$) частиц p_1 и p_2 локализована вблизи точки парного столкновения $\varphi_3 = \pi/2$. Оставшаяся компонента U_1^- из-за слабого притяжения ($c_1 = -2$) в паре частиц p_2 и p_3 имеет три сравнимых по модулю локальных экстремума, равномерно распределенных по всему отрезку $0 \leq \varphi_1 \leq \pi/2$.

В пределе $|c_1| = \infty$ и $c_2 = c_2^+ = c_2^s$ решения модифицированных уравнений (69) и (70) вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} f_1 &= 15 + c_3 (2t_2^2 + t_3 - \cos 2(\gamma_{12} - \gamma_{31}) - 1), \\ B_0^1 &= 1, \quad B_0^2 = \frac{1}{f_1} [2c_3(1 - t_2^2) - 15], \quad B_2^2 = -\frac{16}{5} B_0^2, \\ B_0^3 &= -1 - B_0^2, \quad B_2^3 = -\frac{16}{5} B_0^3, \quad B_2^1 = -(t_1 B_2^2 + t_2 B_2^3); \\ g_1 &= 2 \sin 2\gamma_{31} + \sin 2(\gamma_{12} - \gamma_{23}) + \sin (4\gamma_{23} - 2\gamma_{31}), \\ B_4^2 &= \frac{12}{f_1(1 - t_3^2)} (2t_2^2 - 2t_3 - \cos 2(\gamma_{12} - \gamma_{31}) + 1), \\ B_4^3 &= \frac{24}{f_1 g_1} (\sin (4\gamma_{12} - 2\gamma_{31}) + 2 \sin 2(\gamma_{12} - \gamma_{31}) - \\ &\quad - 3 \sin 2\gamma_{12} - \sin 6\gamma_{12} - \sin 3\gamma_{31}), \\ B_4^1 &= -K_3(\gamma_{12}) B_4^2 - K_3(\gamma_{31}) B_4^3, \end{aligned} \tag{90}$$

компоненты (76) имеют ложные слагаемые $B_0^i Y_{000}^{00}(\Omega_i)$, $i = 1, 2, 3$, а ряд (82) в представлении Ω_i , $i = 1$, выглядит наиболее просто, согласно формуле (74)

$$F(\Omega_i; 36) = \sum_{L=2}^4 \sum_{a=1}^{L/2} {}^i B_{La} Y_{Laa}^{00}(\Omega_i) \neq 0. \quad (91)$$

В пределе $c_1 = c_1^s$ и $c_2 = c_2^+ = \pm\infty$ решения модифицированных уравнений (69) и (70) удобно вычислять по формулам

$$\begin{aligned} f_2 &= 15 + 2c_3(t_3^2 - 1), \\ B_0^1 &= 1, \quad B_2^1 = -\frac{16}{5}, \quad B_0^3 = \frac{c_3}{f_2}(t_2 - \cos 2(\gamma_{12} - \gamma_{31})), \\ B_0^2 &= -1 - B_0^3, \quad B_2^3 = -\frac{16}{5}B_0^3, \quad B_2^2 = \frac{16}{5}(t_1 + t_2 B_0^3); \\ g_2 &= \sin 2(\gamma_{31} - \gamma_{12}) + \sin(2\gamma_{23} - 4\gamma_{31}) - 2\sin 2\gamma_{23}, \\ B_4^1 &= \frac{12}{f_2(t_2^2 - 1)}(2t_3^2 - 2t_2 - \cos 2(\gamma_{12} - \gamma_{23})), \\ B_4^3 &= \frac{24}{f_2 g_2}(2\sin 2(\gamma_{12} - \gamma_{31}) + \sin(4\gamma_{12} - 2\gamma_{23}) - \\ &\quad - 3\sin 2\gamma_{12} - \sin 6\gamma_{12} - \sin 2\gamma_{23}), \\ B_4^2 &= -K_3(\gamma_{12})B_4^1 - K_3(\gamma_{23})B_4^3. \end{aligned} \quad (92)$$

В этом пределе ложные слагаемые — те же ($B_0^i Y_{000}^{00}$), а функцию $F(\Omega_2; 36)$ можно найти по формуле (91) с $i = 2$.

В оставшихся предельных случаях, когда согласно (87) $c_2^- \rightarrow \mp\infty$ при $c_1 \rightarrow \pm\infty$, ситуация иная: если $B_0^{1\pm} = 1$, то $B_1^{2\pm} = -1$ и $B_L^{i\pm} = 0$ при всех остальных i и L . Поэтому предельные решения уравнений (65) одинаковые: $F_i^\pm = (-1)^{1+i} Y_{000}^{00}$, $i = 1, 2$; $F_3^\pm \equiv 0$ и ложные, так как их сумма (81) тривиальная: $F \equiv 0$.

Итак, в пределе двух бесконечно больших по модулю констант взаимодействий эталонные точные решения ($t = 4$) уравнений Фаддеева переходят в ложные, а в пределе одной большой по модулю константы, как, например, в случае $c_2 = c_2^- \rightarrow -\infty$, $c_1 = c_1^s$, в исключительно интересные с физической точки зрения решения. Действительно, такие решения регулярны всюду на \mathcal{S}^5 , в частности, в точке парного столкновения $x_1 = 0$. Кроме того, хотя условие «падения» ($c_2 < -1/4$) частиц p_2 и p_3 в эту точку в отсутствие частицы p_1 выполняется, такого падения в трехчастичной системе не происходит из-за взаимодействий V_1 и V_3 частиц p_2 и p_3 с частицей p_1 .

Случай трех тождественных бозонов. Теперь $m_k = 1$ и $c_k = c_2$ при всех $k = 1, 2, 3$, а из условий симметрии (75) следует, что $B_L^k = B_L^1$ при всех L и k . Поэтому при $t = 4$ уравнение (72) или (84) имеет вид $c_2 - 4 = 0$. Его корню $c_2 = 4$ отвечают коэффициенты $B_0^1 = 1$, $B_2^1 = -4/5$, $B_4^1 = -1$, компонента (79)

$$U_1(\varphi; 36) = \sin 2\varphi - \frac{8}{5} \cos 2\varphi - \frac{1}{3}(1 + 2 \cos 4\varphi)$$

и ряд (82) с коэффициентами (83)

$$F(\Omega_i; 36) = 3Y_{000}^{00}(\Omega_i) - Y_{400}^{00}(\Omega_i) - \sqrt{2}Y_{422}^{00}(\Omega_i).$$

В случае $t = 6$ уравнение (72) имеет два корня $c_2^\pm = 9 \pm \sqrt{11}$. Им отвечают две компоненты (79)

$$U_1^\pm(\varphi; 64) = \sin 2\varphi - \frac{\sin 4\varphi}{4(c_2^\pm - 10)} + \frac{5}{21 - 2c_2^\pm} \left(3 \sin 6\varphi + \frac{14}{c_2^\pm} \sin 8\varphi \right)$$

и две функции (82)

$$F^\pm(\Omega_i; 64) = 3Y_{000}^{00}(\Omega_i) + \frac{15}{21 - 2c_2^\pm} \left(Y_{400}^{00}(\Omega_i) + \sqrt{2}Y_{422}^{00}(\Omega_i) \right) + \\ + \frac{115}{c_2^\pm(21 - 2c_2^\pm)} \left(Y_{600}^{00}(\Omega_i) - Y_{622}^{00}(\Omega_i) \right).$$

Корни c_2^ν , $\nu = 1, 2, \dots, t/2 - 1$, при $t = 8, 10, 12, 14$ приведены в таблице [27]. Корни c_2^ν , $\nu = 1, 2, \dots, 6$, в пределе больших t сходятся к константам 6, 20, 42, 72, 110, 156. В этом пределе компоненты F_i^ν , отвечающие таким корням, не ограничены:

$$F_i^\nu(\Omega_i; (t+2)^2) \sim B_t^{1\nu} Y_{i00}^{00}(\Omega_i), \quad B_t^{1\nu} \rightarrow \infty, \quad t \rightarrow \infty, \quad i = 1, 2, 3.$$

Из сравнения всех перечисленных выше значений корней следует важный вывод: минимально возможное значение c_2 , при котором для трех тождественных бозонов существуют точные решения (63)–(76), равно 4 и реализуется в случае $t = 4$. Следовательно, при $c_2 < 4$ гиперугловые функции F_i факторизованных решений — бесконечные ряды гипергармоник. Такие функции можно найти лишь приближенно, например, как решения уравнений (78) численными методами.

3.3. Приближенные решения. Для трех тождественных бозонов с $\ell = 0$ уравнение (61) подстановкой $Z_p(z) = r^{1/2}Q(r; p^2)$ приводится к виду

$$[-\partial_r^2 + r^{-2}(p^2 - 1/4) - E]Q(r; p^2) = 0, \quad (93)$$

а система (78) вырождается в одно уравнение с коэффициентом $s \equiv 4/\sqrt{3}$:

$$\begin{aligned} (\partial_\varphi^2 + p^2) U_1(\varphi; p^2) = \\ = \frac{c_2}{(\cos \varphi)^2} \left[U_1(\varphi; p^2) + s \int_{C_-(\varphi; \pi/3)}^{C_+(\varphi; \pi/3)} d\varphi' U_1(\varphi'; p^2) \right]. \end{aligned} \quad (94)$$

В работе [47] это уравнение с ошибочно взятым множителем $s = 1$ дополнялось тривиальными граничными условиями

$$U_1(\varphi; p^2) = 0, \quad \varphi = 0, \pi/2. \quad (95)$$

Далее задавалось значение константы c_2 , и сформулированная таким образом краевая задача с помощью сплайн-аппроксимации функции U_1 на некоторой сетке узлов сводилась к задаче на собственные значения $\lambda_\nu \equiv p^2 = p_\nu^2$, $\nu = 1, 2, \dots$, для конечной числовой матрицы. Результаты вычислений были собраны в таблицу, из которой видно, что с ростом c_2 собственные значения p_ν^2 , $\nu = 1, 2, 3, 4$, возрастают и при $c_2 = 0$ совпадают с соответствующими собственными значениями $4\nu^2$ оператора $-\partial_\varphi^2$. Согласно уравнению (94) такого совпадения следует ожидать при любом s не только для первых четырех собственных значений, но и для всех остальных.

В обсуждаемой работе [47] отмечалось, что уравнение (93) может иметь связанные состояния при $c_2 \leq -1, 5$, когда потенциал $(p^2 - 1/4)/r^2$ притягивающий, т. е. выполняется условие $p^2 < 1/4$. Для задачи (94), (95) с правильным коэффициентом $s = 4/\sqrt{3}$ это условие выполняется при $c_2 \leq -0, 258$. Эта оценка вычислена автором настоящего обзора методом сплайн-функций, описанным в работе [90].

4. АСИМПТОТИКИ ПРИ МАЛЫХ РАССТОЯНИЯХ

Асимптотическое разложение трехчастичной волновой функции при малых значениях гиперрадиуса r впервые получено Фоком [48] для 1S_0 -состояния атома ^3He . Ядро гелия рассматривалось как неподвижный кулоновский центр. Движение двух электронов описывалось трехмерным уравнением Шредингера. Его общее регулярное решение искалось в виде двойного ряда по целым степеням r , $s \equiv \ln r$ и неизвестным функциям гиперуглов. Для этих функций Фок вывел рекуррентную цепочку уравнений, первые из которых, не столь сложные как оставшиеся, ему удалось решить точно.

В обзорах [49, 50] дан сравнительный анализ огромного числа работ по исследованию и обобщению фоковского разложения решений уравнения Шредингера для атомных систем из трех и более частиц с парными, чисто кулоновскими взаимодействиями и различными типами симметрии волновой

функции. Большинство работ, процитированных в этих обзорах, выполнены по одной и той же схеме Фока, ставшей классической.

Следующий подход к выводу асимптотик при $r \rightarrow 0$ основан на известном в теории обыкновенных дифференциальных уравнений [2] представлении общего регулярного решения конечной системы таких уравнений в виде линейной комбинации всех частных решений, образующих фундаментальную систему регулярных решений (ФСРР). В работах [51–53] этим методом сначала строятся асимптотические разложения ФСРР системы обыкновенных дифференциальных уравнений, полученные проектированием трехчастичного уравнения Шредингера на базис гипергармоник. Каждое фундаментальное решение представляется двукратным рядом по целым степеням r и s . Для неизвестных коэффициентов ряда выводится рекуррентная цепочка матричных уравнений. В случае чисто кулоновских парных взаимодействий некоторые коэффициенты удается найти в явном виде [52, 53]. Метод, предложенный в работе [52], представляется наиболее развитым. Используя его, можно построить асимптотические разложения ФСРР уравнений для гиперсферических компонент трехчастичной волновой функции. Далее можно подставить такие разложения в гиперсферический ряд для волновой функции. Однако задача суммирования получившегося многократного ряда в замкнутое выражение представляется неразрешимой.

В препринте [37] и в его существенно расширенной журнальной версии [38] было начато обобщение фоковского разложения на случай произвольных центральных взаимодействий и масс частиц. Для общего решения ($\varepsilon = E$) шестимерных уравнений Фаддеева (6) предполагался фоковский анзац, с помощью которого эти уравнения редуцировались к рекуррентной цепочке для неизвестных функций пяти гиперсферических углов. Редукция, как поясняется в п. 4.1, оказалась не завершённой.

Альтернативный подход [30, 31] к обобщению фоковских разложений на случай взаимодействий, как обладающих, так и не обладающих сферической симметрией, описывается в п. 4.2. В этом подходе сначала строится ФСРР двумерных уравнений (15) для бисферических фаддеевских компонент U_{iab}^ℓ трехчастичной волновой функции Ψ^ε с данным полным набором квантовых чисел ε . Затем найденная ФСРР используется для последовательного вывода асимптотических разложений функций U_{iab}^ℓ , Ψ_i^ε и Ψ^ε .

