

# ВАРИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ В КВАНТОВОЙ ЗАДАЧЕ ТРЕХ ТЕЛ С КУЛОНОВСКИМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

*В. И. Коробов\**

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Формулируется вариационный метод Рэля–Ритца для связанных состояний в нерелятивистской квантовой механике, и обсуждаются математические основы метода. Дается обзор наиболее часто используемых способов построения вариационного базиса Ритца на примере атома гелия. Рассмотрены многочисленные приложения вариационных методов к решению квантовой задачи трех тел на связанные состояния, и дается сравнение наиболее точных расчетов для различных физических систем. Как обобщение вариационного метода Рэля–Ритца на «квазисвязанные» состояния (резонансы) рассматривается метод комплексного вращения координат (CCR) и его использование для вычисления различных характеристик резонансов.

The variational Rayleigh–Ritz method for bound states in nonrelativistic quantum mechanics is formulated and the mathematical foundations of the method are discussed. A review of the most frequently used methods for constructing the Ritz variational basis is given by the example of the helium atom. Numerous applications of variational methods to the solution of the quantum three-body problem for bound states are considered, and a comparison of the most accurate calculations for various physical systems is given. As a generalization of the variational Rayleigh–Ritz method to “quasi-bound” states (resonances), the method of complex coordinate rotation (CCR) and its use for calculating various characteristics of resonances is considered.

PACS: 21.45.+v; 21.45.-v

## ВВЕДЕНИЕ

Квантовая задача трех тел с кулоновским взаимодействием является одной из наиболее известных неинтегрируемых задач квантовой механики. Вместе с тем задача на связанные состояния для системы трех частиц допускает «сколь угодно» точные численные решения на современных компьютерах. К примеру, нерелятивистская энергия основного состояния атома гелия с ядром бесконечной массы известна в настоящее время с точностью до 46 значащих цифр [1]. С другой стороны, имеется

---

\* E-mail: korobov@theor.jinr.ru

широкий класс физических задач, которые вызывают практический интерес.

Классическим примером субатомной физики является мюонный катализ и физика экзотических мюонных атомов и молекул. Одна из ключевых задач мюонного катализа — прецизионное исследование слабосвязанных состояний мюонных молекулярных ионов  $dd\mu_{11}$  и  $dt\mu_{11}$ . Энергии этих слабосвязанных состояний определяют скорости резонансного образования мюонных молекул, и в конечном счете определяют ключевые параметры полного цикла мюонного катализа [2].

Другим примером из физики экзотических атомов и молекул является атом антипротонного гелия  $\text{He}^+\bar{p}$  [3]. Антипротон замещает один из электронов атома гелия и при определенных условиях формирует метастабильные состояния со временем жизни в несколько микросекунд! Кроме того, что это рекордное время жизни для античастицы, находящейся в обычной (реальной) среде, это также астрономическое время по меркам обычной атомной физики, где время жизни  $2P$ -состояния атома водорода имеет порядок 1 нс.

Атом антипротонного гелия представляет нетривиальный пример квантовой системы, у которой состояния дискретного спектра (оператора Гамильтона для нерелятивистского кулоновского уравнения Шредингера) являются короткоживущими, тогда как в непрерывном спектре существует остров метастабильных состояний. Эти состояния по своим свойствам практически ничем не отличаются от состояний дискретного спектра в обычном атоме (или молекуле). Они допускают прецизионную спектроскопию энергий переходов и тонкой (сверхтонкой) структуры уровней, что позволяет получить ценную информацию о физических свойствах антипротона.

В настоящее время в ЦЕРН проводятся эксперименты по исследованию атомов антипротонного гелия на установке AD (эксперимент ASACUSA). Результаты недавних прецизионных измерений энергий переходов [4, 5] позволяют определить массу античастицы, антипротона (по отношению к массе электрона) с высокой точностью и демонстрируют совпадение масс протона и антипротона (СРТ-инвариантность) на уровне относительной погрешности  $8 \cdot 10^{-10}$ .

Следует отметить такой важный аспект, как взаимное влияние атомной и ядерной физики [6] при определении статических характеристик ядер. Так, например, среднеквадратичный радиус заряда ядра гелия, определяемый из экспериментов по рассеянию электронов на ядрах, имеет точность порядка 0,2% [7]. В то же время экспериментальное определение радиуса заряда  ${}^4\text{He}$  из спектроскопии мюонных атомов позволяет уменьшить погрешность этой величины в 10 раз [8].

Исторически первой попыткой решения квантовой задачи трех тел является вариационный расчет атома гелия, выполненный вручную Хиллераасом [9] в 1928–1930 гг. для проверки квантовой теории Шредингера системы нескольких частиц, после того как «старая квантовая теория»,

модель Бора–Зоммерфельда (см. обсуждение в [10]), оказалась полностью непригодной для решения этой проблемы. Эти достаточно грубые расчеты энергии ионизации атома гелия показали хорошее совпадение (с точностью до 0,01 %) с экспериментальными данными.

Затем интерес к атому гелия был вновь возрожден в связи с экспериментальной проверкой предсказаний квантовой электродинамики. Появление быстродействующих ЭВМ и необходимость точного вычисления энергии ионизации для проверки лэмбовского сдвига способствовали проведению гораздо более тонких и точных вычислений. Киношита (Kinoshita) [11] проделал вариационные вычисления, потребовавшие диагонализации матрицы размера  $39 \times 39$ , а позже Пекерис (Pekeris) [12] предложил базис, сводящий решение к разреженным матрицам, и провел вычисления с 1078 параметрами, что позволило подтвердить экспериментальное значение лэмбовского сдвига в основном состоянии атома гелия на уровне 0,4 %.

Основная цель данного обзора — анализ методов для решения квантовой задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. Помимо этого в обзоре рассматриваются методы для исследования резонансов в системе трех частиц и теория возмущения для резонансов, необходимая для построения квантовой электродинамики квазистационарных состояний. Таковыми являются, например, метастабильные состояния атома антипротонного гелия.

## 1. ВАРИАЦИОННЫЙ ПРИНЦИП ДЛЯ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

Отправным пунктом в решении стационарного уравнения Шредингера

$$H\Psi = E\Psi \quad (1)$$

для некоторого гамильтониана  $H$  является вариационный принцип Хиллерааса–Ундгейма, более известный в математике как вариационный принцип Рэлея–Ритца.

Пусть имеется самосопряженный оператор  $H$ , определенный в гильбертовом пространстве, для которого выполнено условие ограниченности снизу

$$H \geq cI, \quad (2)$$

где  $c$  — некоторая константа, не обязательно положительная. Определим функционал

$$\Phi(\Psi) = \frac{(\Psi, H\Psi)}{(\Psi, \Psi)}. \quad (3)$$

Этот функционал ограничен снизу значением константы  $c$ .

Теперь мы можем сформулировать теорему, доказательство которой можно найти в [13].

**Теорема 1.** Пусть  $H$  — самосопряженный оператор, удовлетворяющий (2). Определим

$$\mu_n(H) = \max_{\dim \chi = n-1} \min_{\substack{\Psi \in \mathcal{D}(H) \\ \Psi \in \chi^\perp}} \Phi(\Psi), \quad (4)$$

где  $\chi^\perp$  — подпространство, ортогональное  $\chi$ ;  $\mathcal{D}(H)$  — область определения оператора  $H$ . Тогда для каждого фиксированного  $n$ :

а) либо существует  $n$  собственных значений (считая вырожденные собственные значения столько раз, какова их кратность), лежащих ниже края существенного спектра, а  $\mu_n(H)$  есть с учетом кратности  $n$ -е собственное значение;

б) либо  $\mu_n(H)$  — нижний край существенного спектра.

Таким образом, процедура поиска собственных значений (значений энергии связанных состояний) стационарного уравнения Шредингера сводится к вычислению седловых точек функционала (3). Утверждение теоремы называют «принципом минимакса».

Определим процесс Ритца для задачи на собственные значения. Пусть  $\varphi_k$  — последовательность векторов в гильбертовом пространстве, подчиненная двум требованиям:

- 1) векторы  $\varphi_k$  принадлежат области определения оператора  $H$ ;
- 2) при любом  $n$  векторы  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  линейно независимы.

Положим  $u_n = \sum_{k=1}^n x_k \varphi_k$ , где  $x_k$  — скалярные коэффициенты. Подставляя  $u_n$  при фиксированном  $n$  в функционал  $\Phi(\cdot)$ , получим функцию, зависящую от конечного набора параметров  $\{x_k\}_1^n$ :

$$\Phi(\mathbf{x}) = \left( \sum_{i,j=1}^n a_{ij} x_i x_j \right) / \left( \sum_{i,j=1}^n b_{ij} x_i x_j \right),$$

где

$$a_{ij} = (\varphi_i, H \varphi_j), \quad b_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j).$$

При этом поиск минимаксных решений сводится к вычислению соответствующих собственных значений обобщенной задачи на собственные значения

$$A\mathbf{x} = \lambda B\mathbf{x}, \quad (5)$$

и матрицы  $A$  и  $B$  составлены из коэффициентов  $a_{ij}$  и  $b_{ij}$  соответственно.

Векторы  $\varphi_k$  могут зависеть от нелинейных параметров  $\omega$ . В этом случае для каждого фиксированного  $\omega$  и конкретного номера собственного значения  $k$  решается задача (5) и выбирается  $\lambda_k(\omega)$ , затем эта величина минимизируется по всем значениям нелинейных параметров:

$$\lambda_k = \inf_{\omega} \lambda_k(\omega).$$

Для оценок Ритца выполнено одно важное условие:

$$\mu_k(H) \leq \lambda_k. \quad (6)$$

Таким образом, оценки Ритца являются оценками сверху. Для базисных функций, зависящих от нелинейных параметров, неравенство (6) следует из

$$\mu_k(H) \leq \inf_{\omega} \lambda_k(\omega) = \lambda_k.$$

Строгое доказательство применимости теоремы 1 к задачам нерелятивистской квантовой механики с гамильтонианом вида

$$H = - \sum_{i=1}^n \frac{\Delta_i}{2m_i} + V(r_1, \dots, r_n) \quad (7)$$

получено в работах Като [14]. Напротив, прямое применение вариационного принципа Рэля–Ритца к уравнению Дирака, которое, как известно, не удовлетворяет условию (2), приводит к проблеме вариационного коллапса [15]. Возможные пути решения этой проблемы для уравнения Дирака обсуждаются в [16, 17].

## 2. ВАРИАЦИОННЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ОСНОВНОГО СОСТОЯНИЯ АТОМА ГЕЛИЯ

Как уже упоминалось в предыдущем разделе, развитие вариационных методов в решении стационарного уравнения Шредингера для системы нескольких частиц было тесно связано с вычислениями энергии ионизации основного состояния атома гелия. Поэтому в этом разделе мы рассмотрим, как изменялись и совершенствовались вариационные пробные функции, на примере основного состояния атома гелия.

Пусть  $r_1$  и  $r_2$  — расстояния от электронов до ядра, а  $r_{12}$  — расстояние между электронами. Нерелятивистское уравнение Шредингера для атома с двумя электронами и бесконечно тяжелым ядром (в атомных единицах  $\hbar = e = m_e = 1$ ) задается уравнением

$$-\frac{1}{2} \left[ \nabla_1^2 + \nabla_2^2 \right] \Psi + \left( -\frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}} \right) \Psi = E\Psi. \quad (8)$$

В первых работах Хиллераас [9] использовал разложение вариационной функции решения по базису

$$\Psi = e^{-\kappa s} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{lmn} s^l u^m t^{2n}, \quad (9)$$

где введены новые переменные:  $s = r_1 + r_2$ ,  $t = r_2 - r_1$  и  $u = r_{12}$ . Скалярный параметр  $\kappa$ , так же как и коэффициенты  $C_{lmn}$ , определялся из минимизации вариационного функционала (3). Полученное значение энергии ионизации с волновой функцией, включающей 7 первых членов разложения (9), равнялось 2,90324.

Позднее Киношита [11] модифицировал базис Хиллерааса, включив в него отрицательные степени по переменным  $s$  и  $u$ ,

$$\Psi = e^{-\kappa s} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{u}\right)^{2n}.$$

Благодаря неравенству  $t \leq u \leq s$  волновая функция не имеет сингулярностей в области интегрирования. Использование отрицательных степеней позволило увеличить скорость сходимости вариационного разложения и достичь точности в 7 значащих цифр:  $E = 2,9037225$ . Вычисления проводились на компьютере UNIVAC.

Следующим шагом стала работа Пекериса [12], который предложил использовать *периметрические* координаты

$$\begin{cases} u = r_1 + r_{12} - r_2, \\ v = r_2 + r_{12} - r_1, \\ w = r_1 + r_2 - r_{12} \end{cases}$$

и ортогональные многочлены (многочлены Лагерра) в разложении волновой функции

$$\Psi = e^{-\kappa(u+v+2w)/2} \sum_{l,m,n} C_{lmn} L_l(\kappa u/2) L_m(\kappa v/2) L_n(\kappa w). \quad (10)$$

Преимущество периметрических координат состоит в том, что они не связаны неравенством треугольника и фактически являются независимыми переменными, изменяющимися от 0 до бесконечности. Использование ортогональных многочленов приводит к разреженным матрицам  $A$  и  $B$  с матричными элементами, которые выражаются рекуррентными соотношениями в целочисленной арифметике. Последнее свойство позволяет вычислять матричные элементы абсолютно точно, не связывая точность с представлением чисел с плавающей запятой в памяти компьютера. Платой за эти преимущества метода является достаточно медленная сходимость вариационного разложения в зависимости от числа базисных функций. Так, для того чтобы получить рекордную точность, Пекерису потребовалось 1078 базисных функций, при этом значение энергии составило:  $E = 2,903724375$ .

