

ОБОБЩЕНИЯ РАЗЛОЖЕНИЙ ФОКА И КАТО ДЛЯ СИСТЕМ ТРЕХ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ

В. В. Пупышев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ВВЕДЕНИЕ	763
ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И КЛЮЧЕВЫЕ СООТНОШЕНИЯ	769
Координаты.	769
Угловые базисы.	771
Операторы и их свойства.	773
Строение и редукция уравнения Шредингера.	776
Строение и редукция уравнений Фаддеева.	779
Особые конфигурации, связи и формальные разложения.	783
Гелиоподобные системы.	786
ОБОБЩЕНИЯ РАЗЛОЖЕНИЯ ФОКА	787
Примеры разложений фоковского типа.	787
Фундаментальная система регулярных решений двумерных уравнений Фаддеева.	794
Разложения регулярных решений уравнений Фаддеева.	806
Разложения регулярных решений уравнений Шредингера.	815
Приложения и основные результаты.	820
ОБОБЩЕНИЯ РАЗЛОЖЕНИЯ КАТО	821
Условие Като и постановка задачи.	821
Разложения парных и полного взаимодействий.	828
Разложения решений уравнения Шредингера.	831
Разложения решений уравнений Фаддеева.	846
РАЗЛОЖЕНИЯ В ПРЕДЕЛЕ ЛИНЕЙНОЙ КОНФИГУРАЦИИ	854
Разложения парных и полного взаимодействий.	855
Разложения решений уравнения Шредингера.	856
Разложения решений уравнений Фаддеева.	864
ОСОБЫЕ СЛУЧАИ	870
Ложные решения уравнений Фаддеева.	870

Случай нецентральных парных взаимодействий.	873
Коллапсирующие волновые функции.	874
Каналирование частиц в кристалле.	878
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	885
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	886

ОБОБЩЕНИЯ РАЗЛОЖЕНИЙ ФОКА И КАТО ДЛЯ СИСТЕМ ТРЕХ КВАНТОВЫХ ЧАСТИЦ

В. В. Пупышев

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

В обзоре использованы и развиты подходы Шредингера и Фаддеева к решению задачи трех квантовых частиц в конфигурационном пространстве. В рамках этих подходов дано описание и сравнение различных методов построения обобщений функциональных разложений Фока и Като на случай центральных или нецентральных парных взаимодействий более общего вида, чем кулоновские потенциалы. Особое внимание уделено приложениям таких обобщений для квантово-механического и численного анализа строения трехчастичных волновых функций и их фаддеевских компонент вблизи точек тройного и парных соударений и в пределе линейной конфигурации трех частиц.

In the review, the Schrödinger and Faddeev approaches to the solving of three-body quantum problem in the configuration space are implemented and developed. Within these approaches, the various methods for generalizations of Fock and Kato functional expansions to the case of two-body central or noncentral interactions of more general type as Coulomb ones are described and compared. Special attention is paid to applications of these generalizations for quantum mechanical and numerical analysis of the structure of wave functions and their Faddeev components near two- and three-body collision points and in the limit of three-body linear configuration.

PACS: 03.65.Ge

Светлой памяти А. М. Ермолаева посвящается

ВВЕДЕНИЕ

Настоящий обзор устроен следующим образом. Во введении сначала даются используемые определения оптимальной формулировки задачи нескольких квантовых частиц и функционального разложения, затем кратко обсуждается современное состояние теории дифференциальных уравнений Л. Д. Фаддеева. В разд. 1 поясняются основные определения, принятые в этой теории, и приводятся ключевые формулы. Затем в разд. 2 анализируются известные модификации разложения В. А. Фока для волновых функций гелиоподобных систем, состоящих из тяжелого ядра и двух электронов, и детально излагается альтернативный подход к выводу и анализу разложений фоковского типа для регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева, описывающих системы трех квантовых частиц с парными центральными взаимодействиями

более широкого класса, чем кулоновские потенциалы. Далее в разд. 3 приводятся примеры классического условия Т. Като и подробно описывается новый подход к построению разложений тех же решений, но уже вблизи точки столкновения двух частиц. В разд. 4 этот подход адаптируется для вывода и анализа разложений в пределе линейной конфигурации трех частиц. В разд. 5 анализируются некоторые особые случаи, в которых парные взаимодействия в системах двух и трех частиц либо включены в конечном числе парциальных волн, либо являются взаимодействиями центробежного типа или же запирающими потенциалами. В заключении сформулированы основные выводы.

Наиболее удобная и для квантово-механического и математического анализа, и для практических расчетов формулировка задачи нескольких квантовых частиц называется далее оптимальной.

Под функциональным разложением понимается представление функции в виде суммы двух или более слагаемых, называемых компонентами. Особо значимыми с теоретической и прикладной точек зрения являются факторизованные разложения функций многих переменных по функциям меньшего числа переменных, разложения в конечные суммы элементарных или известных специальных функций, а также формальные асимптотические и асимптотические функциональные разложения.

Функциональные разложения широко используются во многих разделах математики [1–12], теоретической физики [13–22] и квантовой химии [23,24].

Все обсуждаемые в настоящем обзоре теоретические подходы к решению актуальных проблем теории рассеяния для систем нескольких квантовых частиц [14, 15] не случайно основаны на тех или иных функциональных разложениях. Дело в том, что универсальным способом решения многих проблем этой теории является удачно выбранное функциональное разложение исследуемой функции и последующая оптимальная формулировка задачи для искомых компонент выбранного разложения. Два данных ниже примера — убедительное доказательство этого утверждения.

Пример 1. Функциональное разложение $T = T_1 + T_2 + T_3$ трехчастичной T -матрицы в импульсном пространстве системы трех частиц с парными центральными и короткодействующими потенциалами оказалось ключевым для впервые предложенной Л. Д. Фаддеевым в [25] математически корректной формулировке задачи трех квантовых частиц в виде системы однозначно разрешимых интегральных уравнений для искомых компонент T_1 , T_2 и T_3 . Последовавшее обобщение этого подхода для систем четырех квантовых частиц впервые дано О. Я. Якубовским в [26] и также основано на функциональных разложениях в импульсном пространстве. Исследования Фаддеева и Якубовского оказались фундаментом для становления математически корректной теории рассеяния для систем нескольких частиц [14, 15], подчиняющихся законам квантовой механики [13]. Две проблемы теории интегральных уравнений Фаддеева–Якубовского, заметно сужающие область ее

приложения, остались нерешенными: до сих пор неизвестно исчерпывающее и удобное для практических расчетов расширение этой теории для систем, содержащих заряженные частицы, и в общем случае представляется принципиально невозможной редукция интегральных уравнений к их оптимальным для численного анализа дискретным аналогам, которыми являются системы линейных уравнений с разреженными матрицами небольшой размерности и легко вычисляемыми элементами.

Пример 2. Следующий этап развития теории рассеяния для систем трех частиц начался с использования функционального разложения $\Psi = \Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3$ трехчастичной волновой функции Ψ и вывода системы дифференциальных уравнений Фаддеева [15] для фаддеевских компонент Ψ_1 , Ψ_2 и Ψ_3 .

Принципиальная проблема этого этапа заключалась в формулировке физических граничных условий для таких компонент при больших расстояниях между частицами, гарантирующих существование и единственность решений фаддеевских дифференциальных уравнений и их эквивалентность исходному трехчастичному уравнению Шредингера. Основной вклад в полное решение этой сложнейшей проблемы для систем как из нейтральных, так и из заряженных частиц дан С. П. Меркурьевым. Полный список исследований Меркурьева, приведенный в монографии [15], дополняют не менее известные фундаментальные работы [27–30]. Существенным был и вклад Меркурьева в становление и развитие основанных на конечно-разностной аппроксимации [9] методов [27,31–35] численного анализа дифференциальных уравнений Фаддеева.

В отличие от фаддеевской интегральной формулировки задачи трех частиц, ее дифференциальная формулировка в виде дифференциальных уравнений Фаддеева с найденными Меркурьевым граничными условиями при больших расстояниях между частицами имеет по крайней мере три существенных преимущества: модификация дифференциальных уравнений Фаддеева на все случаи систем трех частиц, содержащих заряженные частицы, известна; дифференциальные уравнения Фаддеева удобны для анализа строения их искомым решений; для таких уравнений несложно вывести оптимальные для численного анализа дискретные аналоги.

Теория дифференциальных уравнений Фаддеева и методика их приложения для расчетов реальных физических систем благодаря перечисленным выше преимуществам была существенно развита в исследованиях, выполненных коллегами и учениками Меркурьева или при их участии. Такими исследованиями являются: определение кулон-ядерной длины рассеяния протона на дейтроне [36, 37], анализ асимптотик фаддеевских компонент в полном и обрезанном бисферическом базисах [38], формулировка уравнений Фаддеева в модели граничных условий [39, 40], метод сильной связи каналов для уравнений Фаддеева [41], метод кластерной редукции [42–44], анализ особых спектральных свойств оператора Фаддеева [45, 46], комплексный скейлинг

уравнений Фаддеева [47], алгоритмы [48–52] численного анализа уравнений Фаддеева, использующие конечно-разностную аппроксимацию [9], и алгоритмы [53–60], основанные на разложениях искомого решения по базисным квинтетным сплайнам [10, 11].

Применение дифференциальных уравнений Шредингера и Фаддеева для достоверного расчета столкновений в системе трех частиц в пределе низких энергий, расчета слабосвязанных состояний, для вычисления астрофизических S -факторов, сечений трехчастичных ядерных, атомных и молекулярных реакций прежде всего требует детального анализа структуры этих уравнений, их особых решений, исследования различных функциональных разложений искомого решения, формулировки граничных условий в пределе малых расстояний между частицами не только для искомого решения, но и для их частных производных и, наконец, разработки экономичных способов вычисления, включающих такие условия.

Решению перечисленных выше задач посвящена серия авторских исследований [61–84], выполненных методами функциональных разложений для систем нескольких квантовых частиц [85].

В [61–65] дан анализ кинематического преобразования в задаче трех частиц; предложена редукция шестимерных дифференциальных уравнений Фаддеева к удобным для качественного и численного исследования системам трех-, дву- и одномерных уравнений; получены адаптированные для анализа как функций кинематического угла и экономичного вычисления представления ядер интегральных операторов систем двумерных уравнений Фаддеева и коэффициентов Рейнала–Реваи [17], содержащихся в системах одномерных уравнений Фаддеева.

Особенности и новизна предложенного в [61–65] подхода заключались во введении в теорию дифференциальных уравнений Фаддеева оператора кинематического преобразования; выводе и применении операторных представлений парных и полного взаимодействий, свободного и полного трехчастичных гамильтонианов в базисах из D^σ -функций, гипергармоник, бисферических гармоник и присоединенных полиномов Лежандра и в широком использовании нетрадиционных «подвижных» систем координат с осью квантования, направленной вдоль вектора, соединяющего третью частицу с центром масс пары других частиц.

В [66–72] доказаны критерии существования, созданы методы анализа и вычисления физических слагаемых центральных парных взаимодействий [66, 67] и двух классов точных решений дифференциальных уравнений Фаддеева: класса всех ложных решений [68, 69] и класса факторизованных решений [70–72] в случае парных взаимодействий центробежного типа.

Представленные в [66–72] методы построения и анализа ложных слагаемых и точных решений основаны на разложениях по гипергармоникам и исключительно просты, потому что исходная задача сводится к анализу ма-

тричных уравнений $\mathbf{A}\mathbf{B} = 0$ с легко вычисляемой матрицей \mathbf{A} и конечным столбцом \mathbf{B} искомым констант.

В итоге выполненного в [70–72] анализа впервые найден и исследован класс точных факторизованных решений, представимых в виде произведений зависящей от гиперрадиуса функции Бесселя и функции гиперугла, подчиненной интегродифференциальной краевой задаче с однородными граничными условиями, и доказана теорема существования и единственности точных решений такого класса, а чтобы точные решения можно было бы использовать как эталонные, коэффициенты их разложений затабулированы.

В работах [73–75] дан анализ достаточного условия коллапса и строения найденного физически приемлемого класса волновых функций связанных состояний трех тождественных бозонов в случае нулевого полного момента и S -волновых парных взаимодействий центробежного типа. В этих же работах для таких трехчастичных систем предложен метод построения класса факторизованных коллапсирующих (локализующихся в малой окрестности точки тройного удара) решений уравнений Фаддеева.

Этим методом впервые доказано, что коллапс трех бозонов возможен при любой отрицательной константе парного взаимодействия; получено и исследовано двухпараметрическое (параметры: константа разделения аргументов и полная энергия) семейство физически приемлемых волновых функций трехбозонных связанных состояний; попутно дан качественный и численный анализ спектра и коллапса частицы в поле, пропорциональном квадрату секанса расстояния [74], и в нелокальном поле центробежного типа [75].

В серии работ [67] и [76–81] предложены оптимальные методы построения формальных асимптотических разложений регулярных решений трех- и двумерных уравнений Шредингера и Фаддеева вблизи точек тройного [67, 76–78] и парных [79, 80] ударов и в пределе линейной конфигурации трех частиц [81] в случае центральных или нецентральных парных взаимодействий, представимых рядами по целым ($n = -1, 0, \dots$) степеням расстояния между частицами.

Этими методами впервые выведены линейные соотношения (связи) между частными производными регулярных решений дву- и трехмерных уравнений Шредингера и Фаддеева в точках парного и тройного ударов и в пределе линейной конфигурации трех частиц и также впервые все выведенные разложения определены в виде бесконечных рядов, строение которых исследовано в трех типичных для ядерной физики [18] случаях: в пределе нулевых аргументов потенциалы имеют сингулярность кулоновского типа (случай А)), пропорциональны первой степени их аргументов (случай В)) или же являются рядами только по четным степеням их аргументов (случай С)).

В [82–84] создан метод сплайн-разложений для численного анализа трех-, дву- и одномерных уравнений Фаддеева: предложены довольно простые сплайн-алгоритмы численного анализа таких уравнений и методика тестиро-

вания сплайн-алгоритмов на поточечную сходимость при измельчении сетки, включающая описание различных способов применения найденных в [68–72] точных решений как эталонных.

Основные преимущества созданного метода таковы: поточечная сплайн-аппроксимация и искомого решения, и его частных производных вплоть до производных четвертого порядка; простота, обусловленная тем, что предложенные дискретные сплайн-аналоги уравнений Фаддеева — линейные системы с существенно разреженными матрицами блочной структуры; экономичность алгоритмов численного анализа таких аналогов, обеспеченная применением предложенного блочного аналога схемы исключения Гаусса.

Обсуждаемый метод сплайн-разложений [82–84] является наиболее полным из всех известных, ибо содержит набор простых сплайн-алгоритмов обычной и повышенной точности; описанные способы применения найденных точных решений как эталонных; а также оригинальную методику тестирования сплайн-алгоритмов на поточечную сходимость при измельчении сетки и численного определения порядков аппроксимации решения редуцированных уравнений Фаддеева и его частных производных в узлах и вне узлов выбранной сетки.

Сложнейшей проблемой современной теории рассеяния для нескольких квантовых частиц является расширение подхода Фаддеева для описания многоканального рассеяния с поглощением в системе трех частиц. Недавно в [86] предложено обобщение этого подхода на случай комплексных парных взаимодействий и дано корректное определение сечения поглощения в случае рассеяния с перестройкой.

Другой, не менее значимой с точки зрения практических приложений, проблемой современной теории рассеяния для нескольких квантовых частиц является вывод и анализ асимптотических разложений волновой функции и ее фаддеевских компонент вблизи точек тройного и парного соударений и в пределе линейной конфигурации трех частиц. Оптимальное и полное решение этой сложной задачи заключается в редукции уравнений Шредингера и Фаддеева к наиболее простым для исследования и расчета ключевым рекуррентным цепочкам уравнений минимально возможной размерности, в последующем доказательстве однозначной разрешимости таких цепочек и в анализе их строения от функционального вида парных взаимодействий.

Такое полное решение можно получить, следуя известному в теории дифференциальных уравнений [2] подходу [3], в два этапа. Первый из них — вывод формальных асимптотических разложений, а второй — доказательство хотя бы асимптотической сходимости и дифференцируемости разложений, полученных на первом этапе. Как пояснялось в предыдущем обзоре [67], для систем атомного типа [19,20] с чисто кулоновскими парными взаимодействиями известны многочисленные реализации первого этапа. Реализации второго этапа до сих пор неизвестны.

Проблема построения асимптотик волновых функций вблизи точек тройного и парных соударений исследовалась многими авторами.

Однако в современной физической литературе отсутствует

- во-первых, сравнительный анализ различных подходов к решению этой проблемы в рамках трехчастичных дифференциальных уравнений Шредингера [13] или Фаддеева [15];

- во-вторых, подробное и единообразное описание обобщений разложений Фока и Като для волновых функций трехчастичных систем ядерного [18] и молекулярного [23, 24] типов с парными взаимодействиями, не являющимися кулоновскими потенциалами;

- в-третьих, анализ перспективных подходов к выводу разложений волновых функций в пределе линейной конфигурации трех частиц.

Восполнить указанный пробел — главная цель настоящего обзора.

1. ОСНОВНЫЕ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И КЛЮЧЕВЫЕ СООТНОШЕНИЯ

В настоящем разделе перечислены только те известные определения и соотношения, которые потребуются нам далее. Вывод каждого из приведенных соотношений детально изложен и пояснен примерами в [65, 69, 79].

1.1. Координаты. Используем систему единиц, в которой заряд e электрона e^- и константа Планка \hbar равны единице. В трехмерном координатном пространстве \mathcal{R}^3 фиксируем правую декартову систему координат S_3 с направляющими ковариантными ортами $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2$ и $\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2$ 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 и m_3 и нулевыми либо ненулевыми электрическими зарядами z_1, z_2, z_3 . Пусть в этой системе координат \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 [15]:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{ij}}(\mathbf{a}_j - \mathbf{a}_i), & \mu_{ij} &\equiv m_i m_j / (m_i + m_j); \\ \mathbf{y}_k &\equiv \sqrt{2\mu_{k,ij}} \left(\frac{m_i \mathbf{a}_i + m_j \mathbf{a}_j}{m_i + m_j} - \mathbf{a}_k \right), & \mu_{k,ij} &\equiv \frac{m_k (m_i + m_j)}{m_1 + m_2 + m_3}, \end{aligned} \quad (1.1)$$

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 . Поэтому $\{i, j, k\} = \{1, 2, 3\}, \{2, 3, 1\}, \{3, 1, 2\}$.

Векторы \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i объединим в двухкомпонентный вектор-столбец $(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)^T$ и в шестимерный вектор $\mathbf{r}_i \equiv (\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) \in \mathcal{R}^6$ с обычными гиперсферическими координатами (r, Ω_i) , где $r \equiv (x_i^2 + y_i^2)^{1/2}$ — гиперрадиус, а $\Omega_i \equiv (\hat{x}_i, \hat{y}_i, \varphi_i)$ — набор из пяти углов: $\hat{x}_i \equiv (\theta_{x_i}, \varphi_{x_i})$ и $\hat{y}_i \equiv (\theta_{y_i}, \varphi_{y_i})$ — пары

сферических углов векторов $\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i$ в системе S_3 , а $\varphi_i \equiv \arctg(y_i/x_i)$. Пусть $u_i \equiv \cos \theta_i$, где θ_i — угол между векторами \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i .

Таким образом, в \mathcal{R}^6 имеется три ($i = 1, 2, 3$) якобиевские или декартовы ($\langle \mathbf{r}_i | = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$) и три соответствующие им гиперсферические ($\langle \mathbf{r}_i | = \langle r, \Omega_i |$) координатные представления. Переход от представления $\langle \mathbf{r}_i |$ к другому представлению $\langle \mathbf{r}_k |$, $k \neq i$, называется кинематическим преобразованием [65]. Для столбцов, составленных из векторов Якоби, это преобразование имеет вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_k \\ \mathbf{y}_k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} +c_{ki} & s_{ki} \\ -s_{ki} & c_{ki} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_i \\ \mathbf{y}_i \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_{ki} \\ s_{ki} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \cos \gamma_{ki} \\ \sin \gamma_{ki} \end{pmatrix}, \quad (1.2)$$

где значение кинематического угла γ_{ki} определяется только отношением масс частиц и четностью перестановки триады индексов $\{i, j, k\}$. Вследствие кинематической связи векторы \mathbf{x}_k и \mathbf{y}_k являются функциями векторов $\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i$ и параметра γ_{ki} , а все гиперуглы набора Ω_k можно представить как функции гиперуглов набора Ω_i и параметра γ_{ki} . Отметим этот факт соотношениями

$$\mathbf{x}_k = \mathbf{x}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i; \gamma_{ki}), \quad \mathbf{y}_k = \mathbf{y}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i; \gamma_{ki}), \quad \Omega_k = \Omega_k(\Omega_i; \gamma_{ki})$$

и приведем два примера: в представлении $\langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$ длины x_k и y_k векторов \mathbf{x}_k и \mathbf{y}_k — функции длин x_i, y_i векторов и косинуса u_i угла θ_i между ними, выраженного через сферические углы \hat{x}_i и \hat{y}_i :

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i | x_k \rangle &= x_k(x_i, y_i, u_i; \gamma_{ki}) = [(c_{ki} x_i)^2 + 2 c_{ki} s_{ki} x_i y_i u_i + (s_{ki} y_i)^2]^{1/2}, \\ \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i | y_k \rangle &= y_k(x_i, y_i, u_i; \gamma_{ki}) = [(s_{ki} x_i)^2 - 2 c_{ki} s_{ki} x_i y_i u_i + (c_{ki} y_i)^2]^{1/2}, \end{aligned} \quad (1.3)$$

а в представлении $\langle r, \Omega_i |$ угол φ_k — функция переменных φ_i и u_i :

$$\begin{aligned} \varphi_k(\varphi_i, u_i; \gamma_{ki}) &= \\ &= \arccos \{ [\cos(\gamma_{ki} - \varphi_i)]^2 + (1/2)(u_i - 1) \sin 2\gamma_{ki} \sin 2\varphi_i \}^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Предположим, что $u_i \neq \pm 1$. Для каждого $i = 1, 2, 3$ введем в \mathcal{R}^3 две ($t = x_i, y_i$) правые, декартовы и «подвижные» системы координат S_3^t с осями $\mathbf{e}_1^t, \mathbf{e}_2^t, \mathbf{e}_3^t$. Пусть начальные точки O^t всех ($t = x_i, y_i$, а $i = 1, 2, 3$) шести подвижных систем S_3^t совпадают с начальной точкой O фиксированной системы координат S_3 и при $t = x_i$

$$(\mathbf{y}_i \cdot \mathbf{e}_1^t) > 0, \quad (\mathbf{y}_i \cdot \mathbf{e}_2^t) = 0, \quad (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{e}_3^t) = x_i,$$

а при $t = y_i$

$$(\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{e}_1^t) < 0, \quad (\mathbf{x}_i \cdot \mathbf{e}_2^t) = 0, \quad (\mathbf{y}_i \cdot \mathbf{e}_3^t) = y_i.$$

Тогда орты $\mathbf{e}_2^{x_i}$ и $\mathbf{e}_2^{y_i}$ коллинеарны нормали $\mathbf{N} \equiv \mathbf{x}_i \times \mathbf{y}_i$ к плоскости \mathcal{P} трех частиц и эта плоскость совпадает с плоскостями \mathcal{P}_{13}^t ортов \mathbf{e}_1^t и \mathbf{e}_3^t , $t = x_i, y_i$.

Система $S_3^{y_i}$ получается поворотом системы $S_3^{x_i}$ вокруг орта $\mathbf{e}_2^{x_i} = \mathbf{e}_2^{y_i}$ на угол θ_i между векторами \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i , а переход $S_3 \rightarrow S_3^t$ определяется совокупностью $\omega^t = (\varphi_t, \theta_t, \gamma^t)$ углов Эйлера [16], в которой

$$\cos \gamma^t = \operatorname{ctg} \theta_i \cos \theta_t - \operatorname{cosec} \theta_i \cos \theta_{t'}, \quad t, t' = x_i, y_i, \quad t' \neq t.$$

1.2. Угловые базисы. В качестве угловых базисных функций в задаче трех частиц наиболее часто используются сферические функции [16]

$$Y_{c\delta}(\hat{q}) = (2\pi)^{-1/2} \exp(i\delta\varphi_q) \Theta_{c\delta}(\cos \theta_q), \quad \hat{q} = \hat{x}, \hat{y}, \quad (1.5)$$

бисферические функции (биполярные гармоники) [16]

$$\langle \hat{x}, \hat{y} | \ell m a b \rangle \equiv \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) \equiv \sum_{\alpha} C_{a\alpha b}^{\ell m} Y_{a\alpha}(\hat{y}) Y_{b\beta}(\hat{x}), \quad (1.6)$$

гипергармоники [17]

$$Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i) \equiv 2 \operatorname{cosec}(2\varphi_i) \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i), \quad (1.7)$$

а также введенные в [65] функции

$$\tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) \equiv N_{Lab} (\sin \varphi_i)^{a+1} (\cos \varphi_i)^{b+1} P_n^{(a+1/2, b+1/2)}(\cos 2\varphi_i), \quad (1.8)$$

хорошо известные D -функции Вигнера $D_{mm'}^{\ell*}$ и D^σ -функции [87]:

$$D_{mn'}^{\ell\sigma*}(\omega^t) \equiv \left[\frac{2\ell + 1}{16\pi^2(1 + \delta_{n'0})} \right]^{1/2} \times \\ \times \left[D_{mn'}^{\ell*}(\omega^t) + \sigma(-1)^{\ell-n'} D_{m, -n'}^{\ell*}(\omega^t) \right]. \quad (1.9)$$

В формулах (1.5)–(1.9) обозначения стандартные: $\Theta_{a\alpha}$ — нормированные присоединенные полиномы Лежандра; $P_n^{(a,b)}$ — полиномы Якоби; $C_{a\alpha b}^{\ell m}$ — коэффициенты Клебша–Гордана; N_{Lab} — известные множители; δ_{ab} — символ Кронекера; а индексы могут принимать только следующие значения:

$$\ell = 0, 1, \dots; \quad m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell; \quad |a - b| \leq \ell \leq a + b; \\ L = a + b + 2n, \quad n = 0, 1, \dots; \quad \alpha = -a, -a + 1, \dots, a; \\ \sigma = \pm (-1)^\ell, \quad \mu(\sigma) \equiv [1 - (-1)^\ell \sigma]/2, \quad n' = \mu(\sigma), \mu(\sigma) + 1, \dots, \ell.$$

Поэтому при данных значениях полного углового момента ℓ и полной пространственной четности σ минимальное значение L_{\min} гипермомента L равно

$\ell + \mu(\sigma) = a + b$, а $\mu(\sigma) = 0$ для нормальной четности $\sigma = (-1)^\ell$ и $\mu(\sigma) = 1$ для аномальной четности $\sigma = (-1)^{\ell+1}$.

Множество $\left\{ \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) \right\}_{L=a+b}^\infty$ функций \tilde{W}_{Lab} с фиксированными a и b ортонормировано на отрезке $0 \leq \varphi_i \leq \pi/2$:

$$\langle \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) | \tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i) \rangle \equiv \int_0^{\pi/2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) \tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i) d\varphi_i = \delta_{LL'}. \quad (1.10)$$

В D^σ -базисе произведение $Y_{a\alpha}(\hat{y}_i) Y_{b\beta}(\hat{x}_i)$ сферических функций можно представить конечной суммой [79]:

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

$$\langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega_i^t) | Y_{a\alpha}(\hat{y}_i) Y_{b\beta}(\hat{x}_i) \rangle = \left[\frac{1 + \sigma(-1)^{a+b}}{1 + \delta_{m'0}} \right]^{1/2} (-1)^{m+m'} \times$$

$$\times C_{a\alpha b\beta}^{\ell-m} \begin{cases} (-1)^a C_{a-m'\ell m'}^{b0} \Theta_{am'}(u_i), & t = x_i, \\ (-1)^{b+m'} C_{b-m'\ell m'}^{a0} \Theta_{bm'}(u_i), & t = y_i, \end{cases} \quad (1.11)$$

а бисферическую гармонику — конечной суммой [88]:

$$\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega_i^t) | \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \rangle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega_i^t), \quad (1.12)$$

$$\langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega_i^t) | \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \rangle = \begin{cases} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u_i), & t = x_i, \\ (-1)^{m'} T_{ba}^{\ell m'} \Theta_{bm'}(u_i), & t = y_i, \end{cases}$$

где $T_{ab}^{\ell m'}$ — коэффициенты Ченга–Фано [88].