Асимптотики трехчастичных волновых функций в точках парных столкновений ($x_k \rightarrow 0, y_k > 0, k = 1, 2, 3$) исследованы не столь подробно, как обобщенные фоковские разложения. Абсолютное большинство исследований таких асимптотик выполнено в рамках уравнения Шредингера в случае чисто кулоновских парных взаимодействий. Даже в этом случае в явном виде получены лишь два наиболее медленно убывающих слагаемых асимптотик. Некоторые выводы [35, 38, 54–61] таких слагаемых приведены в п. 4.3.

4.1. Построение асимптотик при $r \rightarrow 0$ в \mathcal{R}^6 . Поясним три особенности построения асимптотик фаддеевских компонент методом [38].

Во-первых, сначала строятся асимптотики общего решения $(\Psi_1^\varepsilon, \Psi_2^\varepsilon, \Psi_3^\varepsilon)$, $\varepsilon = E$, уравнений Фаддеева (6) в \mathcal{R}^6 .

Во-вторых, в качестве базисных используются несобственные для операторов \mathbf{I}^2 и l_3 гипергармоники

$$\Phi_{Lab}^{\alpha\beta}(\Omega_i) = 2 \operatorname{cosec} 2\varphi_i \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) Y_{a\alpha}(\hat{y}_i) Y_{b\beta}(\hat{x}_i). \quad (96)$$

В-третьих, так как для компонент Ψ_i^ε предполагаются разложения

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Psi_i^{nm}(\Omega_i), \quad s \equiv \ln r \rightarrow -\infty, \quad M(n) = [n/2], \quad (97)$$

а для всех центральных взаимодействий V_k — представления

$$V_k(x_k) = \sum_{n=-1}^{\infty} V_{kn} x_k^n, \quad (98)$$

то из уравнений (6) в \mathcal{R}^6 получается цепочка уравнений на \mathcal{S}^5 :

$$\begin{aligned} & [\mathbf{L}^2(\Omega_i) - n(n+4)]\Psi_i^{nm}(\Omega_i) = \\ & = (m+1)[2(n+2)\Psi_i^{n,m+1}(\Omega_i) + (m+2)\Psi_i^{n,m+2}(\Omega_i)] + \\ & + E\Psi_i^{n-2,m}(\Omega_i) - \sum_{p=-1}^{n-2} V_{ip}(\cos \varphi_i)^p \sum_{k=1}^3 \Psi_k^{n-p-2,m}(\Omega_k). \quad (99) \end{aligned}$$

Последовательность ее решения пояснялась авторами путем построения функций Ψ_i^{nm} с $n \leq 2$ и $m = n - 1$ (см. ниже).

Итак, решения первых ($n = 0, m = 0$) трех уравнений ($i = 1, 2, 3$) системы (99) — произвольные постоянные $\Psi_i^{00} = C_i^{00}$. Поэтому ее следующие ($n = 1$) три уравнения несвязанные:

$$(\mathbf{L}^2(\Omega_i) - 5)\Psi_i^{10}(\Omega_i) = - \left(V_{i,-1} \sum_{k=1}^3 C_k^{00} \right) \sec \varphi_i, \quad i = 1, 2, 3. \quad (100)$$

Уравнение такого типа разрешимо тогда и только тогда, когда его правая часть ортогональна всем решениям соответствующего однородного уравнения [2]. Общее решение однородного уравнения (100) — линейная комбинация гипергармоник (96) с $L = 1$. Правая часть неоднородного уравнения (100)

ортогональна любой такой комбинации. Поэтому функции Ψ_i^{10} — суммы

$$\Psi_i^{10}(\Omega_i) = \tilde{\Psi}_i^{10}(\Omega_i) + \sum_{\beta=-1}^1 (C_{i1\beta}^{10} \Phi_{101}^{0\beta}(\Omega_i) + C_{i2\beta}^{10} \Phi_{110}^{\beta 0}(\Omega_i)),$$

$$\tilde{\Psi}_i^{10}(\Omega_i) = \left(2V_{i,-1} \sum_{k=1}^3 C_k^{00} \right) \cos \varphi_i, \quad i = 1, 2, 3,$$

где $\tilde{\Phi}_i^{10}$ — частное решение неоднородного уравнения (100), а $C_{ip\alpha}^{10}$ — произвольные константы. Следующие ($n = 2$) тройки уравнений ($i = 1, 2, 3$) цепочки (99) зацепляются по индексу $m = 0, 1$:

$$(\mathbf{L}^2(\Omega_i) - 12)\Psi_i^{21}(\Omega_i) = 0, \quad (101)$$

$$(\mathbf{L}^2(\Omega_i) - 12)\Psi_i^{20}(\Omega_i) = -V_{i,-1} \sec \varphi_i \sum_{k=1}^3 \Psi_k^{10}(\Omega_k) +$$

$$+ 8\Psi_i^{21}(\Omega_i) + E C_i^{00} - V_{i0} \sum_{k=1}^3 C_k^{00}. \quad (102)$$

Уравнениям (101) удовлетворяют комбинации гипергармоник (96) с $L = 2$ и констант C_{ip}^{21} , фиксированных условием разрешимости уравнений (102):

$$\Psi_i^{21}(\Omega_i) = C_{i1}^{21} \Phi_{200}^{00}(\Omega_i) + C_{i2}^{21} \left(\Phi_{211}^{00}(\Omega_i) - \Phi_{211}^{1,-1}(\Omega_i) - \Phi_{211}^{-1,1}(\Omega_i) \right).$$

Общее решение каждого ($i = 1, 2, 3$) уравнения (102) — это сумма его частного решения $\tilde{\Phi}_i^{20}$ и общего решения соответствующего однородного уравнения:

$$\Phi_i^{20}(\Omega_i) = \tilde{\Phi}_i^{20}(\Omega_i) + \sum_{ab} \sum_{\alpha\beta} C_{ia\alpha b\beta}^{20} \Phi_{2ab}^{\alpha\beta}(\Omega_i), \quad \forall C_{ia\alpha b\beta}^{20} = \text{const.}$$

Итак, для данного n необходимо решить $3([n/2] + 1)$ уравнений для функций Ψ_i^{nm} . Сначала каждая ($i = 1, 2, 3; m = [n/2], [n/2] - 1, \dots, 0$) функция Ψ_i^{nm} определяется с точностью до линейной комбинации гипергармоник. Затем коэффициенты этой комбинации фиксируются условием разрешимости уравнений для функций $\Psi_i^{n,m-1}$. Произвольная комбинация гипергармоник всегда остается только в функциях Ψ_i^{n0} , т.е. все коэффициенты $C_{ia\alpha b\beta}^{m0}$ — произвольные, а все константы C_{ip}^{nm} с $m > 0$ зависят от них.

Подставив найденные функции Ψ_i^{nm} в (97), авторы получили асимптотики в случае потенциалов (98) с кулоновскими особенностями ($V_{k,-1} \neq 0$):

$$\begin{aligned} \Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = & C_i^{00} + \left(2V_{i,-1} \cos \varphi_i \sum_{k=1}^3 C_k^{00} \right) r + \\ & + \left[\sum_{\beta=-1}^1 (C_{i1\beta}^{10} \Phi_{101}^{0\beta}(\Omega_i) + C_{i2\beta}^{10} \Phi_{110}^{\beta 0}(\Omega_i)) \right] r + \\ & + [C_{i1}^{21} \Phi_{200}^{00}(\Omega_i) + C_{i2}^{21} (\Phi_{211}^{00}(\Omega_i) - \Phi_{211}^{1,-1}(\Omega_i) - \Phi_{211}^{-1,1}(\Omega_i))] r^2 s + O(r^2). \end{aligned} \quad (103)$$

Далее асимптотики компонент $\Psi_{im'}^{\ell m}$, разложений (22) строились как проекции сумм (97) и (103) на соответствующую базисную функцию $D_{mm'}^\ell$. Таким способом для произвольного значения ℓ выводились ряды

$$\Psi_{im'}^{\ell m}(x_i, y_i, \theta_i) = r^\ell \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m''=0}^{[n/2]} s^{m''} \Psi_{im'}^{nm''}(\varphi_i, \theta_i), \quad i = 1, 2, 3, \quad (104)$$

а в частных случаях ($\ell = 0, 1$) их явные асимптотики при $r \rightarrow 0$:

$$\begin{aligned} \Psi_{i0}^{00}(x_i, y_i, \theta_i) = & C_i^{00} + \left(2V_{i,-1} \cos \varphi_i \sum_{k=1}^3 C_k^{00} \right) r + \\ & + 2\pi^{3/2} (C_{i1}^{21} \cos 2\varphi_i - \sqrt{3} C_{i2}^{21} \cos \theta_i \sin 2\varphi_i) r^2 s + O(r^2), \quad (105) \\ \Psi_{im'}^{1m}(x_i, y_i, \theta_i) = & (C_{i1}^{10} \delta_{m'0} \cos \varphi_i + C_{i2}^{10} \sin \varphi_i P_1^{|m'|}(\cos \theta_i)) r + O(r^2). \end{aligned}$$

Значимость доказанных авторами соотношений (103) бесспорна: эти формулы позволяют построить в явном виде асимптотики любого частного решения уравнений Фаддеева или компонент разложения этого решения по любому угловому базису. Например, если эти соотношения спроектировать на D -функции, образующие полный угловой базис для выбранного частного решения (22) с данным набором $\varepsilon = (E, \ell, m)$ квантовых чисел, то в итоге получатся асимптотики (104) и (4.1) компонент $\Psi_{im'}^{\ell m}$, подчиненных уравнениям Фаддеева (23) в \mathcal{R}^3 .

Теперь обсудим полноту представленного выше метода построения асимптотических разложений (97) общего решения ($\varepsilon = E$) уравнений Фаддеева в \mathcal{R}^6 . Ключевой является рекуррентная цепочка уравнений (99) для функций Ψ_i^{nm} . Первые три уравнения авторам удалось решить аналитически. Точное решение хотя бы конечного числа следующих уравнений этой цепочки представляется очень трудной задачей, потому что число независимых переменных слишком велико (равно пяти), а правые части этих уравнений имеют

сложное строение. Численный анализ обрезанной цепочки уравнений (99) принципиально невозможен, потому что искомые функции Ψ_i^{nm} содержат в качестве слагаемых общие решения соответствующих однородных уравнений. Эти слагаемые определены с точностью до произвольных множителей $C_{i\alpha\beta}^{nm}$. Зафиксировать значения этих множителей без потери общности нельзя никакими граничными условиями для функций Ψ_i^{nm} . Таким образом, проблема построения более подробных, чем суммы (103) трех наиболее медленно убывающих при $r \rightarrow 0$ слагаемых, полных асимптотических разложений (97) осталась нерешенной в обсужденной выше работе [38]. Не исследованными остались и случаи $V_{k,-1} = 0$, $V_{k,1} \neq 0$ и $V_{k,2n-1} = 0$, $n = 0, 1, \dots$, когда все взаимодействия (98) не обладают кулоновскими особенностями или же их ряды содержат только четные степени аргументов x_k , и поэтому в анзацах (97) зависимость от n верхнего предела второй суммы описывается функцией $M(n)$, отличной от $[n/2]$ (см. [31]).

4.2. Построение асимптотик при $r \rightarrow 0$ в \mathcal{R}_+^2 . Пусть, как и в п. 4.1, все парные взаимодействия центральные и имеют вид (98). Если $V_{k,-1} \neq 0$, $k = 1, 2, 3$, то для состояния с набором квантовых чисел $\varepsilon = (E, \ell, m, \sigma)$ асимптотики бисферических фаддеевских компонент U_{iab}^ℓ в виде трех наиболее медленно убывающих при $r \rightarrow 0$ слагаемых можно вывести, проектируя асимптотики (103) на базис из бисферических гармоник $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$, $(-1)^{a+b} = \sigma$. Построение таких сумм и вычисление более подробных асимптотических разложений нетрудно выполнить другим методом [30], стартуя с уравнений Фаддеева (15) в \mathcal{R}_+^2 .

Опишем схему этого метода. Сначала построим ФСРР $U_{iab}^{L\ell}$, $L = a + b$, $a + b + 2, \dots$, уравнений (15) в классе \mathcal{B}^ε в виде асимптотических рядов, содержащих неизвестные функции $U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i)$. Затем представим общее решение этих уравнений (функции U_{iab}^ℓ) в виде линейной комбинации всех решений $U_{iab}^{L\ell}$. Наконец, используя полученные асимптотические разложения функций U_{iab}^ℓ , построим и исследуем содержащие эти функции разложения (14) фаддеевских компонент Ψ_i^ε . В отличие от метода, описанного в п. 4.1, в нашем подходе неизвестными являются функции $U_{iabnm}^{L\ell}$ одного, а не пяти гиперсферических углов, а благодаря промежуточному этапу вывода асимптотических разложений (построению ФСРР) удается сформулировать для функций $U_{iabnm}^{L\ell}$ однозначно разрешимую краевую задачу в виде рекуррентной цепочки неоднородных обыкновенных дифференциальных уравнений с тривиальными граничными условиями. Такую цепочку, в отличие от пятимерной цепочки (99), можно исследовать и численно, и аналитически, применяя известные [20, 21] спектральные разложения (13) интегральных операторов $h_{a'b'ab}^\ell$ по базисным функциям (9).

