P5-2007-37

В. В. Пупышев

СТРОЕНИЕ РЕГУЛЯРНЫХ РЕШЕНИЙ УРАВНЕНИЙ ШРЕДИНГЕРА И ФАДДЕЕВА В ПРЕДЕЛЕ ЛИНЕЙНОЙ КОНФИГУРАЦИИ ТРЕХ ЧАСТИЦ

Направлено в журнал «Теоретическая и математическая физика»

Пупышев В. В. P5-2007-37

Строение регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева в пределе линейной конфигурации трех частиц

Исследуются шестимерные уравнения Шредингера и Фаддеева для системы трех частиц с центральными парными взаимодействиями более общего вида, чем кулоновские. Регулярные общее и частные физические решения таких уравнений представлены бесконечными рядами по целым степеням расстояния от одной частицы до центра масс двух других частиц и искомым функциям других трехчастичных координат. Построение таких функций в угловых базисах, образованных сферическими и бисферическими гармониками или симметризованными D-функциями Вигнера, сведено к решению простых алгебраических рекуррентных уравнений. Для проекций физических решений уравнений Шредингера и Фаддеева на угловые базисные функции выведены граничные условия в пределе линейной конфигурации трех частиц.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики им. Н. Н. Боголюбова ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2007

Pupyshev V. V. P5-2007-37

Structure of Regular Solutions to the Schrödinger and Faddeev Equations in the Limit of the Three-Body Linear Configuration

The six-dimensional Schrödinger and Faddeev equations for a three-body system with two-body central potentials of a more general type than the Coulomb ones are studied. The regular general and particular physical solutions of these equations are represented as infinite series in integer powers of the distance between one particle and the center of mass of two other particles and the sought functions of other three-particle coordinates. In the angular basis, formed by the spherical and bispherical harmonics or the symmetrized Wigner D-functions, the construction of these functions is reduced to solving simple algebraic recurrence equations. For the projections of the physical solutions to the Schrödinger and Faddeev equations onto angular basic functions the boundary conditions in the limit of the linear three-body configuration are derived.

The investigation has been performed at the Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2007

ВВЕДЕНИЕ

Начнем с основных определений. Используем систему единиц, в которой заряд e электрона e^- и константа Планка $\hbar$ равны единице. В трехмерном координатном пространстве $\mathcal{R}^3$ фиксируем декартову систему координат S с ортами $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2$ и $\hat{\mathbf{e}}_3$ 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 $\mathbf{y}_k$ — приведенные векторы Якоби [1]:

$$\begin{aligned}
\mathbf{x}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{ij}}\,(\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i)\,, \quad \mu_{ij} \equiv \frac{m_i m_j}{m_i + m_j}\,, \\
\mathbf{y}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{k,ij}}\left(\frac{m_i\mathbf{a}_i + m_j\mathbf{a}_j}{m_i + m_j} - \mathbf{a}_k\right), \qquad \mu_{k,ij} \equiv \frac{m_k\,(m_i + m_j)}{m_1 + m_2 + m_3}\,,
\end{aligned} \tag{1}$$

где индексы i, j, k образуют циклическую перестановку триады индексов $1, 2, 3$: индекс i переходит в k, j — в i, а k — в j. В шестимерном координатном пространстве $\mathcal{R}^6$ каждой $(k = 1, 2, 3)$ паре векторов $\mathbf{x}_k$ и $\mathbf{y}_k$ сопоставим вектор $\mathbf{r}_k = (\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k)$. Выберем пару $\{p_j, p_k\}$ частиц p_j и p_k. Для этой пары линейной конфигурацией трех частиц (осевым вырождением) называем конфигурацию, в которой все частицы лежат на одной прямой (оси) $\mathcal{L}$, но частицы p_j и p_k отделены и от частицы p_i, и друг от друга: $\mathcal{L} \equiv \{x_i > 0,\, y_i = 0\}$. Под малой окрестностью $\mathcal{F}$ прямой $\mathcal{L}$ подразумеваем область, в которой две частицы p_j и p_k отделены друг от друга $(x_i > 0)$, а частица p_i близка $(y_i \ll 1)$ к центру масс этих двух частиц, лежащих на прямой $\mathcal{L}$.

Пусть Ψ — общее регулярное $(|\Psi(\mathbf{r}_i)| < \infty, \forall \mathbf{r}_i)$ решение уравнения Шредингера для системы $\{p_1, p_2, p_3\}$ в $\mathcal{R}^6$:

$$(H - E)\,\Psi = 0\,, \quad H = H_0 + V\,, \quad V \equiv \sum_{k=1}^{3} V_k\,, \tag{2}$$

где H_0 — свободный гамильтониан, E — полная энергия, а V_k — взаимодействие между частицами p_i и p_j. Явный вид решения Ψ, как правило, неизвестен. Поэтому судить о его поведении (строении) в физически интересных областях пространства $\mathcal{R}^6$ можно лишь по асимптотическим разложениям.

Вывод и анализ асимптотических разложений общего регулярного решения Ψ представляются теоретически важными и интересными, потому что, зная такие разложения, можно легко найти разложение любого регулярного частного решения. Например, трехчастичной волновой функции Ψ^ε, обладающей, в отличие от Ψ, полным набором ε сохраняющихся квантовых чисел. Вывод разложения для Ψ^ε сводится к проектированию найденного разложения для Ψ на базисы из собственных функций всех операторов, коммутирующих с полным гамильтонианом H.

Стоит отметить, что замена функции Ψ^ε в уравнениях Фаддеева [1–3]

$$(H_0 - E)\,\Psi_k^\varepsilon = -V_k\,\Psi^\varepsilon\,, \quad \Psi^\varepsilon = \Psi_1^\varepsilon + \Psi_2^\varepsilon + \Psi_3 \tag{3}$$

ее найденным разложением является ключевой в предложенном ниже выводе соответсвующего разложения фаддеевской компоненты Ψ_i^ε.

В случае центральных парных взаимодействий, например кулоновских

$$V_k(x_k(a_{ij})) = \frac{z_i z_j}{a_{ij}}\,, \quad V_k(x_k) = \frac{q_k}{x_k}\,, \quad q_k \equiv z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}}\,, \quad k = 1,2,3, \tag{4}$$

или взаимодействий более общего вида

$$V_k(x_k) = \frac{q_k}{x_k} + \bar V_k(x_k)\,, \quad \bar V_k(x_k) = \sum_{n=0}^{\infty} x_k^n\,\bar V_{kn},\ \bar V_{kn} = \mathrm{const}\,,\ k = 1,2,3, \tag{5}$$

с гамильтонианом H коммутируют сам H, квадрат оператора полного углового момента $\mathbf{l}$, его компонента l_3 и оператор P_r инверсии $\mathbf{r}_i \to -\mathbf{r}_i$. Набор ε состоит из собственных чисел этих операторов: $\varepsilon \equiv \{E, \ell, m, \sigma\}$. В качестве соответствующих собственных функций часто используются бисферические гармоники $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$ и симметризованные линейные комбинации D-функций Вигнера $D_{mm'}^\ell$. Бисферические гармоники выражаются через коэффициенты Клебша–Гордана $C_{a\alpha b\beta}^{\ell m}$ и сферические функции

$$Y_{fe}(\hat a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\exp(-ie\varphi_a)\,\Theta_{fe}(\cos\theta_a)\,, \quad \hat a \equiv (\theta_a, \varphi_a)\,, \quad \hat a = \hat x_i, \hat y_i\,, \tag{6}$$

формулами [4]

$$\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat x_i, \hat y_i) \equiv \sum_{\alpha=-a}^{a} C_{a\alpha b\beta}^{\ell m}\, Y_{a\alpha}(\hat y_i)\, Y_{b\beta}(\hat x_i)\,, \quad \mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{l}\,, (-1)^{a+b} = \sigma\,, \tag{7}$$

а симметризованные D-функции, называемые далее D^σ-функциями, можно представить в виде [5]:

$$D_{mm'}^{\ell\sigma}(\omega^t) = \left[\frac{2\ell+1}{16\pi^2(1+\delta_{m'0})}\right]^{1/2} \left[D_{mm'}^\ell(\omega^t) + \sigma(-1)^{\ell-m'} D_{m,-m'}^\ell(\omega^t)\right]\,, \tag{8}$$

где $\omega^t = (\alpha^t, \beta^t, \gamma^t)$ — набор углов Эйлера, определяющих ориентацию выбранной «подвижной» системы координат S^t относительно системы S.

Знание асимптотических разложений волновой функции Ψ^ε необходимо для вычисления с высокой точностью ее приближения $\tilde{\Psi}^\varepsilon$ и, следовательно, для последующего достоверного определения всех наблюдаемых величин. Дело в том, что учет всех особенностей поведения искомого решения дифференциального уравнения (в нашем случае Ψ^ε) улучшает поточечную сходимость любого численного метода [6].

В подходе Ритца [6, 7], в вариационно-разностных и проекционно-сеточных схемах [6] и в методе сплайн-коллокаций [7, 8], задачу поточечного приближения в $\mathcal{F}$ можно решить, подчинив частные производные искомой функции $\tilde{\Psi}^\varepsilon$ или ее проекций на базисы (6)–(8) тем же линейным граничным условиям (связям) на прямой $\mathcal{L}$, которым удовлетворяют частные производные точного решения Ψ^ε уравнения Шредингера (2) или же соответствующие проекции этого решения. Пример такой связи — соотношение

$$\sum_{n=0}^{n'<\infty} A_n(\mathbf{x}_i, \hat{y}_i)\, \partial_{y_i}^n \Psi^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = 0\,, \quad (x_i, y_i) \in \mathcal{L}\,, \tag{9}$$

где A_n — известные функции или линейные комбинации известных функций и операторов частных производных по аргументам $\mathbf{x}_i$ и $\hat{y}_i$.

Использование связей типа (9) при сплайн-аппроксимации фаддеевских компонент — простой и перспективный способ улучшения поточечной сходимости вычисляемого решения уравнений Фаддеева к точному в области $\mathcal{F}$.

Знание явных разложений волновых функций и их фаддеевских компонент в этой области представляется особо полезным для квантовомеханического анализа и расчета с прецизионной точностью свойств двух довольно широких классов реальных трехчастичных систем. К первому и давно известному в атомной физике [9] классу относятся трехчастичные системы, состоящие из иона и двух медленных электронов и образовавшиеся в результате однократной ионизации атома или иона электроном. Конфигурация таких систем близка к линейной. Этот факт впервые доказан в работе [10]. Второй класс — хорошо известный в квантовой химии [11, 12] класс линейных трехатомных молекул. Его образуют все трехатомные sp-гибридизированные молекулы. Молекулы CO2, HCN и BeCl2 являются таковыми.

В силу перечисленных выше причин вывод и анализ асимптотических в пределе линейной конфигурации трех частиц разложений регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева представляются интересными и важными как с теоретической, так и с прикладной точек зрения.

Однако в этом пределе для таких решений не известны не только асимптотические, но даже простые формальные разложения в виде бесконечных рядов по целым степеням расстояния от одной частицы до центра масс двух других частиц и искомым функциям других трехчастичных координат.

Основная цель настоящей работы — восполнить этот пробел построением и анализом формальных рядов указанного выше типа для регулярных решений уравнений Шредингера (2) и Фаддеева (3) с центральными парными взаимодействиями более общего вида (5), чем кулоновские потенциалы (4).

Следует отметить, что в настоящей работе асимптотическая сходимость построенных рядов не доказана, но предполагается: явными асимптотиками рядов считаются подсуммы их нескольких наиболее медленно убывающих слагаемых, а из таких подсумм выводятся связи типа (9).

1. РЯДЫ ПАРНЫХ И ПОЛНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Пусть некулоновские слагаемые $\bar{V}_k$, $k \neq i$, парных взаимодействий (5) — аналитические функции. Всюду далее полагается

$$x \equiv x_i > 0, \quad y \equiv y_i \to 0\,, \quad u \equiv \cos\theta = (\mathbf{x}\cdot\mathbf{y})/(xy)\,, \quad k \neq i\,, \quad q \equiv q_i$$

и используется координатное представление $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y}| \equiv \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i|$. Потенциал $V_i(x)$ не зависит от y, поэтому никакое его разложение не требуется.