В то же время было подмечено, что точное решение уравнения Шредингера для основного состояния атома гелия не выражается через чисто полиномиальные разложения вида (9) [18]. Позднее Бартлетт [19] и более строго Фок [20] показали, что точное решение содержит логарифмы в аналитическом разложении в точке тройного соударения частиц. Более точно, пусть  $\rho = \sqrt{r_1^2 + r_2^2}$  — гиперрадиус системы двух электронов (или радиус гиперчастицы в пространстве  $\mathbb{R}^6$ ), тогда решение уравнения

Шредингера при малых  $\rho$  представляется в виде

$$\Psi = \psi_{00} + \rho\psi_{10} + \rho^2(\ln \rho \psi_{21} + \psi_{20}) + \rho^3(\ln \rho \psi_{31} + \psi_{30}) + \dots, \quad (11)$$

где функции  $\psi_{nk}$  зависят только от угловых переменных и являются конечными и однозначными функциями на гиперсфере ( $\rho = \text{const}$ ).

Основываясь на этих результатах, сначала Г. М. Шварц [21] вводит полуцелые степени в разложение Хиллерааса, демонстрируя ускорение сходимости, затем Франковский и Пекерис [22] включают в разложение дополнительно члены, содержащие  $\ln s$ :

$$\Psi = e^{-\kappa s} \sum_{l,m,n,i,j \geq 0} C_{nlmij} s^l u^m t^{2n} (s^2 + t^2)^{i/2} (\ln s)^j. \quad (12)$$

Окончательный результат, полученный Франковским и Пекерисом,

$$E = 2,90372\ 43770\ 333,$$

надолго стал самым точным расчетом для нерелятивистской энергии ионизации основного состояния атома гелия.

Недавно Ч. Шварц в работе [23] подробно исследовал скорость сходимости разложений, описанных в этом разделе. Он также ввел два новых базиса:

$$\begin{aligned} \Psi = e^{-\kappa s} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n} + \\ + s^{1/2} e^{-\kappa s} \sum_{l,m,n \geq 0} D_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n}, \quad (13) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi = e^{-\kappa s} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n} + \\ + e^{-\kappa s} \ln s \sum_{l,m,n \geq 0} D_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n}. \quad (14) \end{aligned}$$

Его анализ показал, что наиболее высокой скоростью сходимости обладает последний базис, включающий как логарифм, так и отрицательные степени переменной  $s$ . Окончательный результат для нерелятивистской энергии ионизации обладает рекордной на сегодня точностью и достоин того, чтобы быть воспроизведенным здесь полностью:

$$E = 2,90372\ 43770\ 34119\ 59831\ 11592\ 45194\ 40444\ 66969\ 25310_5.$$

В расчете было использовано 24099 базисных функций.

### 3. ВАРИАЦИОННЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ДЛЯ ПРОИЗВОЛЬНЫХ СИСТЕМ ТРЕХ ЧАСТИЦ. СОСТОЯНИЯ С НЕНУЛЕВЫМ УГЛОВЫМ МОМЕНТОМ

Дальнейшим развитием разложения (9) является «обобщенное» разложение Хиллерааса [24]. Для состояний с произвольным полным угловым моментом системы  $L$  оно имеет вид

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) \left[ e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_{12}} \sum_{l, m, n \geq 0} C_{lmn} r_1^l r_2^m r_{12}^n \right], \quad (15)$$

где  $\mathcal{L}$  равняется  $L$  для состояний «нормальной» пространственной четности  $\pi = (-1)^L$ , а  $\mathcal{L} = L + 1$  для состояний «аномальной» пространственной четности  $\pi = (-1)^{L+1}$ . Здесь функции  $\mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}$  имеют вид [25]

$$\mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = r_1^{l_1} r_2^{l_2} \{Y_{l_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) \otimes Y_{l_2}(\hat{\mathbf{r}}_2)\}_{LM},$$

а оператор пространственной четности,  $P\Psi = \pi\Psi$ , действует на пространственные координаты следующим образом:  $P(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rightarrow (-\mathbf{r}_1, -\mathbf{r}_2)$ . Удобство использования функций  $\mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}$  обусловлено тем, что они правильно воспроизводят поведение волновой функции при  $r_1 \rightarrow 0$  (или  $r_2 \rightarrow 0$ ), оставляя для выражения, входящего в квадратные скобки (15), разумное требование ограниченности функции в области изменения переменных.

Происхождение названий «нормальной» и «аномальной» пространственной четности объясняется следующими соображениями. Как можно видеть из разложения (15), состояния «аномальной» четности могут распадаться на кластеры с угловым моментом связанной пары  $l \geq 1$ . В атомной физике основное состояние пары частиц обладает нулевым угловым моментом, а граница непрерывного спектра в системе трех частиц определяется энергией основного состояния пары с наиболее глубоким уровнем энергии либо нулевой энергией в случае отсутствия связанных пар. Из этого следует, что связанные состояния «аномальной» четности располагаются ниже порога кластера с возбужденным состоянием пары и обычно лежат в непрерывном спектре системы трех частиц. Поэтому включение в гамильтониан любого оператора взаимодействия, нарушающего пространственную четность, приводит к тому, что эти состояния *растворяются* в непрерывном спектре, образуя резонансы.

Для  $S$ -состояний вычисление матричных элементов сводится к вычислению интегралов вида

$$\Gamma_{lmn}(\alpha, \beta, \gamma) = \int \int \int r_1^l r_2^m r_{12}^n e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_{12}} dr_1 dr_2 dr_{12}. \quad (16)$$

Дифференцируя по  $\alpha$  под знаком интеграла, получаем, что

$$\left(-\frac{\partial}{\partial \alpha}\right) \Gamma_{l-1, mn}(\alpha, \beta, \gamma) = \Gamma_{lmn}(\alpha, \beta, \gamma),$$



и таким образом все интегралы могут быть вычислены из  $\Gamma_{000}$  простым дифференцированием:

$$\begin{aligned} \Gamma_{lmn}(\alpha, \beta, \gamma) &= \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)^n \Gamma_{000}(\alpha, \beta, \gamma) = \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)^n \left[ \frac{2}{(\alpha+\beta)(\beta+\gamma)(\gamma+\alpha)} \right]. \end{aligned} \quad (17)$$

Далее, следуя работе [26], мы воспользуемся рекуррентным соотношением (46) из приложения. Применяя его поочередно к каждой паре переменных  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$ , мы приходим к рекуррентной схеме вычисления интегралов для неотрицательных значений параметров  $(l, m, n)$ :

$$\begin{aligned} \Gamma_{lmn} &= \frac{1}{\alpha + \beta} [l \Gamma_{l-1, m, n} + m \Gamma_{l, m-1, n} + B_{lmn}], \\ B_{lmn} &= \frac{1}{\alpha + \gamma} [l B_{l-1, m, n} + n B_{l, m, n-1} + A_{lmn}], \\ A_{lmn} &= \delta_{l0} \frac{2(m+n)!}{(\beta + \gamma)^{m+n+1}}. \end{aligned} \quad (18)$$

Важной особенностью соотношений (18) является положительность входящих в них величин  $A_{lmn}$ ,  $B_{lmn}$  и  $\Gamma_{lmn}$ , что делает рекуррентную схему (18) вычисления интегралов устойчивой к погрешностям округления в компьютерных вычислениях.

Усреднение по угловым переменным для состояний с ненулевым полным орбитальным моментом системы, сводящее вычисление матричных элементов к интегралам вида (16), было рассмотрено Дрейком [27]. Позднее Эфрос [28] предложил компактную и эффективную рекуррентную схему, реализующую эту редукцию.

Вариационные разложения, которые рассматривались до сих пор, наиболее эффективны для исследования систем, состоящих из двух электронов и тяжелого ядра. Для трехчастичных систем, состоящих из одной легкой частицы и двух тяжелых, таких как положительный ион водорода  $\text{H}_2^+$  или ионы мюонных молекул изотопов водорода и легких ядер, более приемлемой схемой вариационного разложения волновой функции решения является молекулярное разложение:

$$\begin{aligned} \Psi_M^{L\pi}(\mathbf{R}, \mathbf{r}) &= \sum_{m=\mu(\pi)}^L \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi *}(\Phi, \Theta, \varphi) F_m^{L\pi}(R, r, \theta), \\ \mu(\lambda) &= \begin{cases} 0 & \text{для } \pi = (-1)^L, \\ 1 & \text{для } \pi = (-1)^{L+1}. \end{cases} \end{aligned} \quad (19)$$

Здесь  $\mathbf{R}$  — радиус-вектор взаимного расположения двух ядер, а  $\mathbf{r}$  — радиус-вектор легкой частицы относительно геометрического центра тя-

желых частиц. Функции  $\mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}$  — симметризованные функции Вигнера:

$$\begin{aligned} \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}(\Phi, \Theta, \varphi) &= \\ &= \left[ \frac{2L+1}{16\pi^2(1+\delta_{m0})} \right]^{1/2} [D_{Mm}^L(\Phi, \Theta, \varphi) + \pi(-1)^{L-m} D_{M,-m}^L(\Phi, \Theta, \varphi)], \end{aligned}$$

которые являются собственными функциями операторов  $\mathbf{L}^2$ ,  $L_z$  и  $P$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi} &= L(L+1) \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}, & L_z \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi} &= -M \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}, \\ P \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi} &= \pi \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}, \end{aligned}$$

и нормализованы так, что

$$\int d\Phi \int \sin \Theta d\Theta \int d\varphi [\mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}(\Phi, \Theta, \varphi) \mathcal{D}_{M'm'}^{L'\pi'}(\Phi, \Theta, \varphi)] = \delta_{LL'} \delta_{MM'} \delta_{mm'}.$$

Переменные  $\Phi$ ,  $\Theta$  и  $\varphi$  определяют углы Эйлера подвижного репера, связанного с системой трех частиц следующим образом: ось  $Oz'$  направлена вдоль оси двух тяжелых частиц, а  $Ox'$  лежит в плоскости трех частиц по направлению к легкой частице.

Данный способ отделения угловых переменных приводит к гамильтониану, зависящему от внутренних координат частиц и азимутального квантового числа  $m$ . Полученный гамильтониан является трехдиагональным, и внедиагональные матричные элементы имеют параметр малости  $m_e/\mu_n$ , где  $\mu_n$  — приведенная масса тяжелых частиц. Проектируя гамильтониан на подпространство  $m=0$ , мы получим приближение, которое содержит адиабатическое решение Борна–Оппенгеймера. Для больших угловых моментов разложение (19) сходится быстро по азимутальному квантовому числу  $m$  и использование только первых двух-трех компонент из (19) в вариационном разложении достаточно для получения прецизионных значений энергии.

Чтобы определить функции, зависящие от внутренних степеней свободы, удобно использовать сферические координаты (в которых факторизуется кулоновская задача двух центров):

$$\begin{cases} \xi = (r_1 + r_2)/R, & \left\{ \begin{aligned} r_1^2 &= (R/2)^2 + r^2 + Rr \cos \theta, \\ r_2^2 &= (R/2)^2 + r^2 - Rr \cos \theta. \end{aligned} \right. \\ \eta = (r_2 - r_1)/R, \end{cases}$$

В этих координатах разложение азимутальных волновых функций  $F_m^{L\pi}$  из (19) определяется следующим образом:

$$F_m^{L\pi}(R, \xi, \eta) = R^m [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{m/2} \sum_n C_{ijk} R^i \xi^j \eta^k e^{-(\alpha+\beta\xi)R}. \quad (20)$$

Впервые это разложение было предложено Хальперном [29] для расчета энергий связи в мюонной молекуле  $pp\mu$ . В дальнейшем это разложение подробно исследовалось в работах [30, 31] и использовалось для преци-

зионных расчетов слабосвязанных состояний мюонных молекул изотопов водорода  $dd\mu$  и  $dt\mu$  [32–34], имеющих ключевое значение для мюонного катализа.

В заключение следует упомянуть об одном методе, который также часто используется в вариационных расчетах и легко обобщается на случай многих частиц. Это метод, основанный на гауссовских орбиталях («гауссианах»). Пусть  $\mathbf{X} = (\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{A-1})$  — некоторое множество якобиевых координат системы  $A$  частиц. Тогда так называемый *явно коррелированный* «гауссиан» имеет вид

$$\Psi(\mathbf{X}, A) = \exp\left(-\frac{1}{2}\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}\right), \quad (21)$$

где матрица  $A$  такова, что  $\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X}$  инвариантно относительно трехмерных вращений системы координат. Точнее матрица  $A$  определяется множеством  $(A-1) \times (A-1)$  параметров,  $\mathbf{X}^T \mathbf{A} \mathbf{X} = \sum_{ij} a_{ij} \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j$ . Вариационное решение ищется в виде линейной комбинации «гауссианов» с различными матрицами  $A$ , генерируемыми обычно некоторым случайным образом. К недостаткам метода относится медленная сходимость по размеру базиса в случае кулоновского взаимодействия и плохое поведение вариационной волновой функции в точках парного соударения (производная решения равна нулю, что не соответствует условию Като [35]). Более детальное описание метода и подробный обзор приложений можно найти в работах [36] и [37, 38].

#### 4. ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОЕ РАЗЛОЖЕНИЕ

В данном разделе мы приступаем к описанию вариационного метода, который является одним из наиболее эффективных методов в решении квантовой задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. Поэтому мы остановимся на нем более подробно.