Фундаментальная система регулярных решений. Каждое из линейно независимых регулярных решений системы уравнений (15) будем искать в виде асимптотического при $r \rightarrow 0$ ряда. Сначала определим вид старших слага-

емых искомым рядам. По условию (98) в этих уравнениях потенциалы не могут возрастать при $r \rightarrow 0$ быстрее слагаемых $r^{-2} \tilde{L}_{ab}^2(\varphi)$ операторов \tilde{H}_{0ab} . Поэтому старшие члены асимптотик при $r \rightarrow 0$ каждого искомого решения $U_{iab}^{L\ell}$ определяются характеристическим для соответствующего оператора \tilde{H}_{0ab} уравнением [2]. Используя равенства (12), определяем из таких уравнений вид старших слагаемых асимптотик

$$U_{iab}^{L\ell}(r, \varphi_i) \rightarrow C_{iab0}^{L\ell} r^{L+2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i), \quad r \rightarrow 0. \quad (106)$$

Здесь $C_{iab0}^{L\ell}$ — произвольные константы, $i = 1, 2, 3$, $L = a + b + 2n$, $n = 0, 1, \dots$, а индексы a и b такие, что $a + b \leq L$, $\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{1}$ и $\sigma = (-1)^{a+b}$.

Все решения с асимптотиками (106) и одним и тем же значением L , но любыми возможными при таком L индексами a и b , назовем L -серией решений. Приступим к построению каждой L -серии в виде

$$U_{iab}^{L\ell}(r, \varphi_i) \equiv r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(ns) U_{iabn}^{L\ell}(s, \varphi_i), \quad s \equiv \ln r, \quad (107)$$

предположив, что функции $\exp(ns)$ и $U_{iabn}^{L\ell}$ линейно независимы. Чтобы анзац (107) не противоречил соотношениям (106), положим

$$U_{iab0}^{L\ell}(s, \varphi_i) \equiv C_{iab0}^{L\ell} \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i). \quad (108)$$

Теперь в уравнениях (15) заменим взаимодействия и искомую L -серию решений их разложениями (98) и (107). Полученные соотношения перепишем в виде равенств нулю рядов по целым степеням аргумента r . Чтобы удовлетворить этим равенствам, положим коэффициенты перед всеми степенями r равными нулю. Выведенные таким образом уравнения для неизвестных функций $U_{iabn}^{L\ell}$ запишем в порядке возрастания индекса $n = 1, 2, \dots$:

$$\begin{aligned} D_{abn}^L(s, \varphi_i) U_{iabn}^{L\ell}(s, \varphi_i) &= R_{iabn}^{L\ell}(s, \varphi_i), \\ R_{iabn}^{L\ell}(s, \varphi_i) &\equiv -E U_{iab, n-2}^{L\ell}(s, \varphi_i) + \sum_{m=0}^{n-1} V_{i, n-m-2}(\cos \varphi_i)^{n-m-2} \times \\ &\times \left[U_{iabm}^{L\ell}(s, \varphi_i) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle s, \varphi_i | h_{aba'b'}^{\ell}(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'm}^{L\ell}(s, \varphi_k) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (109)$$

Здесь по определению $U_{iabn}^{L\ell} \equiv 0$ при $n < 0$ и

$$D_{abn}^L(s, \varphi) \equiv (\partial_s + L + n + 2)^2 - \tilde{L}_{ab}^2(\varphi), \quad (110)$$

а индексы a, b и a', b' , вообще говоря, не подчинены условиям $a + b \leq L$ и $a' + b' \leq L$. Подсистему системы уравнений (109) для искомым функций

$U_{iabn}^{L\ell}$, $i = 1, 2, 3$, $\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{1}$, $(-1)^{a+b} = \sigma$ с одним и тем же значением индекса n назовем n -подсистемой. Заметим, что каждая n -подсистема ($n = 1, 2, \dots$) состоит из незацепляющихся по индексам $i = 1, 2, 3$ и a, b уравнений для функций $U_{iabn}^{L\ell}$ и содержит в правых частях $R_{iabn}^{L\ell}$ этих уравнений решения $U_{iabm}^{L\ell}$ всех предыдущих m -подсистем с индексом $m = 0, 1, \dots, n-1$. Значит, система (109) является рекуррентной по индексу n .

Опишем структуру решения произвольной n -подсистемы. Все функции $U_{iabn}^{L\ell}$, удовлетворяющие n -подсистеме, представимы в виде суммы частных решений этой неоднородной системы и общего решения соответствующей ей системы однородных уравнений. Последние — суммы типа

$$Z_{iabn}^{L'}(s, \varphi_i) = [c_+ \exp(L'_+ s) + c_- \exp(L'_- s)] \tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i),$$

где c_{\pm} — произвольные постоянные; $L' = a + b + 2n'$; $n' = 0, 1, \dots$ и $L'_{\pm} \equiv \pm L' - L - n$. Слагаемые каждой такой суммы можно отнести либо к нерегулярным решениям, либо к другой ($L' \neq L$) L' -серии решений. Поэтому без потери общности для дальнейшего построения фундаментальной системы регулярных решений полагаем все функции $Z_{iabn}^{L'}$ равными нулю и далее исследуем лишь частные решения неоднородной системы уравнений (109). Заметим, что индексы L в исследуемой системе (109) принимают одновременно либо только четные (случай $\sigma = 1$), либо только нечетные (случай $\sigma = -1$) значения. Поэтому в базисе (9) ядро оператора D_{abn}^L , заданного равенством (110), является пустым множеством, если n — нечетное число, и состоит из линейной оболочки, натянутой на одну функцию $\tilde{W}_{L+n,ab}$, в противном случае. Это свойство определяет строение решений n -подсистемы уравнений, правые части которых — полиномы по s : если эти правые части полиномы по s степени m , то решения будут полиномами по s степени m при нечетном n и степени $m + 1$ в противном случае.

Последовательно полагая $n = 1, 2, \dots$, выясним строение частных решений n -подсистем системы (109). Правые части уравнений первой подсистемы ($n = 1$) содержат функции (108) и не зависят от s . Поэтому решения этой подсистемы $U_{iab1}^{L\ell}$ и правые части $R_{iab2}^{L\ell}$ второй подсистемы (все уравнения системы (109) для функций $U_{iabn}^{L\ell}$ с $n = 2$) тоже не зависят от s . Следовательно, решения второй подсистемы — линейные по s функции:

$$U_{iab2}^{L\ell}(s, \varphi_i) = C_{iab2}^{L\ell} s \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi_i) + G_{iab2}^{L\ell}(\varphi_i), \quad (111)$$

где $C_{iab2}^{L\ell}$ и $G_{iab2}^{L\ell}$ — пока не известные постоянные и функции. Подставляя искомые решения (111) во вторую подсистему (109), получаем уравнения

$$[\tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i) - (L + 4)^2] G_{iab2}^{L\ell}(\varphi_i) = 2(L + 4) C_{iab2}^{L\ell} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi_i) - R_{iab2}^{L\ell}(\varphi_i).$$

Решение каждого (любые допустимые i , a и b) такого уравнения существует тогда и только тогда, когда его правая часть ортогональна соответствующей

функции $\tilde{W}_{L+2,ab}$. Это условие выполняется, если

$$C_{iab2}^{L\ell} = \langle \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) | R_{iab2}^{L\ell}(\varphi) \rangle / (2L + 8), \quad (112)$$

причем $C_{iab2}^{L\ell}$ — функции произвольных постоянных $C_{iab0}^{L\ell}$ асимптотик (106), т. к. функции $R_{iab2}^{L\ell}(\varphi_i)$ параметрически зависят от этих постоянных.

Продолжая анализ n -подсистем, по индукции доказываем, что правые части $R_{iabn}^{L\ell}$ уравнений каждой такой n -подсистемы — полиномы по s степени не выше чем $[(n-1)/2]$, а решения $U_{iabn}^{L\ell}$ таких уравнений — полиномы по s той же степени, если n — нечетное число, и степени не выше чем $[n/2]$ — в противном случае.

Итак, каждая L -серия решений системы (15) — двойная сумма

$$U_{iab}^{L\ell}(s, \varphi_i) = r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i), \quad (113)$$

где $M(n) = [n/2]$ и согласно соотношениям (106) и (111)

$$\begin{aligned} U_{iabn0}^{L\ell}(\varphi_i) &\equiv U_{iabn}^{L\ell}(\varphi_i), \quad n = 0, 1, \\ U_{iab20}^{L\ell}(\varphi_i) &\equiv G_{iab2}^{L\ell}(\varphi_i), \\ U_{iab21}^{L\ell}(\varphi_i) &\equiv C_{iab2}^{L\ell} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi_i). \end{aligned} \quad (114)$$

Используя доказанное представление (113), из исходных уравнений (15) выводим систему одномерных интегродифференциальных уравнений для неизвестных функций $U_{iabnm}^{L\ell}$. Уравнения этой системы запишем в виде последовательности n -подсистем, расположенных в порядке возрастания индекса n и в порядке убывания индекса m для каждого n :

$$\begin{aligned} \left[\tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i) - (L+n+2)^2 \right] U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i) &= E U_{iab,n-2,m}^{L\ell}(\varphi_i) + \\ &+ (m+1)[2(L+n+2)U_{iabn,m+1}^{L\ell}(\varphi_i) + (m+2)U_{iabn,m+2}^{L\ell}(\varphi_i)] + \\ &+ \sum_{p=0}^{n-1} V_{i,n-p-2}(\cos \varphi_i)^{n-p-2} \times \\ &\times \left[U_{iabpm}^{L\ell}(\varphi_i) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle \varphi_i | h_{aba'b'}^{\ell}(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'pm}^{L\ell}(\varphi_k) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (115)$$

При таком порядке записи система (115) является рекуррентной цепочкой уравнений и поэтому представляет собой неоднородную систему обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Из разложений (14) и регулярности фадеевских компонент Ψ_i^{ε} следует, что все функции $U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i)$

должны зануляться в точках $\varphi_i = 0, \pi/2$. Любая конечная подсистема системы (115) с таким граничным условием и наперед заданными константами $C_{iab0}^{L\ell}$ асимптотик (106) однозначно разрешима и может быть проинтегрирована численно.

Итак, при $r \rightarrow 0$ система фундаментальных регулярных решений уравнений (15) имеет вид L -серий (107), (113), содержащих функции $U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i)$, подчиненные рекуррентной цепочке уравнений (115).

Асимптотические разложения фаддеевских компонент. Общее регулярное решение исходной системы уравнений (15) равно сумме, вообще говоря, всех L -серий (107) или (113):

$$U_{iab}^{\ell}(r, \varphi_i) = \sum_{L=a+b}^{\infty} r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(ns) U_{iabn}^{L\ell}(s, \varphi_i), \quad (116)$$

$$U_{iab}^{\ell}(r, \varphi_i) = \sum_{L=a+b}^{\infty} r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i). \quad (117)$$

При любых фиксированных ℓ и σ индексы a, b суммирования в разложениях (14) компонент Ψ_i^{ε} удовлетворяют неравенству $a + b \geq \ell + \mu(\sigma)$, где $\mu(\sigma)$ — такое же, как и в разложении (18). Поэтому индекс L подчинен условию $L \geq \ell + \mu(\sigma)$; если заменить в рядах (14) компоненты U_{iab}^{ℓ} их разложениями (117), то для фаддеевских компонент получатся искомые асимптотические ряды

$$\Psi_i^{\varepsilon}(\mathbf{r}_i) = \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} r^L \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Psi_{inm}^{L\ell}(\Omega_i),$$

$$\Psi_{inm}^{L\ell}(\Omega_i) \equiv 2 \operatorname{cosec} 2\varphi_i \sum_{ab} U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i).$$

Согласно представлениям (5) и (16), им отвечает следующее асимптотическое разложение решения уравнения Шредингера (4):

$$\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{r}_i) = \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} r^L \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Psi_{nm}^{L\ell}(\Omega_i),$$

$$\Psi_{nm}^{L\ell}(\Omega_i) \equiv \sum_{ab} \left[U_{iabnm}^{L\ell}(\varphi_i) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle \varphi_i | h_{aba'b'}^{\ell}(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'nm}^{L\ell}(\varphi_k) \rangle \right] \times \\ \times \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i).$$

Теперь построим явные асимптотики общих решений U_{iab}^ℓ и Ψ_i^ε фаддеевских уравнений (15) и (6) как суммы трех наиболее медленно убывающих при $r \rightarrow 0$ слагаемых. Рассмотрим два случая: (А) все взаимодействия имеют кулоновские сингулярности, (В) — не имеют таковых.

Стоит отметить, что в случае (А) в рядах (113) $M(n) = [n/2]$, а в случае (В) $M(n) \leq [n/6] - \Theta([n/6] - (n-1)/6)$, где Θ — тета-функция.