Так как векторы Якоби (1) кинематически связаны [13]:

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_k \\ \mathbf{y}_k \end{pmatrix} = -\begin{pmatrix} +c_{ki} & s_{ki} \\ -s_{ki} & c_{ki} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \mathbf{x}_i \\ \mathbf{y}_i \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} c_{ki} \\ s_{ki} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \cos\gamma_{ki} \\ \sin\gamma_{ki} \end{pmatrix},$$

$$\gamma_{ki} \in [-\pi/2, /\pi/2],$$

где γ_{ki} — кинематический угол, зависящий только от отношений масс частиц, то x_k — функция аргументов x, y, u:

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y}|x_k\rangle = x_k(x,y,u) = \frac{c_{ki}\,x}{g(v)},\ g(v) \equiv (1-2uv+v^2)^{-1/2},\ v \equiv -\frac{y s_{ki}}{c_{ki}x}, \quad (10)$$

а функция $1/x_k$ пропорциональна производящей функции $g(v)$ для полиномов Лежандра $P_n(u)$ [4]. Поэтому слагаемые q_k/x_k сумм (5) — ряды типа

$$\frac{q_k}{x_k} = \frac{q_k}{c_{ki}x}\sum_{n=0}^{\infty}\left(-\frac{s_{ki}\,y}{c_{ki}\,x}\right)^n P_n(u)\,, \quad k \neq i\,, \quad (11)$$

Далее, из (10) и (11) следует формула дифференцирования

$$\partial_y^n\, x_k\big|_{y=0} = s_{ki}\ \frac{n!}{2n-1}\ \left(-\frac{s_{ki}}{c_{ki}\,x}\right)^{n-1}\left[P_n(u) - P_{n-2}(u)\right], \quad n = 0, 1, \ldots$$

Благодаря ей каждый член T_p ряда Тейлора функции $\bar{V}_k(x_k(x,y,u))$ с центром в точке $y=0$ — сумма по полиномам $P_s(u)$ с индексом $s \le p$:

$$T_p(y,u) = \frac{y^p}{p!}\,\partial_y^p \bar{V}_k(x_k(x,y,u))\Big|_{y=0} = \frac{y^p}{p!}\sum_{s=0}^{p} \bar{V}_k^{ps}(c_{ki}\,x)\,P_s(u)\,,$$

Если P_y и P_u — операторы инверсии $y \to -y$ и $u \to -u$, то

$$P_u P_s(u) = (-1)^s P_s(u),\;\; P_y y^p = (-1)^p y^p,\;\; P_y P_u y_k = y_k,\;\; (1 - P_y P_u)\bar{V}_k(x_k) = 0.$$

Из этих соотношений и линейной независимости функций $x^0, x^1, \ldots$ следует, что $P_y P_u T_p = T_p$ для всех p. Поэтому ряд Тейлора для $\bar{V}_k$ сводится к сумме по индексам p и s, таким, что $p+s$ — четное число:

$$\bar{V}_k(x_k(x,y,u)) = \sum_{p=0}^{\infty} y^p \sum_{s=0}^{p} \bar{V}_k^{ps}(c_{ki}\,x)\,P_s(u)\,, \quad (-1)^{p+s} = 1\,. \qquad (12)$$

Вследствие представления (5) для $\bar{V}_i$ и представлений (11), (12) полное взаимодействие $V = V_1 + V_2 + V_3$ раскладывается в двойной ряд:

$$\begin{aligned} V(x,y,u) &= V(x,-y,-u) = V^{00}(x) + \sum_{p=1}^{\infty} y^p \sum_{s=0}^{p} V^{ps}(x)\,P_s(u)\,, \qquad (13)\\ V^{ps}(x) &\equiv \delta_{ps}\sum_{k\ne i}\frac{q_k}{c_{ki}x}\left(-\frac{s_{ki}}{c_{ki}x}\right)^p + \sum_{k\ne i}\bar{V}_k^{ps}(x)\,, \quad (-1)^{p+s} = 0\,, \end{aligned}$$

а функции $V^{ps}(x)$, $p \le 2$, вычисляются по формулам

$$\begin{aligned} V^{00}(x) &= V_i(x) + \sum_{k\ne i}\left[\frac{q_k}{c_{ki}\,x} + \bar{V}_k(c_{ki}x)\right]\,,\\ V^{11}(x) &= \sum_{k\ne i} s_{ki}\left[\bar{V}_k' - \frac{q_k}{(c_{ki}\,x)^2}\right]\,,\\ V^{20}(x) &= \frac{1}{6}\sum_{k\ne i} s_{ki}^2\left[\bar{V}_k'' + \frac{2\bar{V}_k'}{c_{ki}\,x}\right]\,,\\ V^{22}(x) &= \frac{1}{3}\sum_{k\ne i} s_{ki}^2\left[\bar{V}_k'' - \frac{\bar{V}_k'}{c_{ki}\,x} + \frac{3q_k}{(c_{ki}x)^3}\right]\,, \end{aligned}$$

где $\bar{V}_k'$ и $\bar{V}_k''$ — первая и вторая производные функции $\bar{V}_k(x_k)$ по ее аргументу x_k в точке $x_k = |c_{ki}|\,x$, т. е. при $y=0$.

Для проецирования ряда (13) потребуются матричные элементы полинома P_s в базисах (6) и (7). Если использовать известные формулы [4]

$$\begin{aligned} P_s(u) &= [4\pi/(2s+1)] \sum_{\alpha=-s}^{s} Y^*_{s\alpha}(\hat{x})\, Y_{s\alpha}(\hat{y}) \,, \\ \langle Y_{c\gamma}(\hat{y})|Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{y})\rangle &= (-1)^a \, [(2a+1)/(4\pi)]^{1/2}\, C^{b0}_{a0c0}\, C^{c\gamma}_{a\alpha b\beta} \end{aligned}$$

и представление (6), то нетрудно получить искомые выражения:

$$\langle Y_{a\alpha}(\hat{y})|P_s(u)|Y_{a'\alpha'}(\hat{y})\rangle = (-1)^s \; [\, 4\pi/(2s+1)\,]^{1/2}\; C^{a'0}_{s0a0}\, C^{a\alpha}_{s\beta a\alpha'}\, Y^*_{s\beta}(\hat{x}) \,, \quad (14)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})|P_s(u)|\mathcal{Y}^{\ell m}_{a'b'}(\hat{x},\hat{y})\rangle &= (-1)^{a+b-\ell+s}\, C^{a0}_{s0a'0}\, C^{b0}_{s0b'0} \times \\ &\times \; [\,(2a'+1)(2b'+1)]^{1/2} \left\{ \begin{array}{ccc} a & a' & s \\ b' & b & \ell \end{array} \right\} , \end{aligned} \quad (15)$$

$$\langle \Theta_{a\alpha}(u)|P_s(u)|\Theta_{a'\alpha'}(u)\rangle = \delta_{\alpha\alpha'}\, (-1)^s \; [(2s+1)/2]^{1/2}\; C^{a'0}_{s0a0}\, C^{a\alpha}_{s0a'\alpha} \quad (16)$$

и убедиться в том, что их правые части равны нулю, если не выполнено условие треугольника $\mathbf{a} = \mathbf{a}' + \mathbf{s}$ или если $(a+s-a')$ — нечетное число.

2. СТРОЕНИЕ ОБЩЕГО РЕГУЛЯРНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Докажем, что общее регулярное решение Ψ уравнения Шредингера (2) с взаимодействиями (5) — формальный ряд по целым степеням y:

$$\Psi(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n \Psi^n(\mathbf{x},\hat{y}) \,, \quad (17)$$

а каждая компонента Ψ^n этого ряда ортогональна любой сферической гармонике $Y_{a\alpha}(\hat{x})$ с $a > n$, т. е. представима в виде конечного сферического ряда с не нулевыми, вообще говоря, сферическими компонентами $\Psi^n_{a\alpha}$, $a \le n$:

$$\Psi^n(\mathbf{x},\hat{y}) = \sum_{a=0}^{n} \sum_{\alpha=-a}^{a} \Psi^n_{a\alpha}(\mathbf{x})\, Y_{a\alpha}(\hat{y}) \,, \quad \Psi^n_{a\alpha}(\mathbf{x}) \equiv \langle Y_{a\alpha}(\hat{y})|\Psi(\mathbf{x},\hat{y})\rangle \,. \quad (18)$$

Вследствие разложения (13) для гамильтониана H верно представление

$$H(\mathbf{x},\mathbf{y}) = -\partial^2_y - \frac{2}{y}\,\partial_y + \frac{\mathbf{l}^2_y}{y^2} + \sum_{p=1}^{\infty} y^p \sum_{s=0}^{p} V^{ps}(x)\, P_s(u) + h(\mathbf{x}) + E \,, \quad (19)$$

в котором

$$h(\mathbf{x}) \equiv -\partial_x^2 - \frac{2}{x}\,\partial_x + \frac{\mathbf{l}_x^2}{x^2} + V^{00}(x) - E\,,\ \ \mathbf{l}_x \equiv -i\,\mathbf{x}\times\nabla_x,\ \mathbf{l}_y \equiv -i\,\mathbf{y}\times\nabla_y\,, \quad (20)$$

а уравнение Шредингера (2) заменой его искомого решения Ψ исследуемым рядом (17) сводится к рекуррентной по индексу n цепочке уравнений:

$$\mathbf{l}_y^2\,\Psi^0(\mathbf{x},\hat{y}) = 0\,, \quad (21)$$

$$\left(\mathbf{l}_y^2 - 2\right)\,\Psi^1(\mathbf{x},\hat{y}) = 0\,, \quad (22)$$

$$\left[\,\mathbf{l}_y^2 - (n+2)(n+3)\,\right]\,\Psi^{n+2}(\mathbf{x},\hat{y}) = -h(\mathbf{x})\,\Psi^n(\mathbf{x},\hat{y}) -$$
$$V^{11}(x)\,P_1(u)\,\Psi^{n-1}(\mathbf{x},\hat{y}) - \sum_{p=2}^{n}\sum_{s=0}^{p} V^{ps}(x)\,P_s(u)\,\Psi^{n-p}(\mathbf{x},\hat{y})\,,$$
$$n = 0, 1, \ldots \quad (23)$$

Поэтому доказательство существования представления (17) сводится к доказательству разрешимости такой цепочки. Согласно теории дифференциальных уравнений уравнение для Ψ^{n+2} с данным $n \geq -2$ разрешимо тогда и только тогда, когда его правая часть ортогональна общему решению соответствующего однородного уравнения, т. е. всем гармоникам $Y_{n+2,\alpha}(\hat{y})$ с $|\alpha| \leq n+2$. Докажем такую ортогональность по индукции.

Общее регулярное решение уравнения (21) — произведение сферической гармоники $Y_{00}(\hat{y})$ и, вообще говоря, произвольной функции Ψ^0_{00} аргумента $\mathbf{x}$:

$$\Psi^0(\mathbf{x},\hat{y}) = \Psi^0_{00}(\mathbf{x})\,Y_{00}(\hat{y})\,. \quad (24)$$

Общее регулярное решение уравнения (22) — сумма

$$\Psi^1(\mathbf{x},\hat{y}) = \sum_{\alpha=-1}^{1}\,\Psi^1_{1\alpha}(\mathbf{x})\,Y_{1\alpha}(\hat{y})\,, \quad (25)$$

где $\Psi^1_{1\alpha}(\mathbf{x})$, $\alpha = 0, \pm 1$, — произвольные функции.

Итак, решения Ψ^0 и Ψ^1 являются сферическими рядами (18) с произвольными сферическими компонентами Ψ^0_{00} и $\Psi^1_{1\alpha}$. Следовательно, первый этап доказательства по индукции выполнен. Перейдем ко второму этапу. Предположим, что при некотором n все функции $\Psi^{n'}$ с $n' \leq n+1$ — известные конечные суммы (18), но искомое решение Ψ^{n+2}, вообще говоря, бесконечный сферический ряд. В уравнении (23) заменим все функции $\Psi^{n'}$ с $n' \leq n+2$ их рядами. С помощью (14) спроецируем получившееся уравнение на сферический базис (6). В итоге для искомых проекций $\Psi^{n+2}_{a\alpha}(\mathbf{x})$ получатся алгебраические и не зацепляющиеся ни по индексу $a = 0, 1, \ldots$, ни по индексу $\alpha = -a, \ldots, a$ уравнения:

$$[\, a(a+1) - (n+2)(n+3)\,]\ \Psi^{n+2}_{a\alpha}(\mathbf{x}) = -h(\mathbf{x})\, \Psi^{n}_{a\alpha}(\mathbf{x}) - \\ - \sum_{p=1}^{n} \sum_{s=0}^{p} (-1)^s [4\pi/(2s+1)]^{1/2}\, V^{ps}(x) \times \\ \times \sum_{a'=0}^{n-p} \sum_{\alpha'=-a'}^{a'} C^{a'0}_{s0a0}\, C^{a\alpha}_{s\beta a\alpha'}\, Y^{*}_{s\beta}(\hat{x})\, \Psi^{n-p}_{a'\alpha'}(\mathbf{x})\,, \quad (26)$$

где $n = -2, -1, \ldots$, по определению $\Psi^{n}_{a\alpha} \equiv 0$ при $n < 0$ и, кроме этого, $V^{ps} \equiv 0$, если $(p+s)$ нечетное а, $C^{a'0}_{s0a0} = 0$, если $(s + a - a')$ нечетное.