Для любой гипергармоники $Y_{La'b'}^{\ell m}$, зависящей от гиперуглов Ω_k , выраженных через гиперуглы Ω_i и угол γ_{ki} , верно представление [17, 65]

$$Y_{La'b'}^{\ell m}(\Omega_k(\Omega_i; \gamma_{ki})) = Y_{La'b'}^{\ell m}(\Omega'(\Omega; \gamma)) = \sum_{ab} \langle ab | K(\gamma) | a'b' \rangle_{L\ell} Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad (1.13)$$

где $\langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell}$ — матричные элементы оператора кинематического преобразования $K(\gamma_{ki})$ в обкладках гипергармоник $Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i)$ и $Y_{La'b'}^{\ell m}(\Omega_i)$. Как показано в [65], эти элементы пропорциональны коэффициентам Рейнала–Реваи [17].

1.3. Операторы и их свойства. Пусть \mathbf{l}_{x_i} и \mathbf{l}_{y_i} — операторы угловых моментов, сопряженные векторам \mathbf{x}_i и \mathbf{y}_i , а $\mathbf{l} \equiv \mathbf{l}_{x_i} + \mathbf{l}_{y_i} = l_1 \mathbf{e}_1 + l_2 \mathbf{e}_2 + l_3 \mathbf{e}_3$ и \mathbf{L} — операторы полного углового момента и гипермомента, а P — оператор инверсии $\mathbf{r}_i = (\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) \rightarrow -\mathbf{r}_i = (-\mathbf{x}_i, -\mathbf{y}_i)$.

Далее рассматриваются только регулярные (ограниченные при всех значениях их аргументов) функции. Класс таких функций, заданных в \mathcal{R}^6 , обозначается символом \mathcal{A} . По определению подмножество \mathcal{A}^ε , $\varepsilon \equiv \{\ell, m, \sigma\}$, этого класса состоит из собственных функций операторов \mathbf{l}^2 , l_3 и P : если

$$[\mathbf{l}^2 - \ell(\ell + 1)] \Psi^\varepsilon = 0, \quad (l_3 - m) \Psi^\varepsilon = 0, \quad (P - \sigma) \Psi^\varepsilon = 0, \quad (1.14)$$

то $\Psi^\varepsilon \in \mathcal{A}^\varepsilon \in \mathcal{A}$. Подмножество \mathcal{A}^ε является физически важным по следующей причине. Если в системе трех частиц парные взаимодействия центральные или нецентральные, но включенные в конечном числе парциальных волн, то полный гамильтониан H системы трех частиц коммутирует с операторами \mathbf{l}^2 , l_3 и P , и поэтому полный набор ε сохраняющихся квантовых чисел состоит из собственных значений этих трех операторов: $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$.

Проектор $\Pi^\varepsilon = (\Pi^\varepsilon)^2$ на подмножество \mathcal{A}^ε в бисферическом базисе является бесконечным рядом:

$$\begin{aligned} \Pi^\varepsilon(\hat{x}_i, \hat{y}_i) &= (1/2) \sum_{\mathbf{a}+\mathbf{b}=\mathbf{l}} [1 + \sigma(-1)^{a+b}] |\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i)\rangle \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i)| = \\ &= \sum_{b=\mu(\sigma)}^{\infty} \sum_a |\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i)\rangle \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i)|, \end{aligned} \quad (1.15)$$

в гиперсферическом базисе представляется бесконечным рядом

$$\Pi^\varepsilon(\Omega_i) = \sum_{b=\mu(\sigma)}^{\infty} \sum_a \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} |Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i)\rangle \langle Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i)|, \quad (1.16)$$

а в D^σ -базисе — конечной суммой

$$\Pi^\varepsilon(\omega_i^t) \equiv \Pi^{\varepsilon t} = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} |D_{mm'}^{\ell \sigma^*}(\omega_i^t)\rangle \langle D_{mm'}^{\ell \sigma^*}(\omega_i^t)|, \quad t = x_i, y_i. \quad (1.17)$$

Проекционный образ $\Psi^\varepsilon = \Pi^\varepsilon \Psi$ любой функции Ψ класса \mathcal{A} — функция Ψ^ε класса \mathcal{A}^ε .

Свободный гамильтониан H_0 системы трех частиц в декартовом представлении $\langle \mathbf{r}_i | = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$ выражается суммой двух операторов Лапласа:

$$\begin{aligned} H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) &\equiv -(\Delta_{x_i} + \Delta_{y_i}) = \\ &= -x_i^{-2} \partial_{x_i} (x_i^2 \partial_{x_i}) + x_i^{-2} \mathbf{l}_{x_i}^2(\hat{x}_i) - y_i^{-2} \partial_{y_i} (y_i^2 \partial_{y_i}) + y_i^{-2} \mathbf{l}_{y_i}^2(\hat{y}_i), \end{aligned} \quad (1.18)$$

а в гиперсферическом представлении $\langle \mathbf{r}_i | = \langle r, \Omega_i |$ — суммой

$$H_0(r, \Omega_i) = -r^{-5} \partial_r (r^5 \partial_r) + r^{-2} \mathbf{L}^2(\Omega_i), \quad (1.19)$$

где \mathbf{L}^2 — квадрат шестимерного оператора гипермомента \mathbf{L} :

$$\mathbf{L}^2(\Omega_i) \equiv -\partial_{\varphi_i}^2 - 4 \operatorname{ctg} 2\varphi_i \partial_{\varphi_i} + \frac{\mathbf{l}_{x_i}^2}{(\cos \varphi_i)^2} + \frac{\mathbf{l}_{y_i}^2}{(\sin \varphi_i)^2}. \quad (1.20)$$

В D^σ -базисе для оператора H_0 верны два ($t = x_i, y_i$) представления:

$$H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = \sum_{\ell m \sigma} \sum_{m''=m'-1}^{m'+1} |D_{mm'}^{\ell \sigma *}(\omega_i^t)\rangle H_{0m''m'}^{\ell \sigma t}(x_i, y_i, \theta_i) \langle D_{mm''}^{\ell \sigma *}(\omega_i^t)|. \quad (1.21)$$

Доказательство в случае $t = x_i$, когда $S_3^{x_i}$ — подвижная система, детально описано в [87] и основано на представлении $\mathbf{l}_{x_i} = \mathbf{1} - \mathbf{l}_{y_i}$. В случае $t = y_i$, когда $S_3^{y_i}$ — подвижная система, доказательство дается аналогичным способом, но используется представление $\mathbf{l}_{y_i} = \mathbf{1} - \mathbf{l}_{x_i}$. В обоих ($t = x_i, y_i$) случаях

$$H_{0mm}^{\ell \sigma t}(x_i, y_i, \theta_i) = -\partial_{x_i}^2 - \left(\frac{2}{x_i}\right) \partial_{x_i} - \partial_{y_i}^2 - \left(\frac{2}{y_i}\right) \partial_{y_i} + \\ + \left(\frac{r}{x_i y_i}\right)^2 Q_{mm}(\theta_i) + \frac{\ell(\ell+1) - m^2}{t^2}, \quad (1.22)$$

$$H_{0mm'}^{\ell \sigma t}(x_i, y_i, \theta_i) = \left(\frac{\gamma_{mm'}^{\ell \sigma}}{t^2}\right) Q_{mm'}(\theta_i), \quad m' = m \pm 1;$$

где для сокращения записи введены коэффициенты

$$\gamma_{m', m'+1}^{\ell \sigma} \equiv \{ [1 + \delta_{m'0} \sigma (-1)^\ell] [\ell(\ell+1) - m'(m'+1)] \}^{1/2}, \quad (1.23)$$

$$\gamma_{m', m'-1}^{\ell \sigma} \equiv (1 - \delta_{m'0}) \{ [1 + \delta_{m'1} \sigma (-1)^\ell] [\ell(\ell+1) - m'(m'-1)] \}^{1/2}$$

и операторы

$$Q_{m'm'}(\theta_i) \equiv -(\sin \theta_i)^{-1} \partial_{\theta_i} (\sin \theta_i \partial_{\theta_i}) + (m' / \sin \theta_i)^2, \quad (1.24)$$

$$Q_{m', m' \pm 1}(\theta_i) \equiv \mp \partial_{\theta_i} + (m' \mp 1) \operatorname{ctg} \theta_i.$$

Эти операторы отображают функцию $\Theta_{am'}(u_i)$, $u_i = \cos \theta_i$, по правилам [16]:

$$[Q_{m'm'}(\theta_i) - a(a+1)] \Theta_{am'}(u_i) = 0; \\ Q_{m'm''}(\theta_i) \Theta_{am''} = q_{m'm''}^a \Theta_{am'}(u_i), \quad (1.25) \\ q_{m'm''}^a \equiv [a(a+1) - m'm'']^{1/2}, \quad m'' = m' \pm 1,$$

и поэтому выполняется соотношение

$$[\partial_\theta - m' \operatorname{ctg} \theta] \Theta_{am'}(u) = [a(a+1) - m'(m'+1)]^{1/2} \Theta_{a,m'+1}(u). \quad (1.26)$$

В гиперсферическом представлении $\langle r, \Omega_i |$ оператор

$$\tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i) \equiv -\partial_{\varphi_i}^2 + \frac{a(a+1)}{(\sin \varphi_i)^2} + \frac{b(b+1)}{(\cos \varphi_i)^2} \quad (1.27)$$

порождается квадратом (1.20) оператора гипермомента \mathbf{L} . Все функции (1.8) являются собственными для оператора $\tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i)$:

$$[\tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i) - (L+2)^2] \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) = 0; \quad L = a+b, a+b+2, \dots \quad (1.28)$$

Известный в теории дифференциальных уравнений Фаддеева [15] геометрический оператор $h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki})$ порождается введенным в [64] и исследованным в [65] оператором кинематического преобразования $K(\gamma_{ki})$ и отображает все функции $\tilde{W}_{La'b'}(\varphi_k)$ с $L = a' + b', a' + b' + 2, \dots$ по правилу [64]

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | \tilde{W}_{La'b'}(\varphi_k) \rangle &\equiv \int_{C_-(\varphi_i; \gamma_{ki})}^{C_+(\varphi_i; \gamma_{ki})} h_{aba'b'}^\ell(\varphi_i, \varphi_k; \gamma_{ki}) \tilde{W}_{Lab}(\varphi_k) d\varphi_k = \\ &= \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i), \end{aligned} \quad (1.29)$$

где пределы интегрирования C_\pm — ломаные линии:

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

а ядра $h_{aba'b'}^\ell(\varphi_i, \varphi_k; \gamma_{ki})$ представляются двойными конечными суммами [64, 65] по присоединенным полиномам Лежандра.

Всюду далее, пока не оговорено, все парные взаимодействия V_k , $k = 1, 2, 3$, считаются операторами умножения на центральные (сферически-симметричные) потенциалы $V_k(x_k)$. К ним относятся кулоновские потенциалы

$$V_k(x_k) = q_k/x_k, \quad q_k \equiv z_i z_j \sqrt{2\mu_{ij}}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (1.30)$$

и потенциалы более общего вида

$$V_k(x_k) = q_k/x_k + \bar{V}_k(x_k) = \sum_{n=-1}^{\infty} V_{kn} x_k^n, \quad k = 1, 2, 3, \quad (1.31)$$

где $q_k \equiv V_{k,-1}$ и по предположению \bar{V}_k — аналитическая функция, убывающая при $x_k \rightarrow \infty$ не медленнее, чем $O(x_k^{-3})$.

Для квантовой теории рассеяния типичными являются три случая:

$$\text{A) } V_{k,-1} \neq 0; \quad \text{B) } V_{k,-1} = 0, V_{k1} \neq 0; \quad \text{C) } V_{k,2n-1} = 0, \forall n. \quad (1.32)$$

1.4. Структура и редукция уравнения Шредингера. Свободным уравнением Шредингера для системы $\{p_1, p_2, p_3\}$ трех частиц, обладающей полной энергией E , называется уравнение [13]

$$H_0(\mathbf{r}_i) \Psi(\mathbf{r}_i) = E\Psi(\mathbf{r}_i), \quad \mathbf{r}_i \in \mathcal{R}^6. \quad (1.33)$$

Любая гипергармоника $Y_{Lab}^{\ell m}$ является собственной функцией [17] оператора H_0 . Поэтому фундаментальное решение $\Psi = \Psi_0^\varepsilon$ уравнения (1.33)

$$\Psi_0^\varepsilon(\mathbf{r}_i) = r^{-2} Z_{L+2}(z) Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad z \equiv r\sqrt{E}, \quad \varepsilon = \{L, a, b, \ell, m, \sigma\}, \quad (1.34)$$

обладает тем же набором квантовых чисел ε , что и гипергармоника $Y_{Lab}^{\ell m}$, и содержит в качестве множителя решение Z_ν , $\nu = L + 2$, уравнения Бесселя [4]

$$(z^2 \partial_z^2 + z \partial_z + z^2 - \nu^2) Z_\nu(z) = 0. \quad (1.35)$$

Следовательно, при $E < 0$ не существует никакого регулярного решения Ψ , отличного от тривиального, а при $E \geq 0$ фундаментальное регулярное решение дается формулой (1.34), в которой Z_{L+2} — регулярная функция Бесселя J_{L+2} . Любое регулярное решение уравнения (1.33) можно представить линейной комбинацией функций (1.34) и некоторых коэффициентов B_{ab}^L . Например, решение $\Psi = \Psi_0^\varepsilon$ с квантовыми числами $\varepsilon = \{L, \ell, m, \sigma\}$ — конечная сумма

$$\Psi_0^\varepsilon(\mathbf{r}) = r^{-2} J_{L+2}(z) \sum_{ab} B_{ab}^L Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad (-1)^{a+b} = \sigma, \quad (1.36)$$

а решение Ψ^ε с квантовыми числами $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$ — бесконечный ряд

$$\Psi_0^\varepsilon(\mathbf{r}) = r^{-2} \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} \sum_{ab} B_{ab}^L J_{L+2}(z) Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega), \quad (-1)^{a+b} = \sigma. \quad (1.37)$$

Уравнение Шредингера для системы $\{p_1, p_2, p_3\}$ трех взаимодействующих частиц обычно приводится в операторной форме [13]:

$$(H - E) \Psi = 0, \quad H \equiv H_0 + V, \quad V \equiv V_1 + V_2 + V_3, \quad (1.38)$$

но при этом подразумевается, что все парные взаимодействия заданы в своих собственных представлениях, а все операторы и искомое решение Ψ — в каком-то одном представлении $\langle \mathbf{r}_i |$, которое всегда оказывается несобственным для операторов V_j и V_k . Поэтому в выбранном представлении $\langle \mathbf{r}_i |$ операторное уравнение (1.38) становится дифференциальным уравнением в \mathcal{R}^6 .

Такое уравнение в представлении $\langle \mathbf{r}_i | = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$ записывается в виде

$$\left[H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) + V_i(x_i) + \sum_{k \neq i} V_k(x_k(x_i, y_i, u_i; \gamma_{ki})) - E \right] \Psi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = 0, \quad (1.39)$$

где x_k — функция (1.3) переменных x_i, y_i и u_i , а $H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ — оператор (1.18).

Общее, не обладающее никакими квантовыми числами, кроме полной энергии E , регулярное решение $\Psi(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) \in \mathcal{A}$ уравнения (1.39) можно представить бесконечными сферическими или бисферическими рядами со сферическими или бисферическими компонентами $\Psi_{b\beta}$ или Ψ_{ab} :

$$\Psi = \sum_{b\beta} \Psi_{b\beta}(x, \mathbf{y}_i) Y_{b\beta}(\hat{x}_i), \quad \Psi = \sum_{\ell m} \sum_{ab} \Psi_{ab}^{\ell m}(x_i, y_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i). \quad (1.40)$$

Знание общего решения Ψ хотя бы в некоторой области \mathcal{K} пространства \mathcal{R}^6 представляется исключительно важным, потому что в \mathcal{K} частное регулярное решение Ψ^ε уравнения (1.39) с любым наперед заданным набором сохраняющихся квантовых чисел $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$ можно найти, подействовав проекторами (1.15)–(1.17) на решение Ψ . Таким образом можно получить бисферический ряд частного решения с бисферическими компонентами Ψ_{ab}^ε :

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = \sum_{ab} \Psi_{ab}^\varepsilon(x_i, y_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i), \quad (-1)^{a+b} = \sigma, \quad (1.41)$$

и D^σ -ряд этого же решения, но уже с D^σ -компонентами $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$:

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \Psi_{m'}^{\varepsilon t}(x_i, y_i, \theta_i) D_{mm'}^{\ell \sigma*}(\omega_i^t), \quad t = x_i, y_i. \quad (1.42)$$

В случае $\Psi = \Psi^\varepsilon \in \mathcal{A}^\varepsilon$ и в представлении $\langle \mathbf{r}_i | = \langle r, \Omega_i |$ операторное уравнение Шредингера (1.38) записывается так:

$$\left[H_0(r, \Omega_i) + V_i(r \cos \varphi_i) + \sum_{k \neq i} V_k(r \cos \varphi_k(\varphi_i, u_i; \gamma_{ki})) - E \right] \Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) = 0, \quad (1.43)$$

где φ_k — функция (1.4) переменных φ_i и u_i , а $H_0(r, \Omega_i)$ — оператор (1.19).

Для анализа уравнения (1.43) наиболее часто используются три разложения: бесконечный бисферический ряд

$$\Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) = 2 [r^2 \sin 2\varphi_i]^{-1} \sum_{ab} U_{ab}^\ell(r, \varphi_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i), \quad (-1)^{a+b} = \sigma, \quad (1.44)$$

бесконечный гиперсферический ряд

$$\Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) = r^{-2} \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} \sum_{ab} U_{Lab}^\ell(r) Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad (-1)^{a+b} = \sigma, \quad (1.45)$$

и конечная D^σ -сумма с индексом $t = x_i$ или $t = y_i$

$$\Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) = 2[r^2 \sin 2\varphi_i (1-u_i^2)^{1/2}]^{-1} \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} U_{m'}^{\ell t}(r, \varphi_i, \theta_i) D_{mm'}^{\ell \sigma*}(\omega_i^t). \quad (1.46)$$

Функции $U_{m'}^{\ell t}$, U_{ab}^ℓ и U_{Lab}^ℓ называются приведенными D^σ -, бисферическими и гиперсферическими и компонентами частного решения Ψ^ε .

По определению (1.7) гипергармоники равны произведениям функций $2 \operatorname{cosec} \varphi_i \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$ и \tilde{W}_{Lab} , а согласно (1.10) множество $\{\tilde{W}_{Lab}(\varphi_i)\}_{L=a+b}^{\infty}$ функций \tilde{W}_{Lab} с фиксированными a и b ортонормировано. Поэтому это множество является полным и ортонормированным базисом для разложения компоненты U_{ab}^ℓ , а ее проекция на функцию \tilde{W}_{Lab} равна компоненте U_{Lab}^ℓ :

$$U_{ab}^\ell(r, \varphi_i) = \sum_{L=a+b}^{\infty} U_{Lab}^\ell(r) \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i), \quad U_{Lab}^\ell(r) = \langle \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) | U_{ab}^\ell(\varphi_i) \rangle. \quad (1.47)$$

Если приравнять разложения (1.44) и (1.46) функции Ψ^ε , а затем применить формулы (1.12), то получатся представления D^σ -компонент $U_{m'}^{\ell t}$ через бисферические компоненты U_{ab}^ℓ . Например, в случае $t = x_i$

$$U_{m'}^{\ell t}(r, \varphi_i, u_i) = (1-u_i^2)^{-1/2} \sum_{ab} T_{ab}^{\ell m'} U_{ab}^\ell(r, \varphi_i) \Theta_{am'}(u_i). \quad (1.48)$$

Термин «проецирование» заданного в \mathcal{R}^6 уравнения на выбранный угловой базис далее понимается в обычном смысле, как следующая последовательность операций. Сначала на это уравнение действуем соответствующим проектором (1.15), (1.16) или (1.17). Полученное соотношение оказывается равной нулю суммой, каждое слагаемое которой — произведение базисной угловой функции на некоторое соотношение по переменным, не являющимся ее аргументами. Так как базисные функции линейно независимы по всем своим индексам, то такая сумма равна нулю тогда и только тогда, когда каждое из упомянутых соотношений равно нулю. Это условие позволяет редуцировать исходное уравнение, т. е. свести его к системе уравнений с меньшим числом аргументов.

Три способа редукции уравнения Шредингера (1.43) реализуются по однотипной схеме: в этом уравнении искомое решение Ψ^ε заменяется его рядом (1.44) или (1.45), или же (1.46), получившееся уравнение проецируется на

соответствующий угловой базис бисферических или гиперсферических гармоник или же D^σ -функций. В результате выводятся системы одно-, дву- или же трехмерных уравнений Шредингера для бесконечных совокупностей $\{U_{Lab}^\ell\}$ и $\{U_{ab}^\ell\}$ всех компонент U_{Lab}^ℓ и U_{ab}^ℓ или конечной совокупности $\{U_{m'}^{\ell t}\}$ всех компонент $U_{m'}^{\ell t}$.

1.5. Структура и редукция уравнений Фаддеева. В квантовой теории рассеяния для системы нескольких частиц [15] частному решению $\Psi = \Psi^\varepsilon$, $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$, уравнения Шредингера (1.38) формулой

$$\Psi^\varepsilon = \Psi_1^\varepsilon + \Psi_2^\varepsilon + \Psi_3^\varepsilon \quad (1.49)$$

сопоставляется решение $\{\Psi_1^\varepsilon, \Psi_2^\varepsilon, \Psi_3^\varepsilon\}$ системы трех уравнений Фаддеева

$$(H_0 - E) \Psi_i^\varepsilon = -V_i \Psi^\varepsilon = -V_i [\Psi_1^\varepsilon + \Psi_2^\varepsilon + \Psi_3^\varepsilon], \quad i = 1, 2, 3. \quad (1.50)$$

По определению в координатном пространстве \mathcal{R}^6 каждая фаддеевская компонента Ψ_i^ε суммы Ψ^ε и само уравнение (1.50), в котором содержится взаимодействие V_i , записываются в их собственном представлении $\langle \mathbf{r}_i |$. Поэтому в каждом ($i = 1, 2, 3$) декартовом представлении $\langle \mathbf{r}_i | = \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$ фаддеевские компоненты складываются в сумму (1.49) по правилу

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = \Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) + \sum_{k \neq i} \Psi_k^\varepsilon(\mathbf{x}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i; \gamma_{ki}), \mathbf{y}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i; \gamma_{ki})) \quad (1.51)$$

и подчинены системе трех ($i = 1, 2, 3$) дифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} [H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) - E] \Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) &= -V_i(x_i) \Psi^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) = \\ &= -V_i(x_i) \left[\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i) + \sum_{k \neq i} \Psi_k^\varepsilon(\mathbf{x}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i; \gamma_{ki}), \mathbf{y}_k(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i; \gamma_{ki})) \right], \end{aligned} \quad (1.52)$$

где $H_0(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i)$ — оператор (1.18). Искомые компоненты Ψ_i^ε , $i = 1, 2, 3$, удобно представлять рядами типа (1.41) и (1.42), а именно бисферическим рядом с фаддеевскими бисферическими компонентами Ψ_{iab}^ε и D^σ -рядом с фаддеевскими D^σ -компонентами $\Psi_{im'}^{\varepsilon t}$:

$$\begin{aligned} \Psi_i^\varepsilon &= \sum_{ab} \Psi_{iab}^\varepsilon(x_i, y_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i), \\ \Psi_i^\varepsilon &= \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell \sigma*}(\omega_i^t) \Psi_{im'}^{\varepsilon t}(x_i, y_i, \theta_i). \end{aligned} \quad (1.53)$$

Уравнению Шредингера (1.43) в гиперсферических координатах отвечает система трех ($i = 1, 2, 3$) дифференциальных уравнений Фаддеева

$$\begin{aligned} [H_0(r, \Omega_i) - E] \Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i) &= -V_i(r \cos \varphi_i) \Psi^\varepsilon(r, \Omega_i), \\ \Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) &= \Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i) + \sum_{k \neq i} \Psi_k^\varepsilon(r, \Omega_k(\Omega_i; \gamma_{ki})), \end{aligned} \quad (1.54)$$

где φ_k — функция (1.4) переменных φ_i и u_i , а $H_0(r, \Omega_i)$ — оператор (1.19). Фаддеевские компоненты $\Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i)$ представим бисферическими рядами

$$\Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i) = 2 [r^2 \sin 2\varphi_i]^{-1} \sum_{ab} U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i), \quad (1.55)$$

гиперсферическими рядами

$$\Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i) = r^{-2} \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} \sum_{ab} U_{iLab}^\ell(r) Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i) \quad (1.56)$$

и D^σ -рядами с индексом $t = x_i$ или же $t = y_i$:

$$\begin{aligned} \Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i) &= 2 \left[r^2 \sin 2\varphi_i (1 - u_i^2)^{1/2} \right]^{-1} \times \\ &\times \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} U_{im'}^{\ell x}(r, \varphi_i, u_i) D_{mm'}^{\ell \sigma*}(\omega_i^t). \end{aligned} \quad (1.57)$$

Фаддеевские приведенные D^σ -, бисферические и гиперсферические компоненты $U_{im'}^{\ell x}$, U_{iab}^ℓ и U_{iLab}^ℓ разложений (1.55)–(1.57) подчиняются аналогу соотношений (1.47) и (1.48): компоненты U_{iab}^ℓ и U_{iLab}^ℓ взаимосвязаны:

$$\begin{aligned} U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) &= \sum_{L=a+b}^{\infty} U_{iLab}^\ell(r) \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i), \\ U_{iLab}^\ell(r) &= \langle \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i) | U_{iab}^\ell(\varphi_i) \rangle, \end{aligned} \quad (1.58)$$

а вследствие (1.12) компоненты $U_{im'}^{\ell x}$ выражаются через компоненты U_{iab}^ℓ :

$$U_{im'}^{\ell x}(r, \varphi_i, u_i) = (1 - u_i^2)^{1/2} \sum_{ab} T_{ab}^{\ell m'} U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) \Theta_{am'}(u_i), \quad t = x_i. \quad (1.59)$$

Разложениям (1.55)–(1.57) фаддеевских компонент Ψ_1^ε , Ψ_2^ε и Ψ_3^ε отвечают следующие разложения их подчиненной уравнению Шредингера (1.43) суммы $\Psi^\varepsilon(r, \Omega_i)$: бисферический ряд (1.44) с компонентами

$$U_{ab}^\ell(r, \varphi_i) = U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle r, \varphi_i | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'}^\ell(r, \varphi_k) \rangle, \quad (1.60)$$

содержащими интегралы типа (1.29),

$$\begin{aligned} \langle r, \varphi_i | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'}^\ell(r, \varphi_k) \rangle &= \\ &= \int_{C_-(\varphi_i; \gamma_{ki})}^{C_+(\varphi_i; \gamma_{ki})} h_{aba'b'}^\ell(\varphi_i, \varphi_k; \gamma_{ki}) U_{ka'b'}^\ell(r, \varphi_k) d\varphi_k, \end{aligned}$$

гиперсферический ряд (1.45) с компонентами

$$U_{Lab}^\ell(r) \equiv U_{iLab}^\ell(r) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} U_{kLa'b'}^\ell(r) \quad (1.61)$$

и D^σ -ряд (1.46) с компонентами [69]

$$\begin{aligned} U_{m'}^{\varepsilon t}(r, \varphi_i, u_i) &\equiv \\ &\equiv U_{im'}^{\varepsilon t}(r, \varphi_i, u_i) + (-1)^{m'} \left[\frac{2\ell + 1}{16\pi^2(1 + \delta_{m'0})} \right]^{1/2} \sum_{k \neq i} \left[\frac{\sin 2\varphi_i}{\sin 2\varphi_k} \right] \left[\frac{1 - u_i^2}{1 - u_k^2} \right]^{1/2} \times \\ &\times \sum_{m''=\mu(\sigma)}^{\ell} (-1)^{m''} D_{m''m'}^{\ell\sigma*}(0, \theta_{ki}, 0) U_{km''}^{\varepsilon t}(r, \varphi_k, u_k), \quad (1.62) \end{aligned}$$

где $t = x_i$, а переменные φ_k и u_k и угол θ_{ki} между векторами \mathbf{x}_i и \mathbf{x}_k выражены через аргументы φ_i и u_i и кинематический угол γ_{ki} .

Три способа редукции системы (1.54) реализуются по однотипной схеме: сначала все компоненты Ψ_i^ε заменяются однотипными рядами (1.55) или (1.56), или же (1.57), а затем полученные соотношения проецируются на соответствующий угловой базис. В итоге получаются двумерные интегродифференциальные уравнения для бесконечной совокупности $\{U_{iab}^\ell\}$ всех компонент U_{iab}^ℓ , одномерные дифференциальные уравнения для бесконечной совокупности $\{U_{iLab}^\ell\}$ всех компонент U_{iLab}^ℓ и трехмерные дифференциальные уравнения для конечной совокупности $\{U_{im'}^{\varepsilon t}\}$ всех компонент $U_{im'}^{\varepsilon t}$.