Для  $S$ -состояний это разложение имеет вид

$$\Psi(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}, \quad (22)$$

где параметры в экспоненте выбираются тем или иным образом. В ранних работах [39–41], использовавших разложение (22), полученное представление связывали с дискретизацией интегрального представления волновой функции

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A) = \int \varphi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_A; \alpha) f(\alpha) d\alpha, \quad (23)$$

предложенного еще Грифффином и Уиллером [42] в 1957 г. При этом параметры  $\alpha_n$ ,  $\beta_n$  и  $\gamma_n$  выбирались в соответствии с различными квадратурными формулами интегрирования (23). Систематическое исследо-

вание разложения (22) с использованием параметров, генерируемых с помощью псевдослучайных чисел, было дано в [43]\*. В предлагаемом подходе нелинейные параметры из уравнения (22) генерируются с помощью следующих простых формул:

$$\begin{aligned}\alpha_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2}n(n+1)\sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right], \\ \beta_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2}n(n+1)\sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1 \right], \\ \gamma_n &= \left[ \left[ \frac{1}{2}n(n+1)\sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1 \right].\end{aligned}\quad (24)$$

Здесь  $[x]$  обозначает дробную часть  $x$ , а  $p_\alpha$ ,  $p_\beta$  и  $p_\gamma$  — некоторые простые числа. Преимущество этих простых генераторов псевдослучайных чисел состоит в воспроизводимости результатов вариационных вычислений. И как было продемонстрировано, скорость сходимости экспоненциального разложения с псевдослучайной стратегией выбора нелинейных параметров (24) необычайно высока на наборах базисных функций умеренных размерностей (до 100–200 пробных функций).

К недостаткам метода следует отнести быстрое вырождение базиса, что приводит к потере устойчивости вычислений в арифметике двойной точности уже при размерностях базиса  $N \sim 200$ . В более поздних расчетах, при исследовании слабосвязанных состояний мюонных молекул изотопов водорода  $dd\mu$  и  $dt\mu$  [44], использовалась четверная точность, что позволило продвинуться до размерности  $N = 2000$  базисных функций и достигнуть высокой точности в расчетах характеристик слабосвязанных состояний мюонных молекул. Однако при вычислении нерелятивистской энергии основного состояния атома гелия на больших  $N$  скорость сходимости заметно падала, что, по всей видимости, связано с отсутствием учета логарифмической особенности в поведении волновой функции при малых значениях  $r_1$  и  $r_2$ .

Другой существенной особенностью метода является медленная сходимость разложения для систем с двумя тяжелыми ядрами, такими как  $\text{H}_2^+$ . Подобное поведение можно легко объяснить отсутствием осцилляций у экспоненты, описывающей взаимное движение тяжелых ядер, в то время как осцилляторное поведение характерно для колебательных степеней свободы молекулярных систем. Рецепт, позволяющий избавиться от этого недостатка, очень прост, достаточно ввести вместо вещественных экспонент в (22) комплексные и перейти к базису, состоящему из вещественных и мнимых частей исходного базиса:

---

\* В этой же работе можно найти исчерпывающую библиографию по вопросам, касающимся интегрального (и экспоненциального в частности) разложения вариационной функции.

$$\Psi(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_{n=1}^N \left\{ C_n \operatorname{Re} [\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12})] + D_n \operatorname{Im} [\exp(-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12})] \right\}. \quad (25)$$

Данный рецепт был предложен Ребане и Юсуповым [45] (в варианте для одной комплексной базисной функции) и независимо автором данной работы в [46], а также в несколько менее эффективной форме Фроловым и Смитом [47].

Следует сказать о том, как необходимо строить вариационную функцию для молекулярных систем, когда полный орбитальный момент не равен нулю. Для этого, так же как и в случае атомных систем, удобно использовать разложение по биполярным гармоникам

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}), \quad (26)$$

аналогичное обобщенному хиллераасовскому разложению (15). Это разложение может быть связано с молекулярным разложением (19) с помощью следующего соотношения:

$$\mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) = \sqrt{2\pi} \sum_{m=\varepsilon(\pi)}^{l_2} T_{l_1 l_2}^{L\pi m} \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi *}(\Phi, \Theta, \varphi) Y_{l_2 m}(\theta, 0), \quad (27)$$

$$\varepsilon(\pi) = \mathcal{L} - L = l_1 + l_2 - L,$$

где коэффициенты  $T_{l_1 l_2}^{L\pi m}$  выражаются через коэффициенты Клебша–Гордана:

$$T_{l_1 l_2}^{L\pi m} = \left[ \left( \frac{1 + \pi(-1)^{l_1+l_2}}{1 + \delta_{0m}} \right) \left( \frac{2l_1 + 1}{2L + 1} \right) \right]^{1/2} \langle l_1 0 l_2 m | L m \rangle.$$

При этом геометрия выбирается так, что  $\mathbf{R} = \mathbf{r}_1$ , а  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2$ . В этом случае разложение по угловым переменным индексируется параметром  $l_2$  — угловым моментом легкой частицы и быстро сходится по  $l_2$ , так как подпространства

$$\mathcal{H}_m = \sum_{m=\varepsilon(\pi)}^{m_{\max}} \mathcal{D}_{Mm}^{L\pi}(\Phi, \Theta, \varphi) F_m^{L\pi}(R, r, \theta)$$

и

$$\bar{\mathcal{H}}_m = \sum_{l_2=\varepsilon(\pi)}^{m_{\max}} R^{l_1} r^{l_2} \{Y_{l_1} \otimes Y_{l_2}\}_{LM} G_{l_1 l_2}^{L\pi}(R, r, \theta)$$

совпадают.

Для удобства дальнейших ссылок выпишем экспоненциальное вариационное разложение в полном виде с учетом угловой зависимости волновой функции, описывающей вращательные степени свободы:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=\mathcal{L}} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}),$$

$$G_{l_1 l_2}^{L\pi}(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}},$$
(28)

где  $\mathcal{L} = L$  или  $L + 1$ , в зависимости от пространственной четности состояния (см. (15)), а комплексные параметры в экспоненте генерируются псевдослучайным образом (24).

Как уже отмечалось выше, замедление сходимости наблюдается при вычислении основного состояния атома гелия. Замедление сходимости наблюдается также и в молекулярных расчетах, особенно для состояний с большим вибрационным квантовым числом. Последнее объясняется тем, что частота осцилляций (волновое число) зависит от  $R$  — расстояния между ядрами в системе и его изменение обусловлено спаданием потенциала эффективного взаимодействия между тяжелыми частицами. В то же время, оптимизируя вариационный интервал для нелинейного параметра, который определяет волновое число решения в наиболее существенной для энергии области, мы получаем неэффективное приближение в других областях по  $R$ . Чтобы исправить создавшееся положение, необходимо строить *многослойное* вариационное разложение, состоящее из нескольких независимых наборов базисных функций, оптимальные вариационные нелинейные параметры для которых ищутся независимым образом. Таким образом, каждый «слой», набор базисных функций определяет оптимальное приближение в определенной области изменения переменных системы. Подобная стратегия приводит к тому, что экспоненциальное разложение становится весьма эффективным и универсальным методом решения квантовой задачи трех тел с кулоновским взаимодействием для связанных состояний.

Возможности этого метода были продемонстрированы в [48] и [49]. При вычислении основного состояния атома гелия использовано пять «слоев» базисных функций, которые были организованы по принципу елки. Первый «слой» настраивался так, чтобы лучше аппроксимировать решение при больших и промежуточных значениях  $r_1$  и  $r_2$ . Следующий «слой» выбирался, чтобы соответствовать решению в области малых  $r_1$  и  $r_2$ . Следующий — еще меньших  $r_1$  и  $r_2$ , и т. д. Оптимизация вариационных параметров осуществлялась на базисе с  $N = 3000$  функций. Результаты счета и сравнение с другими расчетами приведены в табл. 1.

Чтобы решить проблему численной неустойчивости расчетов при больших значениях  $N$ , можно использовать модуль программ «multiprecision», разработанный Бейли [50] для работы с Фортраном-90. Этот пакет позволяет производить расчеты в арифметике с любой наперед за-

**Таблица 1. Нерелятивистская энергия основного состояния атома гелия и сравнение с другими расчетами**

Расчет	$N$	$E$ , отн. ед.
Экспоненциальное разложение [49]	3800	-2,9037243770341195983111421
	4200	-2,9037243770341195983111540
	4600	-2,9037243770341195983111572
	5200	-2,9037243770341195983111587
Экстраполяция		-2,9037243770341195983111594(4)
Франковски и Пекерис [22]	246	-2,9037243770326
Голдман [51]	8066	-2,903724377034119594

данной точностью. Более легкая версия программ, разработанная в [49], имеет модули шестерной и восьмерной точности (соответственно, 48 и 64 десятичные цифры), которые позволяют ускорить время счета в пять и более раз по сравнению с пакетом «multiprecision». Важной особенностью нового стандарта Фортрана-90 является возможность использовать модули расширенной точности без существенного изменения исходного кода программ.

Другой предельный случай, две тяжелые частицы и одна легкая, рассматривался в [48] на примере основного состояния молекулярного иона водорода. Для этого случая особое значение имеет включение в разложение комплексных экспонент. Две группы нелинейных параметров использовались в вычислениях, тем не менее этого оказалось достаточно, чтобы превзойти точность наилучшего на то время расчета на четыре значащих цифры (см. табл. 2).

В следующей табл. 3 собраны примеры систем, которые представляют другие предельные случаи. Отрицательный ион позитрония является

**Таблица 2. Сравнение расчетов для основного состояния молекулярного иона водорода  $H_2^+$ .  $m_p = 1836,152701m_e$**

Расчет	$N$	$E$ , отн. ед.
Экспоненциальное разложение (ЭР) [48]	1600	-0,597139063123405047
	1800	-0,5971390631234050655
	2000	-0,5971390631234050710
	2200	-0,5971390631234050740
Экстраполяция		-0,597139063123405076(2)
Гремо, Деланде и Билли [52]	31746	-0,597139063123
Ребане и Филинский [53]		-0,59713906312340
Мосс [54]		-0,5971390631234

Таблица 3. Примеры расчетов других трехчастичных систем ( $L$  — полный орбитальный момент,  $v$  — вибрационное квантовое число)

Система	ЭР	$E$
$e^-e^-e^+$	ЭР [48] [56]	-0,2620050702329801077(3) -0,262005070232976
$\text{He}(2^3P)$	ЭР [48] [55]	-2,13316419077928310(2) -2,13316419077927(1)
$^4\text{He}^+\bar{p}(L = 35, v = 0)$	ЭР [48] [57]	-2,98402095449725(1) -2,98402094
$\text{H}_2^+(L = 0, v = 19)$	ЭР [58]	-0,499731230655812(2) -0,49973123063

классическим примером системы трех частиц равных масс. Во втором и третьем примерах показано применение метода к состояниям с ненулевым полным орбитальным моментом системы. Здесь особенно интересен случай атома антипротонного гелия, где полный орбитальный момент равен 35(!), а само состояние лежит выше порога существенного (непрерывного) спектра системы. Тем не менее это состояние является долгоживущим, и неопределенность, связанная с шириной резонанса, много меньше, чем указанная погрешность расчета.

Последний пример демонстрирует эффективность метода при вычислении последнего вибрационного состояния в последовательности  $S$ -состояний катиона молекулы водорода  $\text{H}_2^+$ . Волновая функция этого состояния имеет 19 узлов(!), а энергия связи равна  $3,39094 \cdot 10^{-6}$  атомных единиц, что на пять порядков меньше, чем энергия связи основного состояния.

И, наконец, в табл. 4 собраны наиболее точные результаты расчетов, доступные к настоящему моменту в литературе для основных состояний трех классических кулоновских систем: атома гелия, отрицательного иона водорода и молекулярного иона водорода. В первых двух случаях предполагается, что масса ядра равна бесконечности. В последнем случае, так же как и в ранних расчетах, используется масса протона:  $m_p = 1836,152701 m_e$ . Во всех расчетах, кроме [60], используются разложения, специально разработанные для конкретной системы. Для атома гелия в пробную функцию встраиваются сингулярные функции, учитывающие логарифмическую особенность (см. (11)). Для молекулярного иона водорода добавляется мультипликативный множитель  $R^n$  с фиксированным значением  $n \approx 35$  [61] в волновую функцию относительного движения ядер, что соответствует более точной аппроксимации области кулоновского отталкивания на малых межъядерных расстояниях ( $R \rightarrow 0$ ). Однако всякое усложнение пробной волновой функции приводит в дальнейшем к серьезным проблемам при вычислении реляти-



Таблица 4. Наиболее точные опубликованные расчеты классических трехчастичных кулоновских систем в основном состоянии. Результаты представлены в хронологическом порядке

Расчет		$E$ , отн. ед.
He	Schwartz [23]	-2,90372 43770 34119 59831 11592 45194 40444(1)
	Schwartz [1]	-2,90372 43770 34119 59831 11592 45194 40444 66969 25310(1)
	Nakashima et al. [59]	-2,90372 43770 34119 59831 11592 45194 40444 66969
	Korobov et al. [60]	-2,90372 43770 34119 59831 11592 45194 40443(1)
$H^-$	Nakashima et al. [59]	-0,52775 10165 44377 19659 08145 66747 511
	Korobov et al. [60]	-0,52775 10165 44377 19659 08145 66747 5776(2)
$H_2^+$	Yan et al. [61]	-0,59713 90631 23405 07483 41340 96026(5)
	Nakashima et al. [62]	-0,59713 90631 23405 07483 41340 96025 974
	Yan et al. [63]	-0,59713 90631 23405 07483 41340 96026 1899(1)

вистских и радиационных поправок к нерелятивистской энергии связи. Поэтому здесь стоит отметить метод [48, 60], который использует простоту экспоненциального разложения, гибкость и высокую скорость сходимости метода и который позволяет получать нерелятивистские энергии кулоновских систем с точностью порядка 33–35 значащих цифр.