В полученных уравнениях $\alpha' \leq n - p$, а $s \leq p$, следовательно, $\alpha' + s \leq n$, и поэтому при $a > n$ все коэффициенты $C^{\alpha'0}_{s0\alpha0}$, а значит и суммы по индексам a' и α', обращаются в нуль. Следовательно, при $a > n+2$, когда по предположению индукции $\Psi^{n+1}_{a\alpha}, \Psi^{n}_{a\alpha} = 0$, уравнения (26) становятся однородными и имеют только тривиальные решения: $\Psi^{n+2}_{a\alpha} \equiv 0$, $|\alpha| \leq a$. При $a = n+2$ и любом $\alpha = -a, \ldots, a$ эти уравнения – тождества типа $0\,\Psi^{n+2}_{n+2,\alpha} = 0$. Им подчиняются произвольные функции $\Psi^{n+2}_{n+2,\alpha}(\mathbf{x})$. При $a \leq n+1$ исследуемые уравнения (26) всегда имеют нетривиальные решения $\Psi^{n+2}_{a\alpha}$, $|\alpha| \leq a$, которые однозначно выражаются через произвольные функции $\Psi^{n+2}_{n+2,\alpha}(\mathbf{x})$. Поэтому Ψ^{n+2} – конечная сумма типа (18). Следовательно, вся цепочка исходных уравнения (21)–(23) разрешима, а для всех ее решений Ψ^n верны представления (18), что и требовалось доказать. Попутно мы показали, что все сферические компоненты $\Psi^{n}_{a\alpha}$, $|\alpha| \leq a$, с максимально возможным при данном n значении $a = n$ – произвольные функции переменной $\mathbf{x}$, через которые однозначно и явно выражаются все остальные компоненты $\Psi^{n}_{a\alpha}$ с $a < n$. Вывод таких представлений несложен и заключается в решении уравнений (26) в порядке возрастания индекса n и убывания индекса a при данном n.

Поясним вывод примером. Для этого подставим компоненты $\Psi^{n}_{a\alpha}$, $n = 0, 1$, функций (24) и (25) в правые части уравнений (26) с $n = 0$ и найдем решения:

$$\Psi^{2}_{00}(\mathbf{x}) = \frac{1}{6}\, h(\mathbf{x})\, \Psi^{0}_{00}(\mathbf{x})\,, \quad \Psi^{2}_{1\alpha}(\mathbf{x}) = 0\,. \quad (27)$$

Используя эти выражения, решим уравнения (26) с $n = 1$ и получим

$$\Psi^{3}_{00}(\mathbf{x}) = 0\,,\ \Psi^{3}_{2\alpha}(\mathbf{x}) = 0\,, \\ \Psi^{3}_{1\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{10}\, h(\mathbf{x})\, \Psi^{1}_{1\alpha}(\mathbf{x}) + \frac{\sqrt{\pi}}{15}\, V^{11}(x) \Psi^{0}_{00}(\mathbf{x})\, Y^{*}_{1\alpha}(\hat{x})\,. \quad (28)$$

Теперь в уравнениях (26) положим $n = 2$, функции $\Psi^2_{a\alpha}$ и $\Psi^3_{a\alpha}$ заменим их представлениями (27) и (28). Разрешив полученные уравнения, находим

$$\Psi^4_{00}(\mathbf{x}) = \frac{1}{20}\left(\frac{1}{6}\,h^2 + V^{20}\right)\Psi^0_{00}\,,\ \Psi^4_{1\alpha}(\mathbf{x}),\ \Psi^4_{3\alpha}(\mathbf{x}) = 0\,;$$

$$\Psi^4_{2\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{14}\left[h\,\Psi^2_{2\alpha} + \frac{\sqrt{8\pi}}{15}\,V^{11}\sum_{\alpha'=-1}^{1} C^{2\alpha}_{1\beta 1\alpha'}\,\Psi^1_{1\alpha'}\,Y^*_{1\beta}(\hat{x}) + \right.$$
$$\left. + \frac{\sqrt{4\pi}}{5}\,V^{22}\,\Psi^0_{00}\,Y^*_{2\alpha}(\hat{x})\right]. \quad (29)$$

Увеличивая n от $n = 3$ можно построить функции $\Psi^{n+2}_{a\alpha}$ с $a = n+1, n, \ldots, 0$:

$$\Psi^{n+2}_{n+1,\alpha}(\mathbf{x}) = 0\,,$$

$$\Psi^{n+2}_{n\alpha}(\mathbf{x}) = \frac{1}{2(2n+3)}\,h(\mathbf{x})\,\Psi^n_{n\alpha}(\mathbf{x}) + \frac{\sqrt{4\pi}}{2(2n+3)}\sum_{p=1}^{n}\frac{(-1)^p}{\sqrt{2p+1}}C^{n-p,0}_{n0p0}V^{pp}(x)\times$$
$$\times\sum_{\alpha'=p-n}^{n-p} C^{n\alpha}_{p\beta,n-p,\alpha'}\,\Psi^{n-p}_{n-p,\alpha'}(\mathbf{x})Y^*_{p\beta}(\hat{x}), \ldots$$

Теперь докажем по индукции, что ряд (18) не содержит компонент $\Psi^n_{a\alpha}$ с нечетной суммой $n + a$ индексов n и a, т. е. $\Psi^n_{a\alpha} \equiv 0$ при любом α, если $n + a$ — нечетное. Согласно (27)–(29) это утверждение верно при $n \leq 4$. Предположим, что $n > 3$ и $\Psi^{n'}_{a'\alpha} \equiv 0$, если $n' \leq n$ и $n' + a'$ — нечетное. Если $a = n + 2$, то $a + n$ — четное, а решение $\Psi^{n+2}_{a\alpha}(\mathbf{x})$ уравнения (26) — произвольная и, вообще говоря, отличная от нуля функция. Пусть теперь $a < n + 2$. Исследуем сумму в правой части уравнения (26) для функции $\Psi^{n+2}_{a\alpha}$. В этой сумме $\Psi^{n-p}_{a'\alpha'} \neq 0$, если $n - p + a'$ — четное, $C^{a'0}_{s0a0} \neq 0$, если $a + a' - s$ — четное и $V^{ps} \neq 0$, если $p + s$ — четное. Следовательно, вся сумма, а значит и решение $\Psi^{n+2}_{a\alpha}$ отличны от тождественного нуля, если $n + a$ — четное, что и требовалось показать.

3. СТРОЕНИЕ ЧАСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В БИСФЕРИЧЕСКОМ БАЗИСЕ

В бисферическом базисе (7) оператор P^ε, проектирующий Ψ на Ψ^ε, — сумма

$$P^\varepsilon = (1/2)\sum_{\mathbf{a}+\mathbf{b}=\mathbf{l}}\left[1 + \sigma(-1)^{a+b}\right]\,|\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})\rangle\,\langle\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})| =$$
$$= \sum_{b=\mu(\sigma)}^{\infty}\sum_{a}|\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})\rangle\,\langle\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})|\,. \quad (30)$$

Здесь и всюду далее по определению

$$2\mu(\sigma) \equiv \left[1-(-1)^{\ell}\,\sigma\right], \quad (-1)^{a+b}=(-1)^{\ell+\mu(\sigma)}, \quad \chi(a) \equiv [\,1-(-1)^{a}]\,/2\,;$$

при данных a, ℓ и σ индекс b равен a, если $\ell = 0$, а при $\ell > 0$ вычисляется по формулам

$$\begin{aligned} b &= b(c;\ell,a,\sigma) = |\ell - a| + 2c + (-1)^{\ell}\,\sigma\,\chi(a) + \mu(\sigma)\,, \\ c &= 0,1,...,c_{max} = [\,\ell + a - |\ell - a|\,]\,/2 - (-1)^{\ell}\,\sigma\,\chi(a) - \mu(\sigma)\,. \end{aligned}$$

Образ $\Psi^{\varepsilon} = P^{\varepsilon}\Psi$ ряда (17) — степенной ряд

$$\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^{n}\Psi^{n\varepsilon}(\mathbf{x},\hat{y})\,, \quad \Psi^{n\varepsilon}(\hat{x},\mathbf{y}) \equiv P^{\varepsilon}\,\Psi^{n}(\hat{x},\mathbf{y})\,, \tag{31}$$

в котором вследствие (18) функции $\Psi^{n\varepsilon}$ — конечные суммы:

$$\Psi^{n\varepsilon}(\mathbf{x},\hat{y}) = \sum_{a=\mu(\sigma)}^{n}\sum_{b}\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)\,\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})\,, \Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x) \equiv \langle\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})|\Psi^{n}(\mathbf{x},\hat{y})\rangle\,, \tag{32}$$

а их компоненты $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$ выражаются через проекции функций Ψ^{n} и $\Psi^{n}_{a\alpha}$:

$$\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x) = \sum_{\beta=-b}^{b} C^{\ell m}_{a\alpha b\beta}\langle Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x})|\Psi^{n}(\mathbf{x},\hat{y})\rangle = \sum_{\beta=-b}^{b} C^{\ell m}_{a\alpha b\beta}\langle Y_{b\beta}(\hat{x})|\Psi^{n}_{a\alpha}(\mathbf{x})\rangle, \tag{33}$$

где $\Psi^{n\varepsilon}_{ab} \equiv 0$ при нечетном $n + a$, так как в этом случае $\Psi^{n\varepsilon}_{a\alpha} \equiv 0$.
Этот же образ можно представить как разложение решения Ψ^{ε} по базису (7):

$$\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{ab}\Psi^{\varepsilon}_{ab}(x,y)\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})\,, \tag{34}$$

$$\Psi^{\varepsilon}_{ab}(x,y) \equiv \langle\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})|\Psi(\mathbf{x},\mathbf{y})\rangle = \sum_{n=a\geq\mu(\sigma)}^{\infty} y^{n}\,\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)\,, \quad (-1)^{n+a} = 1\,,$$

и тем самым доказать два свойства бисферических компонент Ψ^{ε}_{ab} такого разложения: Ψ^{ε}_{ab} — степенной ряд по четным (нечетным) степеням аргумента y, если a четное (нечетное), а $\Psi^{\varepsilon}_{ab}(x,y) = O(y^{a})$ при $y \to 0$ и $x > 0$.

Стоит отметить, что в силу равенств (31)–(34) верно представление

$$\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^{n}\sum_{a=\mu(\sigma)}^{n}\sum_{b}\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)\,\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})\,,\ (-1)^{n+a} = 1\,, \tag{35}$$

из которого следует соотношение $\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = O(y^{\mu(\sigma)})$ при $y \to 0$ и $x > 0$.

Как было показано, функции $\Psi^n_{a\alpha}$ с $a = n = 0, 1, \ldots$ нельзя определить, но через них можно выразить все функции $\Psi^n_{a\alpha}$ с $a < n$. Поэтому при $a = n$ и любом a суммы (33) — произвольные функции $\Psi^{n\varepsilon}_{nb}$, через которые однозначно представляются все остальные функции $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$ с $a < n$. Это утверждение можно доказать и другим способом, а именно, применив метод индукции к рекуррентной по индексу n цепочке алгебраических уравнений, полученной проецированием цепочки (21)–(23) с помощью формул (15) и (30):

$$
\begin{aligned}
&[\, a(a+1) - (n+2)(n+3)\,]\ \Psi^{n+2,\varepsilon}_{ab}(x) = -h_b(x)\,\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x) - \\
&- (-1)^{a+b-\ell} \sum_{p=1}^{n}\sum_{s=0}^{p} (-1)^s V^{ps}(x) \sum_{a'=\mu(\sigma)}^{n-p} (2a'+1)^{1/2} \sum_{b'=|\ell-a'|}^{\ell+a} (2b'+1)^{1/2} \times \\
&\times C^{a0}_{s0a'0}\, C^{b0}_{s0b'0} \left\{ \begin{array}{ccc} a & a' & s \\ b' & b & \ell \end{array} \right\} \Psi^{n-p,\varepsilon}_{a'b'}(x)\,,\ n = -2, -1, \ldots;\ a = 0, 1, \ldots, n\,,
\end{aligned} \tag{36}
$$

где h_b — диагональный матричный элемент оператора (20) в базисе (7):

$$
\begin{aligned}
&\langle \mathcal{Y}^{\ell m}_{ab} | h(\mathbf{x}) | \mathcal{Y}^{\ell m}_{a'b'} \rangle = \delta_{aa'}\delta_{bb'} h_b(x)\,, \\
&\qquad\qquad h_b(x) \equiv -\partial_x^2 - \frac{2}{x}\,\partial_x + \frac{b(b+1)}{x^2} + V^{00}(x) - E\,.
\end{aligned} \tag{37}
$$

Для цепочки уравнений (36) имеют место следующие правила отбора: функции $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$ не равны тождественно нулю, если $n + b$ и $\ell + \mu(\sigma)$ — одновременно четные или нечетные, $n \geq a \geq \mu(\sigma)$ и $n + a$ — четное. Доказательство однозначной разрешимости цепочки (36) и этих правил отбора принципиально не отличается от данного выше анализа системы (23) и поэтому опускается.