Далее нам потребуются только двумерные уравнения Фаддеева

$$\begin{aligned} [\tilde{H}_{0ab}(r, \varphi_i) + E] U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) &= V_i(r \cos \varphi_i) U_{ab}^\ell(r, \varphi_i) = \\ &= V_i(r \cos \varphi_i) \left[U_{iab}^\ell(r, \varphi_i) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle r, \varphi_i | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'}^\ell(r, \varphi_k) \rangle \right]. \quad (1.63) \end{aligned}$$

В этих уравнениях $r \in [0, \infty)$, а $\varphi_i \in [0, \pi/2]$ для каждого $i = 1, 2, 3$; оператор

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

порожден свободным гамильтонианом H_0 и содержит оператор $\tilde{L}_{ab}^2(\varphi_i)$, заданный формулой (1.27), индексы a, b и a', b' принимают любые допустимые при данных ℓ и σ значения, причем условием $(-1)^{a+b} = (-1)^{a'+b'} = \sigma$ обеспечивается сохранение собственного числа σ оператора инверсии P , а для того чтобы ряды (1.55) были ограничены на лучах $\{r \in [0, \infty), \varphi_i = 0\}$ и $\{r \in [0, \infty), \varphi_i = \pi/2\}$, все искомые функции $U_{iab}^\ell(r, \varphi_i)$ подчиняются следующим однородным граничным условиям:

$$\begin{aligned} U_{iab}^\ell &= 0, & r = 0, & \varphi_i \in [0, \pi/2]; \\ U_{iab}^\ell &= 0, & r \in (0, \infty), & \varphi_i = 0, \pi/2. \end{aligned} \tag{1.64}$$

Замечания. В случае центральных парных взаимодействий постановка краевой задачи трех частиц в виде бесконечной системы двумерных уравнений Фаддеева (1.63) в бисферическом базисе с условиями (1.64) и известными граничными условиями при $r \rightarrow \infty$ (см. [15]) не завершена в следующем смысле. На практике возможно численное интегрирование лишь конечной подсистемы бесконечной системы таких уравнений. Вопрос о сходимости вычисляемого спектра к точному при увеличении размерности подсистемы, т. е. числа N_{ab} учитываемых парных парциальных волн, теоретически не исследован. В частных случаях расчеты трехчастичных связанных состояний и упругого рассеяния частицы на связанной паре двух других частиц демонстрируют довольно быструю сходимость по N_{ab} . Одна из граней упомянутого вопроса — сравнение точных асимптотик при $r \rightarrow \infty$ решений исходной бесконечной и обрезанной систем. Такому сравнению была посвящена лишь работа [38], в которой было доказано, что в случае короткодействующих взаимодействий асимптотики обоих решений функционально одинаковые и функционально разные, если парные взаимодействия содержат в качестве слагаемых кулоновские потенциалы.

В общем случае система одномерных уравнений Фаддеева в гиперсферическом базисе неудобна для численного анализа из-за ее бесконечного ранга. Для таких систем вопрос о сходимости вычисляемого спектра конечной подсистемы к точному является открытым. Достоверный численный анализ такой сходимости еще не выполнен, но представляется вполне возможным в рамках недавно предложенного подхода [89–91] к интегрированию больших систем обыкновенных дифференциальных уравнений. Этот подход — изящное объединение вариационного принципа Швингера [7] и непрерывного аналога метода Ньютона [92].

Для трехмерных уравнений Фаддеева в D^σ -базисе упомянутая проблема сходимости не возникает, но анализ этих уравнений заметно осложняется тем, что их правые части содержат искомые функции со смещенными аргументами, число которых равно трем и довольно велико.

Перспективными для численного анализа дифференциальных уравнений Фаддеева представляются недавно предложенные подходы: комплексный скейлинг [47] и основанный на вейвлет-анализе [93] метод пакетной дискретизации континуума [94–98].

1.6. Особые конфигурации, связи и формальные разложения. В координатном пространстве \mathcal{R}^6 системы $\{p_1, p_2, p_3\}$ трех частиц имеются три физически интересные и принципиально разные шестимерные области \mathcal{F} , \mathcal{G} и \mathcal{H} . Чтобы дать определения этих областей, сначала выберем одно из трех разбиений системы $\{p_i, p_j, p_k\}$ на частицу p_i и подсистему $\{p_j, p_k\}$, а для краткости записи положим $\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_i$, $x \equiv x_i$, $y \equiv y_i$.

Под окрестностью точки парного удара ($x = 0, y > 0$) частиц p_j и p_k подразумевается область $\mathcal{F} \equiv \{\mathbf{r} : x \ll 1, y > 0\}$, в которой эти частицы близки друг к другу, но отделены от частицы p_i .

Линейной конфигурацией трех частиц или осевым вырождением, отвечающим упомянутому выше разбиению, называется конфигурация, в которой все частицы лежат на одной прямой (оси) $\mathcal{L} \equiv \{\mathbf{r} : x > 0, y = 0\}$. Под малой окрестностью этой прямой подразумевается область $\mathcal{G} \equiv \{\mathbf{r} : x > 0, y \ll 1\}$, в которой частицы p_j и p_k отделены друг от друга ($x > 0$), а частица p_i близка ($y \ll 1$) к прямой \mathcal{L} , проходящей через них.

Малой окрестностью точки тройного соударения $r = 0$ называется шестимерный шар $\mathcal{H} \equiv \{\mathbf{r} : r \ll 1\}$, в котором расстояния между любыми двумя частицами малы.

Явный вид общего решения Ψ уравнения Шредингера (1.38), как правило, неизвестен. Поэтому судить о его поведении (строении) в \mathcal{F} , \mathcal{G} и \mathcal{H} можно лишь по асимптотическим разложениям. Вывод и анализ асимптотических разложений общего регулярного решения Ψ представляется теоретически важным и интересным, потому что, зная такие разложения, можно легко найти разложение любого регулярного частного решения. Например, решения Ψ^ε , обладающего, в отличие от Ψ , полным набором ε сохраняющихся квантовых чисел. Вывод разложения для Ψ^ε сводится к проектированию найденного разложения для Ψ на базис из собственных функций всех операторов, коммутирующих с полным гамильтонианом H .

Знание явных 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 [7–9].

Напомним, что в одном из таких методов, а именно в подходе Рэлея–Ритца [7], решение Ψ^ε исследуемого уравнения Шредингера $(H - E)\Psi^\varepsilon = 0$ для связанных состояний приближается пробной функцией (вариационным анзацем) $\tilde{\Psi}^\varepsilon \approx \Phi_1^\varepsilon + \Phi_2^\varepsilon + \dots$, все компоненты которого (опорные функции

$\Phi_n^\varepsilon, n = 1, 2, \dots$) определяются в явном виде всюду в \mathcal{R}^6 , но содержат некоторые заранее неизвестные (вариационные) коэффициенты. Эти коэффициенты и верхняя вариационная оценка \tilde{E} энергии E связанного состояния находятся из условия минимума функционала Рэлея–Ритца:

$$\tilde{E} = \min \langle \tilde{\Psi}^\varepsilon | H | \tilde{\Psi}^\varepsilon \rangle / \langle \tilde{\Psi}^\varepsilon | \tilde{\Psi}^\varepsilon \rangle. \quad (1.65)$$

При реализации метода Рэлея–Ритца учет особенностей поведения Ψ^ε в \mathcal{F} особенно важен и эффективен из-за того, что координатную зависимость всех опорных функций Φ_n^ε приходится определять заранее и всюду в \mathcal{R}^6 .

С другой стороны, такие наблюдаемые характеристики трехчастичных систем, как релятивистские поправки, γ -факторы, коэффициенты рекомбинации и сечения астрофизических ядерных процессов [18], выражаются через интегралы, содержащие волновую функцию $\tilde{\Psi}^\varepsilon$. Поэтому точность вычисления таких характеристик, например, скорости $dt\mu$ -катализа, тем лучше, чем лучше аппроксимация $\Psi^\varepsilon \approx \tilde{\Psi}^\varepsilon$ во всей области \mathcal{F} .

В подходе Рэлея–Ритца [7], в вариационно-разностных и проекционно-сеточных схемах [9], в методе сплайн-коллокаций [10, 11] и в современных методах вариационной сплайн-аппроксимации [12] задачу такого приближения можно решить, подчинив частные производные искомой функции $\tilde{\Psi}^\varepsilon$ или ее проекций на базисы (1.5)–(1.9) тем же линейным граничным условиям (связям при $x = 0, y > 0$), которым удовлетворяют частные производные точного решения Ψ^ε уравнения Шредингера (1.39) или его проекции. Пример такой связи — равенство

$$\sum_{n=0}^{n' < \infty} A_n(\hat{x}, \mathbf{y}) \partial_x^n \Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0, \quad x = 0, \quad y > 0, \quad (1.66)$$

где A_n — известные функции или линейные комбинации известных функций и операторов частных производных по аргументам \hat{x} и \mathbf{y} . Знание связей типа (1.66) позволяет решить и обратную задачу: по величине невязки χ ,

$$\chi = \sum_{n=0}^{n' < \infty} A_n(\hat{x}, \mathbf{y}) \partial_x^n \tilde{\Psi}^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}), \quad x = 0, \quad y > 0,$$

оценить, насколько приближенное решение $\tilde{\Psi}^\varepsilon$, полученное каким-то способом, близко к точному решению Ψ в окрестности точки парного удара.

Знание явных разложений функции Ψ^ε и ее фаддеевских компонент в области \mathcal{G} представляется особо полезным для квантово-механического анализа и расчета с прецизионной точностью свойств двух довольно широких классов реальных трехчастичных систем. К первому и давно известному в атомной физике [20] 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. Второй класс — хорошо известный в квантовой химии [23] класс линейных трехатомных молекул. Его образуют все трехатомные *sp*-гибридизированные молекулы. Молекулы CO_2 , HCN и BeCl_2 являются таковыми. Кроме указанных классов трехчастичных систем, рассматриваемых вне какой-либо среды, имеются реальные трехчастичные системы, конфигурацию которых можно приблизить к линейной при каналировании частиц в кристаллах [21] или же воздействием сильного однородного магнитного поля. Эти случаи обсуждаются в разд. 5.

Знание строения функции Ψ^ε и ее фаддеевских компонент в \mathcal{H} необходимо для корректного описания и расчета астрофизически интересных реакций тройного развала и тройного слияния ядер, например, реакции $3\text{}^4_2\text{He} \rightarrow \text{}^{12}_6\text{C}$.

Разложения решений Ψ и Ψ^ε уравнения Шредингера в \mathcal{H} и в \mathcal{F} для трехчастичных систем с чисто кулоновскими взаимодействиями (1.30) исследовались многими авторами. Например, разложениям Ψ в \mathcal{H} посвящены работы [99–126], а разложениям в \mathcal{F} — статьи [127–131].

В ядерной и молекулярной физике наряду с чисто кулоновскими потенциалами (1.30) часто используются потенциалы более широкого класса (1.31) и типичными являются три случая (1.32). Поэтому построение и анализ разложений регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева в \mathcal{F} , \mathcal{G} и \mathcal{H} в случае потенциалов такого класса представляется актуальным и важным.

Стоит отметить, что до работ [76–80] такому обобщению для уравнений Фаддеева была посвящена лишь работа [29], а до работы [81] в пределе линейной конфигурации трех частиц для регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева с взаимодействиями (1.31) не были известны не только асимптотические, но даже наиболее 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.

Теперь напомним схему известного в теории дифференциальных уравнений [2] асимптотического метода [3].

Пусть $F(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_p)$ — искомое решение дифференциального уравнения в частных производных при $\xi_1 \rightarrow 0$ и определенных ограничениях на остальные аргументы ξ_2, \dots, ξ_p . Первый этап — выбор анзаца

$$F(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_p) = \sum_{n=1}^{\infty} g_n(\xi_1) F_n(\xi_2, \dots, \xi_p), \quad (1.67)$$

где все g_n — известные, достаточно простые функции, причем такие, что $g_n(\xi_1) \rightarrow 0$ при $\xi_1 \rightarrow 0$. Второй этап — вывод из исходного уравнения

уравнений для искомым функций F_n и доказательство разрешимости этих уравнений при любом n . Выбор анзаца требует известной интуиции и представляется удачным, если функции g_n легко вычисляются, а совокупность всех уравнений для функций F_n оказывается цепочкой рекуррентных по индексу n уравнений, первые из которых нетрудно решить в явном виде, а остальные исследовать численно. К наиболее простым уравнениям относятся обыкновенные дифференциальные уравнения с однородными граничными условиями и алгебраические уравнения. Если удастся миновать два указанных этапа, то ряд (1.67) называют формальным решением исходного уравнения или формальным асимптотическим разложением (ФАР) решения F при $\xi_1 \rightarrow 0$. Заключительный и обычно самый сложный этап — доказательство асимптотической сходимости ряда (1.67), т. е. соотношения

$$F(\xi_1, \dots, \xi_p) = \sum_{n=1}^N g_n(\xi_1) F_n(\xi_2, \dots, \xi_p) + O(g_{N+1}(\xi_1)), \quad (1.68)$$

$$\xi_1 \rightarrow 0, \quad N < \infty,$$

гарантирующего тот факт, что асимптотика этого ряда — подсумма нескольких его наиболее медленно убывающих слагаемых.

В настоящем обзоре реализуются первые два этапа построения асимптотических разложений регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева в \mathcal{F} , \mathcal{H} и \mathcal{G} : для таких решений выводятся ФАР, вопрос о сходимости которых в каком-либо смысле остается открытым. Доказательство сходимости принципиально затрудняется наличием в ФАР произвольных постоянных и функций. Разложения, не содержащие ни тех, ни других, до сих пор не известны. После вывода ФАР предполагается, что полученные ряды асимптотические и дифференцируемы, а все неопределенные постоянные и функции отличны от нуля. Далее выводятся явные асимптотики таких рядов как подсуммы их нескольких наиболее медленно убывающих слагаемых, а из асимптотик находят связи типа (1.66), т. е. линейные соотношения между частными производными решения уравнения Шредингера или решений уравнений Фаддеева в точках тройного или парного ударов и в пределе линейной конфигурации, т. е. на прямой, проходящей через три частицы.

1.7. Гелиоподобные системы. Гелиоподобной называется система $\{p_1, p_2, p_3\}$ трех частиц, в которой одинаковые частицы p_1 и p_2 имеют конечные массы $m_1 = m_2$ и кулоновские заряды $z_1, z_2 = 1$, частица p_3 считается бесконечно тяжелым ядром ($m_3 = \infty$) с зарядом z_3 , а все парные взаимодействия являются кулоновскими. Пример гелиоподобной системы — атом гелия ${}^3\text{He}$, в котором p_1 и p_2 — электроны, а p_3 — ядро ${}^3_2\text{He}$ гелия с зарядом $z_3 = 2$. В гелиоподобных системах кроме полного углового момента \mathbf{l} сохраняется полный момент $\mathbf{J} \equiv \mathbf{l} + \mathbf{s}_1 + \mathbf{s}_2 + \mathbf{s}_3$, где \mathbf{s}_i — оператор спина частицы p_i , а $i = 1, 2, 3$.

Символом $\Psi^{\varepsilon, J}$ обозначим пространственную часть регулярного решения уравнения Шредингера для $^{2J+1}S_0$ -состояния гелиоподобной системы с квантовыми числами $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\} = \{0, 0, 1\}$ и $J = 0$ или $J = 1$. Напомним, что функция $\Psi^{\varepsilon, 0}$ симметрична относительно перестановки электронов, а функция $\Psi^{\varepsilon, 1}$ антисимметрична.

Для исследования свойств гелиоподобных систем удобно поместить ядро p_3 в начальную точку O неподвижной системы координат S_3 и использовать периметрические координаты (a_1, a_2, a_{12}) , где a_1 и a_2 — длины радиусов-векторов \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 частиц p_1 и p_2 , а a_{12} — длина вектора $\mathbf{a}_{12} \equiv \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$. Во многих случаях более удобны гиперсферические координаты $(r_a, \theta_a, \alpha_a)$: гиперрадиус $r_a \equiv (a_1^2 + a_2^2)^{1/2}$, угол θ_a между векторами \mathbf{a}_1 и \mathbf{a}_2 и угол $\alpha_a \equiv (1/2) \arctg(a_2/a_1)$.

Далее кроме перечисленных координат потребуются периметрические координаты $b_i \equiv m_1 a_i$, $i = 1, 2$, и $b_{12} = m_1 a_{12}$, измеряемые в атомных единицах (а. е.), а также гиперрадиус $r_b \equiv (b_1^2 + b_2^2)^{1/2}$ и его квадрат $R_b \equiv r_b^2$.

2. ОБОБЩЕНИЯ РАЗЛОЖЕНИЯ ФОКА

В первом пункте настоящего раздела сначала поясняются особо значимые результаты работ [99–126], посвященных разложениям вблизи точки тройного удара для систем с кулоновскими парными взаимодействиями (1.30). Затем схематично описываются два альтернативных подхода к обобщениям таких разложений на случаи взаимодействий более общего типа (1.31), чем кулоновские. Первый подход предложен в [29] и детально обсуждался в обзоре [67], второй подход, предложенный и развитый в [76–78], последовательно излагается в п. 2.2–2.5.

2.1. Примеры разложений фоковского типа. Разложения формальных регулярных решений уравнений Шредингера или Фаддеева, содержащие вблизи точки тройного удара целые степени гиперрадиуса и его логарифма, называются разложениями фоковского типа.

В квантовой механике анализ строения многочастичных волновых функций вблизи точки тройного удара начался с исследования разложений регулярного решения $\Psi^{\varepsilon, 0}$ уравнения Шредингера для гелиоподобных систем.

Еще в 1935 г. в работе Бартлетта и др. [99] было впервые показано, что такое решение нельзя представить в виде ряда

$$\Psi^{\varepsilon, 0}(a_1, a_2, a_{12}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{p=0}^{\infty} C_{nmp} a_1^n a_2^m a_{12}^p, \quad (2.1)$$

содержащего числовые коэффициенты C_{nmp} и целые неотрицательные степени переменных a_1 , a_2 и a_{12} .

Чтобы доказать это важное утверждение, достаточно заменить в соответствующем уравнении Шредингера функцию $\Psi^{\varepsilon,0}$ ее искомым рядом (2.1), затем из получившегося уравнения вывести цепочку рекуррентных алгебраических уравнений для неизвестных коэффициентов C_{nmp} и убедиться в том, что такая цепочка не имеет нетривиального решения.

Позже в 1937 г. Бартлетт в [100] указал на существование формального решения $\Psi^{\varepsilon,0}$ в виде ряда, содержащего не только целые степени расстояний между частицами, но и целые степени логарифмов таких расстояний.

Разложение формального решения $\Psi^{\varepsilon,0}$ уравнения Шредингера для 1S_0 -состояния атома ^3He вблизи точки тройного удара впервые получено Фоком в работе [101]. Эта работа была выполнена по следующей схеме. Протон считался неподвижным кулоновским центром, помещенным в начало O неподвижной системы координат S_3 . Движение двух электронов описывалось трехмерным уравнением Шредингера, записанным в гиперсферических координатах $(r_a, \theta_a, \alpha_a)$. Общее регулярное решение $\Psi^{\varepsilon,0}$ этого уравнения заменялось искомым двойным рядом по целым степеням гиперрадиуса r_a , его логарифма $s_a \equiv \ln r_a$ и неизвестным функциям Ψ_{nm}^{ε} двух гиперуглов:

$$\Psi^{\varepsilon,0}(r_a, \theta_a, \alpha_a) = \sum_{n=0}^{\infty} r_a^n \sum_{m=0}^{M(n)} s_a^m \Psi_{nm}(\theta_a, \alpha_a). \quad (2.2)$$

Далее для функций Ψ_{nm}^{ε} выводилась рекуррентная цепочка дифференциальных уравнений второго порядка, содержащая квадрат двумерного оператора гипермомента $\Lambda^2(\theta_a, \alpha_a)$, для которого собственными функциями являются известные в явном виде гипергармоники $Y_{\lambda n}(\theta_a, \alpha_a)$. Затем с помощью разложений искомых функций Ψ_{nm} по таким гипергармоникам доказывалось, что полученная цепочка разрешима, а верхний предел суммирования $M(n)$ зависит от индекса n и равен целой части $[n/2]$ числа $n/2$. При доказательстве оказалось, что каждая функция Ψ_{nm} содержит $M(n) + 1$ неизвестных числовых коэффициентов C_{nm}^p , $p = 1, 2, \dots, [n/2] + 1$.

Поэтому построенное Фоком разложение (2.2) является представлением общего регулярного, но формального решения исследованного уравнения Шредингера. Если это разложение переписать в координатах (a_1, a_2, a_{12}) , то получится ряд

$$\Psi^{\varepsilon,0}(a_1, a_2, a_{12}) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=0}^{M(n)} C_{pqt m} a_1^p a_2^q a_{12}^t s_a^m, \quad (2.3)$$

в котором $M(n) = [n/2]$, индексы p, q, t числовых коэффициентов $C_{pqt m}$ подчинены условию $p + q + t = n$ и, в отличие от ряда (2.1), содержатся целые степени логарифма s_a гиперрадиуса r_a .

Как отмечалось Фоком, при выключении взаимодействия V_{12} между электронами разложения (2.2) и (2.3) вырождаются в однократные ($M(n) = 0$) ряды, не содержащие логарифмических функций. Следовательно, физическая причина, из-за которой эти ряды содержат степени логарифма, довольно простая и заключается в наличии взаимодействия V_{12} .

Анализ Фока был продолжен А. М. Ермолаевым. Его вклад [102–108] в исследование строения собственных функций оператора Шредингера для гелиоподобных систем является фундаментальным. Ермолаев предложил представления [102]

$$\Psi^{\varepsilon, J} = \sum_n^{\infty} R_b^{n-1} \sum_{m=0}^{[n-J-1]} (\ln R_b)^m \Phi_{nm}^J(\theta_a, \alpha_a), \quad \begin{cases} n = 1, 3/2, 2, \dots, & J = 0, \\ n = 2, 5/2, 3, \dots, & J = 1, \end{cases} \quad (2.4)$$

дал исчерпывающий анализ рекуррентной цепочки дифференциальных уравнений для угловых функций Φ_{nm}^J , доказал ее разрешимость, создал метод построения таких функций, позволяющий выделить в явном виде их особенности в точках парных соударений двух электронов ($\alpha_a = \pi$) и каждого электрона с неподвижным ядром ($\alpha_a = 0$) и впервые построил теорию возмущений [103, 104] по взаимодействию между электронами, в которой каждое приближение строится в виде двойного ряда по степеням R_b^n и $(\ln R_b)^m$.

Различие строения собственных функций, обладающих разной перестановочной симметрией, наглядно демонстрируют впервые полученные Ермолаевым явные подсуммы рядов (2.4):

$$\begin{aligned} \Psi^{\varepsilon, 0}(b_1, b_2, b_{12}) &= 1 - z_3(b_1 + b_2) + b_{12}/2 - \\ &\quad - (z_3/6)(1/\pi - 2)(b_1^2 + b_2^2 - b_{12}^2) \ln(b_1^2 + b_2^2) + \dots, \\ \Psi^{\varepsilon, 1}(b_1, b_2, b_{12}) &= b_1^2 - b_2^2 - (z_3/3)(b_1 - b_2)(2b_1^2 + 5b_1b_2 + 2b_2^2) + \\ &+ (b_{12}/4)b_{12}(b_1^2 - b_2^2) - (z_3/8)(7/\pi - 2)(b_1^2 - b_2^2)(b_1^2 + b_2^2 - b_{12}^2) \ln(b_1^2 + b_2^2) + \dots \end{aligned}$$

Следующий и неизбежный этап анализа уравнения Шредингера для 1S_0 -состояния атома ^3He заключался в последовательном решении двух задач: доказательстве сходимости разложения (2.2) общего решения $\Psi^{\varepsilon, 0}$ и выделении из этого решения частного (физического) решения $\Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon, 0}$, подчиненного вполне определенным граничным условиям при больших значениях гиперрадиуса r_b и поэтому являющегося волновой функцией. Такие условия в задаче на связанные состояния, когда полная энергия E отрицательная, обеспечивают квадратичную интегрируемость волновой функции $\Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon, 0}(r_a, \theta_a, \alpha_a)$ по всем ее аргументам.

Мацек в [109] впервые показал, что при $r_a < (-8E)^{1/2}$ разложение (2.2) является квадратично-интегрируемой по переменным θ_a и α_a функцией. Плоточная сходимость этого разложения при любой комплексной энергии E ,

но при конечном значении гиперрадиуса r_a впервые доказана Морганом в [110].

Как отмечалось в [105], а затем в [111], волновая функция атома ${}^3\text{He}$ является фоковским рядом (2.2) при вполне определенных значениях его неизвестных коэффициентов C_{nm}^p , которые в принципе можно определить, используя известные экспоненциально убывающие в пределе больших значений переменных a_1, a_2 и a_{12} асимптотики этой функции.

Однако этот подход до сих пор не реализован, а наиболее простым способом вычисления волновых функций связанных состояний гелиоподобных систем оказался вариационный метод Рэлея–Ритца [7].

Хиллераас в работе [112], ставшей классической, предложил использовать для вычисления волновых функций связанных состояний гелиоподобных систем вариационный анзац в виде конечного разложения по экспоненциальным и полиномиальным функциям расстояний a_1, a_2, a_{12} . Такое разложение сводится к ряду (2.1), который не удовлетворяет уравнению Шредингера. Поэтому позже в серии работ [113–116] хиллераасовский анзац был модифицирован добавлением множителей, являющихся целыми степенями логарифмической функции $\ln(a_1 + a_2)$.

В [103] Ермолаев предложил использовать для вычисления основных 1S_0 -состояний гелиоподобных систем вариационное представление, воспроизводящее в явном виде конечную подсумму разложения (2.4):

$$\tilde{\Psi}^{\varepsilon,0} = \exp \left[-K f(\alpha_a) \sqrt{R_b} \right] \sum_{n=1,3/2,2,\dots}^{N+1} R_b^{n-1} \sum_{m=0}^{[n-1]} (\ln R_b)^m \tilde{\Phi}_{nm}^0(\theta_a, \alpha_a); \quad (2.5)$$

$$N < \infty, \quad K > 0, \quad f(\alpha_a) \equiv \sin(\alpha_a/2) + \cos(\alpha_a/2).$$

В этом представлении экспоненциальный множитель обеспечивал квадратичную интегрируемость искомой функции $\tilde{\Psi}^{\varepsilon,0}$ при больших значениях переменной R_b , с помощью функции f учитывались особенности, порожденные парными соударениями, а коэффициент K и все неопределенные коэффициенты C_{nm}^p , содержащиеся в предварительно вычисленных угловых функциях $\tilde{\Phi}_{nm}^0$, считались вариационными параметрами.

В последовавших работах [106–108] представление (2.5) с $N = 37$ использовалось для вычисления энергий основных 1S_0 -состояний гелиоподобных атомов с $z_3 = 2, 3, \dots, 12; 15, 20$.

Стоит отметить, что вычисленная в этих давних работах верхняя вариационная оценка $\tilde{E} = -2,9037238$ а. е. для энергии основного состояния атома ${}^3\text{He}$ с точностью до шести знаков совпадает с лучшими на сегодняшний день оценками, которыми считаются полученная в [117] оценка

$$\tilde{E} = -2,903724377034119598297 \text{ а. е.}, \text{ и подтверждающая ее оценка}$$

$$\tilde{E} = -2,903724377034119598159 \text{ а. е.}, \text{ вычисленная позже в [118].}$$

Результаты расчетов, выполненных в упомянутых выше работах [106–108] и [113–116], и являются убедительным доказательством следующего утверждения: включение логарифмических функций в вариационные пробные функции существенно уменьшает число необходимых для расчета вариационных параметров и заметно ускоряет сходимость вычисляемой энергии связанного состояния гелиоподобного атома к ее точному значению.

Далее разложения формальных регулярных решений уравнений Шредингера или Фаддеева, содержащие вблизи точки тройного удара целые степени гиперрадиуса и его логарифма, называются разложениями фоковского типа. Ряды (2.2) и (2.3) — примеры таких разложений.

В работах [103, 105] впервые выполнено обобщение фоковского разложения (2.2) для регулярных решений уравнения Шредингера, описывающего многоэлектронный атом, и показано, что любое такое решение в области, где расстояние a_i от любого ($i = 1, 2, \dots, N > 2$) электрона до ядра мало, содержит целые степени гиперрадиуса $r_N \equiv (a_1^2 + a_2^2 + \dots + a_n^2)^{1/2}$ и его логарифма. Обобщения такого типа детально исследовались во многих последовавших работах (см. статью [119] и ссылки в ней).