Начнем со случая (А), когда в рядах (98) $V_{k,-1} \neq 0$, $k = 1, 2, 3$. Три наиболее медленно убывающих слагаемых ряда (117) равны трем первым слагаемым ряда (113) для L -серии с минимальным L , равным $a + b$. Поэтому при $r \rightarrow 0$ и любых i, a и b

$$U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) = r^{L+2} [U_{iab00}^{\ell L}(\varphi_i) + r U_{iab10}^{\ell L}(\varphi_i) + r^2 s U_{iab21}^{\ell L}(\varphi_i) + O(r^2)].$$

С учетом (108) и (114) перепишем эти асимптотики в виде

$$U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) = r^{L+2} \left[C_{iab0}^{\ell L} \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) + r U_{iab10}^{\ell L}(\varphi_i) + r^2 s C_{iab2}^{\ell L} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi_i) + O(r^2) \right], \quad r \rightarrow 0, L = a + b. \quad (118)$$

Остается найти функции $U_{iab10}^{\ell L}$ и коэффициенты $C_{iab2}^{\ell L}$. Используя (13) и (108), представляем искомые решения $U_{iab10}^{\ell L}$ уравнений (115) рядами

$$U_{iab10}^{\ell L}(\varphi_i) = V_{i,-1} C_{iab1}^{\ell L} \sum_{L'=a+b}^{\infty} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i) \frac{\langle \tilde{W}_{L'ab}(\varphi) | \sec \varphi \tilde{W}_{Lab}(\varphi) \rangle}{(L+3)^2 - (L'+2)^2}, \quad (119)$$

$$C_{iab1}^{\ell L} \equiv C_{iab0}^{\ell L} + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} C_{ka'b'0}^{\ell L}. \quad (120)$$

Далее по формулам (112) выразим коэффициенты $C_{iab2}^{\ell L}$ однократными интегралами, содержащими функции (119):

$$C_{iab2}^{\ell L} = \frac{V_{i,-1}}{2(L+4)} \left[\langle \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) | \sec \varphi U_{iab10}^{\ell L}(\varphi) \rangle + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle \sec \varphi \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'10}^{\ell L}(\varphi) \rangle \right]. \quad (121)$$

Рассмотрим случай (В). Так как теперь в рядах (98) $V_{k,-1} = 0$, $k = 1, 2, 3$, то в соотношениях (118) все функции (119) и коэффициенты (121) нулевые. Поэтому три первых слагаемых асимптотик рядов (116) определяются первыми слагаемыми L -серии (113) с минимальным $L = a + b$ и старшим членом

асимптотики L -серии с $L = a + b + 2$. Найдя соответствующие указанным слагаемым решения систем (109) и (115), получим асимптотики

$$U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) = r^{L+2} \left[C_{iab0}^L \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) + r^2 \sum_{L'=L}^{L+2} F_{iab}^{L'} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i) + r^3 U_{iab3}^{L\ell}(\varphi_i) + O(r^4) \right], \quad r \rightarrow 0, \quad (122)$$

где $L \equiv a + b$, функции $U_{iab3}^{L\ell}$ — бесконечные ряды:

$$U_{iab3}^{L\ell}(\varphi_i) \equiv V_{i1} C_{iab1}^{L\ell} \sum_{L'=L}^{\infty} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i) \frac{\langle \tilde{W}_{L'ab}(\varphi) | \cos \varphi \tilde{W}_{Lab}(\varphi) \rangle}{(L+5)^2 - (L'+2)^2},$$

а постоянные F_{iab}^L связаны с коэффициентами (120) равенствами

$$F_{iab}^L \equiv \left(V_{i0} C_{iab1}^{L\ell} - E C_{iab0}^{L\ell} \right) / (4L + 12), \quad F_{iab}^{L+2} \equiv C_{iab0}^{L+2, \ell}. \quad (123)$$

Теперь построим асимптотики рядов (14) для компонент Ψ_i^ε как суммы трех наиболее медленно убывающих при $r \rightarrow 0$ слагаемых. Такие слагаемые определяются наиболее медленно убывающими бисферическими компонентами U_{iab}^ℓ . В рядах (14) оставим компоненты U_{iab}^ℓ с индексами a и b , сумма которых принимает минимально возможное значение $a + b = \ell + \mu(\sigma)$, а в рядах (14) заменим такие компоненты их асимптотиками (118) или (122). В результате получим искомые асимптотики фаддеевских компонент

$$\begin{aligned} \text{(A)} \quad \Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i) &= r^L \left[\Psi_{i00}^\varepsilon(\Omega_i) + r \Psi_{i10}^\varepsilon(\Omega_i) + r^2 s \Psi_{i21}^\varepsilon(\Omega_i) + O(r^2) \right], \\ \text{(B)} \quad \Psi_i^\varepsilon(\mathbf{r}_i) &= r^L \left[\Psi_{i00}^\varepsilon(\Omega_i) + r^2 \Psi_{i20}^\varepsilon(\Omega_i) + r^3 \Psi_{i30}^\varepsilon(\Omega_i) + O(r^4) \right], \end{aligned}$$

где $L = a + b = \ell + \mu(\sigma)$, а функции $\Psi_{inm}^\varepsilon(\Omega_i)$ — это комбинации гипергармоник, произвольных констант $C_{i00}^{L\ell}$ и коэффициентов (120), (121) и (123):

$$\begin{aligned} \Psi_{inm}^\varepsilon(\Omega_i) &= \sum_{a+b=\ell+\mu(\sigma)} C_{iabn}^{L\ell} Y_{L+2\delta_{n1}, ab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad (n, m) = (0, 0), (2, 1), \\ \Psi_{i20}^\varepsilon(\Omega_i) &= \sum_{a+b=\ell+\mu(\sigma)} \sum_{L'=L}^{L+2} F_{iab}^{L'} Y_{L'ab}^{\ell m}(\Omega_i), \\ \Psi_{in0}^\varepsilon(\Omega_i) &= V_{i, n-2} \sum_{a+b=\ell+\mu(\sigma)} C_{iab1}^{L\ell} \sum_{L'=L}^{\infty} Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i) \times \\ &\quad \times \frac{\langle \tilde{W}_{L'ab}(\varphi) | (\cos \varphi)^{n-2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi) \rangle}{(L+n+2)^2 - (L'+2)^2}, \quad n = 1, 3. \end{aligned}$$

4.3. Асимптотики в точках парных столкновений. Как впервые доказал Като [54], все физические волновые функции многочастичных кулоновских систем всюду ограничены, в том числе и в сингулярных точках $a_{ij} = 0$ парных кулоновских взаимодействий. Регулярность волновых функций в этих точках парных столкновений обеспечивается выведенным Като условием. Для S -волновой ($\ell = 0$) функции $\Psi(a_1, a_2, a_{12})$ двух электронов p_1 и p_2 с радиусами-векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 в кулоновском поле бесконечно тяжелого ($m_3 = \infty$) ядра p_3 с зарядом z_3 это условие имеет вид

$$\partial_q \langle \Psi \rangle_\delta |_{q=0} = \lambda \Psi |_{q=0}.$$

Здесь $\langle \Psi \rangle_\delta$ — среднее по сфере бесконечно малого радиуса с центром в точке $q = 0$; $\lambda = m_1 z_3$ при $q = a_i$, $i = 1, 2$ и $\lambda = \mu_{12} = m_1/2$ при $q = a_{12}$.

Позже в работе [55] условие Като было выведено в ином виде, содержащем вместо усреднения неизвестный вектор \mathbf{v} . Например, в окрестности точки столкновения $a_1 = 0$ электрона p_1 с кулоновским центром p_3

$$\Psi(a_1, a_2, a_{12}) = \Psi(0, a_2, a_{12}) \left[1 + m_1 z_3 a_1 + (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{v}) + O(a_1^2) \right]. \quad (124)$$

Следующее обобщение условия Като было выполнено в работе [56]. Для этого N -частичное уравнение Шредингера с кулоновскими парными взаимодействиями записывалось в окрестности рассматриваемой точки $R = a_{12}$ столкновения частиц p_1 и p_2 в асимптотическом виде

$$\left[-\frac{1}{2\mu_{12}} \Delta_R + \frac{z_1 z_2}{R} + O(1) \right] \Psi = 0, \quad R \rightarrow 0,$$

позволяющем подстановкой

$$\Psi = \sum_{b=0}^{\infty} R^b \sum_{\beta=-b}^b Y_{b\beta}(\hat{R}) f_{b\beta}(R), \quad f_{b\beta}(R) = \sum_{n=0}^{\infty} C_{b\beta n} R^n, \quad \lambda(b) \equiv \frac{\mu_{12} z_1 z_2}{b+1}$$

получить уравнение для искомых коэффициентов $C_{b\beta n}$:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[n(n+2b+1)C_{b\beta n} - 2\lambda(b)C_{b\beta, n-1} + C_{b\beta, n-2}O(1) \right] = 0.$$

Из этого уравнения авторы последовательно нашли связи $C_{b\beta 1} = \lambda(b)C_{b\beta 0}$, асимптотики вспомогательных функций $f_{b\beta}$:

$$f_{b\beta}(R) = C_{b\beta 0} \left[1 + \lambda(b)R + O(R^2) \right]$$

и, наконец, асимптотику решения Ψ исходного N -частичного уравнения Шредингера при $R \rightarrow 0$. При $N = 3$ такая асимптотика имеет вид

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{R}, \rho) = R^b \left[\sum_{\beta=-b}^b C_{b\beta 0} Y_{b\beta}(\hat{R})(1 + \lambda(b)R) + R \sum_{\beta=-b-1}^{b+1} C_{b+1, \beta 0} Y_{b+1, \beta}(\hat{R}) + O(R^2) \right], \quad \varepsilon = (E, \ell, m, \sigma),$$

где b — минимально возможное при данных ℓ и σ значение парного углового момента: $b = 0$ для состояний с нормальной четностью и $b = 1$ для состояний с аномальной четностью.

Отметим, что выводу аналогов условия Като для столкновения трех и более электронов в N -электронных системах посвящены работы [57–59], а модификации фоковских разложений, учитывающие это условие во всех членах вплоть до членов порядка $O(r^2)$, предложены в работах [60, 61].

Обсуждаемое ниже построение асимптотик трехчастичных волновых функций $\Psi^\varepsilon(\mathbf{R}, \rho)$ и их компонент в случае кулоновских парных взаимодействий и $R \rightarrow 0, \rho > 0$ или $\rho \rightarrow 0, R > 0$ предложено в работе [35] и представляется наиболее полным и математически строго обоснованным.

Для построения сначала были найдены связи между компонентами различных разложений функций Ψ^ε . Как было замечено, наряду с разложением (18) для функции $\Psi^\varepsilon(\mathbf{R}, \rho)$ имеется два эквивалентных разложения по бисферическим гармоникам $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$ — конечное разложение [104]

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{R}, \rho) = \sum_{a+b=\ell+\mu(\sigma)} \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{R}, \hat{\rho}) R^b \rho^a G_{ab}^{\ell \sigma}(R, \rho, \theta) \quad (125)$$

и бесконечное разложение [14]

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{R}, \rho) = \sum_{ab} \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{R}, \hat{\rho}) f_{ab}^\ell(R, \rho), \quad \sigma = (-1)^{a+b}. \quad (126)$$

Далее с помощью известной связи [105] функций $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$ и $D_{mm'}^{\ell \sigma}$:

$$\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{R}, \hat{\rho}) = \sqrt{2\pi} \sum_{m'=\mu(\sigma)}^b T_{abm'}^{\ell \sigma} D_{mm'}^{\ell \sigma*}(\alpha, \beta, \gamma) Y_{am'}(\theta, 0),$$

$$T_{abm'}^{\ell \sigma} \equiv \left[\frac{2}{1 + \delta_{m'0}} \frac{2b+1}{2\ell+1} \right]^{1/2} C_{b0am'}^{\ell m'}$$

компоненты $F_m^{\ell\sigma}$ разложения (18) выражались через компоненты $G_{ab}^{\ell\sigma}$ и f_{ab}^{ℓ} разложений (125) и (126):

$$F_{m'}^{\ell\sigma}(R, \rho, \theta) = \sqrt{2\pi} \sum_{a=m'}^{\ell} T_{abm'}^{\ell\sigma} Y_{am'}(\theta, 0) R^b r^a G_{ab}^{\ell\sigma}(R, \rho, \theta), \quad (127)$$

$$b = \ell - a + \mu(\sigma),$$

$$F_{m'}^{\ell\sigma}(R, \rho, \theta) = \sqrt{2\pi} \sum_{ab} T_{abm'}^{\ell\sigma} Y_{am'}(\theta, 0) f_{ab}^{\ell}(R, \rho), \quad (128)$$

$$a \geq m', \quad b = |\ell - a|, |\ell - a| + (2 - \mu(\sigma)), \dots$$

Следующий этап построения реализовался подстановкой (126) и проектированием уравнения Шредингера (4) на бисферический базис. В результате была получена бесконечная система дифференциальных уравнений для функций $f_{ab}^{\ell}(R, \rho)$. Затем из соответствующих характеристических уравнений определялись старшие члены асимптотик этих функций:

$$f_{ab}^{\ell}(R, \rho) = R^b \rho^a g_{ab}^{\ell}(R, \rho), \quad g_{ab}^{\ell}(R, \rho) \neq 0, \quad R \rightarrow 0, \quad \rho > 0, \quad (129)$$

а из характеристических уравнений для функций g_{ab}^{ℓ} доказывалось, что

$$g_{ab}^{\ell}(R, \rho) = g_{ab}^{\ell}(0, \rho) \left[1 + \lambda(b)R + O(R^2) \right], \quad R \rightarrow 0, \quad \rho > 0. \quad (130)$$

Наконец, подстановкой (129), (130) в разложения (127) и (128) были выведены асимптотики компонент $F_m^{\ell\sigma}$ и $G_{ab}^{\ell\sigma}$ при $R \rightarrow 0, \rho > 0$:

$$F_{m'}^{\ell\sigma}(R, \rho, \theta) = \beta_{\ell m'} Y_{\ell m'}(\theta, 0) \left[1 + (b+1)\lambda(b)R \right] + R \left[\gamma_{\ell m'}^- Y_{\ell-1, m'}(\theta, 0) + \gamma_{\ell m'}^+ Y_{\ell+1, m'}(\theta, 0) \right] + O(R^2), \quad (131)$$

$$G_{ab}^{\ell\sigma}(R, \rho, \theta) = G_{ab}^{\ell\sigma}(0, \rho, \theta) \left[1 + \lambda(b)R + (\mathbf{R} \cdot \mathbf{v}) + O(R^2) \right], \quad (132)$$

где $\beta_{\ell m'}$ и $\gamma_{\ell m'}^{\pm}$ — константы, а функции $G_{ab}^{\ell\sigma}$ при $R = 0$ не зависят от угла θ . Аналогичным способом доказывались соотношения

$$F_{m'}^{\ell\sigma}(R, \rho, \theta) = \rho^{m'} H_{m'}^{\ell m'}(R, \rho, \theta), \quad |H_{m'}^{\ell\sigma}| < \infty, \quad \rho \rightarrow 0, R > 0, \quad (133)$$

описывающие асимптотическое поведение компонент $F_{m'}^{\ell\sigma}$ в пределе малого расстояния ρ между частицей p_3 и прямой, соединяющей частицы p_1 и p_2 .