Компоненты $\Psi^{n\varepsilon}$ разложения (31) физического решения Ψ^{ε} можно найти, если известны компоненты Ψ^n или $\Psi^n_{a\alpha}$ общего решения Ψ. Например, подействовав проектором (30) на функции (24) и (25), получаем

$$
\begin{aligned}
&\Psi^{0\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}) = \Psi^{0\varepsilon}_{0\ell}(x)\, \mathcal{Y}^{\ell m}_{0\ell}(\hat{x}, \hat{y})\,, \\
&\qquad\qquad \Psi^{1\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}) = \sum_{b=|\ell\pm1|} \Psi^{1\varepsilon}_{1b}(x) \mathcal{Y}^{\ell m}_{1b}(\hat{x}, \hat{y})\,, \quad \sigma = (-1)^{\ell}; \\
&\Psi^{0\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}) = \Psi^{0\varepsilon}_{0\ell}(x) \equiv 0\,, \quad \Psi^{1\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}) = \Psi^{1\varepsilon}_{1\ell}(x) \mathcal{Y}^{\ell m}_{1\ell}(\hat{x}, \hat{y})\,, \quad \sigma = (-1)^{\ell+1}\,,
\end{aligned} \tag{38}
$$

а подставив сферические компоненты (27) и (28) в суммы (33) и затем упростив получившиеся суммы типа (32), доказываем, что при любом $\sigma = \pm(-1)^{\ell}$

$$\Psi^{2\varepsilon}(\mathbf{x},\hat{y}) = \frac{1}{6}\,h_\ell(x)\,\Psi^{0\varepsilon}_{0\ell}(x)\,\mathcal{Y}^{\ell m}_{0\ell}(\hat{x},\hat{y}) + \sum_b \Psi^{2\varepsilon}_{2\ell}(x)\,\mathcal{Y}^{\ell m}_{2b}(\hat{x},\hat{y})\,,$$

$$\Psi^{3\varepsilon}(\mathbf{x},\hat{y}) = \frac{1}{10}\sum_b h_b(x)\,\Psi^{1\varepsilon}_{1b}(x)\,\mathcal{Y}^{\ell m}_{1b}(\hat{x},\hat{y}) -$$

$$-\frac{V^{11}(x)}{10\sqrt{3}}\,\Psi^{0\varepsilon}_{0\ell}(x)\sum_{b=|\ell\pm1|} C^{b0}_{\ell 010}\,\mathcal{Y}^{\ell m}_{1b}(\hat{x},\hat{y}) + \sum_b \Psi^{3\varepsilon}_{3b}(x)\,\mathcal{Y}^{\ell m}_{3b}(\hat{x},\hat{y})\,. \quad (39)$$

Третий способ построения функций $\Psi^{n\varepsilon}$ реализуется подстановкой решений $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$ системы (36) в суммы (32). При этом компоненты Ψ^{n} или $\Psi^{n}_{a\alpha}$ не требуются. Поэтому такой способ представляется оптимальным и для вывода асимптотики ряда (31) и асимптотик компонент Ψ^{ε}_{ab} разложения (34).

Выразив решения $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$, $n \le 4$, цепочки (36) через неизвестные функции $\partial^n_y \Psi^{\varepsilon}_{ab}|_{y=0} = (n!)\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$ с $a = n$, доказываем асимптотику компоненты $\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,y) = \left\{1 + \frac{y^2}{6}\,h_\ell(x) + \frac{y^4}{120}\,\big[\,h^2_\ell(x) + 6V^{20}(x)\,\big]\right\}\Psi^{\varepsilon}_{\ell 0}(x,0) -$$

$$-\frac{\sqrt{3}}{60}\,y^4\,V^{11}(x)\sum_{b'=|\ell\pm1|} C^{b'0}_{\ell 010}\;\partial_y \Psi^{\varepsilon}_{1b'}(x,y)|_{y=0} + O(y^6)\,, \quad (40)$$

асимптотики компонент Ψ^{ε}_{1b} с индексом $b = |\ell \pm (1-\mu(\sigma))|$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{1b}(x,y) = y\left[1 + \frac{y^2}{10}\,h_b(x)\right]\partial_y \Psi^{\varepsilon}_{1b}(x,y)|_{y=0} -$$

$$-\frac{\sqrt{3}}{30}\,y^3\,V^{11}(x)\,C^{b0}_{\ell 010}\;\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,0) + O(y^5) \quad (41)$$

и асимптотики компонент Ψ^{ε}_{2b} с индексом $b = |\ell \pm \mu(\sigma)|, |\ell \pm (2-\mu(\sigma))|$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{2b}(x,y) = \frac{y^2}{2}\left[1 + \frac{y^2}{14}\,h_b(x)\right]\partial^2_y \Psi^{\varepsilon}_{2b}(x,y)|_{y=0} - (-1)^{\ell+b}\,\frac{y^4}{7\sqrt{2}}\,V^{11}(x)\times$$

$$\times \sum_{b'=|b\pm1|} (2b'+1)^{1/2}\,C^{b0}_{b'010}\left\{\begin{array}{ccc} 2 & 1 & 1 \\ b' & b & \ell \end{array}\right\}\partial_y \Psi^{\varepsilon}_{1b'}(x,y)|_{y=0} +$$

$$+\frac{y^4}{14\sqrt{5}}\,V^{22}(x)\,C^{b0}_{\ell 020}\,\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,0) + O(y^6)\,. \quad (42)$$

Вычислив производные ∂^n_y, $n \le 4$, этих асимптотик, получаем следующие связи (9) при $y = 0$ и $x > 0$:

для компоненты $\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}$

$$\begin{aligned}
&\left[\,3\partial_y^2 - h_\ell(x)\,\right]\;\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,y) = 0\,,\\
&\qquad\qquad\left[\,5\partial_y^4 - h_\ell^2(x) - 6V^{20}(x)\,\right]\;\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,y) =\\
&\qquad\qquad\qquad = -2\sqrt{3}\,V^{11}(x)\sum_{b'=|\ell\pm 1|} C^{b'0}_{\ell 010}\,\partial_y\Psi^{\varepsilon}_{1b'}(x,y)\,, \qquad (43)
\end{aligned}$$

для компонент $\Psi^{\varepsilon}_{1b}(x,y)$ с индексом $b = |\ell \pm (1-\mu(\sigma))|$

$$\partial_y\left[\,5\partial_y^2 - 3h_b(x)\,\right]\;\Psi^{\varepsilon}_{1b}(x,y) = -\sqrt{3}\,V^{11}(x)\,C^{b0}_{\ell 010}\,\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,y) \qquad (44)$$

и для компонент Ψ^{ε}_{2b} с индексом $b = |\ell \pm \mu(\sigma)|$, $|\ell \pm (2-\mu(\sigma))|$

$$\begin{aligned}
&\sqrt{10}\,\partial_y^2\left[\,7\partial_y^2 - 6h_b(x)\,\right]\Psi^{\varepsilon}_{2b}(x,y) = 12\sqrt{2}\,V^{22}(x)\,C^{b0}_{\ell 020}\,\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,y) -\\
&\qquad\qquad - 24\sqrt{5}\,(-1)^{\ell+b}\,V^{11}(x)\times\\
&\qquad\times\sum_{b'=|b\pm 1|}(2b'+1)^{1/2}\,C^{b0}_{b'010}\left\{\begin{matrix} 2 & 1 & 1\\ b' & b & \ell\end{matrix}\right\}\partial_y\Psi^{\varepsilon}_{1b'}(x,y)\,. \qquad (45)
\end{aligned}$$

Отметим, что вследствие правила отбора $(-1)^{n+a} = 1$ для разложений (34) все бисферические компоненты Ψ^{ε}_{ab} подчиняются при $y = 0$ и $x > 0$ тривиальным связям: $\partial_y^n\Psi^{\varepsilon}_{ab} = 0$, где n — четное, a — нечетное или наоборот.

4. СТРОЕНИЕ ЧАСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В D^{σ}-БАЗИСЕ

Введем две «подвижные» системы координат $S^t = (\mathbf{e}^t_1, \mathbf{e}^t_2, \mathbf{e}^t_3)$, $t = x, y$. Пусть начальные точки O^x и O^y систем S^x и S^y совпадают с начальной точкой O фиксированной системы $S = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3)$, а их реперы таковы, что

$$(\mathbf{y}\cdot\mathbf{e}^x_1) > 0,\ (\mathbf{y}\cdot\mathbf{e}^x_2) = 0,\ (\mathbf{x}\cdot\mathbf{e}^x_3) = x;\quad (\mathbf{x}\cdot\mathbf{e}^y_1) < 0,\ (\mathbf{x}\cdot\mathbf{e}^y_2) = 0,\ (\mathbf{y}\cdot\mathbf{e}^y_3) = y\,.$$

Тогда орты $\mathbf{e}^x_2$ и $\mathbf{e}^y_2$ направлены вдоль нормали $\mathbf{n} = \mathbf{x}\times\mathbf{y}$ к плоскости трех частиц, а система S^x получается поворотом системы S^y вокруг орта $\mathbf{e}^y_2$ на угол θ между векторами $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$. Так как в системе S ориентация этих векторов задана углами $\hat{x} = (\theta_x, \varphi_x)$ и $\hat{y} = (\theta_y, \varphi_y)$, а в системе S^t — углами $\hat{x}^t$ и $\hat{y}^t$:

$$\begin{aligned}
&\hat{x}^t = (\theta^x_x, \varphi^x_x) = (0,0)\,,\quad \hat{y}^t = (\theta^x_y, \varphi^x_y) = (\theta, 0)\,,\quad t = x\,;\\
&\qquad\qquad \hat{x}^t = (\theta^y_x, \varphi^y_x) = (\theta, \pi)\,,\quad \hat{y}^t = (\theta^y_y, \varphi^y_y) = (0,0)\,,\quad t = y\,, \qquad (46)
\end{aligned}$$

то переход $S \to S^x$ определяется углами Эйлера $\omega^x = (\varphi_x, \theta_x, \gamma^x)$, а переход $S \to S^y$ — углами Эйлера $\omega^y = (\varphi_y, \theta_y, \gamma^y)$, где углы γ^t таковы, что

$$\cos\gamma^t = \operatorname{ctg}\theta\,\cos\theta_t - \operatorname{cosec}\theta\,\cos\theta_{t'}\,, \quad t \neq t' = x, y\,.$$

В D^σ-базисе (8) оператор $P^{\varepsilon t}$, проектирующий Ψ на Ψ^ε, — сумма

$$P^{\varepsilon t} = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} |D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)\rangle\,\langle D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)|\,, \quad t = x, y\,. \tag{47}$$

Чтобы построить D^σ-компоненты $\Psi^{\varepsilon t}_{m'}$ образа $\Psi^\varepsilon = P^{\varepsilon t}\Psi$,

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \Psi^{\varepsilon t}_{m'}(x, y, \theta)\, D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)\,, \tag{48}$$

как проекции

$$\Psi^{\varepsilon t}_{m'}(x, y, \theta) \equiv \langle D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)|\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y})\rangle$$

сферического и бисферического рядов (17), (18) и (31), (32) решения Ψ, применим разложения функций $Y_{a\alpha}(\hat{y})\,Y_{b\beta}(\hat{x})$ и $\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x}, \hat{y})$ по функциям $D^{\ell\sigma *}_{mm'}$. Первое разложение — сумма

$$Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \langle D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)|Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x})\rangle\, D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t),$$

$$\langle D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)|Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x})\rangle = \left[\frac{1+\sigma(-1)^{a+b}}{1+\delta_{m'0}}\right]^{1/2} (-1)^{m+m'} \times$$
$$\times\, C^{\ell-m}_{a\alpha b\beta} \left\{ \begin{array}{r} (-1)^a\, C^{b0}_{a-m'\ell m'}\ \Theta_{am'}(u)\,, t = x, \\ (-1)^{b+m'}\, C^{a0}_{b-m'\ell m'}\ \Theta_{bm'}(u)\,, t = y, \end{array} \right. \tag{49}$$

а второе разложение имеет вид

$$\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x}, \hat{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \langle D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)|\mathcal{Y}_{ab}(\hat{x}, \hat{y})\rangle\, D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)\,,$$

$$\langle D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^t)|\mathcal{Y}_{ab}(\hat{x}, \hat{y})\rangle = \left\{ \begin{array}{rl} T^{\ell m'}_{ab}\,\Theta_{am'}(u)\,, & t = x, \\ (-1)^{m'}\, T^{\ell m'}_{ba}\,\Theta_{bm'}(u)\,, & t = y, \end{array} \right.$$

$$T^{\ell m'}_{ab} \equiv \left[\frac{1+\sigma(-1)^{a+b}}{1+\delta_{m'0}}\right]^{1/2} (-1)^{a+m'}\, C^{b0}_{a-m'\ell m'}\,, \tag{50}$$

где $T^{\ell m'}_{ab}$ — коэффициенты Ченга–Фано [14].