В известном обзоре, представленном в виде трех статей [120–122], дан сравнительный анализ огромного числа работ по исследованию и обобщению фоковского разложения решений уравнения Шредингера для атомных систем из трех и более частиц с парными чисто кулоновскими взаимодействиями и различными типами симметрии волновой функции. Большинство работ, процитированных в этом обзоре, выполнены по представленной выше и ставшей классической фоковской схеме, в которой изначально предполагается наличие целых степеней логарифма гиперрадиуса в разложении искомой волновой функции, а ключевыми являются двумерные дифференциальные уравнения.

Альтернативный подход [123–125] к анализу фоковских разложений основан на известном в теории обыкновенных дифференциальных уравнений [1, 2] представлении общего регулярного решения конечной системы дифференциальных уравнений в виде линейной комбинации всех частных решений, образующих фундаментальную систему регулярных решений (ФСРР).

В этом подходе стартовой является бесконечная система одномерных дифференциальных уравнений Шредингера в гиперсферическом базисе, но вместо такой системы исследуется ее конечная подсистема. Сначала ее каждое фундаментальное регулярное решение представляется двойным рядом, содержащим целые степени гиперрадиуса r , его логарифма $s = \ln r$ и неизвестные числовые коэффициенты. Затем для таких коэффициентов выводится и исследуется на однозначную разрешимость рекуррентная цепочка матричных уравнений. После этого общее регулярное решение Ψ исходного уравнения Шредингера представляется в виде линейной комбинации всех найденных разложений регулярных решений, умноженных на соответству-

ющие гипергармоники. Задача суммирования полученного в итоге сложного многократного ряда в замкнутое выражение для Ψ представляется неразрешимой.

Необходимо подчеркнуть, что в недавней работе [126], как и в обсуждаемых ниже работах [77, 78], типичное для многих исследований предположение о наличии целых степеней логарифма гиперрадиуса в разложениях волновых функций вблизи точки парного удара не требуется, а доказывается.

Поясним схему предложенного в [126] подхода к исследованию асимптотик решения $\Psi^{\varepsilon,0}(b_1, b_2, b_{12})$ уравнения Шредингера для системы из двух электронов и ядра ${}^3_2\text{He}$ в пределе малых и больших значений гиперрадиуса $r_b = \sqrt{R_b}$. В этом подходе используются координаты $(r_b, \alpha_a, \theta_a)$, а исходное уравнение Шредингера сводится к системе двух уравнений подстановкой

$$\Psi^{\varepsilon,0} = A(r_b, \varphi_a, \theta_a) \exp[-r_b \chi(\varphi_a, \theta_a)]. \quad (2.6)$$

Первое уравнение содержит только функцию χ , а второе уравнение — обе искомые функции A и χ . Три физически приемлемых решения первого уравнения находятся в явном виде, а решение A второго уравнения строится в виде бесконечного ряда, содержащего искомые функции $a_{nm}^k(r_b)$ и известные угловые функции f_{nm} , выраженные через полиномы Якоби $P_n^{(m,0)}$. Далее для функций $a_{nm}^k(r_b)$ выводится рекуррентная по индексу k и бесконечная по индексам n и m цепочка неоднородных дифференциальных уравнений второго порядка. Эти уравнения устроены довольно сложно, потому что их правые части содержат числовые коэффициенты, представленные бесконечными рядами, слагаемыми которых являются матричные элементы дифференциальных операторов. Все искомые функции $a_{nm}^k(r_b)$ в принципе можно выразить через такие ряды, но проблема суммирования полученных таким образом представлений функции (2.6) в замкнутое выражение остается открытой.

Отметим, что представление (2.6) справедливо при всех значениях аргументов и устроено более просто, чем давно известный анзац Р. Петеркопа [20]

$$\Psi^{\varepsilon,0} = r_b^{-5/2} \exp[igr + if(\varphi_a, \theta_a) \ln(gr_b)] \sum_{nm} \Psi_{nm}(\varphi_a, \theta_a) (gr_b)^n [\ln(gr_b)]^m,$$

в котором значения константы g и функций f и Ψ_{nm} подлежат определению.

Авторы работы [29] начали обобщение фоковского разложения в рамках дифференциальных уравнений Фаддеева на случай произвольных масс частиц и центральных парных взаимодействий, представимых рядами по целым степеням x^n , $n = -1, 0, \dots$, расстояния x между двумя соответствующими

частицами. Предложенный авторами вывод разложения фаддеевских компонент Ψ_1, Ψ_2, Ψ_3 , подчиненных системе трех шестимерных дифференциальных уравнений Фаддеева, выполнен по фоковской схеме. Эти компоненты строились в виде фоковских рядов по целым степеням r^n и s^m переменных r и $s \equiv \ln r$ и функциям $\Psi_i^{nm}(\Omega_i)$, $i = 1, 2, 3$, зависящим от совокупностей Ω_i пяти гиперуглов и подчиненным рекуррентной цепочке дифференциальных уравнений. Решения ее первых трех уравнений авторы получили в явном виде.

Точное решение следующих уравнений — очень трудная задача, потому что их правые части устроены довольно сложно, а число независимых переменных, равное пяти, слишком велико. Численный анализ таких уравнений принципиально невозможен по простой причине: искомые функции Ψ_i^{nm} содержат в качестве слагаемых общие решения соответствующих однородных уравнений, эти слагаемые определены с точностью до произвольных множителей, а зафиксировать их значения без потери общности нельзя.

Все перечисленные выше трудности удалось преодолеть в рамках другого подхода [77] к выводу разложений фоковского типа, но лишь в случае трех тождественных частиц с S -волновыми взаимодействиями. В этом подходе исходными являются двумерные интегродифференциальные уравнения Фаддеева, а их общее регулярное решение представляется линейной комбинацией произвольных коэффициентов и фундаментальных решений. Каждое фундаментальное решение строится в виде ряда по целым степеням r^n и s^m и функциям $U_{nm}^{L\ell}(\varphi)$, зависящим лишь от одного гиперугла $\varphi = \varphi_1$ и подчиненным рекуррентной цепочке обыкновенных неоднородных дифференциальных уравнений второго порядка с однородными граничными условиями. Такая рекуррентная краевая задача довольно проста и, что самое главное, не содержит никаких неопределенных коэффициентов. Поэтому решение довольно большого числа ее первых уравнений не вызывает принципиальных затруднений. Для решения можно использовать и известные численные методы [9], и предложенный в [77] способ построения функций $U_{nm}^{L\ell}$ в виде рядов по заданным формулами (1.8) собственным функциям \tilde{W}_{Lab} интегральных операторов, содержащихся в двумерных фаддеевских уравнениях.

В [67] кратко обсуждалось обобщение [76] описанного выше метода на случай трех разных частиц с центральными парными взаимодействиями. Исчерпывающее описание такого обобщения и его приложений дано в [78].

Ниже в п. 2.2–2.5 суммируются результаты работ [76–78]. Как и в этих работах, считается, что в системе трех частиц все парные взаимодействия являются центральными взаимодействиями более общего вида (1.31), чем кулоновские. Сначала исследуются регулярные фаддеевские бисферические компоненты U_{iab}^{ℓ} , подчиненные системам двумерных интегродифференциальных уравнений (1.63). Доказывается, что все фундаментальные регулярные реше-

ния Φ_{iab}^L этих уравнений являются двойными бесконечными рядами по целым степеням гиперрадиуса r , его логарифма s и искомым функциям $\Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi_i)$ одного гиперугла φ_i . Построение функций Φ_{iab}^{Lnm} сводится к решению рекуррентной цепочки обыкновенных дифференциальных уравнений с однородными граничными условиями в точках $\varphi_i = 0, \pi/2$. Затем фаддеевские бисферические компоненты представляются суммами всех фундаментальных решений. Найденные разложения этих компонент используются для восстановления разложений проекций регулярных решений шестимерных уравнений Шредингера (1.43) и Фаддеева (1.54) на угловые базисы, образованные бисферическими гармониками (1.6), гипергармониками (1.7) или симметризованными D -функциями Вигнера (1.9). Для всех таких проекций выводятся граничные условия в точке тройного удара $r = 0$.

Ключевыми для построения всех разложений оказались выбор базиса из функций \tilde{W}_{Lab} и выведенная рекуррентная система обыкновенных дифференциальных уравнений для искомым функций $\Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi_i)$ одной переменной. Аналитический и численный анализ такой системы не вызывает принципиальных затруднений. Двумерные уравнения Фаддеева (1.63), а не двумерные уравнения Шредингера выбраны в качестве исходных не случайно. Уравнения Фаддеева содержат парные потенциалы $V_i(r \cos \varphi_i)$, разложения которых по функциям $\tilde{W}_{Lab}(\varphi_i)$ того же гиперугла φ_i довольно просты, а в уравнения Шредингера входят интегралы от суммы трех потенциалов, разложения этих интегралов по функциям $\tilde{W}_{Lab}(\varphi_i)$ довольно сложные.

Далее у всех аргументов опущен индекс i и считается, что

$$\begin{aligned} x &\equiv x_i, & y &\equiv y_i, & \varphi &\equiv \varphi_i, & \Omega &\equiv \Omega_i, \\ u &\equiv u_i, & \theta &\equiv \theta_i, & (1 - u_i^2)^{1/2} &= \sin \theta, \end{aligned}$$

асимптотикой и связью называются асимптотика при $r \rightarrow 0$ и связь при $r = 0$.

2.2. Фундаментальная система регулярных решений двумерных уравнений Фаддеева. Пусть все парные взаимодействия — ряды (1.31) одного и трех типов (1.32), а полный набор сохраняющихся квантовых чисел $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$ задан.

В нашем подходе исходной является краевая задача (1.63), (1.64). Ею реализацию начнем с обсуждения ключевых формул.

Рассмотрим систему (1.63). Пусть $\{a, b\}$ — выбранная пара индексов a и b . Для анализа уравнения этой системы, содержащего в левой части компоненту U_{iab}^ℓ с такими индексами a и b , будем использовать как полный угловой базис набор $\{\tilde{W}_{Lab}(\varphi)\}_{L=a+b}^\infty$ функций (1.8). Этот базис исключительно удобен, потому что согласно спектральным формулам (1.28) и (1.29) функции \tilde{W}_{Lab} являются собственными и для оператора \tilde{L}_{ab}^2 , и для оператора $h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki})$.

Кроме этих формул ключевыми будут разложения

$$(\cos \varphi)^g \tilde{W}_{Lab}(\varphi) = \sum_{L'=a+b} A_{L'ab}^{Lg} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi), \quad g = -1, 0, \dots \quad (2.7)$$

Все коэффициенты $A_{L'ab}^{Lg}$ этих разложений — однократные интегралы:

$$A_{L'ab}^{Lg} \equiv N_{Lab} N_{L'ab} \int_0^{\pi/2} (\sin \varphi)^{2a+2} (\cos \varphi)^{2b+2+g} \times \\ \times P_n^{(a+1/2, b+1/2)}(\cos 2\varphi) P_{n'}^{(a+1/2, b+1/2)}(\cos 2\varphi) d\varphi.$$

Каждый из таких интегралов подстановкой $z = \cos 2\varphi$ и заменой полинома $P_{n'}^{(a+1/2, b+1/2)}(z)$ или $P_n^{(a+1/2, b+1/2)}(z)$ гипергеометрическим рядом [4] сведем к сумме табличных интегралов [6]. В итоге получим инвариантное относительно замены $n \leftrightarrow n'$ индексов n и n' представление в виде конечной суммы

$$A_{L'ab}^{Lg} = N_{Lab} N_{L'ab} \frac{(-1)^{n+n'}}{2 n! n'} (b + 3/2)_n \times \\ \times \sum_{p=0}^n \frac{(-n)_p}{(b + 3/2)_p} \frac{(a + b + n + 2)_p}{\Gamma(p + 1)} \left(-\frac{g}{2} - p\right)_{n'} \times \\ \times B\left(a + n' + \frac{3}{2}, b + p + \frac{g}{2} + \frac{3}{2}\right), \quad (2.8)$$

Эта сумма содержит гамма- и бета-функции Γ и B и символ Похгаммера $(-g/2 - p)_{n'}$, который при замене $n \leftrightarrow n'$ переходит в символ $(-g/2 - p)_n$. Из-за этих символов все коэффициенты $A_{L'ab}^{Lg}$ разложения (2.7) отличны от нуля, если g — нечетное число, и равны нулю, если g — четное число и $L' > L + g$ или же $L' < \max\{a + b, L - g\}$.

Приступим к построению фундаментальной системы регулярных решений краевой задачи (1.63), (1.64). Каждое из ее линейно независимых регулярных решений будем искать в виде формальных асимптотических при $r \rightarrow 0$ рядов. Сначала определим вид старших слагаемых искомого ряда. По условию (1.31) в исследуемых уравнениях (1.63) потенциалы не могут возрастать при $r \rightarrow 0$ быстрее слагаемых $r^{-2} \tilde{L}_{ab}^2(\varphi)$ операторов \tilde{H}_{0ab} . Поэтому старший член асимптотики каждой компоненты Φ_{iab}^L искомого решения определяется соответствующим характеристическим (см. [2]) уравнением $\tilde{H}_{0ab} \Phi_{iab}^L = 0$. Используя (1.28), из таких уравнений находим

$$\Phi_{iab}^L(r, \varphi) = X_{iab}^L r^{L+2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + o(r^{L+2}), \quad r \rightarrow 0. \quad (2.9)$$

Здесь и далее, как и в системе (1.63), $i = 1, 2, 3$, индексы a и b подчинены условиям $a + b \leq L$ и $(-1)^{a+b} = \sigma$, а X_{iab}^L — произвольные коэффициенты.

Совокупность $\{\Phi_{iab}^L\}$ всех компонент Φ_{iab}^L с асимптотиками (2.9) и одним и тем же значением $L \geq L_{\min}$, но любыми возможными при таком L индексами i , a и b назовем L -решением. Компоненты Φ_{iab}^L и $\Phi_{ia'b'}^{L'}$, L - и L' -решений, $L \neq L'$, имеют разную асимптотику (2.9), что обеспечивает линейную независимость всех L -решений по аргументу r . Компоненты Φ_{iab}^L и $\Phi_{ia'b'}^L$ одного и того же L -решения с разными индексами a и a' и (или) разными индексами b и b' также линейно независимы, потому что согласно (1.8) и (2.9) асимптотики любой из компонент Φ_{iab}^L при $\varphi \rightarrow 0$ или $\varphi \rightarrow \pi/2$ зависят от индекса a или b :

$$\Phi_{iab}^L = O(\varphi_i^{a+1}), \quad r \rightarrow 0, \quad \varphi \rightarrow 0;$$

$$\Phi_{iab}^L = O((\pi/2 - \varphi)^{b+1}), \quad r \rightarrow 0, \quad \varphi \rightarrow \pi/2.$$

Выберем некоторое значение L и начнем построение каждой компоненты L -решения в виде ряда

$$\Phi_{iab}^L(r, \varphi) \equiv r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} \exp(ns) \Phi_{iab}^{Ln}(s, \varphi), \quad s \equiv \ln r, \quad (2.10)$$

где по предположению все функции $r^n = \exp(ns)$ и Φ_{iab}^{Ln} линейно независимы и, кроме того, $\Phi_{iab}^{Ln} = 0$ при $r = 0$ и $\varphi = 0, \pi/2$. Чтобы представления (2.10) не противоречили соотношениям (2.9), положим

$$\Phi_{iab}^{L0}(s, \varphi) \equiv X_{iab}^L \tilde{W}_{Lab}(\varphi). \quad (2.11)$$

Заменой $r \rightarrow s \equiv \ln r$ и подстановкой $\varrho = \exp(s) \cos \varphi$ выведем из системы (1.63) более удобную для нашей цели систему

$$\begin{aligned} & \left[\partial_s^2 - \tilde{L}_{ab}^2(\varphi) \right] U_{iab}^\ell(s, \varphi) = -E U_{iab}^\ell(s, \varphi) + \\ & + \exp(2s) V_i(\varrho) \left[U_{iab}^\ell(s, \varphi) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle s, \varphi | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | U_{ka'b'}^\ell(s, \varphi_k) \rangle \right]. \end{aligned}$$

В этой системе заменим все потенциалы V_i рядами (1.31), а функции U_{iab}^ℓ — компонентами Φ_{iab}^L искомого L -решения, взятыми в виде (2.10). В полученных уравнениях приведем подобные слагаемые с одинаковыми степенями

аргумента $r = \exp(s)$ и приравняем каждое такое слагаемое к нулю. В итоге получится система уравнений для функций Φ_{iab}^{Ln} :

$$D_{ab}^{Ln}(s, \varphi) \Phi_{iab}^{Ln}(s, \varphi) = R_{iab}^{Ln}(s, \varphi),$$

$$R_{iab}^{Ln}(s, \varphi) \equiv -E \Phi_{iab}^{L, n-2}(s, \varphi) + \sum_{m=0}^{n-1} V_{i, n-m-2} (\cos \varphi)^{n-m-2} \times \quad (2.12)$$

$$\times \left[\Phi_{iab}^{Lm}(s, \varphi) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle s, \varphi | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | \Phi_{ka'b'}^{Lm}(s, \varphi_k) \rangle \right],$$

где $a + b, a' + b' \leq L$ и по определению $\Phi_{iab}^{Ln} \equiv 0$ при $n < 0$, а

$$D_{ab}^{Ln}(s, \varphi) \equiv (\partial_s + L + n + 2)^2 - \tilde{L}_{ab}^2(\varphi). \quad (2.13)$$

Система (2.12) — рекуррентная цепочка n -подсистем, $n = 0, 1, \dots$. Каждая n -подсистема — совокупность неоднородных уравнений для всех функций Φ_{iab}^{Ln} с данным значением индекса n и индексами i, a, b , такими, что $i = 1, 2, 3$; $(-1)^{a+b} = \sigma$ и $a + b \leq L$. Все уравнения любой n -подсистемы не зацепляются ни по индексу i , ни по индексам a, b и содержат в правых частях R_{iab}^{Ln} компоненты Φ_{iab}^{Lm} решений всех предыдущих m -подсистем, $m = 0, 1, \dots, n - 1$.

Исследуем уравнение некоторой n -подсистемы для функции Φ_{iab}^{Ln} с выбранными значениями индексов i, a, b . Общее решение Φ_{iab}^{Ln} такого неоднородного уравнения — сумма его частного решения и общего решения $Z_{iab}^{L'n}$ соответствующего однородного уравнения. Решение $Z_{iab}^{L'n}$ — сумма

$$Z_{iab}^{L'n}(s, \varphi) = [C^+ \exp(L'_+ s) + C^- \exp(L'_- s)] \tilde{W}_{L'ab}(\varphi),$$

где C^\pm — произвольные константы; $L' = a + b + 2n'$, $n' = 0, 1, \dots$, а $L'_\pm \equiv \pm L' - L - n$. Слагаемые каждой такой суммы можно отнести либо к компонентам нерегулярных решений, либо к компонентам другого ($L' \neq L$) L' -решения исходной краевой задачи (1.63), (1.64). Поэтому далее без потери общности полагаем все функции $Z_{iab}^{L'n}$ равными нулю и исследуем лишь частные решения неоднородной системы уравнений (2.12), равные нулю в точках $\varphi_i = 0, \pi/2$.

Предположим, что правая часть R_{iab}^{Ln} исследуемого уравнения (2.12) для компоненты Φ_{iab}^{Ln} — полином по s конечной степени $M'(n)$:

$$R_{iab}^{Ln}(s, \varphi) = \sum_{m=0}^{M'(n)} s^m R_{iab}^{Ln m}(\varphi), \quad M'(n) < \infty. \quad (2.14)$$

Заменим в этом уравнении искомую компоненту Φ_{iab}^{Ln} ее разложением

$$\Phi_{iab}^{Ln}(s, \varphi) = \sum_{L'=a+b} G_{iL'ab}^{Ln}(s) \tilde{W}_{L'ab}(\varphi) \quad (2.15)$$

по полному базису $\{\tilde{W}_{L'ab}(\varphi_i)\}_{L'=a+b}$. Используя (1.28) и (2.13), спроецируем полученное уравнение на этот базис и таким способом выведем для искомым функций $G_{iL'ab}^{Ln}$, $L' = a + b, a + b + 2, \dots$, бесконечную цепочку незацепляющихся ни по каким индексам уравнений Гаусса с постоянными коэффициентами

$$\begin{aligned} [\partial_s^2 + 2(L + 2 + n) \partial_s + D_{L'ab}^{Ln}] G_{iL'ab}^{Ln}(s) = \\ = \langle \tilde{W}_{L'ab}(\varphi) | R_{iab}^{Ln}(s, \varphi) \rangle = \sum_{m=0}^{M'(n)} s^m \langle \tilde{W}_{L'ab}(\varphi) | R_{iab}^{Lnm}(\varphi) \rangle. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Согласно определению (1.8) функций \tilde{W}_{Lab} индексы L и L' могут принимать одновременно только четные или нечетные значения, если сумма $a + b$ — четное или нечетное число, т.е. если $\sigma = +1$ или же $\sigma = -1$. Поэтому коэффициент

$$D_{L'ab}^{Ln} \equiv (L + 2 + n)^2 - (L' + 2)^2$$

равен нулю только при четном n и $L' = L + n$. В этом случае решение $G_{iL'ab}^{Ln}(s)$ уравнения (2.16) — полином степени $M'(n) + 1$ со старшим членом $B_{iab}^{Ln} s^{M'(n)+1}$, если, конечно, не равен нулю коэффициент

$$B_{iab}^{Ln} \equiv \frac{\langle \tilde{W}_{L+n,ab}(\varphi) | R_{iab}^{Ln}(\varphi) \rangle}{2(L + 2 + n)(M'(n) + 1)}. \quad (2.17)$$

Во всех остальных случаях, когда $L' \neq L + n$ или $B_{iab}^{Ln} = 0$, решение $G_{iL'ab}^{Ln}(s)$ — полином степени $M'(n)$. Значит, верны следующие правила: если правая часть R_{iab}^{Ln} уравнения n -подсистемы (2.12) для функции Φ_{iab}^{Ln} — полином по s степени $M'(n)$, то решение Φ_{iab}^{Ln} — полином по s степени $M'(n)$ или $M'(n) + 1$, если n — нечетное или, соответственно, четное число. В последнем случае согласно (2.15) старшее слагаемое решения-полинома Φ_{iab}^{Ln} — функция $B_{iab}^{Ln} s^{M'(n)+1} \tilde{W}_{L+n,ab}(\varphi)$.

Используя сформулированные выше правила, докажем, что предположение (2.14) верно, и определим $M'(n)$ в каждом из трех случаев (1.32).

Начнем с наиболее общего случая А. Исследуем первую ($n = 1$) подсистему (2.12). Ее правая часть содержит только функции (2.11) и поэтому не зависит от s . Применив правило (1.29), представим рассматриваемую подсистему в виде совокупности несвязанных уравнений:

$$D_{ab}^{Lp}(s, \varphi) \Phi_{iab}^{Lp}(\varphi) = R_{iab}^{Lp}(s, \varphi) = V_{i,p-2} B_{iab}^{L1} (\cos \varphi)^{p-2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi), \quad (2.18)$$

где $p = 1$, а B_{iab}^{L1} — комбинации неопределенных коэффициентов $X_{ka'b'}^L$:

$$B_{iab}^{L1} \equiv X_{iab}^L + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} X_{ka'b'}^L. \quad (2.19)$$

Для полноты докажем, что уравнение (2.18) с данными значениями L, a, b, i и любым нечетным p имеет единственное регулярное решение. Заменим произведение $(\cos \varphi)^{p-2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi)$ в правой части исследуемого уравнения бесконечным рядом (2.7) с коэффициентами (2.8). Затем, используя (1.28) и (1.29), убедимся подстановкой в том, что искомым и единственным, но пока формальным, решением полученного уравнения будет бесконечный ряд

$$\Phi_{iab}^{Lp}(\varphi) = V_{i,p-2} B_{iab}^{L1} \sum_{L'=a+b} \frac{A_{L'ab}^{L,p-2}}{p(2L'+p+4)} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi). \quad (2.20)$$

Теперь докажем, что этот ряд всюду равномерно сходится к конечной сумме

$$\Phi_{iab}^{Lp}(\varphi) = V_{i,p-2} B_{iab}^{L1} (\cos \varphi)^p \sum_{L'=a+b}^L C_{L'ab}^{Lp} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi). \quad (2.21)$$

Для этого достаточно показать, что при вполне определенных коэффициентах $C_{L'ab}^{Lp}$ эта сумма удовлетворяет уравнению (2.18). Подставим в него функции $\tilde{W}_{L'ab}$ и Φ_{iab}^{Lp} в виде (1.8) и (2.21). В полученном уравнении перейдем к переменной $z = \cos 2\varphi$, а функции $z P_{n'}^{(a+1/2, b+1/2)}(z)$ и $(1-z^2) \partial_z P_{n'}^{(a+1/2, b+1/2)}(z)$ представим известными комбинациями [4] линейно независимых полиномов $P_n^{(a+1/2, b+1/2)}(z)$ с индексами $n = n', n' \pm 1$. Положив коэффициент при каждом $(n = 0, 1, \dots, (L-a-b)/2)$ таком полиноме равным нулю, получаем линейную систему уравнений с трехдиагональной матрицей \mathbf{M} :

$$M_{L',L'-2} C_{L'-2,ab}^{Lp} + M_{L'L'} C_{L'ab}^{Lp} + M_{L',L'+2} C_{L'+2,ab}^{Lp} = \delta_{LL'}, \quad (2.22)$$

где $L' = a+b, a+b+2, \dots, L$, а элементы $M_{L'L'}, M_{L'-2,L'} \equiv Z_{L'}^-$ и $M_{L',L'+2} \equiv Z_{L'}^+$ главной, нижней и верхней диагоналей матрицы \mathbf{M} удобно вычислять в следующем порядке:

$$\begin{aligned} d_{L'} &= N_{L'ab}/N_{Lab}, \quad d_{L'}^\pm = [(L+p+2)^2 - (L' \pm p+2)^2], \\ M_{L'L'} &= d_{L'} \left\{ p \left[L' + p + 1 - \frac{(a-b)(a+b+1)}{L'+1} \right] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} d_{L'}^+ \left[1 - \frac{(a-b)(a+b+1)}{(L'+1)(L'+3)} \right] \right\}, \\ Z_{L'}^\pm &= d_{L'} d_{L'}^\pm \frac{[2L' - 2(a \pm b) + 3 \pm 1][2L' + 2(a \pm b) + 5 \pm 3]}{16(L'+2)(L'+2 \pm 1)}. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Так как матрица \mathbf{M} имеет доминирующую диагональ, то система (2.22) однозначно разрешима, поэтому все коэффициенты $C_{L'ab}^{Lp}$ суммы (2.21) определяются этой системой единственным образом, что и требовалось показать.

Если размерность $(L - a - b)/2 + 1$ матрицы \mathbf{M} невелика, то все коэффициенты $C_{L'ab}^{Lp}$ и соответствующее им решение (2.21) уравнения (2.18) можно найти в явном виде. Например, в самом простом случае, когда $L = a + b$,

$$\Phi_{iab}^{Lp}(s, \varphi) = \Phi_{iab}^{Lp0}(\varphi) \equiv \frac{V_{i,p-2}}{p(2b+p+1)} B_{iab}^{L1} (\cos \varphi)^p \tilde{W}_{Lab}(\varphi). \quad (2.24)$$

Итак, все функции Φ_{iab}^{L1} , удовлетворяющие первой ($n = 1$) подсистеме (2.12), определены явно формулами (2.8), (2.20) или (2.21)–(2.24), в которых $p = 1$.