Как видно из формул (131) и (132), в точке парного столкновения компонента $F_m^{\ell\sigma}$ имеет асимптотики: $O(1)$ для состояний с нормальной четностью и $O(R)$ в случае аномальной четности, и в любом случае при $R = 0$ компоненты $F_m^{\ell\sigma}$ с разными m' зависят друг от друга. В осевом пределе (133) поведение компоненты $F_m^{\ell\sigma}$ определяется значением ее индекса m' .

Асимптотики фаддеевских компонент (22) при $x_k \rightarrow 0, y_k \neq 0$, где $k = 1, 2, 3$, исследовались в работе [38]. Ее авторы подстановкой

$$\Psi_{im'}^{\ell m}(\mathbf{q}_k) = \sum_{n=0}^{\infty} x_k^n \Psi_{im'n}^{\ell m}(y_k, \theta_k), \quad \mathbf{q}_k = (x_k, y_k, \theta_k), \quad i = 1, 2, 3,$$

свели уравнения (23) к рекуррентной по индексу n цепочке дифференциальных уравнений для искомым функций $\Psi_{im'n}^{\ell m}$ и, следовательно, доказали, что в окрестности любой их трех ($k = 1, 2, 3$) точек парных столкновений полные асимптотические разложения фаддеевских компонент Ψ_i^ε , $i = 1, 2, 3$, и их суммы Ψ^ε — это бесконечные ряды по целым степеням соответствующего аргумента x_k . Несмотря на то, что полученная рекуррентная система выглядит довольно сложно, авторам удалось выразить решения $\Psi_{im'n}^{\ell m}$ ее первых ($n = 0, 1$) уравнений через неопределенные функции $f_{im'}^0$ и $f_{im'}^{1b}$:

$$\begin{aligned} \Psi_{im'0}^{\ell m}(y_k, \theta_k) &= f_{im'}^0(y_k) P_\ell^{|m'|}(u_k), \\ \Psi_{im'1}^{\ell m}(y_k, \theta_k) &= \delta_{ik} \left(z_1 z_2 \sqrt{\mu_{ij}/2} \right) \sum_{j=1}^3 \times \\ &\quad \times \sum_{m''=-\ell}^{\ell} D_{m'm''}^\ell(0, \theta_k, 0) P_\ell^{|m''|}(u_k) f_{jm''}^0(y_k) + \\ &\quad + \sum_{b=|\ell-1|}^{\ell+1} P_b^{|m'|}(u_k) f_{im'}^{1b}(y_k), \quad u_k \equiv \cos \theta_k. \end{aligned}$$

Используя эти выражения и представления (22), можно построить явные асимптотики фаддеевских компонент Ψ_i^ε в виде сумм двух наиболее медленно убывающих в точке парного столкновения слагаемых.

5. ВАРИАЦИОННЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ

Как было пояснено выше, асимптотические разложения волновых функций и их компонент в точках тройного и парных столкновений содержат неопределенные постоянные и функции. Тем не менее эти разложения дают представление о явной координатной зависимости волновых функций и их компонент при малых расстояниях.

Существенное улучшение сходимости вариационных расчетов при использовании анзацев (вариационных разложений), воспроизводящих такие асимптотики, иллюстрируется ниже основными результатами работ [32, 36, 62–76]. Затем описываются два особых вариационных разложения: разложение [77], обеспечивающее прецизионную точность расчета основных ($\ell = 0$) изоэлектронных состояний атома гелия, и разложение [78–80], заметно упрощающее расчет трехчастичных состояний с $\ell \neq 0$.

Напомним, что вариационный способ [16] построения волновой функции Ψ^ε основного связанного состояния трехчастичной системы и оценки его энергии E реализуется в два этапа. Сначала искомая волновая функция Ψ^ε , или же каждая из ее компонент, заменяется конечной суммой выбранных опорных функций $f_n(\mathbf{q}; \mathbf{X})$, зависящих от совокупностей \mathbf{q} трехчастичных координат и столбца \mathbf{X} искомым вариационных параметров X_1, X_2, \dots, X_N :

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{q}; \mathbf{X}) = \sum_{n=1}^N f_n(\mathbf{q}; \mathbf{X}).$$

Затем параметры находятся из минимума функционала Рэлея–Ритца:

$$E(N) = \langle \Psi^\varepsilon | H | \Psi^\varepsilon \rangle / \langle \Psi^\varepsilon | \Psi^\varepsilon \rangle,$$

где угловые скобки означают интегрирование по совокупности \mathbf{q} всех координат. Задача минимизации сводится к обобщенной проблеме на собственные значения с симметричными матрицами \mathbf{A} и \mathbf{B} :

$$[\mathbf{A} - E(N)\mathbf{B}]\mathbf{X} = 0. \quad (134)$$

Таким образом, вычисление вариационного приближения $E(N)$ искомой энергии E представляется достаточно простым. Вероятно, поэтому исторически первой попыткой решения задачи трех частиц был вариационный расчет [32] двухэлектронного атома гелия ($e^-, e^-, {}^3\text{He}^{++}$). Считалось, что частицы p_1 и p_2 — электроны с радиусами-векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 относительно бесконечно тяжелой частицы p_3 — ядра гелия. Для волновой функции Ψ^ε основного состояния $\varepsilon = (\ell, m, \sigma) = (0, 0, 1)$ использовался анзац с правильной асимптотикой (124) в точке столкновения двух электронов ($q_3 \rightarrow 0$) и в точках столкновения каждого из них ($a_1 \rightarrow 0, a_2 \rightarrow 0$) с ядром гелия:

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{q}) = \exp(-q_1/2) \sum_{ijk} X_{ijk} q_1^i q_2^j q_3^k, \quad (135)$$

$$q_1 \equiv a_1 + a_2, \quad q_2 \equiv a_2 - a_1, \quad q_3 \equiv a_{12} = |\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2|, \quad i, j, k = 0, 1, \dots$$

Вероятно, по этой причине выполненные вручную расчеты энергии ионизации атома гелия совпали с экспериментальными данными с хорошей для того времени точностью 10^{-4} .

Появление электронных вычислительных машин позволило выполнять гораздо более сложные вариационные вычисления. Например, для исследования основного состояния той же системы (e^- , e^- , ${}^3\text{He}^{++}$) в работе [62] использовался анзац (135) и диагонализировалась матрица размерностью $N = 39$, а уже годом позже в работе [63] были выполнены вычисления с довольно большим числом вариационных параметров $N = 1078$.

В работе [64] вместо классического анзаца (135) использовалось представление, воспроизводящее фоковскую асимптотику:

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{q}) = \exp(-q_1/2) \sum_{ijknm} X_{ijknm} q_1^i q_2^{2j} q_3^k r^n s^m, \quad (136)$$

$$r \equiv (a_1^2 + a_2^2)^{1/2}, \quad s \equiv \ln r, \quad i, j, k, n, m, = 0, 1, \dots$$

Оказалось, что такое включение логарифмических членов в вариационный анзац существенно улучшает сходимость вариационного приближения $E(N)$ с ростом N , например, в атомных единицах (а. е.):

$$E(1400) = -2,90372437703411959629 \text{ а. е.},$$

$$E(1600) = -2,903724377034119597843 \text{ а. е.},$$

$$E(1800) = -2,9037243770341195981964 \text{ а. е.}$$

Позже были предложены вариационные анзацы [65,66], более компактные, чем сумма (136), но также обладающие фоковской асимптотикой.

Стоит отметить, что простое обобщение представления (135) — двойное разложение [67,68]:

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{q}) = \sum_{ijk} X_{ijk}^A a_1^i a_2^j a_{12}^k \exp(-\alpha_A a_1 - \beta_A a_2) +$$

$$+ \sum_{ijk} X_{ijk}^B a_1^i a_2^j a_{12}^k \exp(-\alpha_B a_1 - \beta_B a_2)$$

явно описывает не только асимптотики в точках парных столкновений, но и благодаря экспоненциальным функциям и дополнительным действительным параметрам α_A, β_A и α_B, β_B позволяет правильно описать асимптотики волновой функции в пределах диссоциации $a_1 \rightarrow \infty$ и $a_2 \rightarrow \infty$ системы двухэлектронного атома гелия на его ион и свободный электрон. Несмотря на то, что такое разложение позволяет улучшить точность вариационных расчетов, оно имеет скрытый и характерный для вариационного метода дефект: при больших N из-за почти линейной зависимости опорных функций возникает численная неустойчивость, устранить которую не удается даже при использовании четверной арифметики.

Как показано в недавней работе [69], использование другой известной модификации [70–72] анзаца (135)

$$q_1^i q_2^j q_3^k \rightarrow \exp(-\alpha_n a_1 - \beta_n a_2 - \gamma_n a_{12}),$$

т. е. разложения искомой волновой функции по экспоненциальным функциям с комплексными параметрами $\alpha_n, \beta_n, \gamma_n$, также правильно описывающего асимптотики во всех точках парных столкновений и пределах диссоциации, радикально ускоряет сходимость. Для иллюстрации этого факта достаточно отметить, что при довольно близких значениях чисел N опорных функций значение $E(N)$ энергии основного состояния атома гелия, вычисленное в обсуждаемой работе [69], на четыре десятичных знака точнее значения, полученного в работе [68]:

$$E(2114) = -2,903724377034119596 \text{ а. е. [68]},$$

$$E(2200) = -2,903724377034119598296 \text{ а. е. [69]}.$$

Особого внимания заслуживает вариационный метод, представленный в работе [36] как обобщение предыдущих исследований [35, 73–76] на случай произвольного углового момента ℓ и аномальной четности σ связанного трехчастичного состояния. В этом методе для компонент $F_m^{\ell\sigma}$ разложения (18) используется вариационный анзац, описывающий асимптотики и в точке парного столкновения (131), (132), и в осевом пределе (133):

$$F_{m'}^{\ell\sigma}(R, \xi, \eta) = [2\rho(R, \xi, \eta)]^{m'} \sum_n C_n R^{i_n} \xi^{j_n} \eta^{k_n} \exp[-(\alpha_n + \beta_n \xi)R],$$

$$2\rho(R, \xi, \eta) = R[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2},$$

$$i_n \geq j_n, \sigma = (-1)^\ell; \quad i_n < j_n, \sigma = (-1)^{\ell+1},$$

а для численного решения спектральной задачи (134), получаемой из системы уравнений (20) с помощью такого анзаца, применяется известный способ регуляризации [76], обеспечивающий численную устойчивость процедуры обратных итераций. Успешное решение двух характерных для вариационного подхода проблем (выбор реалистического анзаца и построение устойчивого численного алгоритма) позволило авторам вычислить энергии и средние размеры всех связанных состояний мезомолекулярных ионов водорода с $\ell = 0, 1, 2, 3$ и $\sigma = \pm 1$, используя довольно большое число $N = 2600$ вариационных параметров X_n .

Следующая типичная для вариационного метода проблема возникает на промежуточном этапе редукции уравнений (20) к задаче (134), а именно при вычислении интегралов от операторов $H_{m'm''}^{\ell\sigma}$ и V в обкладках опорных функций. При произвольном выборе опорных функций такие трехкратные

интегралы не только не удается взять аналитически, но и довольно сложно вычислить с высокой точностью.

Изыщное решение этой проблемы в расчете основных ($\ell = 0$) состояний систем (p_1, p_2, p_3) из двух электронов p_1 и p_2 и частицы p_3 с зарядом $z_3 = 2, 3, \dots, 10$ предложено и реализовано в работе [77] с помощью анзаца

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{q}) = \sum_{ijk} X_{ijk} f_{ijk}(\mathbf{q}), \quad f_{ijk}(\mathbf{q}) = A_i(q_1)B_j(q_2)C_{2k}(q_3),$$

$$q_1 = a_1 + a_2, \quad q_2 = a_{12}/(a_1 + a_2), \quad q_3 = (a_1 - a_2)/a_{12},$$

$$A_i = \exp(-\alpha_i q_1) L_i^5(2\alpha_i q_1), \quad B_j = N_j P_j^{(0,2)}(2q_2 - 1), \quad C_{2k} = N_{2k} P_{2k}^{(1,1)}(q_3),$$

где α_i и X_{ijk} — вариационные параметры; N_j и N_{2k} — известные нормировочные множители. Особый выбор координат \mathbf{q} и факторизованных опорных функций f_{ijk} позволил авторам не только представить все трехкратные интегралы произведениями однократных интегралов, но и получить лучшие на сегодняшний день вариационные оценки энергий основных изоэлектронных состояний атома гелия.

Следующая проблема вариационного подхода к решению уравнения Шредингера (20) с $\ell \neq 0$ и осью квантования \hat{e}_3 , направленной вдоль коллинеарных векторов \mathbf{x}_3 и \mathbf{R} , обусловлена сложным строением операторов $H_{m', m' \pm 1}^{\ell\sigma}$ и заключается в необходимости существенного увеличения числа N опорных функций вариационного анзаца по сравнению со случаем $\ell = 0$. Наличие таких операторов — это следствие кориолисова взаимодействия, порождаемого нетривиальным при $\ell \neq 0$ слагаемым \mathbf{L}_K^2 оператора \mathbf{L}^2 .