Приступим к анализу строения D^σ-компонент $\Psi^{\varepsilon t}_{m'}$ ряда (48). Применяя (47) и (49), построим образ $\Psi^\varepsilon = P^{\varepsilon t}\Psi$ ряда (17) с компонентами (18) и таким образом докажем, что D^σ-компоненты $\Psi^{\varepsilon t}_{m'}$ – ряды по целым степеням аргумента y и конечным суммам $\Psi^{n\varepsilon t}_{m'}$ проекций $\langle Y_{b\beta}|\Psi^n_{a\alpha}\rangle$ компонент $\Psi^n_{a\alpha}$ общего решения:

$$\Psi^{\varepsilon t}_{m'}(x,y,\theta) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n\,\Psi^{n\varepsilon t}_{m'}(x,\theta)\,, \quad m' = \mu(\sigma),\ldots,\ell\,, \quad t = x, y\,, \tag{51}$$

$$\Psi^{n\varepsilon t}_{m'}(x,\theta) = \sum_{a=\mu(\sigma)}^{n}\sum_{b}\langle D^{\ell\sigma*}_{mm'}(\omega^t)|Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x})\rangle\,\langle Y_{b\beta}(\hat{x})|\Psi^n_{a\alpha}(\mathbf{x})\rangle\,. \tag{52}$$

Следовательно, асимптотики D^σ-компонент $\Psi^{\varepsilon t}_{m'}$, т. е. конечные подсуммы $(n = \mu(\sigma),...,n' < \infty)$ рядов (51), можно найти, заменив функции $\Psi^n_{a\alpha}$ в суммах (52) их явными выражениями, например при $n \le 4$ — правыми частями равенств (24), (25) и (27)–(29).

Другой вывод представления (51) реализуем проецированием бисферического ряда (31) с компонентами (32) на D^σ-базис. Для этого применим (47) и (50). В итоге при $t = x$ функция $\Psi^{n\varepsilon t}_{m'}$ представится конечной суммой по индексу a:

$$\Psi^{n\varepsilon x}_{m'}(x,\theta) = \sum_{a=m'}^{n}\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}(x)\,\Theta_{am'}(u)\,, \quad (-1)^{n+a} = 1\,, \tag{53}$$

с Θ-компонентами

$$\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}(x) \equiv \langle\Theta_{am'}(u)|\Psi^{n\varepsilon x}_{m'}(x,\theta)\rangle = \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^{\ell+a-\mu(\sigma)} T^{\ell m'}_{ab}\,\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)\,, \tag{54}$$

а при $t = y$ — конечной суммой по индексу b:

$$\Psi^{n\varepsilon y}_{m'}(x,\theta) = \sum_{b=m'}^{\ell+a-\mu(\sigma)}\Psi^{n\varepsilon y}_{bm'}(x)\,\Theta_{bm'}(u)\,, \tag{55}$$

с Θ-компонентами

$$\Psi^{n\varepsilon y}_{bm'}(x) \equiv \langle\Theta_{bm'}(u)|\Psi^{n\varepsilon y}_{m'}(x,\theta)\rangle = \sum_{a=|\ell-b+\mu(\sigma)|}^{n}(-1)^{m'}T^{\ell m'}_{ba}\,\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)\,. \tag{56}$$

Рассмотрим суммы (53) и (54). Пусть $n = a$, тогда все компоненты $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ суммы (54) — неопределенные функции, значит и эта сумма, т. е. функция $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}$ с $a = n$, является неопределенной функцией аргумента x. Далее, в суммах (53) и (54) всегда $a \geq m'$, потому что, согласно определению (50), $T_{ab}^{\ell m'} = 0$ при $a < m'$. По той же причине $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x} \equiv 0$, если $m' > a$. Так как $n + a$ — четное, то в сумме (53) $a = m', m' + 2, \ldots, n$ при четном $n + m'$ и $a = m' + 1, m' + 3, \ldots, n$ при нечетном $n + m'$. В сумме (54) $\Psi_{ab}^{n\varepsilon} \equiv 0$, если $a > n$, поэтому $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x} \equiv 0$ при $a > n$, а в суммах (53) и (54) индексы таковы, что $n \geq a \geq m'$. Следовательно, таким же ограничениям подчиняются индексы n, a и m' и в полученном из (51) и (53) разложении

$$\Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = \sum_{n=m'}^{\infty} y^n \sum_{a=m'}^{n} \Psi_{am'}^{n\varepsilon x}\, \Theta_{am'}(u)\,, \quad m' = \mu(\sigma), \mu(\sigma){+}1, \ldots \ell\,. \quad (57)$$

Поэтому первые два слагаемые асимптотики каждой компоненты $\Psi_{m'}^{\varepsilon x}$ при $y \to 0$, $x > 0$ содержат только неопределенные функции $\Psi_{nm'}^{n\varepsilon x}$, $n = m'$, $m' + 1$:

$$\Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = \\ = y^{m'} \left[\Psi_{m'm'}^{m'\varepsilon x}(x)\, \Theta_{m'm'}(u) + y \Psi_{m'+1,m'}^{m'+1,\varepsilon x}(x)\, \Theta_{m'+1,m'}(u) + O(y^2) \right]. \quad (58)$$

Значит, каждая компонента $\Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta)$ при $y \to 0$ и $x > 0$ должна иметь асимптотику $\Psi_{m'}^{\varepsilon x} = O(y^{m'})$. Этот факт был доказан ранее в работе [15].

Теперь рассмотрим суммы (55) и (56). В них $b \geq m'$, потому что, согласно определению (50), $T_{ba}^{\ell m'} = 0$ при $b < m'$. По той же причине $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon x} \equiv 0$, если $m' > b$. Однако $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon y} \neq 0$ при $b > n$, и поэтому сумма (55) более сложная, чем сумма (53), в которой $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x} \equiv 0$ при $a > n$.

В отличие от системы функций $\Theta_{cm'}(u)$, $m' = -c, \ldots c$, система функций $\Theta_{cm'}(u)$, $c = m', m' + 1, \ldots$, ортонормирована на отрезке $-1 \leq u \leq 1$:

$$\langle \Theta_{cm'}(u) | \Theta_{cm''}(u) \rangle \neq \delta_{m'm''}\,, \quad \langle \Theta_{cm'}(u) | \Theta_{c'm'}(u) \rangle = \delta_{cc'}\,.$$

Следовательно, формулы (53) и (55) означают, что компоненты $\Psi_{m'}^{n\varepsilon x}$ и $\Psi_{m'}^{n\varepsilon y}$ разложимы в конечные суммы по ортонормированным системам функций $\Theta_{am'}(u)$ и $\Theta_{bm'}(u)$ с индексами $a, b \geq m'$. Благодаря конечности таких разложений асимптотики рядов (51), т. е. D^σ-компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$, можно построить заменой в (54) или (56) бисферических компонент $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ их явными выражениями (например, (40)–(42)) через неопределенные бисферические компоненты $\Psi_{ab}^{n'\varepsilon}$, $a = n' \leq n$. Согласно (54) и (56) при такой замене функции $\Psi_{m'}^{n\varepsilon x}$ и

$\Psi^{n\varepsilon y}_{m'}$ с данным n выразятся через произвольные функции $f^{n'x}_{m'}$ и $f^{n'y}_{bm'}$:

$$f^{n'x}_{m'}(x) = \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^{\ell+a-\mu(\sigma)} T^{\ell m'}_{ab}\, \Psi^{n'\varepsilon}_{ab}(x)\,,$$
$$f^{n'y}_{bm'}(x) = (-1)^{m'} T^{\ell m'}_{ba}\, f^{n'y}_{b}(x)\,, \quad f^{n'y}_{b}(x) \equiv \Psi^{n'\varepsilon}_{ab}(x)\,, \quad a = n' \le n\,. \tag{59}$$

Третий способ построения асимптотик компонент $\Psi^{\varepsilon t}_{m'}$ суммы (48) опишем более подробно. Этот способ представляется оптимальным, потому что в нем, в отличие от двух упомянутых выше способов, не нужны ни функции $\Psi^{n}_{a\alpha}$, ни функции $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$, а ключевыми являются доказанные представления (51), (53) и (55). Благодаря им для решения (48) верны два разложения:

$$\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^x) \sum_{a=m'}^{n} \Psi^{n\varepsilon x}_{am'}(x)\,\Theta_{am'}(u)\,, \tag{60}$$

$$\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^y) \sum_{b=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} \Psi^{n\varepsilon y}_{bm'}(x)\,\Theta_{bm'}(u) \tag{61}$$

по трем системам линейно независимых функций:

$$\{y^0, y^1, \ldots\}\,, \quad \{D^{\ell\sigma *}_{mm'},\, m' = \mu(\sigma), ..., \ell\} \text{ и } \{\Theta_{am'}, a \ge m'\} \text{ или } \{\Theta_{bm'}, b \ge m'\}\,.$$

Поэтому неизвестные функции $\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}(x)$ и $\Psi^{n\varepsilon y}_{bm'}(x)$ удается подчинить линейным системам уравнений. Исследуем их в обоих случаях $t = x, y$.

Пусть $t = x$, т. е. используется система S^x. Тогда действие проектора (47) с $t = x$ на цепочку (21)–(23) дает рекуррентную по индексу n цепочку систем уравнений для искомых компонент $\Psi^{n\varepsilon x}_{m'}$ ряда (51):

$$\begin{aligned}
&[\,Q_{m'm'}(\theta) - (n+2)(n+3)\,]\ \Psi^{n+2,\varepsilon x}_{m'}(x,\theta) = \\
&\quad = x^{-2} \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma^{\ell\sigma}_{m'm''}\, Q_{m'm''}(\theta)\, \Psi^{n\varepsilon x}_{m''}(x,\theta) - h^{x}_{m'}(x,\theta)\, \Psi^{n\varepsilon x}_{m'}(x,\theta) - \\
&\qquad - \sum_{p=1}^{n} \sum_{s=0}^{p} V^{ps}(x)\, P_s(u)\, \Psi^{n-p,\varepsilon x}_{m'}(x,\theta)\,.
\end{aligned} \tag{62}$$

Здесь $\Psi^{n\varepsilon x}_{m'} \equiv 0$ при $n < 0$; $m' = \mu(\sigma), \ldots, \ell$ при каждом $n = -2, 1, \ldots$;

$$\begin{aligned}
\gamma^{\ell\sigma}_{m',m'+1} &\equiv \left\{\left[\,1 + \delta_{m'0}\,\sigma\,(-1)^{\ell}\,\right]\,[\ell(\ell+1) - m'(m'+1)]\right\}^{1/2},\\
\gamma^{\ell\sigma}_{m',m'-1} &\equiv (1 - \delta_{m'0})\,\left\{\left[\,1 + \delta_{m'1}\,\sigma\,(-1)^{\ell}\,\right]\,[\ell(\ell+1) - m'(m'-1)]\right\}^{1/2}\,;
\end{aligned}$$

оператор $h^x_{m'}(x,\theta)$ порожден оператором (20):

$$h^x_{m'}(x,\theta) \equiv \langle D^{\ell\sigma*}_{mm'}(\omega^x)|h(\mathbf{x})|D^{\ell\sigma*}_{mm'}(\omega^x)\rangle =$$
$$= -\frac{1}{x^2}\,\partial_x(x^2\partial_x) + \frac{1}{x^2}\,\left[\,Q_{m'm'}(\theta) + \ell(\ell+1) - 2(m')^2\right] + V^{00}(x) - E\,, \quad (63)$$

а операторы $Q_{m'm''}(\theta)$ определены формулами

$$Q_{m'm'}(\theta) \equiv -\frac{1}{\sin\theta}\,\partial_\theta(\sin\theta\,\partial_\theta) + \frac{m'^2}{(\sin\theta)^2},\;\; Q_{m',m'\pm1}(\theta) \equiv \mp\partial_\theta + (m'\mp1)\,\mathrm{ctg}\,\theta\,. \quad (64)$$

Как известно [4], при действии на функцию $\Theta_{am'}$ оператор $Q_{m'm'}$ и оператор умножения на полином $P_s(u)$ (см. (16)) сохраняют индекс m', а образы $Q_{m',m'\pm1}\Theta_{a,m'\pm1}$ функций $\Theta_{a,m'\pm1}$ подобны функции $\Theta_{am'}$:

$$[Q_{m'm'}(\theta) - a(a+1)]\Theta_{am'}(u) = 0,$$
$$Q_{m'm''}(\theta)\Theta_{am''}(u) = q^a_{m'm''}\Theta_{am'}(u),$$
$$q^a_{m'm''} \equiv \left[\,a(a+1) - m'm''\,\right]^{1/2}\;, m'' = m' \pm 1\,. \quad (65)$$