Исследуем вторую ($n = 2$) подсистему (2.12). Так как все функции Φ_{iab}^{L0} и Φ_{iab}^{L1} не зависят от s , то и правые части R_{iab}^{L2} уравнений этой подсистемы не зависят от s и являются рядами (2.14) с $n = 2$ и $M'(n) = 0$. Следовательно, все искомые компоненты Φ_{iab}^{L2} решения $\{\Phi_{iab}^{L2}\}$ — линейные по s функции:

$$\Phi_{iab}^{L2}(s, \varphi) = B_{iab}^{L2} s \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + G_{iab}^{L2}(\varphi), \quad (2.25)$$

где B_{iab}^{L2} и G_{iab}^{L2} — пока неизвестные постоянные и функции. Подставив искомые функции Φ_{iab}^{L2} в виде (2.25) во вторую подсистему (2.12), получаем уравнения

$$\left[\tilde{L}_{ab}^2(\varphi) - (L+4)^2 \right] G_{iab}^{L2}(\varphi) = 2(L+4) B_{iab}^{L2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) - R_{iab}^{L2}(\varphi). \quad (2.26)$$

Решение каждого (любые допустимые i , a и b) такого уравнения существует тогда и только тогда, когда его правая часть ортогональна собственной функции $\tilde{W}_{L+2,ab}$ оператора D_{ab}^{L2} , заданного формулой (2.13) с $n = 2$. Этим условием однозначно определяется коэффициент $B_{iab}^{L,2p}$, $p = 1$. При любом L

$$B_{iab}^{L,2p} = (2L+8)^{-1} V_{i,-1} \left[\langle (\cos \varphi)^{p-2} \tilde{W}_{L+2p,ab}(\varphi) | \Phi_{iab}^{Lp}(\varphi) \rangle + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle (\cos \varphi)^{p-2} \tilde{W}_{L+2p,ab}(\varphi) | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | \Phi_{ka'b'}^{Lp}(\varphi_k) \rangle \right], \quad (2.27)$$

а в частном случае, когда $L = a + b$ и Φ_{iab}^{Lp} — функция (2.24),

$$B_{iab}^{L,2p} = [2p(L+4)]^{-1} V_{i,-1} \sum_{k \neq i} V_{k,p-2} \sum_{a'b'} B_{ka'b'}^{L1} (2b'+p+1)^{-1} \times \langle \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) (\cos \varphi)^{p-2} | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | (\cos \varphi_k)^p \tilde{W}_{La'b'}(\varphi_k) \rangle. \quad (2.28)$$

Заменим в определении (2.27) коэффициента $B_{iab}^{L,2p}$ функцию Φ_{iab}^{Lp} ее рядом (2.20), а затем применим правила (1.29) и (2.7). Так как ряд (2.20)

бесконечный, то и коэффициент $B_{iab}^{L,2p}$ представится бесконечной суммой, содержащей только коэффициенты $A_{L'ab}^{Lg}$, $g = p, p-2$, и $\langle ab|K(\gamma_{ki})|a'b'\rangle_{L\ell}$. Такая бесконечная сумма может оказаться равной нулю лишь в исключительном случае, в общем случае $B_{iab}^{L,2p} \neq 0$, если $p = 1, 3, 5, \dots$

Для примера исследуем самый простой случай. Пусть $p = 1$, а $\ell = 0$ и $L = L_{\min} = 0$. Тогда индексы a, b и a', b' принимают только нулевые значения, а ядро $h_{0000}^0(\varphi, \varphi'; \gamma_{ki})$ равно константе $|\operatorname{cosec} 2\gamma_{ki}|$. Согласно (2.19) и (2.28)

$$\begin{aligned} B_{i00}^{01} &= \sum_{k=1}^3 X_{k00}^0, \\ B_{i00}^{02} &= \frac{V_{i,-1}}{12\pi} B_{i00}^{01} \sum_{k \neq i} V_{k,-1} (2|\gamma_{ki}| - \pi) \frac{(\sin \gamma_{ki})^2}{\cos \gamma_{ki}} \end{aligned} \quad (2.29)$$

и поэтому $B_{i00}^{02} = 0$ тогда и только тогда, когда $B_{i00}^{01} = 0$ и (или) $V_{i,-1} = 0$. Теперь решим уравнение (2.26). Используя (1.61) и (2.24), представим его правую часть суммой трех слагаемых. Одно из них пропорционально функции \tilde{W}_{000} , другое — функции \tilde{W}_{200} . Поэтому искомое решение G_{i00}^{02} является линейной комбинацией таких функций и решения f неоднородного уравнения

$$\begin{aligned} [\partial_\varphi^2 + 16] f(\varphi) &= \frac{2B_{i00}^{01}}{3\sqrt{\pi}} \frac{V_{i,-1}}{\cos(\varphi)} \sum_{k \neq i} \frac{V_{k,-1}}{|\sin \gamma_{ki}|} \times \\ &\times \left\{ [\cos C_-(\varphi; \gamma_{ki})]^3 - [\cos C_+(\varphi; \gamma_{ki})]^3 \right\} \end{aligned}$$

с условиями $\langle \tilde{W}_{200}(\varphi) | f(\varphi) \rangle = 0$ и $f = 0$ при $\varphi = 0, \pi/2$. Фундаментальную систему однородного уравнения, отвечающего такому уравнению, образуют функции $\tilde{W}_{000} \sim \sin 4\varphi$ и $\tilde{Z}_{000} \sim \cos 4\varphi$. Используя их, найдем решение f , подчиненное указанным условиям, методом вариации постоянных коэффициентов [2]. Затем запишем решение G_{i00}^{02} исходного уравнения (2.26) в виде

$$\begin{aligned} G_{i00}^{02}(\varphi) &= -(1/12) [EX_{i00}^0 - (V_{i,0} + (1/2)V_{i,-1}^2) B_{i00}^{01}] \tilde{W}_{000}(\varphi) - \\ &- (2/3) B_{i00}^{02} \tilde{W}_{200}(\varphi) - (6\sqrt{\pi})^{-1} B_{i00}^{01} V_{i,-1} \sum_{k \neq i} g(\varphi; \gamma_{ki}), \end{aligned} \quad (2.30)$$

где функция $g(\varphi; \gamma)$ содержит функции $\tilde{s} \equiv |\sin \gamma|$ и $c \equiv \cos \gamma$ параметра $\gamma = \gamma_{ki}$ и меняет свой вид при переходе через точку $\tilde{\varphi} \equiv \pi/2 - |\gamma|$: если $\varphi \in [0, \tilde{\varphi}]$, то

$$g(\varphi; \gamma) \equiv \frac{3 + \tilde{s}^2 [18 (\sin \varphi)^2 + \sin 4\varphi \ln(\cos \varphi) - \varphi \cos 4\varphi - 1]}{6c},$$

если же $\varphi \in [\tilde{\varphi}, \pi/2]$, то

$$g(\varphi; \gamma) \equiv \frac{4(3 - 4c^2) \cos 2\varphi + (21 - 22c^2) \cos 4\varphi - 3(1 - 2c^2)}{24\tilde{s}}.$$

Отмеченное изменение функционального вида — следствие зависимости пределов C_{\pm} интеграла (1.61) от φ и γ_{ki} . В общем случае ($\ell \neq 0$) из-за такой зависимости следует ожидать, что две точки $\varphi = \gamma_{ki}$ и $\varphi = \pi/2 - \gamma_{ki}$, $k \neq i$, будут особыми для всех функций Φ_{iab}^{Ln} : при переходе через такие точки эти функции могут менять свой функциональный вид.

Продолжим анализ n -подсистем (2.12) с $n \geq 3$. По индукции докажем, что правые части R_{iab}^{Ln} уравнений каждой такой n -подсистемы — полиномы (2.14) по s степени не выше, чем $M'(n) = [(n-1)/2]$, а решения Φ_{iab}^{Ln} таких уравнений — полиномы по s той же степени, если n — нечетное число, и полиномы степени не выше, чем $[n/2]$, если n — четное число. Следовательно, предположение (2.14) верно, а каждая компонента L -решений системы (1.63) — двойная сумма

$$\Phi_{iab}^L(s, \varphi) = r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi), \quad (2.31)$$

где $M(n) = [n/2]$ и согласно соотношениям (2.11) и (2.25)

$$\begin{aligned} \Phi_{iab}^{Ln0}(\varphi) &\equiv \Phi_{iab}^{Ln}(\varphi), \quad n = 0, 1; \\ \Phi_{iab}^{L20}(\varphi) &\equiv G_{iab}^{L2}(\varphi), \quad \Phi_{iab}^{L21}(\varphi) \equiv B_{iab}^{L2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi). \end{aligned} \quad (2.32)$$

В уравнениях (1.63) заменим компоненты U_{iab}^{ℓ} компонентами Φ_{iab}^L , взятыми в виде (2.31). Полученные уравнения для функций Φ_{iab}^{Lnm} запишем как последовательность n -подсистем, расположенных в порядке возрастания индекса n и в порядке убывания индекса m для каждого n :

$$\begin{aligned} & \left[\tilde{L}_{ab}^2(\varphi) - (L+n+2)^2 \right] \Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi) = E \Phi_{iab}^{L, n-2, m}(\varphi) + \\ & + (m+1) \left[2(L+n+2) \Phi_{iab}^{Ln, m+1}(\varphi) + (m+2) \Phi_{iab}^{Ln, m+2}(\varphi) \right] - \\ & - \sum_{p=0}^{n-1} V_{i, n-p-2} (\cos \varphi)^{n-p-2} \left[\Phi_{iab}^{Lpm}(\varphi) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle \varphi | h_{aba'b'}^{\ell}(\gamma_{ki}) | \Phi_{ka'b'}^{Lpm}(\varphi_k) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.33)$$

Система (2.33) является рекуррентной цепочкой неоднородных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Дополним ее до краевой задачи граничными условиями $\Phi_{iab}^{Lpm}(\varphi) = 0$ при $\varphi = 0, \pi/2$ для всех

функций $\Phi_{iab}^{Lpm}(\varphi)$. Любая конечная подсистема системы (2.33) с такими однородными граничными условиями и наперед заданными константами X_{iab}^L асимптотик (2.9) однозначно разрешима и может быть проинтегрирована численно известными алгоритмами решения систем дифференциальных уравнений [9].

Альтернативный способ вычисления функций Φ_{iab}^{Lnm} заключается в суммировании их разложений по соответствующим базисным функциям \tilde{W}_{Lab} :

$$\Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi) = \sum_{L'=a+b} Z_{iL'ab}^{Lnm} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi).$$

Благодаря свойству (1.29) операторов $h_{aba'b'}^l$ система (2.33) заменой искомым функций Φ_{iab}^{Lnm} такими рядами сводится к рекуррентной и алгебраической системе линейных уравнений для искомым коэффициентов $Z_{iL'ab}^{Lnm}$.

Исследуем следующий случай В. Так как теперь $V_{k,-1} = 0$, $k = 1, 2, 3$, то согласно (2.18) и (2.27) имеем $\Phi_{iab}^{L1} \equiv 0$ и $B_{iab}^{L2} = 0$. Поэтому вторая ($n = 2$) подсистема (2.12) — совокупность несвязанных уравнений:

$$\left[\tilde{L}_{ab}^2(\varphi) - (L + 4)^2 \right] \Phi_{iab}^{L2}(\varphi) = R_{iab}^{L2}(\varphi) = [V_{i0} B_{iab}^{L1} - E X_{iab}^L] \tilde{W}_{Lab}(\varphi).$$

Их правые части R_{iab}^{L2} и решения Φ_{iab}^{L2} не зависят от s :

$$\Phi_{iab}^{L2}(s, \varphi) = \Phi_{iab}^{L20}(\varphi) \equiv F_{iLab}^{L2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi), \quad (2.34)$$

где постоянные F_{iLab}^{L2} связаны с коэффициентами (2.19) формулами

$$F_{iL'ab}^{L2} \equiv \frac{\delta_{LL'} (V_{i0} B_{iab}^{L1} - E X_{iab}^L)}{4L + 12}. \quad (2.35)$$

Третья ($n = 3$) подсистема (2.12) состоит из уравнений (2.18) с $p = 3$. Их решения — функции (2.24) с $p = 3$. Продолжая анализ тем же способом, что и в предыдущем случае А, последовательно доказываем следующие утверждения: все функции Φ_{iab}^{Ln} , $n < 6$, не зависят от s , все функции Φ_{iab}^{Ln} с $n = 6$ линейны по s и содержат в качестве слагаемых функции $s B_{iab}^{L6} \tilde{W}_{L+6,ab}$ с коэффициентами B_{iab}^{L6} , определенными формулой (2.27) с индексом $p = 3$; суммы (2.14) и (2.31) имеют пределы $M'(n) = [(n - 1)/6]$ и $M(n) = [n/6]$.

Исследуем последний случай С. По определению $V_{k,p-2} = 0$, где $k = 1, 2, 3$, а $p = 1, 3$. Поэтому из (2.18) и (2.27) следует, что все компоненты решений первой и третьей подсистем (2.12) тождественно равны нулю: $\Phi_{iab}^{Lp} \equiv 0$, $p = 1, 3$, и $B_{iab}^{L2} = 0$. Следовательно, как и в предыдущем случае В, все компоненты решения второй ($n = 2$) подсистемы (2.12) определены формулами (2.34) и (2.35). Используя (1.29), (2.11) и (2.34), покажем, что правые

части R_{iab}^{L4} всех уравнений четвертой ($n = 4$) подсистемы (2.12) не зависят от s и являются суммами

$$R_{iab}^{L4}(\varphi) = \tilde{F}_{iLab}^{L2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + V_{i2} B_{iab}^{L1} (\cos \varphi)^2 \tilde{W}_{Lab}(\varphi),$$

$$\tilde{F}_{iLab}^{L2} \equiv (V_{i0} - E) F_{iLab}^{L2} + V_{i0} \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} F_{kLa'b'}^{L2}.$$

Упростим эти представления, заменив в них произведение $(\cos \varphi)^2 \tilde{W}_{Lab}$ суммой (2.7) с индексом $p = 2$ и коэффициентами (2.8). Эта сумма, а значит и функции $R_{iab}^{L4}(\varphi)$ являются линейными комбинациями двух функций \tilde{W}_{Lab} и $\tilde{W}_{L+2,ab}$, если $L = a + b$, и трех функций \tilde{W}_{Lab} и $\tilde{W}_{L\pm 2,ab}$, если $L > a + b$. Поэтому исследуемой подсистеме (2.12) с $n = 4$ удовлетворяют комбинации Φ_{iab}^{L4} этих же функций и однозначно определяемых коэффициентов $F_{iL'ab}^{L4}$:

$$\Phi_{iab}^{L4}(s, \varphi) = \Phi_{iab}^{L40}(\varphi) = \sum_{L'=L-2}^{L'+2} F_{iL'ab}^{L4} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi);$$

$$F_{iLab}^{L4} = \frac{V_{i2} A_{Lab}^{L2} + \tilde{F}_{iLab}^{L2}}{8(L+4)}, \quad (2.36)$$

$$F_{i,L\pm 2,ab}^{L4} = \frac{1}{4} V_{i2} A_{L\pm 2,ab}^{L2} B_{iab}^{L1} \begin{cases} (L+5)^{-1}, \\ (3L+9)^{-1}. \end{cases}$$

Далее по индукции несложно доказать следующие утверждения. Если n нечетно, то n -подсистема (2.12) имеет только тривиальное решение ($\forall \Phi_{iab}^{Ln} \equiv 0$), а при четном n все правые части R_{iab}^{Ln} благодаря правилам (1.29) и (2.7) являются линейными комбинациями функций $\tilde{W}_{L'ab}$, $L' \leq L+n-2$. Так как такая комбинация ортогональна собственной функции $\tilde{W}_{L+n,ab}$ оператора D_{ab}^{Ln} , то любая компонента Φ_{iab}^{Ln} не зависит от s и является комбинацией того типа, что и соответствующая правая часть R_{iab}^{Ln} :

$$\Phi_{iab}^{Ln}(\varphi) = \sum_{L'=L-(L,n)}^{L_+(L,n)} F_{iL'ab}^{Ln} \tilde{W}_{L'ab}(\varphi),$$

$$L_{\pm}(L, n) \equiv \max \{L \pm n \mp 2, a + b\},$$

где $n = 0, 2, \dots$, а $F_{iL'ab}^{Ln}$ — вполне определенные числовые коэффициенты, для которых можно вывести рекуррентные по индексу n соотношения.

Итак, в рассмотренном случае С в суммах (2.14) и (2.31) индекс n — четное число, $M'(n) = 0$ и $M(n) = 0$ при любом n . Поэтому все компоненты Φ_{iab}^L любого L -решения — однократные ряды по четным степеням гиперрадиуса.

Суммируем доказанные выше утверждения в виде теоремы.

Теорема 2.1. *Уравнения (1.63) имеют формальную фундаментальную систему регулярных L -решений, определенных рядами (2.31), в которых $M(n) = [n/2], [n/6], 0$, соответственно, в случае А, В, С, а функции $\Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi)$ подчинены однозначно разрешимой рекуррентной цепочке уравнений (2.33) с однородными граничными условиями в точках $\varphi = 0, \pi/2$.*

Теперь обсудим другой способ построения L -решений $\{\Phi_{iab}^L\}$ исходной системы (1.63). В этом способе ключевой является система уравнений (2.33). При любых данных n и m левые и правые части этих уравнений линейны относительно всех искомым функций Φ_{iab}^{Lnm} и уже найденных функций $\Phi_{ka'b'}^{Ln'm'}$ с индексами $n' \leq n$ и $m' > m$. Поэтому, начиная с $n = 1$, все коэффициенты, например, $B_{iab}^{L1}, B_{iab}^{L2}, F_{iL'ab}^{L2}$, и все функции, в частности, $\Phi_{iab}^{L10}, \Phi_{iab}^{L20}, \Phi_{iab}^{L21}$, обладают исключительно важным свойством — они являются линейными функциями, вообще говоря, всех неопределенных коэффициентов X_{iab}^L . Таким образом, при любых фиксированных значениях индексов i, a, b, n и m правая часть R_{iab}^{Lnm} любого уравнения (2.33) представима в виде конечной суммы

$$R_{iab}^{Lnm}(\varphi) = \sum_{k=1}^3 \sum_{a'b'} X_{ka'b'}^L R_{iab,ka'b'}^{Lnm}(\varphi),$$

и поэтому для решения Φ_{iab}^{Lnm} этого уравнения верно представление

$$\Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi) = \sum_{k=1}^3 \sum_{a'b'} X_{ka'b'}^L \Phi_{iab,ka'b'}^{Lnm}(\varphi). \quad (2.37)$$

Следовательно, если все коэффициенты X_{iab}^L , кроме коэффициента $X_{ka'b'}^L$ с выбранными значениями индексов k, a' и b' , равны нулю, то исследуемое уравнение вырождается в уравнение, не содержащее никаких неопределенных коэффициентов:

$$\left[\tilde{L}_{ab}^2(\varphi) - (L + n + 2)^2 \right] \Phi_{iab,ka'b'}^{Lnm}(\varphi) = R_{iab,ka'b'}^{Lnm}(\varphi), \quad \varphi \in [0, \pi/2]. \quad (2.38)$$

По определению компонента $\Phi_{iab}^{Lnm} = 0$, т. е. сумма (2.37) равна нулю в точках $\varphi = 0, \pi/2$. Это условие будет выполняться при любых коэффициентах X_{iab}^L тогда и только тогда, когда каждое из уравнений (2.38) дополнено до

краевой задачи граничными условиями $\Phi_{iab,ka'b'}^{Lnm} = 0$ при $\varphi = 0, \pi/2$. Такую краевую задачу даже при сравнительно большом n можно решить известными численными методами [9], например, методом вариации постоянных коэффициентов [2]. Этот метод несложно реализовать, потому что фундаментальные решения [4] однородного уравнения, отвечающего уравнению (2.38), известны в явном виде. Регулярным решением является функция \tilde{W}_{Lab} , а нерегулярное решение выражается через функцию Якоби второго рода $Q_n^{(a+1/2, b+1/2)}$:

$$(\sin \varphi)^{a+1} (\cos \varphi)^{b+1} Q_n^{(a+1/2, b+1/2)}(\cos 2\varphi), \quad n = (L - a - b)/2.$$

Замечание. Численный анализ классической цепочки рекуррентных уравнений Фока и цепочки (2.33) возможен лишь после определения всех содержащихся в них числовых коэффициентов. Предложенный выше подход лишен этого недостатка: в нем сначала вычисляются функции $\Phi_{iab,ka'b'}^{Lnm}$, подчиненные рекуррентной по индексам n и m цепочке однородных краевых задач, не содержащих никаких неопределенных коэффициентов, а затем без потери общности восстанавливаются все компоненты Φ_{iab}^{Lnm} любого L -решения как суммы (2.37) с произвольными коэффициентами X_{iab}^L .

2.3. Разложения регулярных решений уравнений Фаддеева. Согласно теории дифференциальных уравнений [2] общее регулярное решение дифференциального уравнения равно сумме всех его регулярных фундаментальных решений, умноженных на произвольные коэффициенты. В предыдущем разделе все регулярные фундаментальные L -решения $\{\Phi_{iab}^L\}$, $L = \ell + \mu(\sigma), \ell + \mu(\sigma) + 2, \dots$, системы (1.63) представлены рядами (2.31), уже содержащими некоторые коэффициенты X_{iab}^L . Поэтому без потери общности компоненты U_{iab}^ℓ общего регулярного решения $\{U_{iab}^\ell\}$ этой системы можно представить суммами соответствующих компонент Φ_{iab}^L всех L -решений:

$$U_{iab}^\ell(r, \varphi) = \sum_{L=a+b}^{\infty} \Phi_{iab}^L(r, \varphi) = \sum_{L=a+b}^{\infty} r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi). \quad (2.39)$$

Заменяя функции U_{iab}^ℓ такими суммами в (1.58), (1.59) и в (1.55), получим формальные разложения для приведенных гиперсферических компонент $U_{iL'ab}^\ell$:

$$U_{iL'ab}^\ell(r) = \sum_{L=a+b}^{\infty} r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Phi_{iL'ab}^{Lnm}, \quad (2.40)$$

$$\Phi_{iL'ab}^{Lnm} \equiv \langle W_{L'ab}(\varphi) | \Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi) \rangle,$$

для приведенных D^σ -компонент $U_{im'}^{\ell x}$:

$$U_{im'}^{\ell x}(r, \varphi, u) = \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Phi_{im'}^{Lnm}(\varphi, u), \quad (2.41)$$

$$\Phi_{im'}^{Lnm}(\varphi, u) \equiv \sin \theta \sum_{ab} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi);$$

и для фаддеевских компонент Ψ_i^ε :

$$\Psi_i^\varepsilon(r, \Omega) = \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} r^L \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Psi_i^{Lnm}(\Omega), \quad (2.42)$$

$$\Psi_i^{Lnm}(\Omega) \equiv \sum_{ab} [\Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi)/(\sin \varphi \cos \varphi)] \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}).$$

По доказанной выше теореме 2.1 строение этих рядов, в частности, индекс $M(n)$, определяется типом (1.32) разложений (1.31) парных потенциалов.

Предположив, что все ряды (2.31) и (2.39)–(2.42) асимптотические, а все коэффициенты X_{iab}^{L0} , $L = a + b + 2n$, $n = 0, 1, 2$, ненулевые, найдем явные асимптотики этих рядов, а затем из асимптотик выведем связи.

Асимптотики рядов (2.39) и (2.40) представим подсуммами их трех наиболее медленно убывающих при $r \rightarrow 0$ слагаемых, которые определяются по следующим правилам: в случае А эти слагаемые выражаются через три слагаемых рядов (2.31) с минимальным L , равным $a + b$; в случае В — через три слагаемых рядов (2.31) с $L = a + b$ и старшие члены (2.9) рядов (2.31) с $L = a + b + 2$; в случае С — через три слагаемых рядов (2.31) с $L = a + b$, два слагаемых рядов (2.31) с $L = a + b + 2$ и старшие слагаемые (2.9) рядов (2.31) с $L = a + b + 4$.

По формулам (2.11), (2.24), (2.32) и (2.34)–(2.36) выразим явно все нужные нам функции Φ_{iab}^{Lnm} , $L = a + b + 2n$, $n = 0, 1, 2$, через функции \tilde{W}_{Lab} . Следуя сформулированным выше правилам и используя эти выражения, выводим явные асимптотики рядов (2.39), т. е. бисферических компонент $U_{iab}^\ell(r, \varphi)$:

$$\begin{aligned} \text{А) } U_{iab}^\ell = r^{L+2} \left\{ [X_{iab}^L + (r \cos \varphi) V_{i,-1} B_{iab}^{L1}/(2b+2)] \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + \right. \\ \left. + r^2 s B_{iab}^{L2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + O(r^2) \right\}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{B)} \ U_{iab}^\ell = r^{L+2} \left\{ X_{iab}^L \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + r^2 \left[F_{iLab}^{L2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + X_{iab}^{L+2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) \right] + \right. \\ \left. + (r \cos \varphi)^3 \left[B_{iab}^{L1} V_{i1} / (6b + 12) \right] \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + O(r^4) \right\}, \quad (2.43) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{C)} \ U_{iab}^\ell = r^{L+2} \left\{ X_{iab}^L \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + r^2 \left[F_{iLab}^{L2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + X_{iab}^{L+2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) \right] + \right. \\ \left. + r^4 \left[F_{iLab}^{L4} W_{Lab}(\varphi) + \left(F_{i,L+2,ab}^{L4} + F_{i,L+2,ab}^{L+2} \right) \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + \right. \right. \\ \left. \left. + X_{iab}^{L+4} \tilde{W}_{L+4,ab}(\varphi) \right] + O(r^2) \right\}. \end{aligned}$$

Далее, подставив найденные функции Φ_{iab}^{Lnm} в формулы (2.40) и используя разложение (2.7) с $g = 1$ в случае А и с $g = 3$ в случае В, находим явные асимптотики всех гиперсферических компонент $U_{iL'ab}^\ell(r)$:

$$\begin{aligned} \text{A)} \ U_{iL'ab}^\ell = r^{L+2} \left[X_{iab}^L \delta_{LL'} + \frac{r V_{i,-1}}{2(b+1)} A_{L'ab}^{L1} B_{iab}^{L1} + \right. \\ \left. + r^2 s B_{iab}^{L2} \delta_{L',L+2} + O(r^2) \right], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{B)} \ U_{iL'ab}^\ell = r^{L+2} \left\{ \left[X_{iab}^L + r^2 F_{iLab}^{L2} \right] \delta_{LL'} + r^2 X_{iab}^{L+2} \delta_{L',L+2} + \right. \\ \left. + r^3 V_{i1} A_{L'ab}^{L3} B_{iab}^{L1} / (6b + 12) + O(r^4) \right\}, \quad (2.44) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{C)} \ U_{iL'ab}^\ell = r^{L+2} \left[X_{iab}^L + r^2 F_{iLab}^{L2} + r^4 F_{iLab}^{L4} \right] \delta_{LL'} + \\ + r^{L+4} \left[X_{iab}^{L+2} + r^2 \left(F_{i,L+2,ab}^{L4} + F_{i,L+2,ab}^{L+2} \right) \right] \delta_{L',L+2} + \\ + r^{L+6} X_{iab}^{L+4} \delta_{L',L+4} + O(r^{L+8}). \end{aligned}$$

Теперь найдем явные асимптотики рядов (2.41) и (2.42) в виде подсумм их трех наиболее медленно убывающих при $r \rightarrow 0$ слагаемых. В случае А ими являются три слагаемых этих рядов с минимально возможным $L = L_{\min}$; в случае В — слагаемые с $L = L_{\min}$, $n = 0, 2, 3$ и $L = L_{\min} + 2$, $n = 0$; в случае С — те же слагаемые, что и в случае В, и слагаемые с $L = L_{\min} + 4$, $n = 0$.