Построение вариационного анзаца, содержащего сравнительно небольшое число реалистических и довольно просто отображаемых оператором \mathbf{L}_K^2 опорных функций, представляется возможным методом, предложенным в работах [78–80]. Чтобы аргументировать это утверждение, сначала опишем основные отличия этого подхода от всех рассмотренных выше.

В работах [78–80] считалось, что орт \hat{e}_3^3 подвижной системы S_3 направлен в плоскости частиц произвольным образом: угол τ_i между якобиевским вектором \mathbf{x}_i и ортом \hat{e}_3^3 , вообще говоря, ненулевой. Хотя для искомой волновой функции системы трех кулоновских частиц использовалось то же разложение (22), уравнение Шредингера в представлении полного момента и четности записывалось в матричном виде

$$[(-r^{-5}\partial_r r^5\partial_r + V - E)\mathbf{I} + r^{-2}(\mathbf{L}^2)^{\ell\sigma}(\mathbf{q})]\mathbf{F}^{\ell\sigma}(\mathbf{q}) = 0,$$

$$\mathbf{I} = \text{diag}\{1, 1, \dots, 1\}, \quad \mathbf{F}^{\ell\sigma} = (F_{\mu(\sigma)}^{\ell\sigma}, \dots, F_{\ell}^{\ell\sigma})^T, \quad \mathbf{q} = (r, \xi, \eta),$$

что позволило существенно упростить вывод спектральной задачи (134).

Далее, в отличие от всех рассмотренных выше анзацев, для компонент $F_{m'}^{\ell\sigma}$ использовалось вариационное разбиение фаддеевского типа. Каждая компонента $F_{m'}^{\ell\sigma}$ представлялась суммой трех слагаемых $\Phi_{im'}^{\ell\sigma}$, записанных, как и

фаддеевские компоненты Ψ_i^ε , $i = 1, 2, 3$, в собственных внутренних координатах (r, φ_i, θ_i) , выраженных через координаты $\mathbf{q} = (r, \xi, \eta)$:

$$\begin{aligned} F_{m'}^{\ell\sigma}(\mathbf{q}) &= \sum_{i=1}^3 \Phi_{im'}^{\ell\sigma}(r, \varphi_i, \theta_i), \quad \Phi_{im'}^{\ell\sigma}(\mathbf{q}) = \\ &= G_{ib}(r, \sin \varphi_i) \sum_{b=\mu(\sigma)}^{\ell} X_{ib} Z_{bm'}^{\ell\sigma}(\varphi_i, \theta_i). \end{aligned} \quad (137)$$

Неоспоримое преимущество такого анзаца состоит в возможности выбора опорных функций G_{kb} , наиболее близких к волновым функциям каждой пары частиц (p_i, p_j) в отсутствие третьей частицы p_k или же правильно описывающих асимптотики при ее удалении ($y_k \rightarrow \infty$). Второе преимущество обусловлено использованием внутренних гипергармоник $Z_{bm'}^{\ell\sigma}$, $m' = \mu(\sigma), \dots, b$, оно заключается в простоте вычисления матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} задачи (134) для столбца \mathbf{X} искомых вариационных коэффициентов X_{ib} при любом ℓ .

Следуя обсуждаемым работам [79, 80], поясним схему вычисления этих матриц. Для гипергармоник (8) с индексами a и b , подчиненными условиям $\sigma = (-1)^{a+b}$ и $L = a + b = \ell + \mu(\sigma)$, использовался аналог разложения (22):

$$Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma}(\omega_i) Z_{bm'}^{\ell\sigma}(\varphi_i, \theta_i), \quad i = 1, 2, 3.$$

Внутренние гипергармоники $Z_{bm'}^{\ell\sigma}$, $m' = \mu(\sigma), \dots, b$, раскладывались по симметризованным d -функциям Вигнера известным способом [78]:

$$\begin{aligned} Z_{bm'}^{\ell\sigma}(\varphi_i, \theta_i) &= \frac{(-1)^{a+\ell}}{\sqrt{a!! b!!}} \sin^a \varphi_i \cos^b \varphi_i \times \\ &\times \sum_{m''=\mu(\sigma)}^{\ell} \sqrt{2 - \delta_{m''0}} C_{b, -m\ell m}^{a0} P_b^m(\theta_i) d_{m''m}^{\ell\sigma}(\tau_i). \end{aligned}$$

Явный вид матрицы $(\mathbf{L}^2)^{\ell\sigma}$ оператора квадрата гипермомента \mathbf{L}^2 в базисе (19) не потребовался, потому что при любой ориентации орта \hat{e}_3 столбец $\mathbf{Z}_b^{\ell\sigma}$ с элементами $Z_{bm'}^{\ell\sigma}$ удовлетворяет матричному уравнению

$$[(\mathbf{L}^2)^{\ell\sigma} - (\ell + \mu(\sigma))(\ell + 4 + \mu(\sigma))] \mathbf{Z}_b^{\ell\sigma} = 0.$$

Поэтому вариационный образ матрицы $(\mathbf{L}^2)^{\ell\sigma}$ удалось выразить через скалярные произведения $\Pi_{ij}^{bb'}$ столбцов $\mathbf{Z}_b^{\ell\sigma}$ и $\mathbf{Z}_{b'}^{\ell\sigma}$ и простые комбинации A_{ib}^{\pm} функций $(\sin \varphi_i)^{\pm 1}$ и производных опорных функций G_{ib} анзаца (137):

$$\langle G_{ib} | (\mathbf{L}^2)^{\ell\sigma} | G_{jb'} \rangle = [\ell + \mu(\sigma)][\ell + 4 + \mu(\sigma)] \langle \Pi_{ij}^{bb'} G_{ib} G_{jb'} \rangle + \langle \Pi_{ij}^{bb'} G_{ib} (A_{jb'}^+ + A_{jb'}^-) \rangle.$$

Здесь $i, j = 1, 2, 3$, угловые скобки означают интегрирование по координатам r, ξ, η , а произведения $\Pi_{ij}^{bb'}$ не зависят от углов τ_i, τ_j , но зависят от угла τ_{ij} между векторами \mathbf{x}_i и \mathbf{x}_j и вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} \Pi_{ij}^{bb'} &= \frac{(-1)^{a+a'}}{\sqrt{a!!b!!a'!!b'!!}} \sin^a \varphi_i \cos^b \varphi_i \sin^{a'} \varphi_j \cos^{b'} \varphi_j \times \\ &\times \sum_{mm'} \sqrt{2 - \delta_{m0}} \sqrt{2 - \delta_{m'0}} C_{b,-m\ell m}^{a0} C_{b',-m'\ell m'}^{a'0} P_b^m(\theta_i) P_{b'}^{m'}(\theta_j) d_{mm'}^{\ell\sigma}(\tau_{ij}). \end{aligned}$$

Заключительный этап — построение матриц \mathbf{A} и \mathbf{B} задачи (134) — достаточно прост, так как матрица \mathbf{A} содержит в качестве слагаемых уже построенную матрицу оператора \mathbf{L}^2 и легко вычисляемые матрицы операторов $-r^{-5}\partial_r r^5\partial_r$ и V , а вычисление матрицы \mathbf{B} сводится к вычислению интегралов $\langle G_{ib} \Pi_{ij}^{bb'} G_{jb'} \rangle$.

Таким образом, при любом ℓ вычисление оператора $(\mathbf{L}^2)^{\ell\sigma}$ в обкладках опорных функций с произвольными, вообще говоря, множителями G_{ib} заменяется гораздо более простой задачей, а ее наиболее трудную часть — вычисление произведений $\Pi_{ij}^{bb'}$ — удастся решить аналитически.

6. СПЛАЙН-РАЗЛОЖЕНИЯ ФАДДЕЕВСКИХ КОМПОНЕНТ

Известные сеточные методы численного решения уравнений Фаддеева, основанные на их редукции к линейным системам уравнений (дискретизации) с легко вычисляемыми матрицами и неизвестными коэффициентами, различаются выбором координат, строением сеток, типом, гладкостью и точностью аппроксимативных разложений искомых решений и их производных, а в итоге — строением и размерностью матриц. Оптимальным является алгоритм, в котором числа узлов сетки, искомых коэффициентов, ненулевых элементов и размерность матрицы минимальны, а порядки аппроксимации наивысшие для выбранного способа дискретизации.

Принципиальные различия дискретизаций [81–93] уравнений Фаддеева в \mathcal{R}_+^2 поясним на самом простом примере, а именно на задаче о связанном состоянии трех тождественных бозонов с S -волновыми взаимодействиями и нулевым полным угловым моментом ($\ell = 0$). В этом случае из-за условий симметрии (75) система (15) вырождается в уравнение

$$\begin{aligned} (\partial_r^2 + r^{-1}\partial_r - r^{-2}\partial_\varphi^2 + E)U(r, \varphi) &= \frac{4}{\sqrt{3}}V_1(r \cos \varphi) \langle r, \varphi | S | U(r, \varphi') \rangle, \quad (138) \\ \langle r, \varphi | S | U(r, \varphi') \rangle &\equiv \left[U(r, \varphi) + \int_{C_-(\varphi; \pi/3)}^{C_+(\varphi; \pi/3)} d\varphi' U(r, \varphi') \right], \quad \varphi \equiv \varphi_1, \varphi' \equiv \varphi_2, \end{aligned}$$

для функции $U(r, \varphi) = U_{100}^{00}(r, \varphi_1)$, равной нулю на границе области \mathcal{R}_+^2 :

$$U(r, \varphi) = 0, \quad \varphi = 0, \pi/2, \quad \forall r, \quad r = \infty, \quad \forall \varphi. \quad (139)$$

Пусть на отрезках $0 \leq r \leq R < \infty$ и $0 \leq \varphi \leq \pi/2$ заданы некоторые, вообще говоря, нерегулярные одномерные разбиения (сетки):

$$\Delta_r : 0 = r_0 < r_1 < \dots < r_{N+1} = R, \quad \Delta_\varphi : 0 = \varphi_0 < \varphi_1 < \dots < \varphi_{M+1} = \pi/2,$$

порождающие в прямоугольнике $\mathcal{P}^2 \equiv [0, R] \otimes [0, \pi/2]$ с границей \mathcal{G}^2 ячейки $\mathcal{P}_{ps}^2 \equiv [r_p, r_{p+1}] \otimes [\varphi_s, \varphi_{s+1}]$ и двумерную сетку $\Delta \equiv \Delta_r \otimes \Delta_\varphi$ узлов (r_p, φ_s) . Сетку Δ характеризуем строкой $\mathbf{N}(r, \varphi) = (N, M)$ и максимальными значениями h и g всех шагов $h_p \equiv r_{p+1} - r_p$ и $g_s \equiv \varphi_{s+1} - \varphi_s$. Достигнутой точностью τ называем число значащих цифр вычисляемой величины, не изменяющихся при измельчении сетки, а под точностью аппроксимации v уравнений Фаддеева их дискретным аналогом подразумеваем, следуя книге [7], асимптотическую оценку приближения вторых частных производных **точных** фаддеевских компонент их конечными разностями либо интерполяционными сплайнами.

Если сетка Δ_r равномерная ($h_p = h$ при всех p), то остаточный член v трехточной конечно-разностной аппроксимации [5] производной $\partial_r^2 U$ известной функции $U \in \mathcal{C}^4(\mathcal{R}_+^2)$ имеет порядок $O(h^2)$, т. е. $v = O(h^2)$:

$$\partial_r^2 U(r, \varphi)|_{r=r_p} = h^{-2}[U(r_{p-1}, \varphi) - 2U(r_p, \varphi) + U(r_{p+1}, \varphi)] + O(h^2),$$

а на неравномерных сетках $v = O(h)$. Для дискретизации уравнение (138) и граничные условия (139) записываются в узлах сетки Δ , а производные аппроксимируются конечными разностями. В итоге для искомым узловых значений $U_{ps} = U(r_p, \varphi_s)$ получается система уравнений с блочно-трехдиагональной матрицей размерности $N \times M$ и блоками размерности M . Такой способ дискретизации был впервые развит в работе [81], а затем применен для решения задач на связанные состояния трех нуклонов с S -волновыми взаимодействиями, а также задач nd - и pd -рассеяния [82]. В недавних работах [83–88] аналогичный подход был успешно реализован для расчета связанных состояний тримера гелия ${}^4\text{He}_3$ (трех атомов ${}^4\text{He}$) и характеристик рассеяния атома ${}^4\text{He}$ на димере гелия ${}^4\text{He}_2$ (связанном состоянии двух атомов ${}^4\text{He}$). Вычисления таких характеристик существенно затрудняется особенностями ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}$ -взаимодействия: сильным отталкиванием и медленным убыванием на малых и, соответственно, больших расстояниях. В этих областях приходится стучать сетки или использовать специальные приемы [85, 92, 101].

Несмотря на предельную простоту метода конечно-разностной аппроксимации, его использование для решения задачи на слабосвязанные состояния или задачи рассеяния, когда асимптотики искомым функций медленно убывают или же осциллируют, требует больших сеток. Например, для расчета [88]

этим методом энергии связи основного и возбужденного состояний тримера с точностью $\tau = 2$ авторам пришлось использовать модель твердого тела [85] и сетки $\mathbf{N}(r, \varphi) = (555, 555)$ и, соответственно, $\mathbf{N}(r, \varphi) = (805, 805)$. Следует отметить, что после вычисления узловых значений фаддеевских компонент построение волновой функции не представляется возможным без решения проблемы их интерполяции. В значительной мере избавиться от перечисленных недостатков позволяет сплайн-аппроксимация.