Поэтому при данном n каждое ($m' = \mu(\sigma),\ldots,\ell$) уравнение системы (62) заменой всех функций $\Psi^{n'\varepsilon x}_{m''}$, $n' = 0,\ldots,n+2$; $m'' = m', m' \pm 1$, их разложениями (53) сводится к уравнению, содержащему функции $\Theta_{am''}$ с разными a, но одним и тем же m'', равным m'. Так как такие функции линейно независимы, то рассматриваемое уравнение имеет решение тогда и только тогда, когда "коэффициент" перед каждой из них равен нулю, т. е. когда для любого a

$$\left[\,a(a+1) - (n+2)(n+3)\,\right]\,\Psi^{n+2,\varepsilon x}_{am'}(x) =$$
$$= x^{-2}\sum_{m''=m'\pm1}\gamma^{\ell\sigma}_{m'm''}\,q^a_{m'm''}\,\Psi^{n\varepsilon x}_{am''}(x) - h^x_{am'}(x)\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}(x) -$$
$$-\sum_{p=1}^{n}\sum_{s=0}^{p}(-1)^s\,V^{ps}(x)\sum_{a'=m'}^{n-p} C^{a'0}_{s0a0}\,C^{am'}_{s0a'm'}\,\Psi^{n-p,\varepsilon x}_{a'm'}(x)\,, \quad (66)$$

где, как следует следует из (63)–(65),

$$h^x_{am'}(x) \equiv \langle\Theta_{am'}(u)|h^x_{m'}(x,\theta)|\Theta_{am'}(u)\rangle\,,$$
$$h^x_{am'}(x) \equiv -\frac{1}{x^2}\,\partial_x(x^2\partial_x) + \frac{1}{x^2}\,\left[\,\ell(\ell+1) + a(a+1) - 2(m')^2\,\right] +$$
$$+ V^{00}(x) - E\,, \quad (67)$$

а индексы n, a, m' таковы, что $n \geq a \geq m' \geq \mu(\sigma)$ и $n+a$ — четное, поэтому $\Psi^{n\varepsilon x}_{am'} = 0$, если $n < 0$ или $m' > a$, или же, если $n+a$ — нечетное.

Итак, цепочка дифференциальных уравнений (62) сведена к рекуррентной по индексу n цепочке систем линейных алгебраических уравнений (66) для искомых Θ-компонент $\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}$ рядов (53). Эти системы нумеруются индексами n и a. Система с данными n и a состоит из уравнений для неизвестных $\Psi^{n+2,\varepsilon x}_{am'}$, причем $m' = \mu(\sigma), \ldots, \ell$, если $a > \ell$ и $m' = a, \ldots, \ell$, если $a \leq \ell$. Матрица такой системы диагональная, а нетривиальное решение $F^{n+2,x}_{am'}$, $m' = \mu(\sigma), \ldots, \min\{a, n+2\}$, соответствующей однородной системы существует только при $a = n+2$ и элементарно выражается ($F^{n+2,x}_{am'} = f^{n+2,x}_{m'}$) через произвольные функции $f^{n+2,x}_{m'}(x)$, равные линейным комбинациям (59) произвольных бисферических компонент $\Psi^{n+2,\varepsilon}_{n+2,b}$. По указанным причинам построение общего решения $\Psi^{n+2,\varepsilon x}_{am'}$, $m' \leq a \leq n+2$, цепочки систем (66) в порядке возрастания n и убывания a при каждом n не вызывает затруднений:

$$
\begin{aligned}
&\Psi^{n+2,\varepsilon x}_{n+2,m'}(x) = f^{n+2,x}_{m'}(x)\,, \Psi^{n+2,\varepsilon y}_{n+1,m'}(x) = 0\,,\\
&\qquad\qquad \Psi^{n+2,\varepsilon x}_{nm'}(x) = [1/(4n+6)]\,\{\, h^{x}_{nm'}(x)\, f^{ny}_{m'}(y) -\\
&\qquad - x^{-2} \sum_{m''=m'\pm 1} [\, \gamma^{\ell\sigma}_{m'm''}\, q^{n}_{m'm''}\, f^{nx}_{m''}(x) - C^{n-10}_{10n0}\, C^{nm'}_{10n-1m'} \times\\
&\qquad\quad \times\, V^{11}(x)\, f^{n-1,x}_{m'}(x) + C^{n-20}_{20n0}\, C^{nm'}_{20n-2m'}\, V^{22}(x)\, f^{n-2,x}_{m'}(x)\ ]\}\,, \ldots
\end{aligned}
$$

В итоге Θ-компоненты $\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}(x)$, а затем и функции $\Psi^{n\varepsilon x}_{m'}(x,\theta)$, т. е. суммы (55), выражаются через произвольные функции $f^{n'x}_{m'}(x)$ с $n' \leq n$, известные операторы $h^{x}_{am'}(x)$ и функции $V^{ps}(x)$ и $\Theta_{am'}(u)$. Например,

$$
\begin{aligned}
\Psi^{0\varepsilon x}_{m'} &= f^{0x}_{0}\,\Theta_{00}\,\delta_{m'0} = 2^{-1/2}\, f^{0x}_{0}\,, \quad \Psi^{1\varepsilon x}_{m'} = f^{1x}_{m'}\Theta_{1m'}\,,\\
\Psi^{2\varepsilon x}_{m'} &= \frac{1}{6}\, h^{x}_{00}\, f^{0x}_{0}\,\delta_{m'0} + f^{2x}_{m'}\Theta_{2m'}\,,\\
\Psi^{3\varepsilon x}_{0} &= \frac{1}{10}\left\{\left[h^{x}_{10} + \frac{1}{\sqrt{3}}V^{11}\right] f^{0x}_{0} - \frac{1}{x^2}\,\gamma^{\ell\sigma}_{01}\, q^{1}_{01}\, f^{1x}_{1}\right\}\Theta_{10} + f^{3x}_{0}\,\Theta_{30}, \qquad (68)\\
\Psi^{3\varepsilon x}_{1} &= \frac{1}{10}\left[h^{x}_{11}\, f^{1x}_{1} - \frac{1}{x^2}\,\gamma^{\ell\sigma}_{01}\, q^{1}_{01} f^{1x}_{0}\right]\Theta_{11} + f^{3x}_{1}\Theta_{31},\\
\Psi^{3\varepsilon x}_{2} &= f^{3x}_{2}\,\Theta_{32}\,, \quad \Psi^{3\varepsilon x}_{3} = f^{3x}_{3}\,\Theta_{33}\,,
\end{aligned}
$$

где $f^{nx}_{0}(x) \equiv 0$ при любом n, если $\sigma = (-1)^{\ell+1}$.

Используя (68), находим асимптотики сумм (51), т. е. D^σ-компонент $\Psi^{\varepsilon x}_{m'}$:

$$
\begin{aligned}
\Psi^{\varepsilon x}_0(x,y,\theta) &= \left[1+\frac{y^2}{6}\,h^x_{00}(x)\right] f^{0x}_0(x)\,\Theta_{00}(u) + \\
&+ y\left[1+\frac{y^2}{10}\,h^x_{00}(x)\right] f^{1x}_0(x)\Theta_{10}(u) + \\
&+ \frac{y^3}{10\sqrt{3}x^2}\left\{x^2V^{11}(x)f^{0x}_0(x) - \right. \\
&- \left.[6\ell(\ell+1)(1+\sigma(-1)^\ell)]^{1/2} f^{1x}_1(x)\right\}\Theta_{10}(u) + \qquad (69) \\
&+ y^2\,f^{2x}_0(x)\,\Theta_{20}(u) + y^3\,f^{3x}_0(x)\,\Theta_{30}(u) + O(y^4)\,, \\
\Psi^{\varepsilon y}_1(x,y,\theta) &= y\left[1+\frac{y^2}{10}\,h^x_{11}(x)\right] f^{1x}_1(x)\,\Theta_{11}(u) - \\
&- \frac{y^3}{5x^2}\,[\ell(\ell+1)]^{1/2}\; f^{1x}_0(x)\,\Theta_{11}(u) + \\
&+ y^2\,f^{2x}_1(x)\,\Theta_{21}(u) + y^3\,f^{3x}_1(x)\,\Theta_{31}(u) + O(y^4)\,, \\
\Psi^{\varepsilon x}_2(x,y,\theta) &= y^2\,f^{2x}_2(x)\Theta_{22}(u) + y^3\,f^{3x}_2(x)\Theta_{32}(u) + O(y^4)\,.
\end{aligned}
$$

Производные $\partial^n_y\Psi^{\varepsilon x}_{m'}$, $n\le 3$, этих асимптотик в точке $y=0$ содержат разное число неизвестных функций $f^{n'x}_{m'}$, $n'\le n$. Поэтому не существует линейной комбинации производных $\partial^n_y\Psi^{\varepsilon x}_{m'}$ разных порядков, не содержащей ни одной функции $f^{n'x}_{m'}$. Для проекций $\partial^n_y\Psi^{\varepsilon x}_{am'}|_{y=0}\equiv(n!)\Psi^{\varepsilon nx}_{am'}$ производных $\partial^n_y\Psi^{\varepsilon y}_{m'}$ на функции $\Theta_{am'}(u)$, т. е. для Θ-компонент $\Psi^{\varepsilon x}_{am'}$, такие комбинации (связи (9)) при $y=0$ и $x>0$ имеются:

$$
\begin{aligned}
&\partial^a_y\Psi^{\varepsilon x}_{am'}(x,y)=0\,,\quad a\ge m'=\mu(\sigma),1,2; \\
&\left[\,3\partial^2_y - h^x_{00}(x)\right]\,\Psi^{\varepsilon}_{00}(x,y)=0\,, \\
&\partial_y\left[\,5\partial^2_y - 3h^x_{10}(x)\right]\,\Psi^{\varepsilon}_{10}(x,y) - \sqrt{3}\,V^{11}(x)\Psi^{\varepsilon x}_{00}(x,y) = \\
&-(3/x^2)\,\left\{2\ell(\ell+1)[1+\sigma(-1)^\ell]\right\}^{1/2}\partial_y\Psi^{\varepsilon x}_{11}(x,y)\,; \\
&\partial_y\left[\,5\partial^2_y - 3h^x_{11}(x)\,\right]\,\Psi^{\varepsilon x}_{11}(x,y) = -(6/x^2)\,[\ell(\ell+1)]^{1/2}\,\partial_y\Psi^{\varepsilon x}_{10}(x,y)\,. \qquad (70)
\end{aligned}
$$

Отметим, что вследствие представления (58) и известной формулы [4]

$$
[\,\partial_\theta - m'\operatorname{ctg}\theta\,]\;\Theta_{am'}(u) = [a(a+1)-m'(m'+1)]^{1/2}\,\Theta_{a,m'+1}(u) \qquad (71)
$$

при $y = 0$, $x > 0$ и всех m' имеются связи, содержащие производную по углу:

$$\partial_y^{m'} \left[\sin\theta \, \partial_\theta - m' \, \cos\theta \right] \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = 0 \, ,$$

$$\partial_y^{m'+1} \left\{ \sin\theta \, \Theta_{m'+1,m'}(u) \left[\partial_\theta - m' \, \cos\theta \right] - \right.$$
$$\left. - \sqrt{2(m'+1)} \, \sin\theta \, \Theta_{m'+1,m'+1}(u) \right\} \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = 0 \, . \quad (72)$$

Пусть $t = y$, т. е. в качестве «подвижной» используется система координат S^y. Все построения в этом случае реализуются в той же последовательности, что и в рассмотренном выше случае $t = x$. Сначала действием проектора (47) с $t = y$ на систему (21)–(23) подчиним неизвестные $\Psi_{m'}^{n\varepsilon y}(x, \theta)$ ряда (51) с $t = y$ одномерным дифференциальным уравнениям того же типа, что и уравнения (62). Затем подстановкой (55) сведем эти уравнения к цепочке рекуррентных алгебраических уравнений для искомых Θ-компонент $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}(x)$. Эта цепочка похожа на цепочку (66), но устроена так, что при любых фиксированных n и b неизвестные $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}(x)$, $\mu(\sigma) \le m' \le b$, подчинены системе уравнений с трехдиагональной матрицей. Поэтому найти эти неизвестные в явном виде более сложно, чем в случае $t = x$, когда при данных n и a искомые функции $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(x)$, $m' \le a$, подчинены системе уравнений (66) с диагональной матрицей. Поэтому выбор системы S^x для вывода разложений решений D^σ-компонент решения Ψ^ε уравнения Шредингера является оптимальным, а система S^y далее не используется.