Заменив во всех упомянутых слагаемых функции Φ_{iab}^{Lnm} их найденными представлениями, получим явные асимптотики D^σ -компонент $U_{im'}^{\ell x}(r, \varphi, u)$:

$$\begin{aligned}
 \text{A) } U_{im'}^{\ell x} &= r^{L+2} \sin \theta \sum_{a+b=L} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \times \\
 &\times \left\{ \left[X_{iab}^L + \frac{rV_{i,-1}}{2(b+1)} B_{iab}^{L1} \cos \varphi \right] \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + r^2 s B_{iab}^{L2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + O(r^2) \right\}, \\
 \text{B) } U_{im'}^{\ell x} &= r^{L+2} \sin \theta \sum_{a+b=L} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \tilde{W}_{Lab}(\varphi) \times \\
 &\times [X_{iab}^L + r^2 F_{iLab}^{L2} + (r \cos \varphi)^3 B_{iab}^{L1} V_{i1}/(6b+12)] + \\
 &+ r^{L+4} \sin \theta \sum_{a+b=L}^{L+2} X_{iab}^{L+2} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + O(r^{L+6}), \quad (2.45)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{C) } U_{im'}^{\ell x} &= r^{L+2} \sin \theta \sum_{a+b=L} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \tilde{W}_{Lab}(\varphi) \times \\
 &\times [X_{iab}^L + r^2 F_{iLab}^{L2} + r^4 F_{iLab}^{L4}] + r^{L+4} \sin \theta \sum_{a+b=L}^{L+2} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) \times \\
 &\times [X_{iab}^{L+2} + r^2 (F_{i,L+2,ab}^{L4} + F_{i,L+2}^{L+2})] + \\
 &+ r^{L+6} \sin \theta \sum_{a+b=L}^{L+4} X_{iab}^{L+4} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \tilde{W}_{L+4,ab}(\varphi) + O(r^{L+8})
 \end{aligned}$$

и явные асимптотики фаддеевских компонент $\Psi_i^\varepsilon(r, \Omega)$:

$$\begin{aligned}
 \text{A) } \Psi_i^\varepsilon &= r^L \sum_{a+b=L} \{ [X_{iab}^L + (r \cos \varphi) V_{i,-1} B_{iab}^{L1}/(2b+2)] Y_{iab}^{\ell m}(\Omega) + \\
 &+ r^2 s B_{iab}^{L2} Y_{L+2,ab}(\Omega) + O(r^2) \}, \\
 \text{B) } \Psi_i^\varepsilon &= r^L \sum_{a+b=L} [X_{iab}^L + r^2 F_{iLab}^{L2} + (r \cos \varphi)^3 V_{i1} B_{iab}^{L1}/(6b+12)] Y_{iab}^{\ell m}(\Omega) + \\
 &+ r^{L+2} \sum_{a+b=L}^{L+2} X_{iab}^{L+2} Y_{L+2,ab}^{\ell m}(\Omega) + O(r^{L+4}), \quad (2.46)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\text{С) } \Psi_i^\varepsilon = & r^L \sum_{a+b=L} [X_{iab}^L + r^2 F_{iLab}^{L2} + r^4 F_{iLab}^{L4}] Y_{ab}^{\ell m}(\Omega) + \\
& + r^{L+4} \sum_{a+b=L}^{L+2} [X_{iab}^{L+2} + r^2 (F_{i,L+2,ab}^{L4} + F_{i,L+2}^{L+2})] Y_{L+2,ab}^{\ell m}(\Omega) + \\
& + r^{L+6} \sum_{a+b=L}^{L+4} X_{iab}^{L+4} Y_{L+4,ab}^{\ell m}(\Omega) + O(r^{L+8}).
\end{aligned}$$

Приступим к выводу связей при $r = 0$. Вывод реализуем в два этапа: сначала выразим неопределенные коэффициенты X_{iab}^L и их комбинации B_{iab}^{L1} и F_{iLab}^{L2} через частные производные асимптотик (2.43)–(2.45) по аргументу r при $r = 0$, а затем заменим в определениях (2.19) и (2.35) все коэффициенты X_{iab}^L , B_{iab}^{L1} и F_{iLab}^{L2} их полученными выражениями.

Из (2.43) в случае А следуют два представления коэффициентов X_{iab}^L и B_{iab}^{L1} через частные производные функции U_{iab}^ℓ при $r = 0$:

$$\begin{aligned}
X_{iab}^L &= [(L+2)! \tilde{W}_{Lab}(\varphi)]^{-1} \partial_r^{L+2} U_{iab}^\ell(r, \varphi), \\
B_{iab}^{L1} &= \left\{ (2b+2) / [(L+3)! V_{i,-1} \tilde{W}_{Lab}(\varphi)] \right\} \partial_r^{L+3} U_{iab}^\ell(r, \varphi).
\end{aligned}$$

Используя эти представления и положив $p = 1$, перепишем равенство (2.19) в виде связи между частными производными $Q_{jab}(\varphi) \equiv \partial_r^{L+2} U_{iab}^\ell|_{r=0}$ трех функций $U_{jab}^\ell(r, \varphi)$, $j = i, j \neq i$:

$$\begin{aligned}
\partial_r^p Q_{iab}(\varphi) = & M_b^{Lp} V_{i,p-2} (\cos \varphi)^p \left[Q_{iab}(\varphi) + \right. \\
& \left. + \tilde{W}_{Lab}(\varphi) \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} Q_{kab}(\varphi_k) / \tilde{W}_{La'b'}(\varphi_k) \right]. \quad (2.47)
\end{aligned}$$

Здесь и всюду далее

$$M_b^{Lp} \equiv \frac{(L+p+2)!}{p(2b+p+1)(L+2)!}.$$

Тем же способом доказываем, что в случае В имеются связи (2.47) с $p = 3$.

Случай С — исключительный. В этом случае слагаемое суммы (2.43) при любом $n > 0$ является произведением функции r^{2n} и угловой функции, которая в отличие от случаев А и В всегда содержит и неопределенные коэффициенты $X_{iab}^{L'}$ с $L' = L + 2n$, и коэффициенты $F_{iab}^{L'n}$, выраженные через коэффициенты $X_{iab}^{L'}$ с $L' < L + 2n$. Поэтому из любой конечной совокупности соотношений, полученных дифференцированием асимптотик функций

U_{iab}^ℓ в точке $r = 0$, нельзя исключить все неопределенные коэффициенты и получить связи для частных производных этих функций в этой точке.

Теперь из (2.44) выведем связи для функций $Q_{jLab}(r) \equiv \partial_r^{L+2} U_{jLab}^\ell(r)$.

В случаях А и В при любом L' и соответствующем $p = 1$ и $p = 3$ коэффициенты X_{iab}^L и B_{iab}^{L1} выражаются через производные $\partial_r^{L+2} U_{iLab}^\ell$ и $\partial_r^{L+2+p} U_{iL'ab}^\ell$ в точке $r = 0$. Заменяв X_{iab}^L и B_{iab}^{L1} в (2.19) такими выражениями, получим связи

$$\begin{aligned} \partial_r^p Q_{iL'ab} &= A_{Lab}^{Lp} M_b^{Lp} V_{i,p-2} \times \\ &\times \left(Q_{iLab} + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} Q_{kLa'b'} \right). \end{aligned} \quad (2.48)$$

В случаях В и С коэффициенты X_{iab}^L и F_{iLab}^{L2} пропорциональны производным $\partial_r^{L+2} U_{iLab}^\ell$ и $\partial_r^{L+4} U_{iLab}^\ell$ в точке $r = 0$. Используя такие соотношения и формулы (2.19) и (2.35), выводим связи

$$\begin{aligned} \partial_r^2 Q_{iLab} &= \left(1 + \frac{L}{4} \right) \times \\ &\times \left[(V_{i0} - E) Q_{iLab} + \sum_{k \neq i} V_{k0} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} Q_{kLa'b'} \right]. \end{aligned} \quad (2.49)$$

В случаях В и С коэффициенты F_{iab}^{L2} и X_{iab}^{L+2} пропорциональны производным $\partial_r^{L+4} U_{iLab}^\ell$ и $\partial_r^{L+4} U_{i,L+2,ab}^\ell$ при $r = 0$, и поэтому имеются простые связи:

$$\partial_r^{L+4} [U_{iLab}^\ell(r) - U_{i,L+2,ab}^\ell(r)] = 0, \quad r = 0. \quad (2.50)$$

Осталось вывести связи из равенств (2.45). Имеются два исключительных и рассмотренных ниже случая $\ell, \sigma = 0$ и $\ell, \sigma = 1$. Только при таких значениях ℓ и σ в случаях А и В суммы (2.45) содержат лишь один член, и поэтому для компонент $U_{im'}^{\ell x}$ имеются связи при $r = 0$. При всех иных ℓ и σ или же в случае С эти суммы содержат два и более слагаемых, причем все коэффициенты X_{iab}^L , B_{iab}^{L1} и (или) F_{iLab}^{L2} суммируются по a и b . Поэтому их нельзя представить как частные производные компонент $U_{im'}^{\ell x}$ по r в точке $r = 0$. Следовательно, связи между такими производными не существуют. Спроецировав эти асимптотики на функции $\Theta_{am'}$, получим асимптотики проекций $U_{im'a}^{\ell x} \equiv T_{ab}^{\ell m'} U_{iab}^\ell$. В этих асимптотиках неизвестные коэффициенты не суммируются, и поэтому для функций $Q_{jab} \equiv \partial_r^{L+2} U_{jm'a}^{\ell x} / T_{ab}^{\ell m'} |_{r=0}$ имеются связи (2.47).

Обсудим качественные следствия формул (2.43)–(2.46). Напомним, что в этих формулах $L = a + b$.

Сначала поясним угловую зависимость слагаемых сумм (2.43). Их первые слагаемые в любом случае А, В или С зависят от гиперугла φ так же, как функция

$$\tilde{W}_{Lab}(\varphi) = N_{Lab}(\sin \varphi)^{a+1}(\cos \varphi)^{b+1},$$

$$N_{Lab} = \left[\frac{(2L+4)\Gamma(L+2)}{\Gamma(a+3/2)\Gamma(b+3/2)} \right]^{1/2}.$$

Угловая зависимость вторых слагаемых сумм (2.43) в случае А описывается произведением $\cos \varphi \tilde{W}_{Lab}(\varphi)$, а в случаях В и С — линейной комбинацией коэффициентов X_{iab}^L и F_{iLab}^{L2} и двух функций: функции $\tilde{W}_{Lab}(\varphi)$ и функции

$$\tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) = N_{L+2,ab}(\sin \varphi)^{a+1}(\cos \varphi)^{b+1} (1/2) [a - b + (L+3) \cos 2\varphi],$$

$$N_{L+2,ab} = N_{Lab} (1/2) [(2a+3)(2b+3)(L+4)]^{1/2}.$$

Третьи слагаемые сумм (2.43) в случае А зависят от угла φ так же, как функция $\tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi)$, в случае В — как функция

$$(\cos \varphi)^3 \tilde{W}_{Lab}(\varphi) = N_{Lab}(\sin \varphi)^{a+1} (\cos \varphi)^{b+4},$$

а в случае С — как линейная комбинация коэффициентов F_{iLab}^{L4} , $(F_{i,L+2,ab}^{L2} + X_{iab}^{L+4})$ и двух функций: функции $\tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi)$ и функции

$$W_{L+4,ab}(\varphi) = N_{L+4,ab}(\sin \varphi)^{a+1}(\cos \varphi)^{b+1} \times$$

$$\times (1/8) [(L+4)(L+5)(\cos 2\varphi)^2 + 2(L+4) \cos 2\varphi + a - b].$$

Теперь опишем зависимость слагаемых сумм (2.44) от индекса L' . Если $L' = L$, то в любом случае А, В или С старшие (первые) слагаемые убывают одинаковым образом: $U_{iL'ab}^\ell = O(r^{L+2})$. В случае А при любом L' второе слагаемое убывает как r^{L+3} . В случаях В и С вторые слагаемые убывают как r^{L+4} , только если $L' = L, L+2$. В случае В второе слагаемое убывает как r^{L+5} при всех $L' \neq L, L+2$, а в случае С — как r^{L+6} , если $L' = L, L+2, L+4$.

Рассмотрим суммы (2.45) и (2.46). В них по определению $L = \ell + \mu(\sigma)$. Поэтому асимптотики при $r \rightarrow 0$ компонент $U_{im'}^\ell$ и Ψ_i^ε во всех случаях А, В и С зависят от полной четности σ : если четность нормальная, то $U_{im'}^{\ell x} = O(r^{\ell+2})$ и $\Psi_i^\varepsilon = O(r^\ell)$, если же четность аномальная, то $U_{im'}^{\ell x} = O(r^{\ell+3})$, а $\Psi_i^\varepsilon = O(r^{\ell+1})$.

Формулы (2.43)–(2.46) несложно переписать в переменных $x = r \cos \varphi$ и $y = r \sin \varphi$. Полученные соотношения, например, образы формул (2.43)

$$\begin{aligned} \text{А) } U_{iab}^\ell = N_{Lab} x^{b+1} y^{a+1} & \left\{ X_{iab}^L + \frac{x V_{i,-1}}{2b+2} B_{iab}^{L1} + \right. \\ & \left. + \frac{N_{L+2,ab}}{2N_{Lab}} B_{iab}^{L2} \ln(x^2 + y^2) \left[(a+1)x^2 - (b+1)y^2 \right] + O(r^2) \right\}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

$$\begin{aligned} \text{В) } U_{iab}^\ell = N_{Lab} x^{b+1} y^{a+1} & \left\{ X_{iab}^L + F_{iLab}^{L2} (x^2 + y^2) + \right. \\ & \left. + \frac{N_{L+2,ab}}{N_{Lab}} X_{iab}^{L+2} \left[(a+1)x^2 - (b+1)y^2 \right] + \frac{x^3 V_{i1}}{6(b+2)} B_{iab}^{L1} + O(r^4) \right\}, \end{aligned}$$

предлагается использовать для равномерного сращивания асимптотик фаддеевских компонент Ψ_i^ε вблизи точки парного удара ($x \rightarrow 0, y > 0$) с их асимптотиками в пределе линейной конфигурации трех частиц ($x > 0, y \rightarrow 0$). Решение этой проблемы предполагается дать в отдельной работе.

В (2.43)–(2.46) все коэффициенты B_{iab}^{L1} , B_{iab}^{L2} и F_{iLab}^{L2} — линейные функции (2.19), (2.28) и (2.35) неизвестных констант X_{iab}^L . При данных X_{iab}^L вычисление коэффициентов B_{iab}^{L1} сводится к вычислению коэффициентов Рейнала–Реваи, значения коэффициентов B_{iab}^{L2} нетрудно вычислить, используя известные компактные представления [65] ядер $h_{aba'b'}^\ell(\varphi, \varphi_k; \gamma_{ki})$, вычисление коэффициентов F_{iLab}^{L2} — несложная задача. При небольших значениях ℓ полного углового момента суммы (2.43)–(2.46) довольно просты. Для примера приведем сумму (2.45) в случае А при $\ell = 0$, а затем при $\ell = 1$.

Пусть $\ell = 0$, $\sigma = 1$, тогда $L, a, b, m' = 0$ и с точностью $O(r^3 s)$

$$\begin{aligned} U_{i0}^{0x} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} xy \sin \theta & \left[X_{i00}^0 + \frac{x}{2} V_{i,-1} B_{i00}^{01} + \right. \\ & \left. + 2B_{i00}^{02} \ln(x^2 + y^2) (x^2 - y^2) + \sqrt{\frac{\pi}{2}} G_{i00}^{02}(\varphi)(x^2 + y^2) \right], \end{aligned} \quad (2.52)$$

где B_{i00}^{01} и B_{i00}^{02} — коэффициенты (2.29), а $G_{i00}^{02}(\varphi)$ — функция (2.30) переменной $\varphi = \arctg(y/x)$. Так как B_{i00}^{01} — сумма коэффициентов X_{k00}^0 по индексу $k = 1, 2, 3$, то компоненты U_{i0}^{0x} , $i = 1, 2, 3$, подчиняются связям

$$\partial_r^2 \left[2 \partial_r U_{i0}^{0x}(r, \varphi, u) - 3 V_{i,-1} \cos \varphi \sum_{k=1}^3 U_{k0}^{0x}(r, \varphi_k, u_k) \frac{\sin 2\varphi \sin \theta}{\sin 2\varphi_k \sin \theta_k} \right] = 0.$$

Пусть теперь $\ell = 1$. Если $\sigma = -1$, то $\mu(\sigma) = 0$, поэтому $L = \ell + \mu(\sigma) = 1$; $\{a, b\} = \{1, 0\}, \{0, 1\}$, а $m' = 0, 1$ и с точностью до слагаемых $O(r^5)$

$$U_{i1}^{1x} = -\frac{4}{\sqrt{\pi}} x (y \sin \theta)^2 \left[X_{i10}^1 + \frac{x}{2} V_{i,-1} B_{i10}^{11} + B_{i10}^{12} \frac{s}{\sqrt{3}} (5x^2 - 3y^2) \right],$$

$$U_{i0}^{1x} = U_{i1}^{1x} \operatorname{ctg} \theta + \frac{4}{\sqrt{\pi}} x^2 y \sin \theta \times \quad (2.53)$$

$$\times \left[X_{i01}^1 + \frac{x}{4} V_{i,-1} B_{i01}^{11} + B_{i01}^{12} \frac{s}{\sqrt{3}} (3x^2 - 5y^2) \right],$$

где $s \equiv (1/2) \ln(x^2 + y^2)$, B_{iab}^{11} — следующие комбинации коэффициентов X_{iab}^1 :

$$B_{i10}^{11} = X_{i10}^1 - \sum_{k \neq i} (X_{k10}^1 \cos \gamma_{ki} - X_{k01}^1 \sin \gamma_{ki}),$$

$$B_{i01}^{11} = X_{i01}^1 - \sum_{k \neq i} (X_{k10}^1 \sin \gamma_{ki} + X_{k01}^1 \cos \gamma_{ki}),$$

а коэффициенты B_{iab}^{21} выражаются через коэффициенты B_{kab}^{11} и функции $\tilde{s} \equiv |\sin \gamma|$ и $c \equiv \cos \gamma$ кинематического угла $\gamma \equiv \gamma_{ki}$:

$$B_{iab}^{12} = \frac{\sqrt{3}}{60\pi} V_{i,-1} \sum_{k \neq i} V_{k,-1} \sum_{a'+b'=1} \frac{B_{ka'b'}^{11}}{b'+1} g_{a'b'}^{ab}(\gamma_{ki});$$

$$g_{10}^{10}(\gamma) = (\tilde{s}/c)^2 (1 + 4c^2)(\pi - 2|\gamma|) - 2\tilde{s}^3/c,$$

$$g_{10}^{10}(\gamma) = 4(\tilde{s}^3/c) (\pi - 2|\gamma|) \operatorname{sign} \gamma,$$

$$g_{10}^{01}(\gamma) = (\tilde{s}/c) [(4c^2 - 3)(\pi - 2|\gamma|) + 2\tilde{s}c] \operatorname{sign} \gamma,$$

$$g_{01}^{01}(\gamma) = 2(\tilde{s}/c)^2 (2c^2 - 1)(\pi - 2|\gamma|) + 4\tilde{s}^3/c.$$

Если же $\ell, \sigma = 1$, то $\mu(\sigma) = 1$, поэтому $L = 2$, $\{a, b\} = \{1, 1\}$, а $m' = 1$ и

$$U_{i1}^{1x} = (8/\sqrt{\pi}) x^2 y^2 \sin \theta \times$$

$$\times \left[X_{i11}^2 + \frac{x}{4} V_{i,-1} B_{i11}^{21} + \sqrt{6} B_{i11}^{22} s (x^2 - y^2) \right] + O(r^6). \quad (2.54)$$

Здесь B_{i11}^{21} — сумма трех коэффициентов X_{k11}^2 по индексу $k = 1, 2, 3$, а

$$B_{i11}^{22} = (\sqrt{6}/120) \pi^{-1} V_{i,-1} B_{i11}^{21} \sum_{k \neq i} V_{k,-1} \operatorname{tg}^2 \gamma_{ki} \times$$

$$\times [(\pi - 2|\gamma_{ki}|) \cos 2\gamma_{ki} / \cos \gamma_{ki} + 2 \sin |\gamma_{ki}|],$$

поэтому для компонент U_{i1}^{1x} , $i = 1, 2, 3$, имеются простые связи:

$$\partial_r^4 \left[4\partial_r U_{i1}^{1x}(r, \varphi, u) - 5V_{i,-1} \cos \varphi \sum_{k=1}^3 U_{i1}^{1x}(r, \varphi_k, u_k) \left(\frac{\sin 2\varphi}{\sin 2\varphi_k} \right)^2 \frac{\sin \theta}{\sin \theta_k} \right] = 0.$$

Приложения. Поясним вычислительные приложения формул (2.43)–(2.50). Используя эти формулы, можно двумя простыми способами улучшить поточечную сходимость вычисляемых решений одно-, дву- и трехмерных уравнений Фаддеева к их точным решениям вблизи точки $r = 0$. Опишем оба способа на примере дискретных (сеточных) аналогов уравнений (1.63) с условиями (1.64) и вполне определенными физическими граничными условиями [15] при $r \rightarrow \infty$.

Первый способ состоит в использовании связей (2.47) как граничных условий, дополнительных к условиям (1.64).

Второй способ реализуется по следующей схеме. Сначала задается двумерная сетка Δ узлов, лежащих на дуге \mathcal{L}_0 достаточно малого радиуса r_0 и вне кругового сектора S_0 , который она ограничивает:

$$\mathcal{L}_0 \equiv \{r : r = r_0, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi/2\}, \quad S_0 \equiv \{r : r < r_0, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi/2\}.$$

В секторе S_0 функции U_{iab}^ℓ приближаются соответствующими случаю А, В или С суммами (2.43) с неизвестными коэффициентами и отброшенными остаточными членами. Вне сектора S_0 функции U_{iab}^ℓ подчиняются дискретным аналогам уравнений (1.63), условий (1.64) и условий при $r \rightarrow \infty$, а в узлах сетки Δ , лежащих на дуге \mathcal{L}_0 , — условиям непрерывности («сшивки»). В итоге для совокупности неизвестных коэффициентов и значений искомым функций U_{iab}^ℓ в узлах коллокации получается линейная система уравнений с квадратной матрицей. Эта система решается численно.

Оба способа нетрудно реализовать для улучшения всех известных дискретных сплайн-аналогов двумерных фаддеевских краевых задач. Такие аналоги основаны на методах сплайн-функций [12], подробно представлены в [83] и легко обобщаются на случай трехмерных уравнений для D^σ -компонент $U_{im'}^{\ell x}$, подчиненных полученным в [29] физическим граничным условиям при $r \rightarrow \infty$.

Еще одно и немаловажное приложение выведенных связей — тестирование любых алгоритмов численного анализа одно-, дву- и трехмерных уравнений Фаддеева на сходимость вблизи точки $r = 0$. С этой целью в связи подставляются вычисленные решения вместо точных и по величинам получившихся невязок (погрешностей) оценивается достигнутая локальная точность.

2.4. Разложения регулярных решений уравнений Шредингера. Покажем, что доказанных разложений (2.39) всех компонент U_{iab}^ℓ общего регулярного решения $\{U_{iab}^\ell\}$ фаддеевских уравнений (1.63) вполне достаточно, чтобы

восстановить соответствующие разложения всех шредингеровских приведенных парциальных компонент U_{ab}^ℓ , U_{Lab}^ℓ и $U_{m'}^{\ell x}$ общего регулярного решения Ψ^ε уравнения Шредингера (1.43) и самого решения Ψ^ε .

Подставив в (1.60) фаддеевские компоненты U_{iab}^ℓ в виде рядов (2.39), получим разложения приведенных бисферических компонент U_{ab}^ℓ :

$$U_{ab}^\ell(r, \varphi) = \sum_{L=a+b}^{\infty} r^{L+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Phi_{ab}^{Lnm}(\varphi), \quad (2.55)$$

$$\Phi_{ab}^{Lnm}(\varphi) = \Phi_{iab}^{Lnm}(\varphi) + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle \varphi | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | \Phi_{ka'b'}^{Lnm}(\varphi_k) \rangle.$$

Заменяя функции U_{iab}^ℓ такими суммами в (1.47), (1.48) и в (1.60), выведем соответствующие разложения приведенных гиперсферических компонент $U_{L'ab}^\ell$:

$$U_{L'ab}^\ell(r) = \sum_{L'=a+b}^{\infty} r^{L'+2} \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Phi_{L'ab}^{Lnm}, \quad (2.56)$$

$$\Phi_{L'ab}^{Lnm} = \langle \tilde{W}_{L'ab}(\varphi) | \Phi_{ab}^{Lnm}(\varphi) \rangle,$$

разложения приведенных D^σ -компонент $U_{m'}^{\ell x}$:

$$U_{im'}^{\ell x}(r, \varphi, u) = \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} r^{L+2+n} \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Phi_{m'}^{Lnm}(\varphi, u), \quad (2.57)$$

$$\Phi_{m'}^{Lnm}(\varphi, u) = \sin \theta \sum_{ab} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \Phi_{ab}^{Lnm}(\varphi)$$

и разложение регулярного решения Ψ^ε уравнения Шредингера (1.43):

$$\Psi^\varepsilon(r, \Omega) = \sum_{L=\ell+\mu(\sigma)}^{\infty} r^L \sum_{n=0}^{\infty} r^n \sum_{m=0}^{M(n)} s^m \Psi^{Lnm}(\Omega), \quad (2.58)$$

$$\Psi^{Lnm}(\Omega) \equiv \sum_{ab} \left[\frac{\Phi_{ab}^{Lnm}(\varphi)}{\sin \varphi \cos \varphi} \right] \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}).$$

Найдем явные асимптотики полученных рядов (2.55)–(2.58) в виде под-сумм их трех наиболее медленно убывающих слагаемых и попутно покажем, что для этого достаточно знать лишь асимптотики (2.43) всех фаддеевских компонент U_{iab}^ℓ . Сначала рассмотрим случаи А и В.

Заменив в (1.60) компоненты U_{iab}^ℓ их асимптотиками (2.43), получаем искомые асимптотики рядов (2.55), т. е. асимптотики компонент $U_{ab}^\ell(r, \varphi)$:

$$\begin{aligned} \text{A) } U_{ab}^\ell &= r^{L+2} \left[X_{ab}^L \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + r f_{ab}^{L1}(\varphi) + r^2 s B_{ab}^{L2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + O(r^2) \right], \\ \text{B) } U_{ab}^\ell &= r^{L+2} \left\{ X_{ab}^L \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + r^2 \left[F_{Lab}^{L2} \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + X_{ab}^{L+2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) \right] + r^3 Q_{ab}^{L3}(\varphi) + O(r^4) \right\}. \end{aligned} \quad (2.59)$$

Здесь и далее функции $f_{ab}^{Lp}(\varphi)$, $p = 1, 3$, определены формулами

$$\begin{aligned} f_{ab}^{Lp}(\varphi) &\equiv \frac{V_{i,p-2} B_{iab}^{L1}}{p(2b+p+1)} (\cos \varphi)^p \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + \\ &+ \sum_{k \neq i} \sum_{a'+b'=L} \frac{V_{k,p-2} B_{ka'b'}^{L1}}{p(2b'+p+1)} \langle \varphi | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | (\cos \varphi_k)^p \tilde{W}_{La'b'}(\varphi_k) \rangle, \end{aligned} \quad (2.60)$$

а все коэффициенты $Z_{ab}^{L'} = X_{ab}^{L'}, F_{ab}^{L'2}, f_{L'ab}^{Lp}$ без нижнего индекса i , нумерующего фаддеевские компоненты Ψ_i^ξ , выражаются через соответствующие коэффициенты $Z_{iab}^{L'} = X_{iab}^{L'}, F_{iab}^{L'2}, f_{iL'ab}^{Lp}$ с индексом $i = 1, 2, 3$ по правилу

$$Z_{ab}^{L'} \equiv Z_{iab}^{L'} + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L'\ell} Z_{ka'b'}^{L'}. \quad (2.61)$$

Отметим, что согласно определению (2.19) и этому правилу $X_{ab}^L = B_{iab}^{L1}$.