Напомним определения и некоторые свойства сплайн-функций [7].

Пусть n и ν — целые числа и $0 \leq \nu \leq n + 1$. Функция $S_{n\nu}(r)$ — сплайн степени n дефекта ν с узлами на сетке Δ_r и коэффициентами a_α^p , если $S_{n\nu}(r) \in C_{[0, R]}^{n-\nu}$, и на каждом отрезке $[r_p, r_{p+1}]$

$$S_{n\nu}(r) = \sum_{\alpha=0}^n a_\alpha^p (r - r_p)^\alpha. \quad (140)$$

Производные $S_{n\nu}^{(t)}$ порядка $t = n - \nu + 1, \dots, n$, вообще говоря, терпят разрывы во внутренних узлах сетки Δ_r . Сплайны $S_{m\mu}(\varphi)$, но уже на сетке Δ_φ , определяются аналогичным образом. Функция $S_{nm\nu\mu}(r, \varphi)$ называется сплайном двух переменных степени n дефекта ν , $0 \leq \nu \leq n + 1$, по r и степени m дефекта μ , $0 \leq \mu \leq m + 1$, по φ с линиями сшивки на сетке Δ и коэффициентами $a_{\alpha\beta}^{ps}$, если $S_{nm\nu\mu}(r, \varphi) \in C^{n-\nu, m-\mu}(\mathcal{P}^2)$ и

$$S_{nm\nu\mu}(r, \varphi) = \sum_{\alpha=0}^n \sum_{\beta=0}^m a_{\alpha\beta}^{ps} (r - r_p)^\alpha (\varphi - \varphi_s)^\beta, \quad (r, \varphi) \in \mathcal{P}_{ps}^2, \quad \forall p, s. \quad (141)$$

По определению (140) на каждом промежутке $[r_p, r_{p+1}]$ сплайны S_{31} и S_{32} являются полиномами третьей степени, причем производные S'_{32} , S'_{31} и S''_{31} непрерывны всюду на $[0, R]$, а производные S''_{32} терпят разрывы во внутренних узлах сетки. Сплайны S_{31} и S_{3311} называются кубическими и бикубическими сплайнами класса C^2 , а сплайны S_{32} и S_{3322} — эрмитовыми кубическими и бикубическими сплайнами.

Для вычисления сплайнов $S_{n\nu}$ и $S_{nm\nu\mu}$ вместо кусочно-полиномиальных представлений (140) и (141) часто используются их разложения по соответствующей конечной системе базисных сплайнов, зануляющихся вне определенных подынтервалов отрезков $[0, R]$ или $[0, \varphi]$. Подынтервал, на котором базисный сплайн отличен от нуля, называют его интервалом-носителем.

В работе [89] для численного решения задачи (138), (139) в области \mathcal{P}^2 использовалась подстановка

$$U(r, \varphi) = r^{-1/2} F(r, \varphi) \exp(z), \quad z \equiv \sqrt{r|E|}$$

и аппроксимация искомой функции F сплайном S_{3322} , разложенным по базисным кубическим эрмитовым сплайнам $B_p^\lambda(r)$ и $B_s^\tau(\varphi)$ с интервалами-носителями $[r_{p-1}, r_{p+1}]$ и $[\varphi_{s-1}, \varphi_{s+1}]$:

$$F(r, \varphi) \approx S_{3322}(r, \varphi) = \sum_{\lambda, \tau=1}^2 \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^M X_{\lambda\tau ps} B_p^\lambda(r) B_s^\tau(\varphi). \quad (142)$$

Для дискретизации авторами применялся известный метод ортогональной коллокации [6, 7]: уравнение и граничные условия для искомого сплайна S_{3322} записывались в двух гауссовских точках каждого отрезка $[r_p, r_{p+1}]$ и $[\varphi_s, \varphi_{s+1}]$ сеток Δ_r и Δ_φ . Таким образом, для искомых коэффициентов $X_{\lambda\tau ps}$ разложения (142) получалась система линейных уравнений с ленточной матрицей размерностью $4N \times M$ и шириной ленты $6M$. Оказалось, что применение сплайн-аппроксимации позволяет сократить число узлов сетки Δ в 1,5–2 раза по каждой переменной по сравнению с конечно-разностной аппроксимацией, а выбор гауссовских точек в качестве узлов коллокации обеспечивает точность аппроксимации $v = O(h^3 + g^3)$ как на равномерной, так и на неравномерной сетке.

Такое же сокращение отмечалось и в работе [90], в которой был предложен алгоритм дискретизации задачи (138), (139), основанный на более гладкой аппроксимации: $U \approx S_{3311}$. Уравнения и граничные условия сначала записывались в узлах сетки Δ , затем неизвестные коэффициенты $N_{ps} \equiv \partial_r^2 S_{3311}(r_p, \varphi_s)$ сплайна, выраженные из полученных уравнений, подставлялись в условия непрерывности для производных $\partial_r^2 S_{3311}$ во внутренних узлах сетки Δ . Это позволило аппроксимировать вторые частные производные с точностью $v = O(h^2 + g^2)$ и получить систему уравнений для коэффициентов сплайна с блочно-трехдиагональной матрицей с блоками размерностью M .

Такую же точность v и разреженность матрицы обеспечивает и предложенный в последовавшей работе [91] более гибкий и универсальный алгоритм, основанный на аппроксимации искомой функции U сплайнами S_{3311} , разложенными по базисным сплайнам $B_p(r)$ и $B_s(\varphi)$ класса \mathcal{C}^2 с интервалами-носителями $[r_{p-2}, r_{p+2}]$ и $[\varphi_{s-2}, \varphi_{s+2}]$:

$$U(r, \varphi) \approx S_{3311}(r, \varphi) = \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^M X_{ps} B_p(r) B_s(\varphi).$$

Позже в работах [92, 93] был развит метод, более эффективный по сравнению с рассмотренным выше алгоритмом решения обрезанной по индексам a и b системы интегродифференциальных уравнений (15). В этом методе, как и в работе [89], искомые бисферические фаддеевские компоненты U_{iab}^ℓ аппроксимируются сплайном (141), разложенным по эрмитовым базисным

сплайнам $B_p^\lambda(r)$ и $B_s^\tau(\varphi)$:

$$U_{iab}^\ell(r, \varphi) \approx S_{3322}(r, \varphi_i) = \sum_{\lambda, \tau=1}^2 \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^M X_{\lambda\tau ps}^{iab} B_p^\lambda(r) B_s^\tau(\varphi).$$

Для дискретизации подсистемы ($a < \infty$, $b < \infty$) системы уравнений (15) авторами использовался метод ортогональной коллокации, а для сокращения объема вычислений был предложен и реализован метод тензорной факторизации матриц и метод трансформации переменной r — подстановки $r(\rho) = -\lambda^{-1} \ln(1 - \rho)$ с новым аргументом ρ и варьируемым параметром λ . В итоге авторам удалось аппроксимировать вторые производные функций U_{iab}^ℓ с точностью $v = O(h^3 + g^3)$ и на небольших сетках достичь хорошей точности вычислений энергий связанных состояний. Например, для задачи (138), (139) с потенциалом Мальфлета–Тьена, записанной в координатах (ρ, φ) , точность $\tau = 3$ вычисления энергии основного состояния достигается при $\mathbf{N} = (10, 12)$, а точность $\tau = 5$ — при $\mathbf{N} = (45, 50)$.

Изящный способ решения уравнений (15), позволяющий существенно сократить время вычислений, предложен и реализован в работах [94, 95] по следующей схеме. Для выбранной сетки Δ_φ , но только под интегралами, искомые компоненты U_{iab}^ℓ заменяются разложениями

$$U_{iab}^\ell(r, \varphi_k) = \sum_{s=1} U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) F_s(\varphi_k), \quad F_s(\varphi) = S_{32}(\varphi), \quad F_s(\varphi_{s'}) = \delta_{ss'}$$

по фундаментальным сплайнам F_s . Далее вычисляются интегралы. Таким образом, исходные интегродифференциальные уравнения сводятся к дифференциальными уравнениям. Для их решения авторы использовали конечно-разностные аппроксимации по r и φ_i . При не столь больших сетках $\mathbf{N} = (80, 50)$ вычисленные ими значения энергий связи мезомолекул μpp , μdd , μtt , иона $e^- e^+ e^-$ и ядра ${}^3\text{H}$ с точностью $\tau \geq 3$ согласуются с результатами других подходов (см. таблицу в [95]).

После работы [38] проблема существования решения уравнений Фаддеева (23) в \mathcal{R}^3 подробно обсуждалась в обзорах [39, 40]. Наиболее эффективные алгоритмы численного решения таких уравнений в случае трех заряженных частиц в состоянии с $\ell = 0$ предложены в работах [96–100], а в случае нейтральных тождественных бозонов с сильным отталкиванием на малых расстояниях (например, трех атомов ${}^4\text{He}_3$) — в работах [101–103].

В случае $\ell = 0$ каждое ($i = 1, 2, 3$) разложение (22) содержит одно слагаемое, поэтому система (23) состоит из трех уравнений и подстановкой

$$\Psi_{i0}^0(\mathbf{q}_i) = f(\mathbf{q}_i) U_i(\mathbf{q}_i), \quad i = 1, 2, 3,$$

сводится к системе трехмерных уравнений для функций U_i , $i = 1, 2, 3$:

$$\left[\tilde{H}_0(\mathbf{q}_i) - E \right] U_i(\mathbf{q}_i) = f^{-1}(\mathbf{q}_i) V_i(x(\mathbf{q}_i)) \sum_{k=1}^3 f(\mathbf{q}_k) U_k(\mathbf{q}_k). \quad (143)$$

В этой системе оператор \tilde{H}_0 , порожденный оператором H^0 , инвариантен относительно набора \mathbf{q}_i трех координат в плоскости частиц, и в зависимости от выбора множителя f и координат $\mathbf{q} = \mathbf{q}_i$ имеет следующий вид:

$$\tilde{H}_0(\mathbf{q}) = -\partial_r^2 - \frac{4}{r^2} \left[\partial_\chi^2 + \frac{1}{(\sin \chi)^2} \left(\partial_\theta^2 - \operatorname{ctg} \theta \partial_\theta + \frac{1}{(\sin \theta)^2} \right) + \frac{1}{16} \right], \quad (144)$$

$$\mathbf{q} = (r, \chi, \theta), \quad f = r^{-5/2} (\sin \chi \sin \theta)^{-1}, \quad \chi \equiv 2\varphi,$$

$$\tilde{H}_0(\mathbf{q}) = -\partial_x^2 - \partial_y^2 - \frac{x^2 + y^2}{x^2 y^2} \operatorname{cosec} \theta \partial_\theta \sin \theta \partial_\theta, \quad (145)$$

$$\mathbf{q} = (x, y, \theta), \quad f = 1/xy,$$

$$\tilde{H}_0(\mathbf{q}) = -\partial_x^2 - \partial_y^2 - \frac{x^2 + y^2}{x^2 y^2} \partial_u (1 - u^2) \partial_u, \quad (146)$$

$$\mathbf{q} = (x, y, u), \quad f = 1/xy.$$

Все обсуждаемые далее алгоритмы [96–103] основаны на разложениях искомым функций U_i по квинтетным сплайнам [96]:

$$U_i(\mathbf{q}) = \sum_{\lambda=1}^3 \sum_{p=1}^N \sum_{s=1}^M \sum_{t=1}^K X_{pst}^{i\lambda} B_p^\lambda(q_1) B_s^\lambda(q_2) B_t^\lambda(q_3), \quad (147)$$

заданным на выбранной трехмерной сетке $\Delta_{\mathbf{q}}$ узлов (q_{1p}, q_{2s}, q_{3t}) . Квинтетные сплайны $B_p^\lambda(q_1)$, $\lambda = 1, 2, 3$, это сплайны $S_{5,2}$, подчиненные разным условиям на концах их общего интервала-носителя $[q_{1,p-1}, q_{1,p+1}]$.

В работе [96] исследовался спектр системы (e^-, e^-, e^+) путем численного решения уравнений (143), (6). Совпадение с вариационными оценками составило четыре десятичных знака уже при небольшом числе узлов по каждой координате: $\mathbf{N}(r, \chi, \theta) = (16, 14, 18)$. Позже по аналогичной схеме был проведен расчет спектра $dt\mu$ -системы [97]. Совпадение с вариационной оценкой составило пять десятичных знаков при сетке $\mathbf{N}(r, \chi, \theta) = (18, 15, 15)$. Затем в работе [98] исследовались длины рассеяния в системах $e^- + (e^- e^+)$, $p + (p\mu)$ и $d + (d\mu)$. С этой целью решались дискретные аналоги уравнений (143),

(145) при условии $y \leq y_{\max} < \infty$. Как оказалось, численная сходимость ($\tau = 4$) устанавливается на сетках: $\mathbf{N}(x, y, \theta) = (18, 18, 15)$ при $y_{\max} = 180$ для системы $e^- + (e^- e^+)$, $y_{\max} = 350$ для системы $p + (p\mu)$ и $y_{\max} = 600$ для системы $d + (d\mu)$. В последовавшей работе [99] впервые численным решением уравнений (143), (145) были определены положения резонансов в $e^- + (e^- e^+)$ -системе по скачку на π фазы упругого рассеяния. Нужную точность расчета ($\tau = 3$) обеспечивала сетка $\mathbf{N}(x, y, \theta) = (12, 48, 12)$. В работе [100] были рассчитаны скорости реакции ядерного синтеза в процессах столкновения (реакция на лету) в системах $a + (a\mu)$ для $a = p, d, t$ и $d + (t\mu), t + (d\mu)$. Волновые функции строились численным интегрированием уравнений (143), (145) с помощью ранее развитого метода [98]. Точность $\tau = 3$ достигалась на сетках $\mathbf{N}(x, y, \theta) = (12 - 18, 39 - 60, 12 - 18)$.