### 5. МЕТОД КОМПЛЕКСНОГО ВРАЩЕНИЯ И РЕЗОНАНСЫ. ВАРИАЦИОННЫЕ МЕТОДЫ

Пусть  $\mathcal{H} = L^2(\mathbb{R}^{3N})$  — гильбертово пространство состояний системы  $N$  частиц. Рассмотрим однопараметрическое семейство унитарных растяжений (дилатаций) в  $L^2(\mathbb{R}^{3N})$ :

$$(U(\theta)\varphi)(\mathbf{x}) = e^{3N\theta/2}\varphi(e^\theta \mathbf{x}), \quad \varphi(\mathbf{x}) \in L^2(\mathbb{R}^{3N}). \quad (29)$$

Генератором группы дилатаций является оператор  $A = (1/2)(\mathbf{xP} + \mathbf{Px})$ . Пусть  $\mathcal{D}_\alpha$  будет множество векторов  $\varphi$ , для которых

$$\varphi(\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(i\theta)^n}{n!} A^n \varphi$$

имеет конечный радиус сходимости,  $|\theta| \leq \alpha$ , такие состояния будем называть дилатационно аналитическими векторами. Множество  $\mathcal{D}_\infty$  всюду плотно в  $\mathcal{H}$ . Оператор  $V$  назовем дилатационно аналитичным, если операторнозначная функция

$$V(\theta) = U(\theta) V U^{-1}(\theta) \quad (30)$$

является аналитической функцией параметра  $\theta$  в окрестности нуля.

Легко видеть, что оператор Лапласа  $\Delta$  (или оператор кинетической энергии  $H_0 = T = -\sum_i (1/2m_i)\Delta_i$ ) дилатационно аналитичен:

$$T(\theta) = e^{-2\theta}T.$$

Аналогично оператор кулоновского взаимодействия системы частиц:

$$V_C(\theta) = e^{-\theta}V_C, \quad V_C = \sum_{i \neq j} \frac{Z_i Z_j}{r_{ij}}.$$

Менее тривиальным примером является оператор дельта-функции:

$$[\delta(\mathbf{r}_{ij})](\theta) = e^{-3\theta}\delta(\mathbf{r}_{ij}).$$

Однако этот оператор является «слишком» сингулярным и для применения в строгих математических рассуждениях должен быть регуляризован тем или иным образом. Например,

$$\delta(\mathbf{r}) \rightarrow \frac{\Lambda^2}{r} e^{-\Lambda r},$$

тогда, применяя преобразование:  $\mathbf{r} \rightarrow e^\theta \mathbf{r}$ ,  $\Lambda \rightarrow e^{-\theta} \Lambda$ , получим оператор, аналитический относительно параметра  $\theta$ :

$$\frac{\Lambda^2}{r} e^{-\Lambda r} \rightarrow \frac{e^{-3\theta} \Lambda^2}{r} e^{-\Lambda r}.$$

После того как соответствующие усреднения операторов произведены, регуляризация снимается устремлением параметра  $\Lambda$  к бесконечности.

Следующая теорема доказана в [64] для случая одной частицы,  $H = H_0 + V(r)$ , однако в слегка измененном виде она верна и для системы нескольких частиц [65].

**Теорема 2.** Пусть оператор  $H$  самосопряжен и дилатационно аналитичен в полосе  $S_\alpha$ . Тогда для любого вектора  $\Phi \in \mathcal{D}_\infty$  функция  $(\Phi, R(z)\Phi)$ , где  $R(z) = (H - z)^{-1}$  — резольвента оператора  $H$ , может быть продолжена через вещественную ось снизу (сверху) до лучей  $\arg z = 2\alpha$  (соответственно,  $\arg z = -2\alpha$ ).

Из этой теоремы немедленно следует отсутствие сингулярного непрерывного спектра и то, что гильбертово пространство состояний системы частиц раскладывается в прямую сумму (ортогональные подпространства)

$$\mathcal{H} = \mathcal{M}_{ac}(H) \oplus \mathcal{M}_{disc}(H)$$

состояний непрерывного и дискретного (состоящего из собственных значений конечной кратности) спектров.

Прежде чем перейти к дальнейшему изложению теории для систем, состоящих из  $N$  частиц, необходимо дать определения некоторых базовых понятий. Пусть  $D = \{D_1, \dots, D_k\}$  — некоторое разложение множества частиц  $\{1, \dots, N\}$  на  $k \geq 2$  кластеров, такое что  $D_i \cap D_j = \emptyset$ ,

если  $i \neq j$ ;  $\bigcup_{i=1}^k D_i = \{1, \dots, N\}$ . Пусть  $H_{D_i} = T_{0,D_i} + V_{D_i}$  — гамильтониан кластера  $D_i$ , где  $T_{0,D_i}$  — кинетическая энергия кластера в системе центра масс кластера, а  $V_{D_i}$  — оператор взаимодействия между частицами кластера  $D_i$ . Сумма энергий  $E_{D_1} + \dots + E_{D_k}$ , где  $E_{D_i}$  — некоторое собственное значение оператора  $H_{D_i}$  — называется  $k$ -частичным порогом. Множество всех таких порогов будем обозначать  $\Sigma$ . Аналогично определяется  $\Sigma(\theta)$  для гамильтониана  $H(\theta)$ .

Будем говорить, что оператор взаимодействия *дилатационно аналитичен*, если

- а)  $D(V) \supseteq D(H_0)$  и  $V$  симметричен;
- б)  $V$  компактен относительно  $H_0$ ;
- в) существует такое  $\alpha > 0$ , что семейство  $V(\theta)$ ,  $\theta \in \mathbb{R}$ , допускает аналитическое продолжение в полосу

$$S_\alpha = \{\theta \in \mathbb{C} \mid |\operatorname{Im} \theta| < \alpha\}$$

в том смысле, что  $V(\theta)(H_0 + I)^{-1}$  является аналитической операторнозначной (со значениями в ограниченных операторах) функцией на  $S_\alpha$ .

Следующая теорема, доказанная Балслевом и Комбом [66] для системы нескольких частиц,  $H = H_0 + \sum_{i \neq j} V_{ji}$ , играет ключевую роль в методе комплексного вращения.

**Теорема 3.** *Предположим, что все двухчастичные потенциалы  $V_{ij}$  допускают аналитическое продолжение в полосу  $S_\alpha$ , тогда спектр оператора  $H(\theta)$  ( $0 < \operatorname{Im} \theta < \alpha$ ) (рис. 1) состоит из*

- а) множества  $\sigma_{\text{ess}} = \{z + e^{-2\theta} r \mid z \in \Sigma(\theta), r \in \mathbb{R}^+\}$ , определяющего существенную часть спектра;
- б) множества изолированных точек спектра  $\sigma_{\text{disc}}(\theta)$ , являющихся собственными значениями конечной кратности.

Более того:

- 1) Вещественные собственные значения и пороги оператора  $H(\theta)$  являются таковыми и для оператора  $H$ .
- 2) Все не вещественные собственные значения и пороги (называемые резонансами и комплексными порогами соответственно) опера-

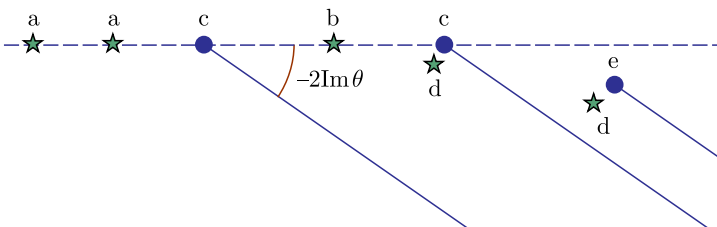


Рис. 1. Спектр  $H(\theta)$

тора  $H(\theta)$  лежат в секторе

$$\{z \mid 0 > \arg(z - \Sigma_{\min}) > -2 \operatorname{Im} \theta\},$$

где

$$\Sigma_{\min} = \inf \{x \mid x \in \Sigma \cap \mathbb{R}\},$$

и зависят только от  $\operatorname{Im} \theta$ , но не от  $\operatorname{Re} \theta$ .

3) Комплексные пороги и собственные значения оператора  $H(\theta)$ , которые являются изолированными от существенного спектра  $H(\theta)$ , лежат в спектре  $\sigma(H(\theta'))$ , если только  $\operatorname{Im} \theta'$  находится достаточно близко от  $\operatorname{Im} \theta$ .

## 6. МЕТОД КОМПЛЕКСНОГО ВРАЩЕНИЯ И ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ ДЛЯ РЕЗОНАНСОВ

В методе комплексного вращения координат (Complex Coordinate Rotation, CCR) [67] все координаты динамической системы преобразуются, «поворачиваются» в комплексной плоскости:

$$r_{ij} \rightarrow r_{ij} e^{i\varphi}, \quad (31)$$

где  $\varphi$  — параметр комплексного вращения. При этом гамильтониан системы с кулоновским взаимодействием изменяется особенно просто,

$$H_\varphi = T e^{-2i\varphi} + V e^{-i\varphi}, \quad (32)$$

где  $T$  и  $V$  — операторы кинетической и кулоновской потенциальной энергии соответственно.

Непрерывный спектр  $H_\varphi$  вращается в комплексной плоскости вокруг точек ветвления («порогов»), чтобы открыть полюса резонансов, расположенных на нефизическом листе римановой поверхности энергий, в соответствии с теоремой Агилара, Балслева, Комба. Резонансные энергии затем определяются решением комплексной задачи на собственные значения для повернутого гамильтониана

$$(H_\varphi - E)\Psi_\varphi = 0. \quad (33)$$

Собственная функция  $\Psi_\varphi$ , полученная из уравнения (33), является квадратично интегрируемой, и соответствующее комплексное собственное значение,

$$E = E_r - i\Gamma/2, \quad (34)$$

определяет энергию  $E_r$  и ширину  $\Gamma$  резонанса. Последняя связана со скоростью кулоновского распада (процесс Оже с испусканием электрона для атомов и/или преддиссоциация для молекулярных систем) как  $\lambda_C = \Gamma/\hbar$ . При точном решении уравнения (33) значение  $E$  не зависит от выбора угла вращения  $\varphi$  при условии, что положение резонанса не закрывается линиями разреза непрерывного спектра.

Для широкого класса потенциалов было показано (см. [68] и ссылки в ней), что комплексная энергия  $E$ , полученная методом комплексного вращения координат из уравнения (33), соответствует положению полюса  $S$ -матрицы исходной задачи. А волновая функция ССР-решения,  $\Psi_\varphi$ , после выполнения обратного преобразования, аналитического продолжения к нулевому значению угла поворота  $\varphi = 0$ , соответствует решению волновой функции для полюса  $S$ -матрицы. Это решение,  $\Psi_{\varphi=0}$ , не является более квадратично интегрируемым и отвечает граничному условию излучения.

Использование конечного базиса в разложении волновой функции  $\Psi_\varphi$  сводит задачу (33) к обобщенной задаче на собственные значения,

$$(A - \lambda B)x = 0, \quad (35)$$

где  $A = \langle \psi_i^* | H_\varphi | \psi_j \rangle$  — конечная  $N \times N$  матрица гамильтониана, и  $B$  — матрица перекрытия,  $B = \langle \psi_i^* | \psi_j \rangle$ .

Собственное значение  $\lambda(\theta_r, \varphi, N)$  является функцией параметра вещественной дилатации  $\theta_r$ ,  $r_{ij} \rightarrow r_{ij} e^{\theta_r}$ , угла вращения  $\varphi$  и числа базисных функций  $N$ . В случае, когда вариационные параметры определены и сходимость достигнута, должны выполняться следующие условия:

$$\frac{\partial \lambda}{\partial \theta_r} \approx 0, \quad \frac{\partial \lambda}{\partial \varphi} \approx 0, \quad \frac{\partial \lambda}{\partial N} \approx 0. \quad (36)$$

На практике положения резонансов находятся из графиков «ротационных путей»  $\lambda(\varphi)$  при различных значениях параметра вещественной дилата-

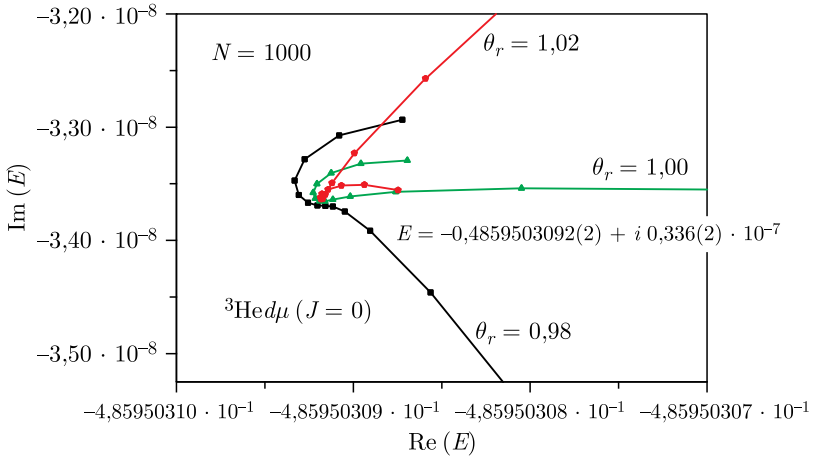


Рис. 2. Ротационные пути  $\lambda(\varphi)$  для резонанса в системе  ${}^3\text{He}^{++} - d\mu$ , расположенного ниже порога  $d\mu(n = 1)$ . Узел в центре графика соответствует стационарной точке (36), определяющей положение резонанса  $E$  в комплексной плоскости энергий

ции  $\theta_r$ , как показано на рис. 2. Из рисунка видно, что ротационные пути стягиваются в одну точку, в которой функция  $\lambda(\varphi)$  изменяется медленно, стационарную точку в смысле уравнений (36). Отдельные точки на графике соответствуют решению уравнения (35) для различных значений  $\theta_r$  и  $\varphi$ , здесь угол поворота  $\varphi$  меняется с шагом 0,02. Если увеличить число пробных функций  $N$ , то станет заметно, как множество точек-решений стягивается (сходится) к стационарному значению, которое и является местом расположения резонанса,

$$E = -0,4859503092(2) + i0,336(2) \cdot 10^{-7}.$$

В данном случае эта энергия описывает положение резонанса в системе  ${}^3\text{He}^{++}d\mu$ , образуемого поляризационным потенциалом  $d\mu$  атома в основном состоянии в присутствии ядра гелия-3 (гелиона) [69]. Из этих данных определяется энергия связи (относительно порога  $d\mu$  атома),  $E_B = -70,9758124(3)$  эВ, и скорость кулоновской преддиссоциации в канал  ${}^3\text{He}^{++}\mu + d$ , равной  $\lambda_C = 5,75(3) \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ .

Во многих задачах, в частности при вычислении релятивистских и КЭД-поправок, необходима теория возмущений для резонансов.

В том случае, когда используется фешбаховский проекционный формализм [70], волновая функция нулевого приближения может быть выбрана как связанное решение в закрытых каналах, а оператор «оптического» потенциала рассматривается как еще один оператор возмущения. Однако такая функция нулевого приближения не всегда оказывается достаточно точной для задач прецизионной спектроскопии.

Если же в качестве нулевого решения брать волновую функцию, соответствующую полюсу  $S$ -матрицы, то, как известно, такая волновая функция не является квадратично интегрируемой. Это не позволяет вычислять средние значения от операторов уже в первом порядке теории возмущения. Использование метода комплексного вращения координат и следующей теоремы, доказанной Саймоном в [65], позволяет обойти эту трудность.

**Теорема 4.** Пусть  $H$  — гамильтониан системы частиц с кулоновским взаимодействием и  $W(\theta)$  — дилатационно аналитическое возмущение. Пусть  $E_0$  — изолированное простое комплексное собственное значение оператора  $H(\theta)$ . Тогда для малых значений параметра  $\beta$  существует в точности одно собственное значение оператора  $H(\theta) + \beta W(\theta)$  в окрестности  $E_0$ , и функция

$$E(\beta) = E_0 + a_1\beta + a_2\beta^2 + \dots \quad (37)$$

является аналитической в окрестности  $\beta = 0$ . В частности,

$$a_1 = E'(0) = \frac{\langle \Psi_\theta^* | W(\theta) | \Psi_\theta \rangle}{\langle \Psi_\theta^* | \Psi_\theta \rangle}. \quad (38)$$

Использование этой теоремы может быть проиллюстрировано следующим примером. Релятивистские поправки на связанный электрон в ведущем порядке описываются гамильтонианом Брейта–Паули:

$$E_{rc} = \alpha^2 \left\langle -\frac{\mathbf{p}_e^4}{8m_e^3} + \frac{4\pi}{8m_e^2} [Z_{\text{He}}\delta(\mathbf{r}_{\text{He}}) + Z_{\bar{p}}\delta(\mathbf{r}_{\bar{p}})] \right\rangle. \quad (39)$$

Оба оператора, входящие в (39), дилатационно аналитичны,

$$\delta_\varphi(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) e^{-3i\varphi}, \quad \mathbf{p}_\varphi^4 = \mathbf{p}^4 e^{-4i\varphi}.$$

Однако они не являются малыми возмущениями в смысле требований теоремы Саймона. Это общая практика в квантовой электродинамике — регуляризовать такие операторы тем или иным образом. Единственное требование — сохранить свойство «дилатационной аналитичности». И затем, после того как все вычисления выполнены, регуляризация должна быть снята для получения конечных результатов.

Для примера рассмотрим состояние  $(n, l) = (38, 33)$  атома антипротонного гелия  ${}^4\text{He}^+\bar{p}$ . Здесь квантовые числа  $(n, l)$  определяют орбиталь антипротона относительно ядра гелия, в то время как электрон находится в основном состоянии. Само состояние находится в непрерывном спектре и распадается на пару  ${}^4\text{He}^{++}\bar{p}$  и электрон с *нерелятивистским* временем жизни  $\sim 3,071(3) \cdot 10^{11} \text{ с}^{-1}$ . В табл. 5 приведены результаты расчетов. Как и следовало ожидать, средние от операторов  $\mathbf{p}_e^4$  и  $\delta_{\mathbf{r}}$  являются комплексными. Они не зависят от выбора угла поворота  $\varphi$ , для конечного базиса приближенно. Полученные средние значения дают поправки к комплексному собственному значению, что изменяет не только энергию состояния, но и время жизни, позволяя получить *физическую* скорость кулоновского распада данной системы.

Еще одно важное применение данной теоремы было предложено в [71] при вычислении логарифма Бете для метастабильных состояний (резонансов) в атоме антипротонного гелия.

**Таблица 5. Средние значения операторов  $\mathbf{p}^4$  и  $\delta(\mathbf{r})$ ; релятивистские поправки к энергии и оже-ширине состояния  $(38, 33)$  атома  ${}^4\text{He}^+\bar{p}$**

Параметр	Re	Im
$E_{\text{NR}}$	-2,847324042(3)	$3,714(3) \cdot 10^{-6}$
$\mathbf{p}_e^4$	48,7142(4)	0,0089(4)
$\delta(\mathbf{r}_{\text{He}})$	1,60580(1)	0,00029(1)
$\delta(\mathbf{r}_{\bar{p}})$	0,05392	0,000015
$E_{\text{rel}}$	-2,847384174(5)	$3,702(5) \cdot 10^{-6}$

## 7. ВЫЧИСЛЕНИЕ ХАРАКТЕРИСТИК РЕЗОНАНСОВ МЕТОДОМ КОМПЛЕКСНОГО ВРАЩЕНИЯ КООРДИНАТ

Одна из сложных проблем в решении задач атомной и молекулярной физики вариационными методами — определение квадрата амплитуды волновой функции в точках парного соударения или вычисление среднего от оператора  $\delta^3(\mathbf{r})$ . Особенно сложно вычислять его значение в точках соударения двух ядер, так как вследствие кулоновского отталкивания амплитуда в этих точках сильно подавлена кулоновским барьером.

Один из способов преодолеть эту трудность был предложен Драхманом [72] и заключался в том, чтобы локальный сингулярный оператор заменить эквивалентным ему регулярным глобальным оператором с более быстрой скоростью сходимости. Развитие идеи Драхмана для вычисления сингулярных операторов было рассмотрено также в [73].

Для дельта-функции  $\delta(\mathbf{r}_{12})$  в системе трех частиц, описываемых гамильтонианом

$$H = - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \nabla_i^2 + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (40)$$

эквивалентный оператор может быть выбран с использованием тождества

$$c_1 \nabla_j^2 (1/r_{jk}) + c_2 \nabla_k^2 (1/r_{jk}) = -(c_1 + c_2) 4\pi \delta(\mathbf{r}_{jk}),$$

где  $\mathbf{r}_{jk} = \mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k$ . Тогда для связанного состояния  $\Psi_0$   $[(H - E_0)\Psi_0 = 0]$ , учитывая, что  $\nabla^2 \Psi^2 = 2\Psi \nabla^2 \Psi + 2(\nabla \Psi)^2$ , имеем

$$\langle \delta(\mathbf{r}_{jk}) \rangle = \frac{\mu_{jk}}{\pi} \left[ \left\langle \frac{E_0 - V}{r_{jk}} \right\rangle - \sum_{i=1}^N \frac{1}{2m_i} \left\langle \nabla_i \Psi_0 \left| \frac{1}{r_{jk}} \right| \nabla_i \Psi_0 \right\rangle \right], \quad (41)$$

$\mu_{jk} = m_j m_k / (m_j + m_k)$  — приведенная масса двух частиц.

В ранних расчетах полученная формула хорошо работала при вычислениях дельта-функции между двумя электронами, однако для столкновения двух ядер при использовании базисов небольшого размера, при которых энергия уже достигает достаточно точного значения, вычисление  $\langle \delta(\mathbf{r}) \rangle$ , как прямое, так и с помощью формулы (41), не дает желаемых результатов.

В этих случаях можно использовать комбинированные методы, такие как были предложены в [74] для вычисления  $\langle \delta(\mathbf{R}) \rangle$ , физической величины, важной для исследования скорости ядерной реакции в молекулярных системах. Идея метода заключается в том, что вариационная волновая функция, которая с хорошей точностью описывает решение в разрешенной области, сшивается с многоканальным адиабатическим решением, построенным для малых  $R$ , где  $R$  — расстояние между ядрами. Для иллюстрации этого метода воспользуемся примером из предыдущего раздела, а именно рассмотрим резонансное состояние мюонной молекулы  ${}^3\text{He}^{++}d\mu$ .



Для того чтобы вычислить значение квадрата амплитуды в нуле  $|\Psi(0)|^2$ , волновую функцию резонанса, полученную из уравнения  $(H_\varphi - E)\Psi_\varphi = 0$  для некоторого угла поворота  $\varphi$ , необходимо повернуть обратно к  $\varphi \rightarrow 0$ . Это достигается преобразованием

$$\Psi_0(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = e^{-3i\varphi} \Psi_\varphi(\mathbf{R}e^{-i\varphi}, \mathbf{r}e^{-i\varphi}),$$

здесь  $\mathbf{R}$  — радиус-вектор взаимного расположения ядер, а вектор  $\mathbf{r}$  определяет координаты мюона.

Чтобы однозначно определить волновую функцию, необходимо ввести нормализацию полученного квадратично интегрируемого решения (для  $\varphi > \arg(E)/2$ ):

$$\int [\Psi_\varphi(\mathbf{R}, \mathbf{r})]^2 d\mathbf{r} d\mathbf{R} = 1. \quad (42)$$

Функция в левой части — аналитическая функция параметра  $\varphi$  и потому является константой. При  $\varphi = 0$  волновая функция не является квадратично интегрируемой, но для узких резонансов (42) приближенно соответствует так называемой «box»-нормализации, когда интегрирование выполняется в ограниченной области конфигурационного пространства до некоторого достаточно большого значения  $R = R_{\max}$ .

Полученная численно волновая функция, усредненная по мюонной степени свободы,

$$F(R) = \left\{ e^{-6i\varphi} \int [\Psi_\varphi(\mathbf{R}e^{-i\varphi}, \mathbf{r}e^{-i\varphi})]^2 d\mathbf{r} d\Omega \right\}^{1/2}, \quad (43)$$

показана на рис. 3, а. Осцилляции, которые хорошо видны на линии мнимой части волновой функции, обусловлены наличием открытого канала. Асимптотическое поведение волновой функции в открытом канале определяется условием излучения  $\Psi_0(R) \sim \exp(ikR)$ , где  $k$  — комплексное

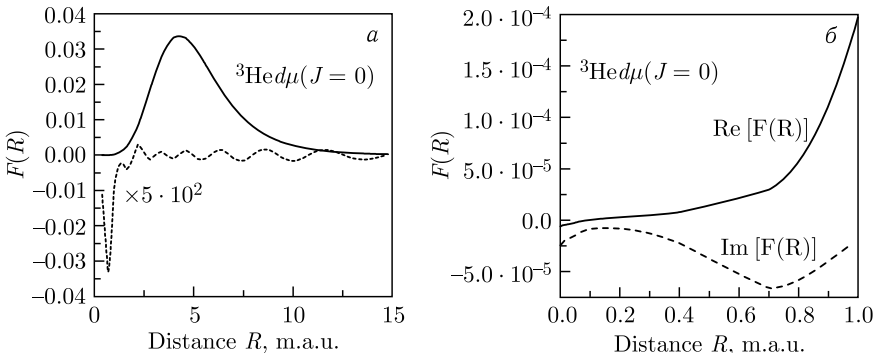


Рис. 3. а) Комплексная волновая функция  $F(R)$  для состояния  ${}^3\text{He}d\mu(J=0)$  (сплошная линия — вещественная часть в. ф., штриховая — увеличенная мнимая часть); б) та же волновая функция, но для малых значений  $R$

волновое число. Оно соответствует значению  $E$  в точке расположения полюса резонанса в комплексной плоскости энергии, отсчитываемому от порога открытого канала.