Закончим настоящий раздел замечаниями. Как известно [5], шестимерное уравнение Шредингера (2) сводится подстановкой (48) с $t = x$ к конечной системе трехмерных уравнений для искомых D^σ-компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon x}$ волновой функции Ψ^ε. При построении дискретных аналогов такой системы предлагается использовать полученные связи (70) и (72) как дополнительные граничные условия. Таким способом можно улучшить поточечную сходимость вычисляемых D^σ-компонент к точным вблизи линейной конфигурации трех частиц.

5. СТРОЕНИЕ ЧАСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА

Построим и исследуем разложения при $x > 0$ и $y \to 0$ фаддеевской компоненты Ψ_i^ε частного решения Ψ^ε уравнения Шредингера. Для этого сначала используем бисферический базис, а затем D^σ-базис.

Докажем, что представление (31)–(35) решения Ψ^ε уравнения Шредингера в бисферическом базисе порождает аналогичное по строению разложение фаддеевской компоненты Ψ_i^ε: эта компонента — бисферический ряд

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \;\; = \;\; \sum_{ab} \Psi_{iab}^\varepsilon(x, y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) \, , \quad (73)$$

бисферические компоненты Ψ^{ε}_{iab} такого ряда — суммы

$$\Psi^{\varepsilon}_{iab}(x,y) = \sum_{n=a}^{\infty} y^n \, \Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x)\,, \quad (-1)^{n+a} = 1\,, \tag{74}$$

и поэтому имеет место представление

$$\Psi^{\varepsilon}_{i}(\mathbf{x},\mathbf{y}) \quad = \quad \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \sum_{a=\mu(\sigma)}^{n} \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^{\ell+a+\mu(\sigma)} \Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x)\, \mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})\,. \tag{75}$$

Для доказательства исследуем уравнение фаддеевской системы (3), содержащее в левой части искомую компоненту Ψ^{ε}_{i}. Заменим в этом уравнении решение уравнения Шредингера Ψ^{ε} рядом (35). Правая часть получившегося уравнения — ряд по степеням аргумента y и базисным функциям $\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}$. Поэтому искомое регулярное решение Ψ^{ε}_{i} может быть только рядом того же типа, но пока без дополнительных ограничений на индексы a, b и n, кроме условий треугольника $\mathbf{a}+\mathbf{b}=\mathbf{l}$ и четности $(-1)^{a+b}=\sigma$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{i}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n \sum_{ab} \Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x)\, \mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}\hat{x},\hat{y})\,. \tag{76}$$

В исследуемом уравнении заменим Ψ^{ε}_{i} таким рядом. Используя проектор (30), спроецируем полученное уравнение на базисные функции $\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}(\hat{x},\hat{y})$. В результате для каждой фиксированной пары индексов a и b искомые компоненты $\Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x)$, $n=0,1,\ldots$, подчинятся алгебраической и рекуррентной по индексу n цепочке уравнений

$$\begin{aligned}&\left[\, a(a+1) - (n+2)(n+3) \,\right] \Psi^{n+2,\varepsilon}_{iab}(x) = \\ &\quad = -\left[\, h_b(x) - V^{00}(x) \,\right] \Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x) - V_i(x)\, \Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)\,, \quad n=-2,-1,\ldots, \end{aligned} \tag{77}$$

где h_b — оператор (37), а $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)$ — функции, исследованные в разделе 3.

Пусть в этой цепочке $a>n$ или $n<\mu(\sigma)$, или же $n+a$ — нечетное. Тогда $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)\equiv 0$ согласно (35) и поэтому $\Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x)\equiv 0$. Далее полагаем $a\le n$, $a\ge\mu(\sigma)$, а сумму $n+a$ считаем четным числом. При таких ограничениях на индексы пробный ряд (76) становится рядом (75), а исследуемая цепочка устроена так же, как и цепочка (36) для функций $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$, и поэтому разрешима: при данных a и b все искомые функции $\Psi^{n\varepsilon}_{iab}$ с $n>a$ выражаются через неопределенную функцию $\Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x)$ с $n=a$ и известные функции $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$. Следовательно, разложения (74) и (75) существуют, что и требовалось доказать.

Отметим, что согласно (74) фаддеевские компоненты $\Psi^{\varepsilon}_{iab}(x,y)$ с четным (нечетным) индексом a — ряды по четным (нечетным) степеням аргумента y.

Получим явные асимптотики рядов (74) с $a \leq 2$ в виде подсумм их четырех или трех наиболее медленно убывающих при $y \to 0$ слагаемых. Затем выведем связи при $y = 0$ и $x > 0$ для производных $\partial_y^n \Psi^{\varepsilon}_{iab}$.

Сначала найдем функции $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)$ с $n \leq 4$ как проекции сумм (38) и (39) на функции $\mathcal{Y}^{\ell m}_{ab}$, а затем, используя формулу (29), определим компоненты $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)$ с $n = 4$. В уравнениях (77) заменим функции $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}(x)$ с $n \leq 4$ их найденными явными выражениями. Решим полученные уравнения и выразим функции $\Psi^{n\varepsilon}_{iab}(x)$ как комбинации неопределенных функции $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$ и $\Psi^{n\varepsilon}_{iab}$ с $n = a$, равных производным $(n!)^{-1}\partial_y^n \Psi^{\varepsilon}_{ab}(x,y)$ и $(n!)^{-1}\partial_y^n \Psi^{\varepsilon}_{iab}(x,y)$ при $y = 0$ и $n = a$. Используя такие комбинации, выведем искомые асимптотики рядов (74) с $a \leq 2$, а именно, асимптотику компоненты $\Psi^{\varepsilon}_{i0\ell}$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{i0\ell}(x,y) = \left\{1 + \frac{y^2}{6}\,(h_\ell - V^{00})\left[1 + \frac{y^2}{20}\,(h_\ell - V^{00})\right]\right\}\Psi^{\varepsilon}_{i0\ell}(x,0) + \\ + \frac{y^2}{6}\left\{V_i + \frac{y^2}{20}\left[(h_\ell - V^{00})\,V_i + V_i\,h_\ell\right]\right\}\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,0) + O(y^6)\,, \quad (78)$$

асимптотики компонент Ψ^{ε}_{i1b} с индексом $b = |\ell \pm (1 - \mu(\sigma))|$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{i1b}(x,y) = y\left[1 + \frac{y^2}{10}\,(h_b - V^{00})\right]\partial_y \Psi^{\varepsilon}_{i1b}(x,y)|_{y=0} + \\ + \frac{y^3}{10}\,V_i\,\partial_y \Psi^{\varepsilon}_{1b}(x,y)|_{y=0} + O(y^5) \quad (79)$$

и асимптотики компонент Ψ^{ε}_{i2b} с индексом $b = |\ell + \mu(\sigma)|$, $|\ell \pm (2 - \mu(\sigma)|$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{i2b}(x,y) = \frac{y^2}{2}\left[1 + \frac{y^2}{14}\,(h_b - V^{00})\right]\partial_y^2 \Psi^{\varepsilon}_{i2b}(x,y)|_{y=0} + \\ + \frac{y^4}{28}\,V_i\,\partial_y^2 \Psi^{\varepsilon}_{2b}(x,y)|_{y=0} + O(y^6)\,. \quad (80)$$

Вычислив производные ∂_y^n, $n \leq 4$, от этих асимптотик, получаем связи при $y = 0$ и $x > 0$ между компонентами Ψ^{ε}_{iab} и Ψ^{ε}_{ab}:

$$\begin{aligned} &\left[\,3\partial_y^2 - h_\ell(x) + V^{00}(x)\,\right]\,\Psi^{\varepsilon}_{i0\ell}(x,y) = V_i(x)\,\Psi^{\varepsilon}_{0\ell}(x,y)\,, \\ &\partial_y\left\{\,5\partial_y^2 - 3\left[\,h_b(x) - V^{00}(x)\,\right]\,\right\}\,\Psi^{\varepsilon}_{i1b}(x,y) = 3V_i(x)\,\partial_y \Psi^{\varepsilon}_{1b}(x,y)\,, \\ &\partial_y^2\left\{\,7\partial_y^2 - 6\left[\,h_b(x) - V^{00}(x)\,\right]\,\right\}\,\Psi^{\varepsilon}_{i2b}(x,y) = 6\,V_i(x)\,\partial_y^2 \Psi^{\varepsilon}_{2b}(x,y) \end{aligned} \quad (81)$$

и связи для компонент Ψ^{ε}_{iab}:

$$\partial_y^{a+1}\Psi^{\varepsilon}_{iab}(x,y) = 0\,, \quad a = 0,1,2; \quad (82)$$

$$\left[5\partial_y^4 - \left(h_\ell - V^{00}\right)^2\right]\,\Psi^{\varepsilon}_{i0\ell}(x,y) = \\ = \left[(h_\ell - V^{00})\,V_i + V_i\,h_\ell\right]\,V_i^{-1}\,(3\partial_y^2 - h_\ell + V^{00})\,\Psi^{\varepsilon}_{i0\ell}(x,y)\,.$$

Редукция шестимерных уравнения Фаддеева с помощью подстановки (73) к бесконечным системам интегродифференциальных уравнений для фаддеевских бисферических компонент Ψ^{ε}_{iab} описана в известной монографии [1] и в обзоре [16]. Сравнительный анализ дискретных сплайн-аналогов таких систем дан в обзоре [17]. Во все такие аналоги уравнений Фаддеева несложно включить полученные асимптотики (78)–(80) искомых компонент Ψ^{ε}_{iab} и доказанные связи (82). Пример такого включения дан в недавней работе [18].

Теперь исследуем разложения фаддеевской компоненты Ψ^{ε}_{i} в D^{σ}-базисе.

Ограничимся случаем $t = x$. Пусть решение Ψ^{ε} уравнения Шредингера представлено рядами (48), (57) и (60) с известными Θ-компонентами $\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}$. Используя те же приемы, что и при выводе бисферического ряда (75), нетрудно показать, что такому представлению отвечает аналогичные по строению разложения фаддеевской компоненты Ψ^{ε}_{i} и ее D^{σ}-компонент $\Psi^{\varepsilon x}_{im'}$:

$$\Psi^{\varepsilon}_{i}(\mathbf{x},\mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^{x})\, \Psi^{\varepsilon x}_{im'}(x,y,\theta)\,, \tag{83}$$

$$\Psi^{\varepsilon x}_{im'}(x,y,\theta) = \sum_{n=m'}^{\infty} y^{n} \sum_{a=m'}^{n} \Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}(x)\, \Theta_{am'}(u)\,, \quad (-1)^{n+a} = 1\,. \tag{84}$$

Вывод уравнений для неизвестных функций $\Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}$ несложен. Для этого используется только одно уравнение фаддеевской системы (3), содержащее в левой части искомую компоненту Ψ^{ε}_{i}. Сначала в этом уравнении функция Ψ^{ε} заменяется рядом (60), а фаддеевская компонента Ψ^{ε}_{i} — искомым рядом (83) с D^{σ}-компонентами (84). Затем полученное уравнение последовательно проецируются на базисные функции $D^{\ell\sigma *}_{mm'}(\omega^{x})$ и $\Theta_{am'}(u)$. В итоге для искомых Θ-компонент $\Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}(x)$ выводится простая и рекуррентная по индексу $n = -2, -1, \ldots$ цепочка алгебраических уравнений:

$$\begin{aligned} &[\, a(a+1) - (n+2)(n+3)\,]\; \Psi^{n+2,\varepsilon x}_{iam'}(x) = -V_{i}(x)\, \Psi^{n\varepsilon x}_{am'}(x) + \\ &+ x^{-2} \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma^{\ell\sigma}_{m'm''}\, q^{a}_{m'm''}\, \Psi^{n\varepsilon x}_{iam''}(x) - \left[\, h^{x}_{am'}(x) - V^{00}(x)\,\right]\, \Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}(x)\,, \end{aligned} \tag{85}$$

где $n + a$ — четное, $n \geq a \geq m'$, а $h^{x}_{am'}(x)$ — оператор (67). Эта цепочка устроена так же как и цепочка (66) для компонент $\Psi^{\varepsilon x}_{am'}$, и поэтому функции $\Psi^{n+2,\varepsilon x}_{iam'}$ удобно вычислять в порядке возрастания индекса $n = -2, -1, \ldots$ и убывания индекса $a = n, n-1, \ldots$ при каждом n. Первое уравнение ($a = n+2$) имеет вид $0\, \Psi^{n+2,\varepsilon x}_{iam'} = 0$. Его решение $\Psi^{n+2,\varepsilon x}_{iam'}(x) = g^{n+2,x}_{im'}(x)$ — некоторая нетривиальная функция аргумента x. Исключение составляет случай $\sigma = (-1)^{\ell+1}$ и $m' = 0$, когда $\Psi^{n\varepsilon x}_{in0} \equiv 0$ при всех n. Поэтому в этом случае $g^{nx}_{im'}(x) \equiv 0$ при $m' = 0$ и всех n. Обсуждаемая цепочка уравнений (85) однозначно разрешима: все функции $\Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}$ с $n > a$ выражаются через неопределенные функции $g^{nx}_{im'}$ и функции $\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}$, для которых затем используется представление через произвольные функции $f^{nx}_{m'}(x)$.