В работах [101–103] для численного решения уравнения (143), (146) использовалось разложение (147), были предложены модифицированный метод ортогональной коллокации, обеспечивающий шестой порядок приближения, и модифицированный метод тензорной факторизации. Точность $\tau = 5$ вычисления энергии основного состояния тримера достигнута авторами на сетках $\mathbf{N}(x, y, u) = (60, 60, 25)$.

Итак, используя сплайн-разложения, можно решить двух- и трехмерные уравнения Фаддеева с хорошей точностью при небольших для современных компьютеров численных сетках.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Как следует из разд. 2, разбиение парных взаимодействий на корректно определенные ложные и физические слагаемые [24–26] представляется интересным для дальнейшего исследования. В первую очередь, важно выяснить все физические следствия существования такого разбиения.

Обсужденный в разд. 3 метод построения точных решений [27–29] — это первый шаг в исследовании задачи трех частиц с потенциалами центробежного типа. Следующий этап, который состоит в построении точных решений, описывающих рассеяние $3 \rightarrow 3$ в такой модели, представляется особенно важным: знание таких решений позволит вычислить в явном виде модельный третий вириальный коэффициент и исследовать аналитически трехчастичные условия «падения» и эффекты ефимовского типа.

Описанные в разд. 4 полные асимптотические разложения фаддеевских компонент в окрестности точек тройного и парных столкновений [30, 31, 38] являются лишь формальными асимптотическими разложениями. Исследование таких разложений на равномерную сходимость — пока не решенная, но несомненно важная теоретическая задача.

Как отмечалось в разд. 5, вариационные разложения [36, 62–76], описывающие старшие члены асимптотик искомых волновых функций, позволяют выполнить прецизионные вычисления энергий связанных состояний. Следует ожидать, что вариационные анзацы, воспроизводящие такие асимптотики более подробно, позволят достигнуть той же вычислительной точности при существенно меньшем числе опорных функций. Построение таких асимптотически более точных анзацев представляется возможным, если для опорных функций использовать разбиения фаддеевского типа.

Для всех упомянутых в разд. 6 сплайн-разложений [89–103] фаддеевских компонент сходимость с ростом числа точек сеток подтверждена только практическими вычислениями для некоторых типов взаимодействий. Однако для уравнений фаддеевского типа, содержащих искомые функции под интегралом либо со сдвинутыми аргументами, доказательства устойчивости и выводы оценок точности сплайн-аппроксимации неизвестны. Поэтому дополнение каждого из рассмотренных сплайн-методов теоретическим анализом устойчивости и выводом оценок сходимости представляется существенным и необходимым для математической полноты.

Автор благодарен С. И. Виницкому за исключительно полезные замечания и Н. В. Пупышевой за неоценимую помощь при подготовке рукописи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пупышев В. В. // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30. С. 1562.
2. Смирнов В. И. Курс высшей математики. М.: Наука, 1974. Т. 3.
3. Abramowitz M., Stegun I. A. Handbook of Mathematical Functions. Washington: D. C., 1972.
4. Lancaster P. Theory of Matrixes. N. Y.; London: Acad. Press, 1969.
5. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1977.
6. Prenter P. M. Splines and Variational Methods. N. Y.: Wiley, 1975.
7. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
8. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
9. Вильдермут К., Тан Я. Единая теория ядра. М.: Мир, 1980.
10. Мошинский М. Гармонический осциллятор в современной физике от атомов до кварков. М.: Мир, 1972.
11. Немец О. Ф., Гофман Ю. В. Справочник по ядерной физике. Киев: Наукова думка, 1975.
12. Шмид Э., Цигельман Х. Проблема трех тел в квантовой механике. М.: Наука, 1979.
13. Faddeev L. D., Merkuriev S. P. Quantum Scattering Theory for Several Particle Systems. Kluwer: Academic Publishers, 1993.
14. Вариалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. М.: Наука, 1975.

15. *Виницкий С. И., Пономарев Л. И.* // ЭЧАЯ. 1982. Т. 13. С. 1336.
16. *Михлин С. Г.* Вариационные методы в математической физике. М.: Гостехиздат, 1957.
17. *Сморodinский Я. А., Эфрос В. Д.* // ЯФ. 1973. Т. 17. С. 210.
18. *Смирнов Ю. Ф., Шитикова К. В.* // ЭЧАЯ. 1977. Т. 8. С. 847.
19. *Джибути Р. И., Крупеникова Н. Б.* Метод гиперсферических функций в квантовой механике нескольких тел. Тбилиси: Мецниереба, 1984.
20. *Пупышев В. В.* // ЯФ. 1986. Т. 43. С. 260.
21. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 1989. Т. 81. С. 86.
22. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 1996. Т. 107. С. 501.
23. *Пупышев В. В.* // ЯФ. 1999. Т. 62. С. 1955.
24. *Пупышев В. В.* Препринт ОИЯИ Р5-99-314. Дубна, 1999.
25. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 2000. Т. 125. С. 253.
26. *Пупышев В. В.* Препринт ОИЯИ Р4-2000-136. Дубна, 2000.
27. *Pupyshev V. V.* // Phys. Lett. A. 1989. V. 140. P. 151.
28. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 2001. Т. 128. С. 268.
29. *Пупышев В. В.* Препринт ОИЯИ Р5-2001-28. Дубна, 2001.
30. *Pupyshev V. V.* JINR Preprint E5-87-902. Dubna, 1987.
31. *Pupyshev V. V.* // Few-Body Systems. 1990. V. 8. P. 105.
32. *Hylleraas E. A.* // Z. Physik. 1929. V. 54. P. 347.
33. *Breit G.* // Phys. Rev. 1930. V. 35. P. 569.
34. *Касчиев М. С., Виницкий С. И.* // ЯФ. 1986. Т. 44. С. 386.
35. *Коробов В. И.* // ЯФ. 1989. Т. 50. С. 1595.
36. *Korobov V. I., Puzynin I. V., Vinitzky S. I.* // Muon Catalyzed Fusion. 1992. V. 7. P. 63.
37. *Kostrykin V. V., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* LOMI Preprint E-10-87. L., 1987.
38. *Kostrykin V. V., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* // Few-Body Systems. 1989. V. 6. P. 97.
39. *Квицинский А. А., Кострыкин В. В., Меркурьев С. П.* // ЭЧАЯ. 1990. Т. 21. С. 1301.
40. *Квицинский А. А., Кострыкин В. В., Меркурьев С. П.* // Там же. С. 553.
41. *Vencze Gy.* // Nucl. Phys. A. 1973. V. 211. P. 568.
42. *Redish E. F.* // Nucl. Phys. A. 1974. V. 225. P. 16.
43. *Kukulín V. I., Poterantsev V. N.* // Ann. Phys. 1978. V. 111. P. 333.
44. *Кукулин В. И., Померанцев В. Н.* // ЯФ. 1978. Т. 27. С. 1668.
45. *Friar J. L., Gibson B. F., Payne G. L.* // Phys. Rev. C. 1980. V. 22. P. 284.
46. *Fabre de la Ripelle M., Larsen S. Y.* // Few-Body Systems. 1992. V. 13. P. 199.
47. *Avishai Y.* // J. Math. Phys. 1975. V. 16. P. 1491.
48. *Фок В. А.* // Изв. АН СССР, сер. физ. 1954. Т. 18. С. 161.
49. *Abbott P. C., Maslen E. N.* // J. Phys. A. 1987. V. 20. P. 2043.
50. *Gottschalk J. E., Abbott P. C., Maslen E. N.* // Ibid. P. 2077.
51. *Palumbo F.* // Phys. Lett. B. 1977. V. 69. P. 275.

52. *Haftel M. I., Mandelzweig V. B.* // Ann. Phys. 1983. V. 150. P. 48.
53. *Klar H.* // J. Phys. A. 1985. V. 18. P. 1561.
54. *Kato T.* // Comm. on Pure and Appl. Math. 1957. V. 10. P. 151.
55. *Bingel W. A.* // Z. Naturforsch. 1963. V. 18a. P. 1249.
56. *Pack R. T., Brown W. B.* // J. Chem. Phys. 1966. V. 45. P. 556.
57. *Hoffman-Osternhof M., Seiler R.* // Phys. Rev. 1981. V. 23. P. 21.
58. *Hoffman-Osternhof M., Hoffman-Ostrenhof T., Stremnitzer H.* // Phys. Rev. Lett. 1992. V. 68. P. 3857.
59. *Johnson B. R.* // Phys. Rev. 1981. V. 24. P. 2339.
60. *Abbott P. C., Maslen E. N.* // J. Phys. B. 1986. V. 19. P. 1595.
61. *Myers C. R. et al.* // Phys. Rev. A. 1991. V. 44. P. 5537.
62. *Kinoshta T.* // Phys. Rev. 1957. V. 105. P. 1490.
63. *Pekeris C. L.* // Phys. Rev. 1958. V. 112. P. 1649.
64. *Frankowski K., Pekeris C. L.* // Phys. Rev. 1966. V. 146. P. 46.
65. *Freund D. E., Huxtable B. D., Morgan J. D., III* // Phys. Rev. A. 1984. V. 29. P. 980.
66. *Thakkar A. J., Koga T.* // Ibid. V. 50. P. 854.
67. *Drake G. W. F., Yan Z.-C.* // Chem. Phys. Lett. 1994. V. 229. P. 486.
68. *Drake G. W. F.* // Phys. Scr. 1999. V. T83. P. 83.
69. *Korobov V. I.* // Phys. Rev. A. 2000. V. 61. P. 0.64503-1.
70. *Alexander S. A., Monkhorst H. J.* // Phys. Rev. A. 1988. V. 38. P. 26.
71. *Фролов А. М., Эфрос В. Д.* // Письма в ЖЭТФ. 1984. Т. 39. С. 544.
72. *Frolov A. M., Smith V. H., Jr.* // J. Phys. B. 1995. V. 28. P. L449.
73. *Виницкий С. И., Коробов В. И., Пузынин И. В.* // ЖЭТФ. 1986. Т. 91. С. 705.
74. *Korobov V. I., Puzynin I. V., Vinitsky S. I.* // Phys. Lett. B. 1987. V. 196. P. 272.
75. *Korobov V. I., Vinitsky S. I.* // Phys. Lett. B. 1989. V. 228. P. 21.
76. *Коробов В. И.* // Журн. выч. матем. и матем. физики. 1988. Т. 28. С. 105.
77. *Chuluumbaatar O., Puzynin I. V., Vinitsky S. I.* // J. Phys. B. 2001. V. 34. P. L425.
78. *Matveenko A. V., Fukuda H.* // J. Phys. B. 1996. V. 29. P. 1675.
79. *Matveenko A. V.* // Few-Body Systems. 2001. V. 30. P. 259.
80. *Matveenko A. V.* // J. Phys. B. 2001. V. 34. P. L87.
81. *Merkuriev S. P., Gignoux G., Laverne A.* // Ann. Phys. 1976. V. 99. P. 30.
82. *Меркурьев С. П., Куперин Ю. А., Квицинский А. А.* // ЯФ. 1983. Т. 37. С. 1440.
83. *Motovilov A. K., Sofianos S. A., Kolganova E. A.* // Chem. Phys. Lett. 1997. V. 275. P. 168.
84. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sofianos S. A.* // Phys. Rev. A. 1997. V. 56. P. 1686.
85. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sofianos S. A.* // J. Phys. B. 1998. V. 31. P. 1279.
86. *Motovilov A. K., Kolganova E. A.* // Few-Body Systems Suppl. 1999. V. 10. P. 75.
87. *Kolganova E. A., Motovilov A. K.* // Phys. Atom. Nucl. 1999. V. 62. P. 1179.
88. *Motovilov A. K. et al.* // Eur. Phys. J. D. 2001. V. 13. P. 33.

-
89. *Payne G. L. et al.* // Phys. Rev. C. 1980. V. 22. P. 823.
 90. *Пупышев В. В.* // ЯФ. 1986. Т. 43. С. 1318.
 91. *Пупышев В. В.* Сообщение ОИЯИ Р4-86-386. Дубна, 1986.
 92. *Bosveld G. D., Schellingerhout N. W.* Report 231. Groningen, 1989.
 93. *Schellingerhout N. W., Kok L. P., Bosveld G. D.* // Phys. Rev. A. 1989. V. 40. P. 5568.
 94. *Виницкий С. И. и др.* // ЯФ. 1990. Т. 51. С. 641.
 95. *Bernabéu J. et al.* // Hyp. Int. 1996. V. 101/102. P. 391.
 96. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* // Phys. Rev. A. 1992. V. 45. P. 2723.
 97. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // Ibid. V. 46. P. 7301.
 98. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. 994.
 99. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // Phys. Rev. A. 1994. V. 50. P. 1924.
 100. *Kvitsinsky A. A., Hu C.-Y., Cohen J. S.* // Phys. Rev. A. 1996. V. 53. P. 255.
 101. *Roudnev V. A., Yakovlev S. L.* // Comput. Phys. Commun. 2000. V. 126. P. 162.
 102. *Yakovlev S. L., Roudnev V. A.* // Few-Body XV Conf. Handbook. Groningen, 1997. P. 157.
 103. *Roudnev V. A., Yakovlev S. L.* // Chem. Phys. Lett. 2000. V. 328. P. 97.
 104. *Schwartz C.* // Phys. Rev. 1961. V. 123. P. 1700.
 105. *Chang E. S., Fano U.* // Phys. Rev. A. 1972. V. 6. P. 173.