Та же функция, но в меньшей области изменения  $R$  вблизи от точки соударения двух ядер, изображена на рис. 3, б. На рисунке ясно видно, что часть волновой функции, которая отражает поведение при совсем малых  $R$ , имеет неправильное поведение вследствие недостаточной сходимости вариационного решения в этой области. Это объясняется тем, что амплитуда волновой функции в этой области мала и даже существенные относительные изменения волновой функции не приводят к значительным изменениям энергии всей системы. Вместе с тем varia-

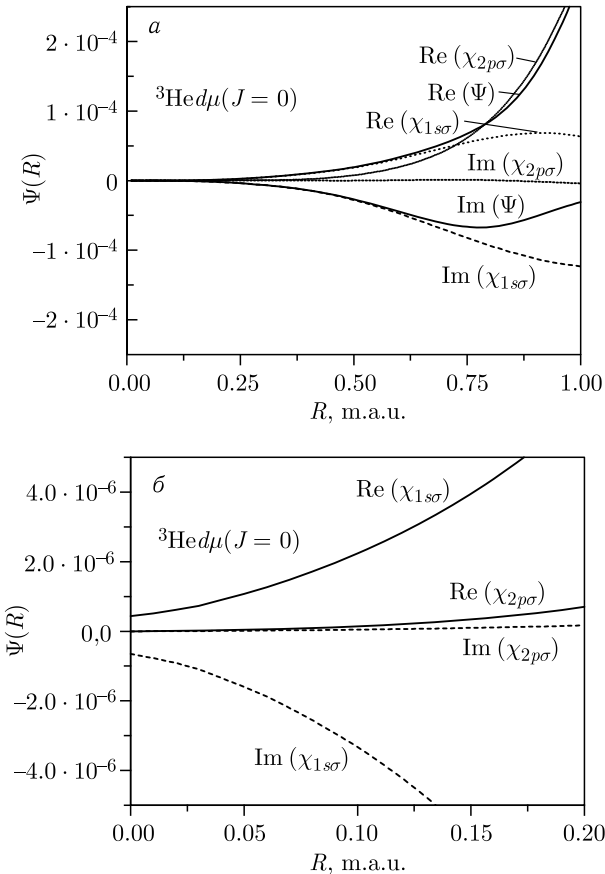


Рис. 4. а) Амплитуды  $\chi(R)$  адиабатического многоканального разложения, полученные из вариационной волновой функции; б) многоканальное адиабатическое решение в области малых  $R$

ционное решение в области  $R > 0,3$  м. а. е. (мюонных атомных единиц) обладает высокой относительной точностью и может быть использовано для экстраполяции решения в область  $R \rightarrow 0$ .

Для того чтобы получить решение в области малых  $R$ , было использовано многоканальное адиабатическое приближение, основанное на разложении Борна–Оппенгеймера [75]. Адиабатические амплитуды определялись из вариационного решения, когда сравнивались при  $R_m \approx 1$ . Затем радиальное уравнение Шредингера решалось численно методом конечных разностей. Результаты «улучшенного» решения показаны на рис. 4. Таким образом, использование комбинированного метода позволило получить значение  $|F(0)|^2 \approx 0,63 \cdot 10^{-12}$  м. а. е. для квадрата амплитуды вероятности в точке соударения двух ядер. При этом решение при  $R = 0$  слабо зависело от выбора  $R_m$ , точки сшивания вариационного и адиабатического решений.

Следует отметить, что данный результат получен с использованием умеренного базиса из  $N = 800$  функций и в арифметике двойной точности (16 значащих цифр). Следующий расчет был выполнен несколько лет спустя с использованием метода «грубой силы».

Прежде чем приступить к подробному описанию расчета, необходимо сказать, что из формулы (43) следует, что

$$F^2(0) = \langle \Psi_\varphi^* | \delta(\mathbf{R}) e^{-3i\varphi} | \Psi_\varphi \rangle. \quad (44)$$

Итак, для получения среднего значения оператора  $\delta(\mathbf{R})$  использовался базис  $N = 2900$  функций экспоненциального вариационного разложения (28). Чтобы обеспечить численную устойчивость решения, вычисления проводились в арифметике шестерной точности (48 значащих цифр). Результаты счета представлены на рис. 5. Учитывая, что данный подход не требует дополнительного программирования, плата в виде одной недели счета представляется разумной. С другой стороны, данный пример, не менее сложный, чем вычисление 25 знаков энергии основного состояния атома гелия, еще раз демонстрирует всю вычислительную мощь метода «экспоненциального» вариационного разложения.

Как следует из рис. 5, значение  $F^2(0)$  есть комплексная величина,

$$F^2(0) = [-0,292(2) - i0,679(2)] \cdot 10^{-12} \text{ м. а. е.},$$

откуда получаем, что  $|F(0)|^2 = 0,739(2) \cdot 10^{-12}$  м. а. е. Данный результат хорошо согласуется с тем, что было получено комбинированным методом. Следует также отметить, что при использовании комбинированных методов трудно контролировать точность конечного результата, в то время как в прямых методах расчета сходимость в зависимости от числа базисных функций легко поддается контролю.

До сих пор мы подробно рассматривали вычисление средних значений для оператора  $\delta(\mathbf{r}_i)$ . Однако таким же образом можно вычислять средние значения и других операторов, обладающих свойством «дилатационной

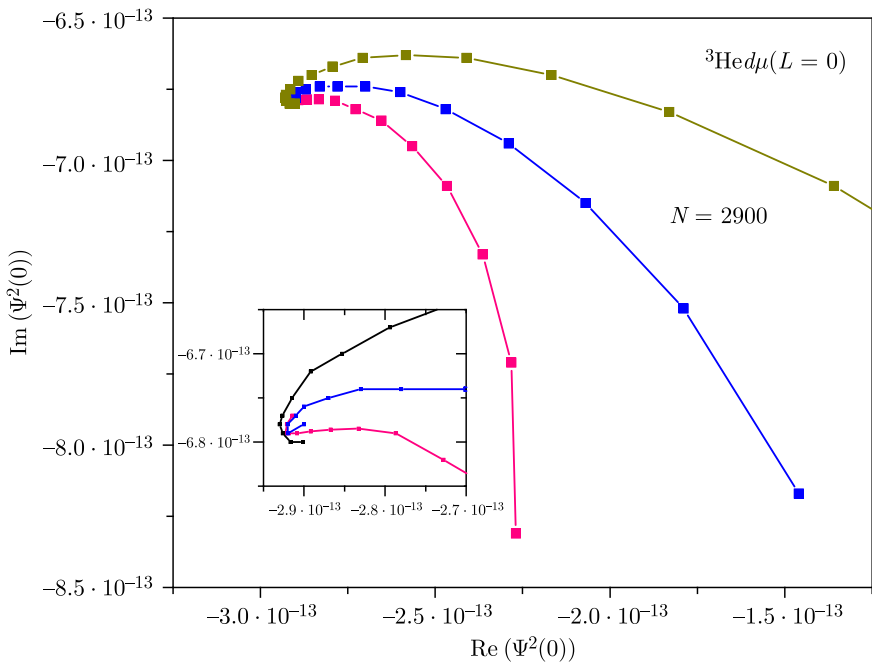


Рис. 5. Значение квадрата волновой функции в точке соударения ядер в системе  ${}^3\text{He}^{++}d\mu$

аналитичности», таких как средние расстояния между частицами  $r_i$ , или в более общем виде  $r_i^k$ , которые определяют геометрию резонанса [76]. Конечные значения средних обеспечиваются квадратичной интегрируемостью «повернутых» волновых функций, а единственность определения — нормировкой (42). Получаемые средние являются комплексными величинами, при этом физический смысл мнимой части определяется из контекста конкретной решаемой физической задачи, как это было сделано в случае с оператором дельта-функции.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Основной целью данной работы была попытка сделать некоторый исторический обзор развития вычислительных методов для решения квантовой задачи трех тел с кулоновским взаимодействием и, в частности, показать эффективность метода «экспоненциального» вариационного разложения. Это предполагает как прецизионные вычисления нерелятивистских уровней энергии, так и разработку методов для вычисления релятивистских и радиационных поправок как для связанных состояний, так и для резонансов.

**Приложение А**  
**АНАЛИТИЧЕСКОЕ ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ**  
**ЭЛЕМЕНТОВ ДЛЯ ВАРИАЦИОННОГО РАЗЛОЖЕНИЯ**  
**ХИЛЛЕРААСА**

Изложение следует работе [77].

**Основное рекуррентное соотношение.** Для вычисления интегралов от радиальных переменных нам необходимо уметь вычислять

$$\Gamma_{lm}(\alpha, \beta) = \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \frac{f(\alpha, \beta)}{\alpha + \beta}. \quad (45)$$

По теореме Лейбница имеем

$$\Gamma_{lm}(\alpha, \beta) = \sum_{\substack{\lambda + \lambda' = l \\ \mu + \mu' = m}} \frac{l!}{\lambda! \lambda'!} \frac{m!}{\mu! \mu'!} \frac{(\lambda' + \mu')!}{(\alpha + \beta)^{\lambda' + \mu' + 1}} \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^\lambda \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^\mu f(\alpha, \beta).$$

Далее, используя рекуррентное соотношение для биномиальных коэффициентов

$$\frac{(\lambda' + \mu')!}{\lambda'! \mu'!} = C_{\lambda' + \mu' - 1}^{\lambda'} + C_{\lambda' + \mu' - 1}^{\mu'} = \frac{(\lambda' + \mu' - 1)!}{\lambda'! (\mu' - 1)!} + \frac{(\lambda' + \mu' - 1)!}{(\lambda' - 1)! \mu'!},$$

мы получаем

$$\begin{aligned} \Gamma_{lm} &= \\ &= \sum_{\substack{\lambda + \lambda' = l \\ \mu + \mu' = m}} \left[ \frac{l!}{\lambda! (\lambda' - 1)!} \frac{m!}{\mu! \mu'!} \frac{(\lambda' + \mu' - 1)!}{(\alpha + \beta)^{\lambda' + \mu' + 1}} + \frac{l!}{\lambda! \lambda'!} \frac{m!}{\mu! (\mu' - 1)!} \frac{(\lambda' + \mu' - 1)!}{(\alpha + \beta)^{\lambda' + \mu' + 1}} \right] \times \\ &\quad \times \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^\lambda \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^\mu f(\alpha, \beta), \end{aligned}$$

откуда, применяя повторно теорему Лейбница, приходим к окончательному выражению:

$$\Gamma_{lm}(\alpha, \beta) = \frac{1}{\alpha + \beta} \left[ l \Gamma_{l-1, m} + m \Gamma_{l, m-1} + \left(-\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)^l \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m f(\alpha, \beta) \right]. \quad (46)$$

**Сингулярные интегралы вида  $(-1, m, n)$ .** Генерирующая функция, аналогичная (17), получается прямым интегрированием аналитически,

$$\begin{aligned} \Gamma_{-1,00}(\alpha, \beta, \gamma) &= \iint \frac{1}{r_1} e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_{12}} dr_1 dr_2 dr_{12} = \\ &= \int_0^\infty dr_1 \left\{ \left( \int_0^{r_1} dr_2 \int_{r_1 - r_2}^{r_1 + r_2} dr_{12} + \int_{r_1}^\infty dr_2 \int_{r_2 - r_1}^{r_1 + r_2} dr_{12} \right) \frac{e^{-\alpha r_1 - \beta r_2 - \gamma r_{12}}}{r_1} \right\} = \\ &= \frac{\ln(\alpha + \beta) - \ln(\alpha + \gamma)}{(\beta - \gamma)(\beta + \gamma)}. \quad (47) \end{aligned}$$

С использованием (47) другие интегралы вида  $(-1, m, n)$  могут быть получены с помощью дифференцирования

$$\begin{aligned} \Gamma_{-1, mn} &= \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)^n \Gamma_{-1, 00} = \\ &= \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)^n \frac{\ln(\alpha+\beta) - \ln(\alpha+\gamma)}{(\beta-\gamma)(\beta+\gamma)}. \end{aligned} \quad (48)$$

К сожалению, метод, применявшийся для генерации регулярных функций  $\Gamma_{lmn}(\alpha, \beta, \gamma)$ , не может быть напрямую использован в этом случае. Фактор  $1/(\beta - \gamma)$  делает рекурсию неустойчивой.

Чтобы преодолеть эту трудность, перепишем выражение (48), предполагая, что  $\beta > \gamma$ , в виде

$$\begin{aligned} \Gamma_{-1, mn} &= \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)^n \times \\ &\times \left\{ \frac{1}{(\alpha+\gamma)(\beta+\gamma)} \left[ \left(\frac{\beta-\gamma}{\alpha+\gamma}\right)^{-1} \ln\left(1 + \frac{\beta-\gamma}{\alpha+\gamma}\right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (49)$$

и введем новую переменную  $u = (\beta - \gamma)/(\alpha + \gamma)$ , тогда следующая рекуррентная схема может быть предложена как

$$\begin{aligned} \Gamma_{-1, mn} &= \frac{1}{\beta + \gamma} [m \Gamma_{-1, m-1, n} + n \Gamma_{-1, m, n-1} + D_{mn}], \\ D_{mn} &= \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)^n \frac{1}{(\alpha + \gamma)} [u^{-1} \ln(1 + u)], \\ D_{mn} &= \frac{1}{\alpha + \gamma} [n D_{m, n-1} + C_{mn}], \\ C_{mn} &= \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m \left(-\frac{\partial}{\partial\gamma}\right)^n [u^{-1} \ln(1 + u)]. \end{aligned} \quad (50)$$

Чтобы сгенерировать массив  $C_{mn}$ , удобно сначала продифференцировать по переменной  $\gamma$ , что дается рекуррентным соотношением

$$C_{mn} = \frac{1}{\alpha + \gamma} [(m + n - 1) C_{m, n-1} - (\alpha + \beta) C_{m+1, n-1}],$$

которое требует заполнения треугольного массива  $(m, n)$  с  $m, n = 1, \dots, M + N$  и  $m + n \leq M + N$ . Первый слой задается

$$C_{m0} = \left(-\frac{\partial}{\partial\beta}\right)^m [u^{-1} \ln(1 + u)] = \frac{g_m(u)}{(\alpha + \gamma)^m}.$$

Наконец, мы определим рекурсию, необходимую для вычисления одномерного массива функций  $g_m$

$$g_m(u) = \left(-\frac{d}{du}\right)^m [u^{-1} \ln(1+u)],$$

$$g_m = \frac{m}{u} g_{m-1} + \frac{1}{u} f_m, \quad f_m(u) = \left(-\frac{d}{du}\right)^m \ln(1+u) = -\frac{(m-1)!}{(1+u)^m}, \quad (51)$$

что завершает построение рекуррентной схемы аналитического вычисления интегралов вида  $(-1, m, n)$ . Однако, когда  $u$  мало, прямая рекурсия (51) становится неустойчивой, и в этом случае лучше воспользоваться рекурсией в обратном направлении,

$$g_{m-1} = \frac{1}{m}(u g_m - f_m), \quad m = M, M-1, \dots, \quad (51a)$$

где  $M$  выбирается таким образом, что если  $g_M$  положить равным нулю, то ошибка, введенная в значении  $g_M$  на этом шаге, уменьшится до машинного эпсилон за время «обратной» рекурсии, к моменту, когда требуемое значение  $m$  будет достигнуто. В частности, когда  $u = 0$  (или  $\beta = \gamma$ , что является типичным для физических систем, содержащих тождественные частицы), получаем

$$\Gamma_{-1,00}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{1}{(\alpha + \beta)\beta} = \frac{1}{(\alpha + \gamma)\gamma},$$

что позволяет избавиться от неопределенностей вида  $0/0$  в процессе вычисления.