Способом, использованным при выводе соотношения (58), не трудно доказать следующее утверждение: так как в ряду (84) сумма $n+a$ — четное число, то первые два слагаемые асимптотики каждой компоненты $\Psi^{\varepsilon x}_{m'}$ при $y \to 0$, $x > 0$ содержат только неопределенные функции g^{nx}_{in} с $n = m'$, $m'+1$:

$$\Psi^{\varepsilon x}_{im'}(x,y,\theta) = \\ = y^{m'} \left[g^{m'x}_{im'}(x)\, \Theta_{m'm'}(u) + y\, g^{m'+1,x}_{i,m'+1}(x)\, \Theta_{m'+1,m'}(u) + O(y^2) \right]. \quad (86)$$

Теперь выведем явные асимптотики рядов (84) с $m' \le 2$ как подсуммы их трех, наиболее медленно убывающих при $y \to 0$ слагаемых, а затем получим связи для Θ-компонент $\Psi^{\varepsilon x}_{iam'}$. Сначала найдем функции $\Psi^{n\varepsilon}_{am'}(x)$ с $n \le 3$ как проекции сумм (68) на функции $\Theta_{am'}(u)$. В уравнениях (85) с $m' \le 2$ заменим эти функции их найденными выражениями. Решив полученные уравнения, выразим функции $\Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}(x)$ через неопределенные функции $f^{nx}_{m'} \equiv \Psi^{n\varepsilon x}_{am'}$ и $g^{nx}_{im'} \equiv \Psi^{n\varepsilon y}_{iam'}$, равные производным $(n!)^{-1}\partial^n_y \Psi^{\varepsilon x}_{m'}(x,y)$ и $(n!)^{-1}\partial^n_y \Psi^{\varepsilon x}_{im'}(x,y)$ при $y = 0$ и $n = a$. Используя такие представления, запишем асимптотики рядов (84) с $m' \le 2$ в обоих случаях $\sigma = \pm(-1)^\ell$ в виде

$$\Psi^{\varepsilon x}_{i0}(x,y,\theta) = \left\{ g^{0x}_{i0} + \frac{y^2}{6} \left[(h^x_{00} - V^{00}) g^{0x}_{i0} + V_i f^{0x}_0 \right] \right\} \Theta_{00}(u) + \\ + y \left[g^{1x}_{i0} + \frac{y^2}{10} V_i\, f^{1x}_0 \right] \Theta_{10}(u) + \\ + \frac{y^3}{10x^2} \left\{ x^2 [h^x_{10} - V^{00}]\, g^{1x}_{i0} - [2\ell(\ell+1)(1+\sigma(-1)^\ell)]^{1/2} g^{1x}_{i1} \right\} \Theta_{10}(u) + \\ + y^2\, g^{2x}_{i0}\, \Theta_{20}(u) + y^3 g^{3x}_{i0}\, \Theta_{30}(u) + O(y^4)\,, \quad (87)$$

$$\Psi^{\varepsilon x}_{i1}(x,y,\theta) = y \left\{ g^{1x}_{i1} + \frac{y^2}{10} \left[(h^x_{11} - V^{00})\, g^{1x}_{i1} + V_i\, f^{1y}_1 \right] \right\} \Theta_{11}(u) - \\ - \frac{y^3}{5x^2} \left[\ell(\ell+1) \right]^{1/2} g^{1x}_{i0}\, \Theta_{11}(u) + y^2\, g^{2x}_{i1}\, \Theta_{21}(u) + y^3\, g^{3x}_{i1}\, \Theta_{31}(u) + O(y^4)\,;$$

$$\Psi^{\varepsilon x}_{i2}(x,y,\theta) = y^2\, g^{2x}_{i2}\, \Theta_{22}(u) + y^3\, g^{3x}_{i3}\, \Theta_{32}(u) + O(y^4).$$

Вычислив производные ∂^n_y от полученных асимптотик, выводим связи при $y = 0$, $x > 0$ для проекций $\partial^n_y \Psi^{\varepsilon x}_{iam'} \equiv (n!) \Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}$ производных $\partial^n_y \Psi^{\varepsilon x}_{m'}$ на функции $\Theta_{am'}(u)$. В результате получаем, что при $y = 0$ и $x > 0$ проекции $\Psi^{\varepsilon x}_{iam'}$ фаддеевской компоненты Ψ^ε_i связаны с проекциями $\Psi^{\varepsilon x}_{am'}$ решения Ψ^ε

уравнения Шредингера соотношениями

$$
\begin{aligned}
&\left[\, 3\partial_y^2 - (h_{00}^x - V^{00}) \,\right] \, \Psi_{i00}^{\varepsilon x}(x,y) = V_i(x)\, \Psi_{00}^{\varepsilon x}(x,y)\,, \\
&\partial_y \left\{ 5\partial_y^2 + 3x^{-2} \, \left[2\ell(\ell+1)(1+\sigma(-1)^{\ell} \,\right]^{1/2} \right\} \, \Psi_{i10}^{\varepsilon x}(x,y) + \\
&+3(h_{10}^x - V^{00})\, \partial_y \Psi_{i00}^{\varepsilon x}(x,y) = 3V_i(x)\, \partial_y \Psi_{10}^{\varepsilon x}(x,y)\,, \\
&\partial_y \left\{ \, 5\partial_y^2 - 3\left[h_{11}^x(x) - V^{00}(x) \right] \, \right\} \, \Psi_{i11}^{\varepsilon x}(x,y) + \\
&+6x^{-2} \, \left[\ell(\ell+1)\right]^{1/2} \, \partial_y \Psi_{i00}^{\varepsilon x}(x,y) = 3V_i(x)\, \partial_y \Psi_{11}^{\varepsilon x}(x,y)\,.
\end{aligned}
\tag{88}
$$

Отметим, что вследствие формул (71) и (86) при $y = 0$, $x > 0$ и всех m' имеются связи, содержащие производную по углу:

$$
\begin{aligned}
&\partial_y^{m'} \left[\, \sin\theta\, \partial_\theta - m' \, \cos\theta \,\right] \, \Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x,y,\theta) = 0\,, \\
&\partial_y^{m'+1} \left\{ \, \sin\theta\, \Theta_{m'+1,m'}(u) \left[\, \partial_\theta - m' \, \cos\theta \,\right] - \right. \\
&\qquad \left. - \sqrt{2(m'+1)} \, \sin\theta\, \Theta_{m'+1,m'+1}(u) \right\} \, \Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x,y,\theta) = 0\,.
\end{aligned}
\tag{89}
$$

Завершим настоящий раздел важными замечаниями.

В работе [2], но только в случае $t = x$, шестимерные уравнения Фаддеева (3) подстановкой (83) были впервые сведены к конечной системе трехмерных дифференциальных уравнений Фаддеева для искомых D^σ-компонент $\Psi_{im'}^{\varepsilon x}$. Построение теории рассеяния в такой формулировке задачи трех частиц дано в обзоре [3], после которого трехмерные уравнения Фаддеева стали интенсивно применяться для расчета характеристик реальных трехчастичных систем. Результаты первых расчетов, выполненных в рамках таких уравнений, обсуждались в обзоре [19]. В недавней работе [20] трехмерные уравнения Фаддеева выведены в обоих случаях $t = x$ и $t = y$.

Соотношения (87) дают представление о явной зависимости искомых D^σ-компонент $\Psi_{im'}^{\varepsilon x}$ от переменных y и θ. Связи (88) позволяют восстановить производные парциальных фаддеевских Θ-компонент $\Psi_{iam'}^{\varepsilon x}$ по производным Θ-компонент $\Psi_{am'}^{\varepsilon x}$ решения уравнения Шредингера и наоборот. Связи (89) предлагается использовать в дискретных аналогах трехмерных уравнений Фаддеева для ускорения поточечной сходимости вычисляемого решения таких уравнений к точному вблизи линейной конфигурации трех частиц.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перечислим и обсудим главные результаты настоящей работы.

В разделах 2–4 показано, что в случае центральных взаимодействий (5) довольно широкого класса общее Ψ и частное Ψ^ε регулярные решения уравнения Шредингера (2) вблизи линейной конфигурации трех частиц являются рядами (17), (31) и (34), (60), (61) по целым степеням аргумента y. Ключевые для построения таких рядов компоненты $\Psi^{n}_{a\alpha}$, $\Psi^{n\varepsilon}_{ab}$ и $\Psi^{n\varepsilon x}_{am'}$ удалось подчинить простым цепочкам алгебраических уравнений (26), (36) и (66), рекуррентных по индексу n и незацепляющихся при данном n по индексу a, индексам a, b или a, m'. Предложенная редукция исходного шестимерного уравнения Шредингера (2) к таким цепочкам позволила вывести в явном виде асимптотики (40)–(42) и (69) бисферических Ψ^{ε}_{ab} и D^{σ}-компонент $\Psi^{\varepsilon x}_{m'}$ частного решения Ψ^{ε} вплоть до слагаемых $O(y^4)$. Из этих асимптотик выведены ранее неизвестные связи (43)–(45) и (70), (72).

Как было доказано в разделе 5, представлениям (31), (33) и (48), (53), (55) частного решения $\Psi^{\varepsilon}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ уравнения Шредингера (2) соответствуют аналогичные по строению разложения (74), (75) и (83), (84) фаддеевской компоненты $\Psi^{\varepsilon}_{i}(\mathbf{x},\mathbf{y})$ этого решения. Для компонент $\Psi^{n\varepsilon}_{iab}$ и $\Psi^{n\varepsilon x}_{iam'}$ этих разложений удалось вывести разрешимые в явном виде рекуррентные цепочки алгебраических уравнений (77) и (85), а затем найти явные асимптотики (78)–(80) и (86), (87) и следующие из них связи (81), (82) и (88), (89).

Предложенный в разделах 3–5 метод построения и анализа формальных разложений регулярных решений двух- и трехмерных уравнений Шредингера и Фаддеева является довольно общим и простым по следующим причинам.

Во-первых, метод применим для системы трех разных частиц с центральными парными взаимодействиями довольно общего для задач атомной и молекулярной физики типа (5) и при любых допустимых значениях полного углового момента и пространственной четности.

Во-вторых, метод позволяет исследовать полные (бесконечные) разложений регулярных решений дву- и трехмерных уравнений Шредингера и Фаддеева вблизи линейной конфигурации трех частиц.

В-третьих, в обсуждаемом методе построение разложений всех исследуемых функций сводится к решению соответствующих довольно простых рекуррентных цепочек алгебраических уравнений.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д.* Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.

2. *Kostrykin V. V., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* // Few-Body Syst. 1989. V. **6**:2. P. 97.

3. *Квицинский А. А., Кострыкин В. В., Меркурьев С. П.* // ЭЧАЯ. 1990. Т. **21**:6. С. 1301.

4. *Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. М.: Наука, 1975.

5. *Виницкий С. И., Пономарев Л. И.* // ЭЧАЯ. 1982. Т. **13**:6. С. 1336.

6. *Марчук Г. И.* Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989.

7. *Prenter P. M.* Splines and Variational Methods. New York: Wiley, 1975.

8. *Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л.* Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.

9. *Петеркоп Р. К.* Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975.

10. *Wannier G. H.* // Phys. Rev. 1953. V. **90**. P. 817.

11. *Абаренков И. В., Братцев В. Ф., Тулуб А. В.* Начала квантовой химии. М.: Высшая школа. 1989.

12. *Степанов Н. Ф., Пупышев В. И.* Квантовая механика молекул и квантовая химия. М.: МГУ, 1991.

13. *Smith F. T.* // J. Chem. Phys. 1959. V. **31**. P. 1352.

14. *Chang E. S., Fano U.* // *Phys. Rev. A.* 1972. V. **6**. P. 173.

15. *Коробов В. И.* // ЯФ. 1989. Т. **50**:6(12). С. 1595.

16. *Пупышев В. В.* // ЭЧАЯ. 1999. Т. **3**:6. С. 1562.

17. *Пупышев В. В.* // ЭЧАЯ. 2004. Т. **35**:2. С. 257.

18. *Пупышев В. В.* // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. **3**:2. С. 28.

19. *Пупышев В. В.* // ЭЧАЯ. 2002. Т. **33**:4. С. 843.

20. *Пупышев В. В.* // ТМФ. 2006. Т. **148**:2. С. 227.

Получено 14 марта 2007 г.

Редактор *М. И. Зарубина*

Подписано в печать 24.05.2007.
Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 1,94. Уч.-изд. л. 2,34. Тираж 315 экз. Заказ № 55784.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@jinr.ru
www.jinr.ru/publish/