Теперь в (1.47) подставим функции U_{ab}^ℓ в виде (2.59). В итоге получим асимптотики гиперсферических компонент $U_{L'ab}^\ell(r)$, т. е. асимптотики рядов (2.56):

$$\begin{aligned} \text{A) } U_{L'ab}^\ell &= r^{L+2} \left[X_{ab}^L \delta_{LL'} + r f_{L'ab}^{L1} + r^2 s B_{ab}^{L2} \delta_{L',L+2} + O(r^2) \right], \\ \text{B) } U_{L'ab}^\ell &= r^{L+2} \left\{ \left[X_{ab}^L + r^2 F_{Lab}^{L2} \right] \delta_{LL'} + \right. \\ &\quad \left. + r^2 X_{ab}^{L+2} \delta_{L',L+2} + r^3 f_{L'ab}^{L3} + O(r^4) \right\}, \end{aligned} \quad (2.62)$$

где символом $f_{L'ab}^{Lp}$ обозначена комбинация (2.61) трех коэффициентов

$$f_{iL'ab}^{Lp} \equiv \frac{V_{i,p-2} A_{L'ab}^{Lp} B_{iab}^{L1}}{p(2b+p+1)}, \quad i = 1, 2, 3.$$

Осталось найти явные асимптотики всех D^σ -компонент $U_{m'}^{\ell x}$ и решения Ψ^ε , т. е. асимптотики рядов (2.57) и (2.58). Для этого в суммах (1.59) и (1.60) оставим наиболее медленно убывающие при $r \rightarrow 0$ компоненты U_{ab}^ℓ с индексами a и b , подчиненными в случае А условию $a + b = L$, где $L = L_{\min}$, а в случае В — условию $a + b \leq L + 2$. Заменяя в (1.59) и (1.60) такие компоненты их представлениями (2.59), получим явные асимптотики D^σ -компонент $U_{m'}^{\ell x}(r, \varphi, u)$:

$$\begin{aligned}
 \text{А) } U_{m'}^{\ell x} &= r^{L+2} \sin \theta \sum_{a+b=L} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \times \\
 &\quad \times \left\{ X_{ab}^L W_{L,ab}(\varphi) + r f_{ab}^{L1}(\varphi) + r^2 s B_{ab}^{L2} \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + O(r^2) \right\}, \\
 \text{В) } U_{m'}^{\ell x} &= r^{L+2} \sin \theta \sum_{a+b=L} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \times \\
 &\quad \times \left\{ [X_{ab}^L + r^2 F_{Lab}^{L2}] \tilde{W}_{Lab}(\varphi) + r^3 f_{ab}^{L3}(\varphi) \right\} + \\
 &\quad + r^{L+4} \sin \theta \sum_{a+b=L}^{L+2} X_{ab}^{L+2} T_{ab}^{\ell m'} \Theta_{am'}(u) \tilde{W}_{L+2,ab}(\varphi) + O(r^{L+6})
 \end{aligned} \tag{2.63}$$

и явную асимптотику функции $\Psi^\varepsilon(r, \Omega)$

$$\begin{aligned}
 \text{А) } \Psi^\varepsilon &= r^L \sum_{a+b=L} [X_{ab}^L Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega) + 2 r \operatorname{cosec} 2\varphi f_{ab}^{L1}(\varphi) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) + \\
 &\quad + r^2 s B_{ab}^{L2} Y_{L+2,ab}(\Omega) + O(r^2)], \\
 \text{В) } \Psi^\varepsilon &= r^L \sum_{a+b=L} \left\{ [X_{ab}^L + r^2 F_{Lab}^{L2}] Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega) + \right. \\
 &\quad \left. + 2 r^3 \operatorname{cosec} 2\varphi f_{ab}^{L3}(\varphi) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) \right\} + \\
 &\quad + r^{L+2} \sum_{a+b=L}^{L+2} X_{ab}^{L+2} Y_{L+2,ab}^{\ell m}(\Omega) + O(r^{L+4}).
 \end{aligned} \tag{2.64}$$

Рассмотрим оставшийся случай С. Используя (1.29), (2.19), (2.61) и равенства $X_{ab}^L = B_{iab}^{L1}$, доказываем следующее правило: чтобы получить явные асимптотики функций U_{ab}^ℓ , U_{Lab}^ℓ , $U_{m'}^{\ell x}$ и Ψ^ε , достаточно в соответствующих соотношениях (2.43)–(2.46) для функций U_{iab}^ℓ , U_{iLab}^ℓ , $U_{im'}^{\ell x}$, Ψ_i^ε опустить индекс i .

Как следует из (2.39)–(2.45) и (2.55)–(2.63), фаддеевские и соответствующие им шредингеровские парциальные компоненты — функционально одинаковые ряды по переменным r , s и угловым функциям. Однако фаддеевские угловые функции устроены гораздо более просто, чем отвечающие им шредингеровские угловые функции. Именно по этой причине в качестве стартовых уравнений использовались уравнения Фаддеева (1.63) в бисферическом базисе, а не соответствующая им система уравнений Шредингера в том же базисе.

Приступим к выводу связей. Исследуем равенство (2.59) в случае А. Положим в нем $p = 1$ и $X_{ab}^L = B_{iab}^{L1}$. Найдем производную ∂_r^{L+3} получившегося соотношения при $r = 0$. В полученном равенстве, содержащем функцию (2.60), заменим коэффициенты B_{iab}^{L1} их выражениями через производные $\partial_r^{L+2} U_{iab}^\ell|_{r=0}$ и таким образом получим связи для функций $Q_{ab}(r, \varphi) \equiv \partial_r^{L+2} U_{ab}^\ell(r, \varphi)$:

$$\begin{aligned} \partial_r^p Q_{ab}(r, \varphi) = & V_{i,p-2} (\cos \varphi)^p \left[M_b^{Lp} Q_{ab}(r, \varphi) + \right. \\ & \left. + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} M_{b'}^{Lp} \langle \varphi | h_{aba'b'}^\ell(\gamma_{ki}) | (\cos \varphi_k)^p Q_{a'b'}(r, \varphi_k) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.65)$$

При $p = 3$ эти связи справедливы в случае В.

Вывод связей для функций $Q_{Lab}(r) \equiv \partial_r^{L+2} U_{Lab}^\ell(r)$ из соотношений (2.62) принципиально ничем не отличается от вывода связей (2.48)–(2.50). Поэтому приведем только окончательные выражения: в случаях А и В верны связи

$$\partial_r^p Q_{L'ab} = A_{Lab}^{Lp} M_b^{Lp} V_{i,p-2} Q_{Lab}, \quad \forall L', \quad (2.66)$$

где $p = 1$ в случае А и $p = 3$ в случае В, а в случаях В и С имеются связи

$$\begin{aligned} \partial_r^2 Q_{Lab} = & \left(1 + \frac{L}{4} \right) \left[(V_{i0} - E) Q_{Lab} + \right. \\ & \left. + \sum_{k \neq i} V_{k0} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} Q_{La'b'} \right]. \end{aligned} \quad (2.67)$$

Завершая описания связей, отметим, что вследствие соотношений (2.63) связям (2.65) подчиняются функции $Q_{ab}(\varphi) \equiv \partial_r^{L+2} U_{am'}^{\ell x} / T_{ab}^{\ell m'}|_{r=0}$, где $U_{am'}^{\ell x}$ — проекция D^σ -компоненты $U_{m'}^{\ell x}(r, \varphi, u)$ на функцию $\Theta_{am'}(u)$.

Пример. Приведем явные асимптотики функции $\Psi^\varepsilon(r, \Omega_i)$ с квантовыми числами $\ell = 0$ и $\sigma = 1$. Для этого в (2.64) положим $a, b, L = 0$.

В случае А получим

$$\Psi^\varepsilon = (2\pi^{3/2})^{-1} \left\{ X_{00}^0 \left[2 + xV_{i,-1} + \sum_{k \neq i} V_{k,-1} g(x, y; \gamma_{ki}) \right] + \right. \\ \left. + 2B_{00}^{20} (x^2 - y^2) \ln(x^2 + y^2) \right\} + O(r^2), \quad r \rightarrow 0. \quad (2.68)$$

где B_{00}^{20} — комбинация коэффициентов (2.29):

$$B_{00}^{20} = B_{i00}^{20} + \sum_{k \neq i} B_{k00}^{20} \cos 2\gamma_{ki},$$

а функция g выражается через функции $\tilde{s} \equiv |\sin \gamma|$ и $c \equiv \cos \gamma$:

$$g(x, y; \gamma) \equiv \begin{cases} cx + (\tilde{s}y)^2/(3cx), & y \leq x \operatorname{ctg} \gamma; \\ \tilde{s}y + (cx)^2/(3\tilde{s}y), & y \geq x \operatorname{ctg} \gamma. \end{cases}$$

Поэтому существуют два особых луча $\varphi = \gamma_{ki}$, $k \neq i$, при переходе через которые меняется функциональный вид асимптотики функции $\Psi^\varepsilon(r, \Omega_i)$.

Такая же особенность имеется и в случае В, когда

$$\Psi^\varepsilon = (12\pi^{3/2})^{-1} X_{00}^0 \left[12 + x^3 V_{i1} + \right. \\ \left. + \sum_{k \neq i} V_{k1} g(x, y; \gamma_{ki}) \right] + O(r^4), \quad r \rightarrow 0, \quad (2.69)$$

а функция $g(x, y; \gamma)$ выражается через те же функции \tilde{s} и c формулами

$$g(x, y; \gamma) = \begin{cases} c^3 x^3 + 2c\tilde{s}^2 xy^2 + (\tilde{s}y)^4/(5cx), & y \leq x \operatorname{ctg} \gamma; \\ \tilde{s}^3 y^3 + 2c^2 \tilde{s} x^2 y + (cx)^4/(5\tilde{s}y), & y \geq x \operatorname{ctg} \gamma. \end{cases}$$

2.5. Приложения и основные результаты. Представленные в настоящем разделе явные асимптотики (2.43)–(2.46), (2.51)–(2.54) и (2.59)–(2.64) регулярных решений одно-, дву- и трехмерных уравнений Фаддеева и Шредингера и связи (2.47)–(2.50) и (2.65), (2.67) предлагается включать в дискретные аналоги таких уравнений для ускорения поточечной сходимости вычисляемых решений к точным вблизи точки тройного удара.

Основные результаты настоящего раздела сформулируем в виде доказанной в нем теоремы существования, обобщающей разложение Фока для трехчастичных уравнений Шредингера и Фаддеева на случай парных взаимодействий более общего вида, чем кулоновские потенциалы.

Теорема 2.2. Пусть центральные парные взаимодействия — степенные ряды (1.31) одного из трех типов (1.32). Тогда при $r \rightarrow 0$ ряды (2.40)–(2.42) и (2.55)–(2.58) являются формальными решениями соответствующих одно-, дву-, трех- и шестимерных уравнений Фаддеева и Шредингера. В этих рядах $M(n) = [n/2], [n/6], 0$ в случае А, В и С соответственно. Стартовой и ключевой для построения всех вышеупомянутых решений является однозначно разрешимая рекуррентная цепочка неоднородных обыкновенных дифференциальных уравнений (2.33) второго порядка с тривиальными граничными условиями.

3. ОБОБЩЕНИЯ РАЗЛОЖЕНИЯ КАТО

В настоящем разделе сначала поясняются основные результаты классической работы [127] Като и их наиболее интересные следствия, обобщения и приложения. Затем последовательно исследуются шестимерные уравнения Шредингера (1.38), (1.39) и Фаддеева (1.52) для системы трех частиц с центральными парными взаимодействиями более общего вида (1.31), чем кулоновские. Регулярные общее и частные решения Ψ и Ψ^ε , $\{\Psi_1^\varepsilon, \Psi_2^\varepsilon, \Psi_3^\varepsilon\}$ таких уравнений представляются бесконечными рядами по целым степеням расстояния между двумя частицами и искомым функциям других трехчастичных координат. Построение таких функций в угловых базисах, образованных сферическими (1.5) и бисферическими (1.6) гармониками или симметризованными D -функциями Вигнера (1.9), сводится к решению простых алгебраических рекуррентных уравнений. Для проекций частных решений уравнений Шредингера (1.39) и Фаддеева (1.52) на угловые базисные функции выводятся граничные условия в точке парного удара.

Особенностью исследования, обеспечивающей его исключительную простоту и оптимальность, является выбранная последовательность построения разложений: сначала строятся разложения для решения уравнения Шредингера, а затем по таким разложениям восстанавливаются разложения соответствующего решения системы уравнений Фаддеева.

3.1. Условие Като и постановка задачи. В [127] Като исследовал свойства непрерывности и ограниченности собственных функций уравнения Шредингера для системы из нескольких частиц с парными взаимодействиями, подчиненными довольно общим ограничениям.

Для системы трех частиц с действительными центральными парными взаимодействиями $V_k(x_k)$, $k = 1, 2, 3$, такие ограничения условия можно сформулировать следующим образом. Пусть существуют разбиения $V_k = A_k + B_k$, $k = 1, 2, 3$, такие, что сумма всех слагаемых A_k — ограниченная в \mathcal{R}^6 функция, каждое слагаемое $B_k(x_k)$ обращается в тождественный нуль вне некоторого конечного сегмента $[0, d]$ и при некотором $g \geq 2$ каждая функция $|B_k|^g$

суммируема на этом сегменте с весом x_k^2 :

$$\forall k = 1, 2, 3, \quad \exists V_k = A_k(x_k) + B_k(x_k) : \left| \sum_{k=1}^3 A_k(x_k) \right| < \infty; \quad (3.1)$$

$$B_k \equiv 0, \quad x_k > d; \quad \int_0^d x_k^2 |B_k(x_k)|^g dx_k < \infty, \quad g \geq 2.$$

Кулоновские парные взаимодействия (1.30) подчиняются всем соотношениям (3.1) при условии $2 \leq g < 3$. Чтобы убедиться в этом, используем функцию Θ , выберем некоторое конечное $d > 0$ и положим

$$A_k = \left[(1 - \Theta(d - x_k)) \right] \left(\frac{q_k}{x_k} \right), \quad B_k(x_k) = \Theta(d - x_k) \left(\frac{q_k}{x_k} \right); \quad k = 1, 2, 3.$$

Таким же способом несложно показать, что все парные взаимодействия, представимые степенными рядами (1.31), подчиняются ограничениям (3.1) в любом из трех случаев (1.32). Като исследовал лишь случай А. Следствием доказанной им теоремы II является следующее утверждение.

Теорема 3.1. *В случае А любая регулярная собственная функция Ψ уравнения Шредингера (1.39) для системы трех частиц непрерывна в \mathcal{R}^6 и имеет ограниченные частные производные первого порядка всюду, за исключением сингулярных точек $x_k = 0$, кулоновских слагаемых q_k/x_k парных взаимодействий V_k , где $k = 1, 2, 3$.*

Теперь на простых примерах поясним условие Като, обсудим способы применения этого условия на практике и сформулируем основную задачу настоящего раздела.

Пример 1. Рассмотрим водородоподобный атом, т. е. двухчастичную систему, состоящую из ядра с зарядом z_3 и электрона. Пусть ядро находится в начальной точке O фиксированной в \mathcal{R}^3 декартовой системы координат S_3 и считается неподвижным кулоновским центром, а электрон имеет в этой системе радиус-вектор \mathbf{b}_1 с декартовыми координатами (c_1, c_2, c_3) и сферическими координатами (b_1, \hat{b}_1) . Тогда ненормированная волновая функция

$$\Psi(\mathbf{b}_1) = \exp(-z_3 b_1) Y_{00}(\hat{b}_1)$$

основного связанного состояния рассматриваемой системы похожа на «шатер». Этот шатер имеет «опору» в точке $O = (0, 0, 0)$, т. е. в точке парного удара ($b_1 = 0$) электрона с ядром, и ниспадает при удалении от этой точки в любом направлении двумерной плоскости, перпендикулярной опоре. Математически такая особенность строения функции $\Psi(\mathbf{b}_1)$ объясняется следующим

образом. В точке ($b_1 = 0$) функция $\Psi(\mathbf{b}_1)$ дифференцируема по всем ее аргументам, но при $c_i \neq 0$ ее частная производная по аргументу c_i

$$\partial_{c_i} \Psi(\mathbf{b}_1) = -z_3 \left(\frac{c_i}{b_1} \right) \Psi(\mathbf{b}_1), \quad i = 1, 2, 3, \quad (3.2)$$

имеет особенность: если $c_j, c_k = 0$, то такая производная скачком меняет знак при переходе аргумента c_i через его нулевое значение. Смена знака производных $\partial_{c_i} \Psi$, $i = 1, 2, 3$, является причиной, из-за которой поверхность, описываемая функцией Ψ , похожа на шатер. Колебание [1] (величина скачка) таких производных

$$\partial_{c_i} \Psi(\mathbf{b}_1)|_{c_i=0-} - \partial_{c_i} \Psi(\mathbf{b}_1)|_{c_i=0+} = -2z_3, \quad c_j, c_k = 0,$$

определяется знаком и величиной заряда z_3 ядра. Существование такого колебания волновой функции атома водорода ($z_3 = 1$) порождено сингулярностью кулоновского взаимодействия и впервые упомянуто в [127].

Пример 2. Обсудим известные особенности строения волновой функции Ψ системы N заряженных частиц $\{p_1, p_2, \dots, p_N\}$. Пусть m_i и z_i — масса и кулоновский заряд частицы p_i , а μ_{ij} и \mathbf{a}_{ij} — приведенная масса и разность радиусов-векторов \mathbf{a}_i и \mathbf{a}_j частиц p_i и p_j в системе координат S_3 . Считаем, что взаимодействие V_{ij} в любой паре $\{p_i, p_j\}$ частиц кулоновское: $V_{ij} = z_i z_j / a_{ij}$. Для краткости записи введем вектор $\mathbf{a} \equiv \{\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_N\}$, а символом $\langle \xi \rangle$ будем обозначать результат усреднения исследуемой функции ξ по заранее определенной двумерной сфере в пределе ее нулевого радиуса. Точкой парного удара частиц p_i и p_j называется конфигурация N частиц, в которой $a_{ij} = 0$, но $a_{ik} > 0$ и $a_{jk} > 0$ для всех $k \neq i, j$.

Как впервые показал Като в [127], волновая функция Ψ рассматриваемой системы N частиц имеет форму шатра близи точки парного удара частиц p_i и p_j и в этой точке подчиняется условию

$$\partial_{a_{ij}} \langle \Psi(\mathbf{a}) \rangle = \mu_{ij} z_i z_j \Psi(\mathbf{a}), \quad a_{ij} = 0, \quad (3.3)$$

если усреднение выполнено по сфере с центром в точке $a_{ij} = 0$, а в противном случае, когда точка a_{ij} не принадлежит сфере, — условию

$$\partial_{a_{ij}} \langle \Psi(\mathbf{a}) \rangle = 0, \quad a_{ij} \neq 0. \quad (3.4)$$

После работы [127] условие (3.3) стали называть условием Като, касповым условием или условием «заострения».

Пример 3. Пусть рассмотренная в предыдущем примере система является N -электронной молекулой. Пусть одно из ядер той молекулы имеет заряд Z и помещено в начало O системы координат S_3 , а электронная подсистема

описывается волновой функцией Ψ и электронной плотностью [23]

$$\rho(\mathbf{a}_1) \equiv N \int |\Psi(\mathbf{a})|^2 d\mathbf{a}_2 d\mathbf{a}_3 \cdots d\mathbf{a}_N.$$

Из (3.3) и (3.4) следует, что $\partial_{a_1} \ln \langle \rho \rangle = -m_1 Z$, если точка $a_1 = 0$ является центром двумерной сферы с координатами \hat{a}_1 , а в противном случае $\partial_{a_1} \ln \langle \rho \rangle = 0$. Эти соотношения широко применяются в квантовой химии [23, 24], рентгенографии и электронографии. В квантовой химии анализ функции $\partial_{a_1} \ln \langle \rho \rangle$ при разных значениях ее аргумента помогает теоретически установить, где находятся ядра исследуемой молекулы и какие они имеют заряды. Рентгенография и электронография позволяют экспериментально определить фурье-образ распределения электронной плотности ρ , что делает возможным определить места наиболее вероятного расположения ядер в молекуле и таким образом распознать геометрическую конфигурацию ее ядерной подсистемы.

Пример 4. Вернемся к анализу системы трех частиц и из известных разложений [127–130] решения Ψ^ε , $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$, в окрестности \mathcal{F} точки парного удара выведем аналоги условия Като — связи типа (1.66).

Пусть система $\{p_1, p_2, p_3\}$ состоит из двух электронов p_1, p_2 и ядра p_3 , который считается бесконечно тяжелой частицей ($m_3 = \infty$), помещенной в начало O системы координат S_3 . Тогда из работы [127] Като следует, что S -волновая ($\ell = 0$) функция $\Psi^\varepsilon(a_1, a_2, a_{12})$ такой системы соответствует нелокальному граничному условию

$$\partial_c \langle \Psi^\varepsilon(a_1, a_2, a_{12}) \rangle = \lambda \Psi^\varepsilon(a_1, a_2, a_{12}), \quad c = 0, \quad (3.5)$$

где усреднение выполнено по двумерной сфере с центром в точке $c = 0$, т. е. по всем сферическим углам \hat{c} вектора \mathbf{c} , а $\lambda = m_1 z_3$ при $\mathbf{c} = \mathbf{a}_i$, $i = 1, 2$ и $\lambda = \mu_{12} = m_1/2$ при $\mathbf{c} = \mathbf{a}_{12}$.

Позже в [128] для той же волновой функции была получена асимптотика

$$\begin{aligned} \Psi^\varepsilon(a_1, a_2, a_{12}) = & \left[1 + m_1 z_3 a_1 \right] \Psi^\varepsilon(0, a_2, a_{12}) + \\ & + (\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{A}) + O(a_1^2), \quad a_1 \rightarrow 0, \quad (3.6) \end{aligned}$$

где \mathbf{A} — неопределенный вектор из \mathcal{R}^3 . Проекция $\Psi_{00}^\varepsilon \equiv \langle Y_{00}(\hat{a}_1) | \Psi^\varepsilon \rangle$ на сферическую функцию $Y_{00}(\hat{a}_1)$ не содержит \mathbf{A} и удовлетворяет связи типа (1.66):

$$(\partial_{a_1} - m_1 z_3) \Psi_{00}^\varepsilon(a_1, a_2, a_{12}) = 0, \quad a_1 = 0, \quad a_2, a_{12} > 0.$$

Авторы работы [129] записали N -частичное уравнение Шредингера с кулоновскими взаимодействиями в асимптотическом виде

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

что позволило им определить асимптотику общего решения Ψ , но лишь с точностью порядка $O(R^2)$. В случае $N = 3$ такая асимптотика имеет вид

$$\Psi = f_{00}^0 Y_{00}(\hat{R}) [1 + \mu_{12} z_1 z_2 R] + R \sum_{\beta=-1}^1 f_{1\beta}^1 Y_{1\beta}(\hat{R}) + O(R^2), \quad R \rightarrow 0. \quad (3.7)$$

Если ее продифференцировать по R и результат спроектировать на функцию $Y_{00}(\hat{R})$, то для проекции $\Psi_{00} \equiv \langle Y_{00}(\hat{R}) | \Psi \rangle$ получится связь, не содержащая неопределенных и не зависящих от R множителей f_{00}^0 и $f_{1\beta}^1$:

$$(\partial_R - \mu_{12} z_1 z_2) \Psi_{00}(\mathbf{a}) = 0, \quad R = 0.$$

Опишем обозначения \mathbf{R} , ρ и S_3^R , использованные в [130, 131]. В случае $x = x_3$, $i = 3$ наша система координат S_3^x совпадает с системой S^R , орт \mathbf{e}_3^R которой коллинеарен вектору $\mathbf{R} \equiv \mathbf{a}_{12} \uparrow \uparrow \mathbf{x}_3$, соединяющему частицы p_1 и p_2 , а орт \mathbf{e}_1^R расположен в плоскости \mathcal{P} трех частиц и направлен к частице p_3 , а вектор $\rho \uparrow \uparrow \mathbf{y}_3$ соединяет третью частицу p_3 с центром масс пары $\{p_1, p_2\}$.

В работе [130] для D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon R}$ трехчастичной волновой функции

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{R}, \rho) = \sum_{m'=0}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^R) \Psi_{m'}^{\varepsilon R}(R, \rho, \theta), \quad \cos \theta = \left(\frac{\mathbf{R} \cdot \rho}{R\rho} \right), \quad \sigma = (-1)^\ell,$$

в случае кулоновских взаимодействий (1.30) были доказаны асимптотики

$$\begin{aligned} \Psi_{m'}^{\varepsilon R}(R, \rho, \theta) &= f_{\ell m'}^0(\rho) Y_{\ell m'}(\theta, 0) \left[1 + \mu_{12} z_1 z_2 R \right] + \\ &+ R \sum_{a=|\ell \pm 1|} f_{am'}^1(\rho) Y_{am'}(\theta, 0) + O(R^2), \quad R \rightarrow 0, \quad \rho > 0. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Дифференцируя их по R и проектируя полученные равенства на функции $\Theta_{\ell m'}(\theta)$, исключаем все неизвестные функции $f_{\ell m'}^0$, $f_{am'}^1$ и приходим к связям

$$(\partial_R - \mu_{12} z_1 z_2) \Psi_{\ell m'}^{\varepsilon R}(R, \rho) = 0, \quad \Psi_{\ell m'}^{\varepsilon R}(R, \rho) \equiv \langle \Theta_{\ell m'}(\theta) | \Psi_{m'}^{\varepsilon R} \rangle, \quad R = 0, \quad \rho > 0.$$

В [131] подчеркивалось, что учет таких связей в точке парного удара заметно улучшает сходимость метода Рэлея–Ритца.

Пример 5. В экспериментальных методах электронной импульсной спектроскопии [132] в конечном состоянии исследуемой реакции измеряются на совпадение как минимум два быстрых электрона, что позволяет выполнить кинематически полные исследования сложных атомных соударений. Пример такого соударения — двойная ионизация атома гелия: $e + {}^3\text{He} \rightarrow 3e + {}^3\text{He}$. Экспериментальные исследования этой реакции принято называть $(e, 3e)$ - или $(e, (3-1))e$ -экспериментами, если на совпадение измеряются три электрона или же только налетающий и один из испущенных электронов.

В первом $(e, 3e)$ -эксперименте [133] измерялось дифференциальное сечение σ_{3e} в следующей кинематике: три электрона регистрировались в одной плоскости, падающий и рассеянный электрон имели энергии $E_0 = 5599$ и $E_s = 5500$ эВ, намного превышающие энергии $E_a = 10$ и $E_b = 10$ эВ электронов, выбитых из атома ${}^3\text{He}$, азимутальный угол рассеянного электрона был небольшим: $\theta_s = 0,45^\circ$.

Недавно в $(e, (3-1))e$ -эксперименте [134] было измерено дифференциальное сечение $d\sigma_{(3-1)e}$. Для этого детектировались рассеянный и один из выбитых электронов, имевших одинаковые азимутальные углы $\theta_s, \theta_a = 45^\circ$ и энергии $E_s, E_a = 1000$ эВ, намного большие, чем энергия $E_b = 10$ эВ другого электрона, выбитого из атома ${}^3\text{He}$.

В результате первого теоретического исследования [135] было показано, что величина и угловая зависимость сечения $d\sigma_{3e}$ чувствительны и к выбору приближения $\tilde{\Psi}$ волновой функции $\Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon, 0}$ атома ${}^3\text{He}$, и к выбору модельной функции $\tilde{\Psi}_{3e}$, качественно описывающей конечное состояние $3e + {}^3\text{He}$.

Современные методы вычисления приближения $\tilde{\Psi}$ и различные теоретические оценки сечений $d\sigma_{3e}$ и $d\sigma_{(3-1)e}$ уже обсуждались в недавнем обзоре [136]. Поэтому ниже перечислены только главные выводы работ [137–142] о качестве некоторых приближений $\tilde{\Psi}$ и роли условия Като в теоретическом описании сечений $d\sigma_{3e}$ и $d\sigma_{(3-1)e}$.

До сих пор эти сечения удастся оценить лишь в первом борновском приближении. Уже в этом приближении матричный элемент реакций $(e, 3e)$ и $(e, (3-1))e$ является трудновычисляемым многократным интегралом I , в котором состояние $e + {}^3\text{He}$ системы представляется произведением плоской волны $\exp[i(\mathbf{k}_0 \cdot \mathbf{b}_0)]$, описывающей движение электрона, налетающего с импульсом \mathbf{k}_0 на атом гелия, и приближения $\tilde{\Psi}$ волновой функции этого атома. Вычисление интеграла I заметно ускоряется, если функция $\tilde{\Psi}$ имеет простой вид и задана явно при всех значениях ее аргументов.

Таким условиям удовлетворяют и давно известное приближение [137]

$$\tilde{\Psi}_P = 1,535 \exp[-z_3(b_1 + b_2)] F_0\left(kb_{12}, \frac{1}{2k}\right), \quad (3.9)$$

детально обсуждавшееся в [138, 139], и недавно предложенные функции [140]

$$\begin{aligned}\tilde{\Psi}_0 &= 1,343 \exp[-z_3(b_1 + b_2)] \exp(b_{12}/2), \\ \tilde{\Psi}_1 &= 1,429 \exp[-z_3(b_1 + b_2)] \exp(b_{12}/4)(1 + b_{12}/4).\end{aligned}\quad (3.10)$$

В этих формулах $z_3 = 2$ — заряд ядра гелия, F_0 — регулярная функция Кулона [5], описывающая рассеяние двух электронов с относительным импульсом k . Его значение $k = 0,41$ а.е. найдено из условия минимума функционала Рэля–Ритца (1.65), определяющего верхнюю вариационную оценку \tilde{E} энергии основного 1S_0 -состояния атома гелия.

Такие оценки для обсуждаемых функций $\tilde{\Psi}_P$, $\tilde{\Psi}_0$ и $\tilde{\Psi}_1$ соответственно равны $-2,8788$, $-2,8561$ и $-2,8721$ а.е. и заметно отличаются от лучших из известных на сегодняшний день оценок [117, 118], согласно которым с точностью до семи знаков $\tilde{E} = -2,903724$ а.е.

В координатах (b_1, b_2, b_{12}) условие Като для точной волновой функции $\Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon,0}$ основного состояния атома гелия в точках соударения электрона с ядром записывается в виде связей

$$(\partial_{b_i} - z_3) \Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon,0}(b_1, b_2, b_{12}) = 0, \quad i \neq j = 1, 2, \quad b_i = 0, \quad b_j, b_{12} > 0, \quad (3.11)$$

а в точке соударения двух электронов задается связью

$$(2\partial_{b_{12}} - 1) \Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon,0}(b_1, b_2, b_{12}) = 0, \quad b_{12} = 0; \quad b_1, b_2 > 0. \quad (3.12)$$

Функция (3.9) подчиняется связям (3.11), но не подчиняется связи (3.12). Обе функции (3.10) удовлетворяют всем условиям (3.11) и (3.12).