**Сингулярные интегралы вида  $(-1, -1, n)$ .** Следующий шаг — вычисление сингулярных интегралов вида  $\Gamma_{-1,-1,n}(\alpha, \beta, \gamma)$ , которые требуются, например, для получения среднего значения оператора  $\mathbf{p}^4$ . Начнем опять с генерирующей функции

$$\Gamma_{-1,-1,0}(\alpha, \beta, \gamma) = \frac{1}{4\gamma} \left\{ \left[ \ln\left(\frac{\alpha+\gamma}{\beta+\gamma}\right) \right]^2 + 2 \left[ \operatorname{dilog}\left(\frac{\alpha+\beta}{\alpha+\gamma}\right) + \operatorname{dilog}\left(\frac{\alpha+\beta}{\beta+\gamma}\right) \right] + \frac{\pi^2}{3} \right\}. \quad (52)$$

Здесь  $\operatorname{dilog}(x)$  — функция дилогарифма, как она определяется в справочнике Абрамовица и Стиган [78] (см. прил. Б). Далее вычислительная схема определяется следующим образом:

$$\Gamma_{-1,-1,n}(\alpha, \beta, \gamma) = \left(-\frac{\partial}{\partial \gamma}\right)^n \Gamma_{-1,-1,0}(\alpha, \beta, \gamma) = \gamma^{-1} [n \Gamma_{-1,-1,n-1} - B_n], \quad (53)$$

где

$$\begin{aligned}
 B_n &= - \left( -\frac{\partial}{\partial \gamma} \right)^n \frac{1}{4} \left\{ \left[ \ln \left( \frac{\alpha + \gamma}{\beta + \gamma} \right) \right]^2 + \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left[ \operatorname{dilog} \left( \frac{\alpha + \beta}{\alpha + \gamma} \right) + \operatorname{dilog} \left( \frac{\alpha + \beta}{\beta + \gamma} \right) \right] + \frac{\pi^2}{3} \right\} = \\
 &= \left( -\frac{\partial}{\partial \gamma} \right)^{n-1} \left[ \frac{\alpha}{\alpha^2 - \gamma^2} \ln \left( \frac{\alpha + \beta}{\beta + \gamma} \right) + \frac{\beta}{\beta^2 - \gamma^2} \ln \left( \frac{\alpha + \beta}{\alpha + \gamma} \right) \right] = \\
 &= \left( -\frac{\partial}{\partial \gamma} \right)^{n-1} \left\{ \frac{\alpha}{(\alpha + \gamma)(\beta + \gamma)} [v^{-1} \ln(1 + v)] + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{\beta}{(\alpha + \gamma)(\beta + \gamma)} [u^{-1} \ln(1 + u)] \right\}, \quad (53a)
 \end{aligned}$$

$u = (\beta - \gamma)/(\alpha + \gamma)$  и  $v = (\alpha - \gamma)/(\beta + \gamma)$ . Окончательное выражение, написанное в последней строке уравнения (53a), дает устойчивую рекуррентную схему, если только функция  $g_0(u) = u^{-1} \ln(1 + u)$  и ее производные будут вычисляться так же, как и выше.

**Другие сингулярные интегралы.** Сингулярные интегралы вида  $\Gamma_{-2,m,n}(\alpha, \beta, \gamma)$  не являются интегрируемыми, но они обычно встречаются только в комбинациях таких, как  $\Gamma_{-2,m+2,n} - \Gamma_{-2,m,n+2}$ , которые уже имеют конечные значения. Таким образом, в этой ситуации требуется найти такую генерирующую функцию, которая бы давала правильное значение для комбинаций, представляющих интегрируемые выражения. Ниже мы приводим выражения только для генерирующих функций  $\Gamma_{-2,m,n}(\alpha, \beta, \gamma)$  и других сингулярных интегралов в форме, подходящей для вычислений:

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{-2,0,0} &= - \frac{(\alpha + \beta) \ln(\alpha + \beta) - (\alpha + \gamma) \ln(\alpha + \gamma)}{\beta^2 - \gamma^2} = \\
 &= - \left[ \frac{\alpha}{\beta + \gamma} + \frac{1}{2} \right] \frac{\ln(\alpha + \beta) - \ln(\alpha + \gamma)}{\beta - \gamma} - \frac{\ln(\alpha + \beta) + \ln(\alpha + \gamma)}{2(\beta + \gamma)}. \quad (54a)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{-3,0,0} &= - \frac{\alpha}{2(\beta + \gamma)} + \left[ \frac{\alpha^2}{2(\beta + \gamma)} + \frac{\alpha}{2} + \frac{\beta^2 + \gamma^2}{4(\beta + \gamma)} \right] \frac{\ln(\alpha + \beta) - \ln(\alpha + \gamma)}{\beta - \gamma} + \\
 &\quad + \left[ \frac{\alpha}{2(\beta + \gamma)} + \frac{1}{4} \right] [\ln(\alpha + \beta) + \ln(\alpha + \gamma)]. \quad (54b)
 \end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
 \Gamma_{-4,00} &= \frac{5\alpha^2}{12(\beta+\gamma)} + \frac{1}{6}\alpha - \\
 &- \frac{1}{12} \left[ \frac{2\alpha^3}{\beta+\gamma} + 3\alpha^2 + 3\alpha \frac{\beta^2 + \gamma^2}{\beta+\gamma} + (\beta^2 - \beta\gamma + \gamma^2) \right] \frac{\ln(\alpha+\beta) - \ln(\alpha+\gamma)}{\beta-\gamma} - \\
 &- \frac{1}{12} \left[ \frac{3\alpha^2}{\beta+\gamma} + 3\alpha + \frac{\beta^2 + \beta\gamma + \gamma^2}{\beta+\gamma} \right] [\ln(\alpha+\beta) + \ln(\alpha+\gamma)]. \quad (54\text{в})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{-2,-1,0} &= \frac{1}{2} \ln^2(\beta+\gamma) + \text{dilog} \left( \frac{\alpha+\beta}{\beta+\gamma} \right) - \frac{(\alpha+\gamma)}{4\gamma} \left\{ \left[ \ln \left( \frac{\alpha+\gamma}{\beta+\gamma} \right) \right]^2 + \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left[ \text{dilog} \left( \frac{\alpha+\beta}{\alpha+\gamma} \right) + \text{dilog} \left( \frac{\alpha+\beta}{\beta+\gamma} \right) \right] + \frac{\pi^2}{3} \right\}. \quad (55\text{а})
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \Gamma_{-3,-1,0} &= \frac{(\alpha+\beta)[1-\ln(\alpha+\beta)]}{2} + \frac{\alpha \ln(\beta+\gamma)[1-\ln(\beta+\gamma)]}{2} - \\
 &- \alpha \text{dilog} \left( \frac{\alpha+\beta}{\beta+\gamma} \right) + \frac{(\alpha+\gamma)^2}{8\gamma} \left\{ \left[ \ln \left( \frac{\alpha+\gamma}{\beta+\gamma} \right) \right]^2 + \right. \\
 &\quad \left. + 2 \left[ \text{dilog} \left( \frac{\alpha+\beta}{\alpha+\gamma} \right) + \text{dilog} \left( \frac{\alpha+\beta}{\beta+\gamma} \right) \right] + \frac{\pi^2}{3} \right\}. \quad (55\text{б})
 \end{aligned}$$

Последние два уравнения используются в расчетах логарифма Бете при вычислении оператора кинетической энергии для базиса, который включает в себя сингулярные члены вида  $r_i^{-1} \cdot e^{-\alpha_i r_1 - \beta_i r_2 - \gamma_i r_{12}}$  в разложении (22).

Чтобы избавиться от полиномов по  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  в числителе сложных выражений, можно использовать следующую рекурсию:

$$(-\partial_\gamma)^n [(\alpha+\gamma)f(\gamma)] = -n(-\partial_\gamma)^{n-1} f(\gamma) + (\alpha+\gamma)(-\partial_\gamma)^n f(\gamma).$$

Составляя таблицы  $\Gamma_{lmn}$  в требуемой области целых параметров  $(l, m, n)$ , затем можно использовать общую схему, описанную в [27, 28], чтобы вычислить матричные элементы для состояний с произвольным полным угловым моментом.

## Приложение Б ДИЛОГАРИФМ

В этом приложении мы представляем удобный способ для вычисления функции дилогарифма с высокой точностью.

Для функции дилогарифма мы используем определение из справочника Абрамовица и Стиган [78]:

$$\operatorname{dilog}(x) = \int_1^x \frac{\ln(t)}{1-t} dt = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{(1-x)^k}{k^2}, \quad \operatorname{dilog}(x) = \frac{\ln x}{1-x}. \quad (56)$$

Дилогарифм удовлетворяет функциональным соотношениям

$$\begin{aligned} \operatorname{dilog}(x) + \operatorname{dilog}(1-x) &= -\ln x \ln(1-x) + \frac{\pi^2}{6}, \\ \operatorname{dilog}(x) + \operatorname{dilog}(x^{-1}) &= -(\ln x)^2/2, \end{aligned} \quad (57)$$

которые позволяют определить функцию на всей комплексной плоскости, если она уже определена на множестве  $D = \{x : |x-1| \leq 1, \operatorname{Re}(x) \geq 1/2\}$ . Затем используется связь с функцией Дебая

$$\operatorname{dilog}(e^{-z}) = \int_0^z \frac{t dt}{e^t - 1}, \quad (58)$$

при этом множество  $D$  отображается в  $|z| < 2\pi$ . Функция Дебая, наконец, может быть вычислена на  $|z| < 2\pi$  с использованием быстро сходящегося степенного ряда

$$\int_0^z \frac{t^n dt}{e^t - 1} = z^n \left[ \frac{1}{n} - \frac{z}{2(n+1)} + \sum_{k=1}^{\infty} \frac{B_{2k} z^{2k}}{(2k+n)(2k)!} \right], \quad (59)$$

где  $B_{2k}$  — числа Бернулли.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Schwartz C.* Further Computations of the He Atom Ground State. arXiv:math-ph/0605018.
2. *Ponomarev L. I.* Muon Catalyzed Fusion // *Contem. Phys.* 1991. V. 31. P. 219.
3. *Yamazaki T., Morita N., Hayano R. S., Widmann E., Eades J.* Antiprotonic Helium // *Phys. Rep.* 2002. V. 366. P. 183.
4. *Hori M. et al.* Two-Photon Laser Spectroscopy of Antiprotonic Helium and the Antiproton-to-Electron Mass Ratio // *Nature.* 2011. V. 475. P. 484.
5. *Hori M. et al.* Buffer-Gas Cooling of Antiprotonic Helium to 1.5 to 1.7 K, and Antiproton-to-Electron Mass Ratio // *Science.* 2016. V. 354. P. 610.
6. *Friar J. L.* The Structure of Light Nuclei and Its Effect on Precise Atomic Measurements // *Can. J. Phys.* 2002. V. 80. P. 1337.
7. *Sick I.* Precise Root-Mean-Square Radius of  ${}^4\text{He}$  // *Phys. Rev. C.* 2008. V. 77. P. 041302.
8. *Krauth J. J. et al.* Measuring the  $\alpha$ -Particle Charge Radius with Muonic Helium-4 Ions // *Nature.* V. 589. P. 527.

9. *Hylleraas E. A.* Uber den Grundzustand des Heliumatoms // *Z. Phys.* 1928. V. 48. P. 469; Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande, sowie des tiefsten Terms von Ortho-Helium // *Z. Phys.* 1929. V. 54. P. 347.
10. *Шифф Л.* Квантовая механика. М.: Иностран. лит., 1959.
11. *Kinoshita T.* Ground State of the Helium Atom // *Phys. Rev.* 1957. V. 105. P. 1490.
12. *Pekeris C. L.* Ground State of Two-Electron Atoms // *Phys. Rev.* 1958. V. 112. P. 1649;  $1^1S$  and  $2^3S$  States of Helium // *Phys. Rev.* 1959. V. 115. P. 1216.
13. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 4. Анализ операторов. М.: Мир, 1982.
14. *Kato T.* Fundamental Properties of Hamiltonian Operators of Schrödinger Type // *Trans. Amer. Math. Soc.* 1951. V. 70. P. 195; On the Existence of Solutions of the Helium Wave Equation // *Ibid.* 1951. V. 70. P. 212.
15. *Stanton R. E., Havriliak S.* // *J. Chem. Phys.* 1984. V. 81. P. 1910; *Goldman S. P.* // *Phys. Rev. A.* 1984. V. 28. P. 2552; *Talman J. D.* // *Phys. Rev. Lett.* 1986. V. 57. P. 1091.
16. *Hill R. N., Krauthausen C.* A Solution to the Problem of Variational Collapse for the One-Particle Dirac Equation // *Phys. Rev. Lett.* 1994. V. 72. P. 2151.
17. *Grant I. P., Quiney H. M.* Rayleigh-Ritz Approximation of the Dirac Operator in Atomic and Molecular Physics // *Phys. Rev. A.* 2000. V. 62. P. 022508.
18. *Bartlett J. H., Gibbons J. J., Dunn C. G.* The Normal Helium Atom // *Phys. Rev.* 1935. V. 47. P. 679.
19. *Bartlett J. H.* The Helium Wave Equation // *Phys. Rev.* 1937. V. 51. P. 661.
20. *Фок В. А.* Об уравнении Шредингера для атома гелия // *Изв. АН СССР. Физика.* 1954. Т. XVIII. С. 161.
21. *Schwartz H. M.* Ritz-Hylleraas Solutions of the Ground State of Two-Electron Atoms Involving Fractional Powers // *Phys. Rev.* 1960. V. 120. P. 483.
22. *Frankowski K., Pekeris C. L.* Logarithmic Terms in the Wave Functions of the Ground State of Two-Electron Atoms // *Phys. Rev.* 1966. V. 146. P. 46.
23. *Schwartz C.* Experiment and Theory in Computations of the He Atom Ground State // *Intern. J. Mod. Phys. E.* 2006. V. 15. P. 877; arXiv:physics/0208004.
24. *Kolos W., Roothaan C. C. J., Sack R. A.* Ground State of Systems of Three Particles with Coulomb Interaction // *Rev. Mod. Phys.* 1960. V. 32. P. 178.
25. *Варишолович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. М.: Наука, 1975.
26. *Sack R. A., Roothaan C. C. J., Kolos W.* Recursive Evaluation of Some Atomic Integrals // *J. Math. Phys.* 1967. V. 8. P. 1093.
27. *Drake G. W. F.* Angular Integrals and Radial Recurrence Relations for Two-Electron Matrix Elements in Hylleraas Coordinates // *Phys. Rev. A.* 1978. V. 18. P. 820.
28. *Эфрос В. Д.* Задача трех тел. Обобщенное экспоненциальное разложение // *ЖЭТФ.* 1985. Т. 90. С. 10.
29. *Halpern A.*  $(\mu p)^+$  Molecule; Muon Capture in Hydrogen // *Phys. Rev. Lett.* 1964. V. 13. P. 660.
30. *Виницкий С. И., Коробов В. И., Пузынин И. В.* Вариационное вычисление уровней энергии  $\mu$ -мезомолекул изотопов водорода // *ЖЭТФ.* 1986. Т. 91. С. 705.

31. *Korobov V.I., Puzynin I.V., Vinitzky S.I.* Bound States of Hydrogen Mesic Molecular Ions: Variational Approach. *Muon Catalyzed Fusion* // 1992. V.7. P. 63–80.
32. *Виницкий С. И., Коробов В. И., Пузынин И. В.* Вариационный расчет характеристик слабосвязанных вращательно-колебательных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$  // Краткие сообщ. ОИЯИ. 1986. № 19-86. С. 40–44.
33. *Виницкий С. И., Коробов В. И., Пузынин И. В.* Уточнение уровней энергии слабосвязанных вращательно-колебательных состояний мезомолекул  $dd\mu$  и  $dt\mu$  // Краткие сообщ. ОИЯИ. 1987. № 3(23)-87. С. 24–28.
34. *Korobov V.I., Puzynin I.V., Vinitzky S.I.* A Variational Calculation of Weakly Bound Rotational-Vibrational States of the Mesic Molecules  $dd\mu$  and  $dt\mu$  // *Phys. Lett. B.* 1987. V. 196. P. 272.
35. *Kato T.* On the Eigenfunctions of Many-Particle Systems in Quantum Mechanics // *Commun. Pure Appl. Math.* 1957. V. 10. P. 151.
36. *Kukulín V.I., Krasnopol'sky V.M.* A Stochastic Variational Method for Few-Body Systems // *J. Phys. G: Nucl. Phys.* 1977. V. 3. P. 795.
37. *Varga K., Suzuki Y.* Precise Solution of Few-Body Problems with the Stochastic Variational Method on a Correlated Gaussian Basis // *Phys. Rev. C.* 1995. V. 52. P. 2885.
38. *Mitroj J., Bubín S., Horiuchi W., Suzuki Ya., Adamowicz L., Cencek W., Szalewicz K., Komasa J., Blume D., Varga K.* Theory and Application of Explicitly Correlated Gaussians // *Rev. Mod. Phys.* 2013. V. 85. P. 693.
39. *Carter B.P.* Muonic Molecules and Nucleon–Deuteron Capture // *Phys. Rev.* 1966. V. 141. P. 863.
40. *Rosenthal C.M.* The Reduction of the Multi-Dimensional Schrödinger Equation to a One-Dimensional Integral Equation // *Chem. Phys. Lett.* 1971. V. 10. P. 381.
41. *Somorjai R.L., Power J.D.* The Dimensional and Numerical Equivalence of the Space-Filling-Curve Approach and Multi-Dimensional Integration Methods for Integral-Transform Trial Functions // *Chem. Phys. Lett.* 1972. V. 12. P. 502; *Power J.D., Somorjai R.L.* Upper and Lower Bounds to the Eigenvalues of Two-Electron Atoms: Proof That the  $2^{1,3}S$  States of  $H^-$  Are Not Bound // *Phys. Rev. A.* 1972. V. 5. P. 2401.
42. *Griffin J.J., Wheeler J.A.* Collective Motions in Nuclei by the Method of Generator Coordinates // *Phys. Rev.* 1957. V. 108. P. 311.
43. *Thakkar A.J., Smith V.H., Jr.* Compact and Accurate Integral-Transform Wave Functions. I. The  $1^1S$  State of the Helium-Like Ions from  $H^-$  through  $Mg^{10+}$  // *Phys. Rev. A.* 1977. V. 15. P. 1.
44. *Alexander S.A., Monkhorst H.J.* High-Accuracy Calculation of Muonic Molecules Using Random-Tempered Basis Sets // *Phys. Rev. A.* 1988. V. 38. P. 26.
45. *Ребане Т. К., Юсупов О. Н.* Комплексные экспоненциальные базисные волновые функции в кулоновской задаче трех тел // *ЖЭТФ.* 1990. Т. 98. С. 1870.
46. *Korobov V.I., Bakalov D., Monkhorst H.J.* Variational Expansion for the Antiprotonic Helium Atoms // *Phys. Rev. A.* 1999. V. 59. P. R919.
47. *Frolov A.M., Smith V.H., Jr.* Universal Variational Expansion for Three-Body Systems // *J. Phys. B.* 1995. V. 28. P. L449.

48. *Korobov V.I.* Coulomb Three-Body Bound-State Problem: Variational Calculations of Nonrelativistic Energies // *Phys. Rev. A.* 2000. V. 61. P. 064503.
49. *Korobov V.* Nonrelativistic Ionization Energy for the Helium Ground State // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 66. P. 024501.
50. *Bailey D.H.* Multiprecision Translation and Execution of Fortran Programs // *ACM Trans. Math. Software.* 1993. V. 19. P. 288; A Fortran 90-Based Multiprecision System. 1995. V. 21. P. 379.
51. *Goldman S.P.* Uncoupling Correlated Calculations in Atomic Physics: Very High Accuracy and Ease // *Phys. Rev. A.* 1998. V. 57. P. R677.
52. *Grémaud B., Delande D., Billy N.* Highly Accurate Calculation of the Energy Levels of the  $H_2^+$  Molecular Ion // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1998. V. 31. P. 383.
53. *Ребане Т.К., Филинский А.В.* Энергии симметричных трионов // *Ядерная физика.* 1997. Т. 60. С. 1816.
54. *Moss R.E.* Energies of Low-Lying Vibration-Rotation Levels of  $H_2^+$  and Its Isotopomers // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1999. V. 32. P. L89.
55. *Drake G.W.F., Zong-Chao Yan.* Energies and Relativistic Corrections for the Rydberg States of Helium: Variational Results and Asymptotic Analysis // *Phys. Rev. A.* 1992. V. 46. P. 2378.
56. *Frolov A.M.* Bound-State Properties of the Positronium Negative Ion  $Ps^-$  // *Phys. Rev. A.* 1999. V. 60. P. 2834.
57. *Kino Y., Kamimura M., Kudo H.* High-Accuracy 3-Body Coupled-Channel Calculation of Metastable States of Antiprotonic Helium Atoms // *Nucl. Phys. A.* 1998. V. 631. P. 649.
58. *Moss R.E.* Calculations for the Vibration-Rotation Levels of  $H_2^+$  in Its Ground and First Excited Electronic States // *Mol. Phys.* 1993. V. 80. P. 1541.
59. *Nakashima H., Nakatsuji H.* Solving the Schrödinger Equation for Helium Atom and Its Isoelectronic Ions with the Free Iterative Complement Interaction (ICI) Method // *J. Chem. Phys.* 2007. V. 127. P. 224104.
60. *Aznabaev D.T., Bekbaev A.K., Korobov V.I.* Nonrelativistic Energy Levels of Helium Atoms // *Phys. Rev. A.* 2018. V. 98. P. 012510.
61. *Li H., Wu J., Zhou B.-L., Zhu J.-M., Yan Z.-C.* Calculations of Energies of the Hydrogen Molecular Ion // *Phys. Rev. A.* 2007. V. 75. P. 012504.
62. *Hijikata Y., Nakashima H., Nakatsuji H.* Solving Non-Born-Oppenheimer Schrödinger Equation for Hydrogen Molecular Ion and Its Isotopomers Using the Free Complement Method // *J. Chem. Phys.* 2009. V. 130. P. 024102.
63. *Ye Ning, Zong-Chao Yan.* Variational Energy Bounds for the Hydrogen Molecular Ion // *Phys. Rev. A.* 2014. V. 90. P. 032516.
64. *Aguilar J., Combes J.M.* A Class of Analytic Perturbations for One-Body Schrödinger Hamiltonians // *Commun. Math. Phys.* 1971. V. 22. P. 269.
65. *Simon B.* Resonances in  $n$ -Body Quantum Systems with Dilatation Analytic Potentials and the Foundations of Time-Dependent Perturbation Theory // *Ann. Math.* 1973. V. 97. P. 247.
66. *Balslev E., Combes J.M.* Spectral Properties of Many-Body Schrödinger Operators with Dilatation-Analytic Interactions // *Commun. Math. Phys.* 1971. V. 22. P. 280.
67. *Ho Y.K.* The Method of Complex Coordinate Rotation and Its Applications to Atomic Collision Processes // *Phys. Rep.* 1983. V. 99. P. 1.

68. *Cycon H. L., Froese R. G., Kirsch W., Simon B.* Schrödinger Operators with Application to Quantum Mechanics and Global Geometry. Springer-Verlag, 1987;  
*Цикон Х., Фрёзе Р., Кирш В., Саймон Б.* Операторы Шредингера с приложениями к квантовой механике и глобальной геометрии. М.: Мир, 1990.
69. *Korobov V. I.* Coulomb Predissociation Rates of  $\text{HeH}\mu$  Molecular Ions // Hyperfine Interactions. 1996. V. 101/102. P. 329–332.
70. *Feshbach H.* A Unified Theory of Nuclear Reactions // Ann. Phys. (N.Y.). 1958. V. 5. P. 357; *ibid.* 1962. V. 19. P. 287.
71. *Korobov V. I.* Bethe Logarithm for Resonant States: Antiprotonic Helium // Phys. Rev. A. 2014. V. 89. P. 014501.
72. *Drachman R. J.* A New Global Operator for Two-Particle Delta Functions // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1981. V. 14. P. 2733.
73. *Pachucki K., Cencek W., Komasa J.* On the Acceleration of the Convergence of Singular Operators in Gaussian Basis Sets // J. Chem. Phys. 2005. V. 122. P. 184101.
74. *Bogdanova L. N., Korobov V. I., Ponomarev L. I.* Nuclear Fusion Rates from Resonant States of  ${}^3\text{HeH}\mu$  Molecular Ion // Hyperfine Interactions. 1999. V. 118. P. 183.
75. *Пономарев Л. И., Веницкий С. И.* Адиабатическое представление в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием // ЭЧАЯ. 1982. Т. 13. С. 1336.
76. *Froelich P., Alexander S. A.* Structure and Dynamics of the Doubly Excited Helium Atom // Phys. Rev. A. 1990. V. 42. P. 2550.
77. *Korobov V. I.* Regular and Singular Integrals for Relativistic and QED Matrix Elements of the Coulomb Three-Body Problem for an Exponential Basis Set // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 2002. V. 35. P. 1959.
78. *Abramowitz M., Stegun I. A.* Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover Ed., 1980.