В работе [141] впервые вычислено довольно простое вариационное приближение $\tilde{\Psi}_C$, удовлетворяющее усредненным условиям Като (3.11), (3.12), и в случае шестидесяти вариационных параметров минимизирующее функционал Рэля–Ритца (1.65) с семизначной точностью: $\tilde{E} = -2,903724\dots$ а.е.

Как отмечалось и в обзоре [136], и в докладе [142], удовлетворительное согласие измеренных в экспериментах [133, 134] сечений σ_{3e} и $\sigma_{3(e-1)}$ с их многочисленными теоретическими оценками не достигается даже в тех случаях [138–141], когда используются приближения $\tilde{\Psi}_P$, $\tilde{\Psi}_0$, $\tilde{\Psi}_1$ и $\tilde{\Psi}_C$, воспроизводящие связи (3.11) и (3.12) для точной волновой функции $\Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon,0}$.

Возможное решение этой проблемы — включение в вычислительные схемы более подробной, чем условия Като, информации о строении функции $\Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon,0}$ и функции конечного состояния $\tilde{\Psi}_{3e}$ трех электронов и ядра гелия во всех точках парных соударений. Такую информацию дают связи для частных производных функций $\Psi_{\text{phys}}^{\varepsilon,0}$ и $\tilde{\Psi}_{3e}$ более высоких, чем в условии Като, порядков. Уже поэтому вывод таких связей в точках парных соударений представляется интересным и актуальным.

Постановка задачи. Разложениями Като далее называются представления регулярных решений Ψ , Ψ^ε уравнения Шредингера (1.39) или же представления проекций таких решений на выбранный угловой базис в виде подсуммы двух первых слагаемых их, вообще говоря, бесконечных разложений в малой окрестности \mathcal{F} точки парного удара. Пример такого разложения — вытекающее из (3.7) представление

$$\Psi_{00}(\mathbf{a}) = (1 + \mu_{12} z_1 z_2 R) \Psi_{00}(\mathbf{a})|_{R=0} + O(R^2), \quad R \rightarrow 0.$$

Заметим, что из (3.6)–(3.8) нельзя получить никаких других связей типа (1.66), потому что явный вид слагаемых, убывающих как $O(R^2)$, неизвестен. Для вывода граничных условий, связывающих производные решений Ψ или Ψ^ε более высокого порядка, необходимо знать в области \mathcal{F} их полные асимптотические разложения (бесконечные ряды). Вывод и анализ полных разложений в случае центральных взаимодействий более общего вида (1.31), чем кулоновские взаимодействия, впервые дан в [79] для уравнения Шредингера (1.39), а для соответствующих ему уравнений Фаддеева (1.52) — в [80]. Этот анализ является обобщением разложений Като и составляет основное содержание последующих пунктов настоящего раздела. В них подробно исследуется наиболее общий из трех случаев (1.32), а именно случай А, используется представление $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | \equiv \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$ и полагается

$$x \equiv x_i \rightarrow 0, \quad y \equiv y_i > 0, \quad u \equiv \cos \theta = \frac{\mathbf{x} \cdot \mathbf{y}}{xy}, \quad k \neq i, \quad q \equiv q_i.$$

Особенности всех доказанных соотношений в случаях В и С оговариваются отдельно в виде замечаний.

3.2. Разложения парных и полного взаимодействий. Вследствие соотношений (1.3) векторы x_k и y_k можно представить как функции аргументов $x \equiv x_i$, $y \equiv y_i$ и $u \equiv u_i$ в следующем виде:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | x_k \rangle = x_k(x, y, u) &= \frac{|s_{ki}|y}{g(v_x)}, & \langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | y_k \rangle = y_k(x, y, u) &= \frac{c_{ki}y}{g(v_y)}, \\ g(v) &\equiv (1 - 2uv + v^2)^{-1/2}, & v_x &\equiv -\frac{c_{ki}x}{s_{ki}y}, & v_y &\equiv \frac{s_{ki}x}{c_{ki}y}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Следовательно, функция $1/x_k(x, y, u)$ пропорциональна производящей функции $g(v_x)$ для полиномов Лежандра $P_n(u)$ (см. [4]), поэтому

$$\frac{1}{x_k} = \frac{1}{|s_{ki}|y} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{c_{ki}x}{s_{ki}y} \right)^n P_n(u), \quad k \neq i. \quad (3.14)$$

Из (3.13) и (3.14) следует формула дифференцирования

$$\begin{aligned} \partial_x^n x_k|_{x=0} = c_{ki} \frac{s_{ki}}{|s_{ki}|} \frac{n!}{2n-1} \left(-\frac{c_{ki}}{s_{ki}y} \right)^{n-1} \times \\ \times [P_n(u) - P_{n-2}(u)], \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (3.15)$$

Аналогичным образом доказывается формула дифференцирования

$$\begin{aligned} \partial_x^n y_k|_{x=0} = s_{ki} \frac{n!}{2n-1} \left(\frac{s_{ki}}{c_{ki}y} \right)^{n-1} \times \\ \times [P_n(u) - P_{n-2}(u)], \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (3.16)$$

Благодаря формуле (3.15) каждый член T_p ряда Тейлора функции $\bar{V}_k(x_k(x, y, u))$ с центром в точке $x = 0$ — сумма по полиномам $P_s(u)$ с $s \leq p$:

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

Если P_x и P_u — операторы инверсии $x \rightarrow -x$ и $u \rightarrow -u$, то

$$\begin{aligned} P_u P_s(u) = (-1)^s P_s(u), \quad P_x x^p = (-1)^p x^p, \\ P_x P_u x_k = x_k, \quad (1 - P_x P_u) \bar{V}_k(x_k) = 0. \end{aligned}$$

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

$$\bar{V}_k(x_k(x, y, u)) = \sum_{p=0}^{\infty} x^p \sum_{s=0}^p \bar{V}_k^{ps}(|s_{ki}|y) P_s(u), \quad (-1)^{p+s} = 1. \quad (3.17)$$

Вследствие представления (1.31) для \bar{V}_i и представлений (3.14), (3.17) полное взаимодействие $V = V_1 + V_2 + V_3$ раскладывается в двойной ряд:

$$\begin{aligned} V(x, y, u) = q/x + V^{00}(y) + \sum_{p=1}^{\infty} x^p \sum_{s=0}^p V^{ps}(y) P_s(u), \quad q \equiv q_i, \\ V^{ps}(y) \equiv V_{ip} \delta_{s0} + \delta_{ps} \sum_{k \neq i} \frac{q_k}{|s_{ki}|y} \left(-\frac{c_{ki}}{s_{ki}y} \right)^p + \sum_{k \neq i} \bar{V}_k^{ps}(y), \end{aligned} \quad (3.18)$$

где отличны от нуля только константы $V^{p0} = V_{ip}$ с нечетным p и функции $V^{ps}(y)$ с четной суммой $p + s$. При $p \leq 2$ их можно найти по формулам

$$\begin{aligned} V^{00}(y) &= V_{i0} + \sum_{k \neq i} \left[\frac{q_k}{(|s_{ki}|y)} + \bar{V}_k(|s_{ki}|y) \right], \quad V^{10}(y) = V_{i1}, \\ V^{11}(y) &= \sum_{k \neq i} c_{ki} \left(\frac{s_{ki}}{|s_{ki}|} \right) \left[\bar{V}'_k(|s_{ki}|y) - \frac{q_k}{(s_{ki}y)^2} \right], \\ V^{20}(y) &= V_{i2} + (1/6) \sum_{k \neq i} c_{ki}^2 \left[\bar{V}''_k(|s_{ki}|y) + \frac{2\bar{V}'_k(|s_{ki}|y)}{(|s_{ki}|y)} \right], \\ V^{22}(y) &= \sum_{k \neq i} \left\{ \frac{q_k c_{ki}^2}{(|s_{ki}|y)^3} + (1/3) c_{ki}^2 \left[\bar{V}''_k(|s_{ki}|y) - \frac{\bar{V}'_k(|s_{ki}|y)}{(|s_{ki}|y)} \right] \right\}, \end{aligned}$$

где \bar{V}'_k и \bar{V}''_k — первая и вторая производные функции $\bar{V}_k(x_k)$ по аргументу x_k в точке $x_k = |s_{ki}|y$, т. е. при $x = 0$. Из всех трех случаев (1.32) случай С — особый. Так как в этом случае $q, q_k = 0$ и $V^{p0} = 0$, $p = 1, 3, \dots$, то ряд (3.18) инвариантен относительно замены $x \rightarrow x, u \rightarrow -u$:

$$\begin{aligned} V(x, y, u) &= V(-x, y, -u) = \\ &= \sum_{p=1}^{\infty} x^p \sum_{s=0}^p (1 - \delta_{p1} \delta_{s0}) V^{ps}(y), \quad (-1)^{p+s} = 1. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Для проецирования ряда (3.18) потребуются матричные элементы полинома P_s в базисах (1.5) и (1.6). Используя известные формулы [16]

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

и представление (1.5), находим искомые выражения

$$\langle Y_{b\beta}(\hat{x}) | P_s(u) | Y_{b'\beta'}(\hat{x}) \rangle = (-1)^s \left[\frac{4\pi}{2s+1} \right]^{1/2} C_{s0b0}^{b'0} C_{s\alpha b'\beta'}^{b\beta} Y_{s\alpha}^*(\hat{y}), \quad (3.20)$$

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) | P_s(u) | \mathcal{Y}_{a'b'}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) \rangle &= (-1)^{a+b-\ell+s} C_{s0a'0}^{a0} C_{s0b'0}^{b0} \times \\ &\times [(2a'+1)(2b'+1)]^{1/2} \left\{ \begin{array}{ccc} a & a' & s \\ b' & b & \ell \end{array} \right\}, \end{aligned} \quad (3.21)$$

$$\langle \Theta_{b\beta}(u) | P_s(u) | \Theta_{b'\beta'}(u) \rangle = \delta_{\beta\beta'} (-1)^s C_{s0b0}^{b'0} C_{s0b'\beta}^{b\beta} \quad (3.22)$$

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

3.3. Разложения решений уравнения Шредингера. Построим разложения общего, а затем частного решений Ψ и Ψ^ε шестимерного уравнения Шредингера (1.39) в наиболее общем случае А.

Разложение общего регулярного решения. Докажем, что общее регулярное решение Ψ уравнения Шредингера (1.39) с взаимодействиями (1.31) — формальный ряд по целым степеням x :

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \Psi^n(\hat{x}, \mathbf{y}), \quad (3.23)$$

а каждая компонента Ψ^n этого ряда ортогональна любой функции $Y_{b\beta}(\hat{x})$ с $b > n$, т. е. раскладывается в конечный сферический ряд с, вообще говоря, ненулевыми сферическими компонентами $\Psi_{b\beta}^n$, $b \leq n$:

$$\Psi^n(\hat{x}, \mathbf{y}) = \sum_{b=0}^n \sum_{\beta=-b}^b \Psi_{b\beta}^n(\mathbf{y}) Y_{b\beta}(\hat{x}), \quad \Psi_{b\beta}^n(\mathbf{y}) \equiv \langle Y_{b\beta}(\hat{x}) | \Psi(\hat{x}, \mathbf{y}) \rangle. \quad (3.24)$$

Вследствие разложения (3.18) для оператора H верно представление

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\partial_x^2 - \frac{2}{x} \partial_x + \frac{\mathbf{1}_x^2}{x^2} + \frac{q}{x} + \sum_{p=1}^{\infty} x^p \sum_{s=0}^p V^{ps}(y) P_s(u) + h(\mathbf{y}) + E, \quad (3.25)$$

$$h(\mathbf{y}) \equiv -\partial_y^2 - (2/y) \partial_y + \mathbf{1}_y^2 y^{-2} + V^{00}(y) - E, \quad (3.26)$$

а уравнение Шредингера (1.39) подстановкой анзаца (3.23) сводится к рекуррентной по индексу n цепочке уравнений

$$\mathbf{1}_x^2 \Psi^0(\hat{x}, \mathbf{y}) = 0, \quad (3.27)$$

$$(\mathbf{1}_x^2 - 2) \Psi^1(\hat{x}, \mathbf{y}) = -q \Psi^0(\hat{x}, \mathbf{y}), \quad (3.28)$$

$$\begin{aligned} [\mathbf{1}_x^2 - (n+2)(n+3)] \Psi^{n+2}(\hat{x}, \mathbf{y}) = & -q \Psi^{n+1}(\hat{x}, \mathbf{y}) - h(\mathbf{y}) \Psi^n(\hat{x}, \mathbf{y}) - \\ & - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p V^{ps}(y) P_s(u) \Psi^{n-p}(\hat{x}, \mathbf{y}), \quad n = 0, 1, \dots \end{aligned} \quad (3.29)$$

Поэтому доказательство существования представления (3.23) сводится к доказательству разрешимости такой цепочки. Согласно теории дифференциальных уравнений [1] уравнение для Ψ^{n+2} , $n \geq -2$, разрешимо тогда и только тогда, когда его правая часть ортогональна общему решению соответствующего однородного уравнения, т. е. всем гармоникам $Y_{n+2,\beta}(\hat{x})$ с $|\beta| \leq n+2$. Докажем такую ортогональность по индукции. Общее регулярное решение уравнения (3.27) — произведение гармоники $Y_{00}(\hat{x})$ и, вообще говоря, произвольной функции Ψ_{00}^0 аргумента \mathbf{y} :

$$\Psi^0(\hat{x}, \mathbf{y}) = \Psi_{00}^0(\mathbf{y}) Y_{00}(\hat{x}). \quad (3.30)$$

Поэтому правая часть уравнения (3.28) для неизвестной функции Ψ^1 ортогональна гармоникам $Y_{1\beta}(\hat{x})$, $\beta = 0, \pm 1$. Значит, решение Ψ^1 существует и равно сумме частного решения $q\Psi^0/2$ исследуемого неоднородного уравнения и общего решения соответствующего однородного уравнения:

$$\Psi^1(\hat{x}, \mathbf{y}) = (q/2) \Psi_{00}^0(\mathbf{y}) Y_{00}(\hat{x}) + \sum_{\beta=0,\pm 1} \Psi_{1\beta}^1(\mathbf{y}) Y_{1\beta}(\hat{x}). \quad (3.31)$$

Итак, Ψ^0 и Ψ^1 — ряды (3.24) с произвольными компонентами Ψ_{00}^0 и $\Psi_{1\beta}^1$. 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 (3.24), но искомое решение Ψ^{n+2} , вообще говоря, бесконечный сферический ряд. В уравнении (3.29) заменим все функции $\Psi^{n'}$ с $n' \leq n+2$ их рядами. С помощью (3.20) спроектируем получившееся уравнение на сферический базис (1.5). В итоге для искомого проекций $\Psi_{b\beta}^{n+2}(\mathbf{y})$ получатся алгебраические и незацепляющиеся ни по индексу $b = 0, 1, \dots$, ни по индексу $\beta = -b, \dots, b$ уравнения

$$\begin{aligned} [b(b+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{b\beta}^{n+2}(\mathbf{y}) = \\ = -q\Psi_{b\beta}^{n+1}(\mathbf{y}) - h(\mathbf{y})\Psi_{b\beta}^n(\mathbf{y}) - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s \left[\frac{4\pi}{2s+1} \right]^{1/2} \times \\ \times V^{ps}(\mathbf{y}) \sum_{b'=0}^{n-p} \sum_{\beta'=-b'}^{b'} C_{s0b0}^{b'0} C_{s\alpha b'\beta'}^{b\beta} Y_{s\alpha}^*(\hat{y}) \Psi_{b'\beta'}^{n-p}(\mathbf{y}). \end{aligned} \quad (3.32)$$

В этих уравнениях $b' \leq n-p$, а $s \leq p$, следовательно, $b' + s \leq n$, и поэтому при $b > n$ все коэффициенты $C_{s0b0}^{b'0}$, а значит и сумма по индексам b', β' , обращаются в нуль. Следовательно, при $b > n+2$, когда по предположению индукции $\Psi_{b\beta}^{n+1}, \Psi_{b\beta}^n = 0$, уравнения (3.32) становятся однородными и имеют только тривиальные решения: $\Psi_{b\beta}^{n+2} \equiv 0, |\beta| \leq b$. При $b = n+2$ и любом

$\beta = -b, \dots, b$ эти уравнения — тождества типа $0 \Psi_{n+2, \beta}^{n+2} = 0$. Им подчиняются произвольные функции $\Psi_{n+2, \beta}^{n+2}(\mathbf{y})$. Так как при $b \leq n + 1$ исследуемые уравнения (3.32) всегда имеют нетривиальные решения $\Psi_{b\beta}^{n+2}$, $|\beta| \leq b$, то Ψ^{n+2} — конечная сумма типа (3.24). Следовательно, вся цепочка исходных уравнений (3.27)–(3.29) разрешима, а для всех ее решений Ψ^n верны представления (3.24), что и требовалось доказать. Попутно было показано, что все сферические компоненты $\Psi_{b\beta}^n$, $|\beta| \leq b$, с максимально возможным при данном n значении $b = n$ — произвольные функции переменной \mathbf{y} , через которые однозначно выражаются все остальные компоненты $\Psi_{b\beta}^n$ с $b < n$. Вывод таких представлений несложен и заключается в решении уравнений (3.32) в порядке возрастания индекса n и убывания индекса b при данном n .

Поясним вывод примером. Подставим компоненты $\Psi_{b\beta}^n$, $n = 0, 1$, функций (3.30) и (3.31) в правые части уравнений (3.32) с $n = 0$ и найдем решения:

$$\Psi_{1\beta}^2(\mathbf{y}) = (q/4)\Psi_{1\beta}^1(\mathbf{y}), \quad \Psi_{00}^2(\mathbf{y}) = (1/12) [2h(\mathbf{y}) + q^2] \Psi_{00}^0(\mathbf{y}). \quad (3.33)$$

Далее, используя эти выражения, решим уравнения (3.32) с $n = 1$:

$$\begin{aligned} \Psi_{2\beta}^3(\mathbf{y}) &= (q/6)\Psi_{2\beta}^2(\mathbf{y}), \\ \Psi_{1\beta}^3(\mathbf{y}) &= (1/40) [4h(\mathbf{y}) + q^2] \Psi_{1\beta}^1(\mathbf{y}) + \\ &\quad + (\sqrt{\pi}/15)V^{11}(\mathbf{y})\Psi_{00}^0(\mathbf{y})Y_{1\beta}^*(\hat{y}), \\ \Psi_{00}^3(\mathbf{y}) &= (1/144) [q(8h(\mathbf{y}) + q^2) + 12V^{10}] \Psi_{00}^0(\mathbf{y}). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Отметив, что асимптотика функции Ψ , полученная подстановкой (3.30) и (3.31) в (3.23), совпадает с асимптотикой (3.7), доказанной в [129], перейдем к проблеме построения связей (1.66) для Ψ . Каждый ($n = 0, 1, \dots$) ряд (3.24) для функции Ψ^n содержит $n(n+2)$ неизвестных компонент $\Psi_{b\beta}^{n'}$, $b = n' \leq n$, $|\beta| \leq b$. Поэтому не существует конечной линейной комбинации функций Ψ^n , не содержащей ни одной неизвестной компоненты и равной нулю при всех \hat{x} и \mathbf{y} . Так как $\partial_x^n \Psi|_{x=0} = (n!) \Psi^n$, то в исследуемом общем случае, когда среди частиц p_1, p_2, p_3 нет тождественных, такую линейную комбинацию, т. е. связь (1.66), нельзя построить и для частных производных функции Ψ .

Разложения частного регулярного решения в бисферическом базисе.

Приступим к анализу строения частного решения Ψ^ε , $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$, уравнения Шредингера в случае А. Тождественность двух частиц не является обязательной. Так как в бисферическом базисе (1.6) оператор $\Pi^\varepsilon(\hat{x}, \hat{y})$, проектирующий Ψ на Ψ^ε , — сумма (1.15), то образ $\Psi^\varepsilon = \Pi^\varepsilon \Psi$ ряда (3.23) — степенной ряд

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \Psi^{n\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}), \quad \Psi^{n\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) \equiv \Pi^\varepsilon \Psi^n(\hat{x}, \mathbf{y}), \quad (3.35)$$

в котором вследствие разложений (3.24) функции $\Psi^{n\varepsilon}$ — конечные суммы:

$$\begin{aligned}\Psi^{n\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) &= \sum_{b=\mu(\sigma)}^n \sum_a \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y) &\equiv \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) | \Psi^n(\hat{x}, \mathbf{y}) \rangle,\end{aligned}\quad (3.36)$$

а их компоненты выражаются через проекции функций $\Psi_{b\beta}^n$ и Ψ^n :

$$\begin{aligned}\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y) &= \sum_{\alpha=-a}^a C_{a\alpha b\beta}^{\ell m} \langle Y_{a\alpha}(\hat{y}) | \Psi_{b\beta}^n(\mathbf{y}) \rangle = \\ &= \sum_{\alpha=-a}^a C_{a\alpha b\beta}^{\ell m} \langle Y_{a\alpha}(\hat{y}) Y_{b\beta}(\hat{x}) | \Psi^n(\hat{x}, \mathbf{y}) \rangle.\end{aligned}\quad (3.37)$$

Образ Ψ^ε можно представить как разложение решения Ψ^ε по базису (1.6):

$$\begin{aligned}\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sum_{ab} \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) &\equiv \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) | \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle = \sum_{n=b \geq \mu(\sigma)}^{\infty} x^n \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y)\end{aligned}\quad (3.38)$$

и тем самым доказать, что бисферические компоненты Ψ_{ab}^ε такого разложения — степенные ряды с асимптотиками $\Psi_{ab}^\varepsilon = O(x^b)$, $b = \mu(\sigma)$, при $x \rightarrow 0$.

Как было показано, функции $\Psi_{b\beta}^n$ с $b = n = 0, 1, \dots$ нельзя определить, но через них можно выразить все функции $\Psi_{b\beta}^n$ с $b \leq n$. Поэтому при $b = n$ и любом a суммы (3.37) — произвольные функции $\Psi_{an}^{n\varepsilon}$, через которые однозначно представляются все остальные функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ с $b \leq n$. Это утверждение можно доказать и другим способом, а именно, применив метод индукции к рекуррентной по индексу n цепочке алгебраических уравнений, полученной проектированием цепочки (3.27)–(3.29) с помощью формул (3.21) и (1.15):

$$\begin{aligned}[b(b+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{ab}^{n+2, \varepsilon}(y) &= -q \Psi_{ab}^{n+1, \varepsilon}(y) - \\ &- h_a(y) \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y) - (-1)^{a+b-\ell} \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s V^{ps}(y) \sum_{b'=\mu(\sigma)}^{n-p} (2b'+1)^{1/2} \times \\ &\times \sum_{a'} (2a'+1)^{1/2} C_{s0a'0}^{a0} C_{s0b'0}^{b0} \left\{ \begin{matrix} a & a' & s \\ b' & b & \ell \end{matrix} \right\} \Psi_{a'b'}^{n-p, \varepsilon}(y), \\ n &= -2, -1, \dots; \quad b = \mu(\sigma), 1, \dots, n,\end{aligned}\quad (3.39)$$

где h_a — диагональный матричный элемент оператора (3.26) в базисе (1.6):

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m} | h(\mathbf{y}) | \mathcal{Y}_{a'b'}^{\ell m} \rangle &= \delta_{aa'} \delta_{bb'} h_a(y), \\ h_a(y) &\equiv -\partial_y^2 - (2/y)\partial_y + a(a+1)y^{-2} + V^{00}(y) - E. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Доказательство разрешимости цепочки (3.39) принципиально не отличается от данного выше анализа системы (3.29) и поэтому опускается.

Компоненты $\Psi^{n\varepsilon}$ разложения (3.35) физического решения Ψ^ε можно найти, если известны компоненты Ψ^n или $\Psi_{b\beta}^n$ общего решения Ψ . Например, подействовав проектором (1.15) на функции (3.30) и (3.31), имеем

$$\begin{aligned} \Psi^{0\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) &= \Psi_{\ell 0}^{0\varepsilon}(y) \mathcal{Y}_{\ell 0}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \Psi^{1\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) &= (q/2)\Psi^{0\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) + \sum_{a=|\ell\pm 1|} \Psi_{a1}^{1\varepsilon}(y) \mathcal{Y}_{a1}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \quad \sigma = (-1)^\ell; \\ \Psi^{0\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) &= \Psi_{\ell 0}^{0\varepsilon}(y) \equiv 0, \quad \Psi^{1\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) = \Psi_{\ell 1}^{1\varepsilon}(y) \mathcal{Y}_{\ell 1}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \quad \sigma = (-1)^{\ell+1}, \end{aligned} \quad (3.41)$$

а подставив сферические компоненты (3.33) и (3.34) в суммы (3.37) и затем упростив ряды (3.36), доказываем, что при любом σ

$$\begin{aligned} \Psi^{2\varepsilon} &= \frac{1}{12}(2h_\ell + q^2)\Psi^{0\varepsilon} + \frac{q}{4} \sum_a \Psi_{a1}^{1\varepsilon} \mathcal{Y}_{a1}^{\ell m} + \sum_a \Psi_{\ell 2}^{2\varepsilon} \mathcal{Y}_{a2}^{\ell m}, \\ \Psi^{3\varepsilon} &= \frac{1}{144} [q(8h_\ell + q^2) + 12V^{10}] \Psi^{0\varepsilon} + \frac{1}{40} \sum_a (4h_a + q^2) \Psi_{a1}^{1\varepsilon} \mathcal{Y}_{a1}^{\ell m} - \\ &\quad - \frac{V^{11}}{10\sqrt{3}} \Psi_{\ell 0}^{0\varepsilon} \sum_{a=|\ell\pm 1|} C_{\ell 0 1 0}^{a 0} \mathcal{Y}_{a1}^{\ell m} + \frac{q}{6} \sum_a \Psi_{a2}^{2\varepsilon} \mathcal{Y}_{a2}^{\ell m} + \sum_a \Psi_{a3}^{3\varepsilon} \mathcal{Y}_{a3}^{\ell m}. \end{aligned} \quad (3.42)$$

Третий способ построения функций $\Psi^{n\varepsilon}$ реализуется подстановкой решений $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ системы (3.39) в суммы (3.36). При этом компоненты Ψ^n или $\Psi_{b\beta}^n$ не требуются. Поэтому такой способ представляется оптимальным и для вывода асимптотики ряда (3.35) и асимптотик компонент Ψ_{ab}^ε ряда (3.38).

Выразив решения $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$, $n \leq 4$, цепочки (3.39) через неизвестные функции $\partial_x^n \Psi_{ab}^\varepsilon|_{x=0} = (n!) \Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ с $b = n$, доказываем асимптотику компоненты $\Psi_{\ell 0}^\varepsilon$:

$$\begin{aligned} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(x, y) &= \left\{ 1 + \frac{qx}{2} + \frac{x^2}{12}[2h_\ell + q^2] + \frac{x^3}{144}[q(8h_\ell + q^2) + 12V^{10}] + \right. \\ &\quad \left. + \frac{x^4}{20} \left[\frac{1}{36}h_\ell [6h_\ell + 5q^2] + \frac{q^4}{144} + V^{20} + \frac{7q}{12}V^{10} \right] \right\} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(0, y) - \\ &\quad - \frac{\sqrt{3}}{60} x^4 V^{11} \sum_{a'=|\ell\pm 1|} C_{\ell 0 1 0}^{a' 0} \partial_x \Psi_{a' 1}^\varepsilon(x, y)|_{x=0} + O(x^5), \end{aligned} \quad (3.43)$$

асимптотики компонент Ψ_{a1}^ε с индексом $a = |\ell \pm (1 - \mu(\sigma))|$:

$$\begin{aligned} \Psi_{a1}^\varepsilon(x, y) = & x \left\{ 1 + \frac{qx}{4} + \frac{x^2}{40} [4h_a + q^2] + \right. \\ & \left. + \frac{x^3}{720} [q(14h_a + q^2) + 40V^{10}] \right\} \partial_x \Psi_{a1}^\varepsilon(x, y)|_{x=0-} \\ & - \frac{\sqrt{3}V^{11}}{270} C_{\ell 010}^{a0} (9 + 2qx)x^3 \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(0, y) + O(x^5) \quad (3.44) \end{aligned}$$

и асимптотики компонент Ψ_{a2}^ε с индексом $a = |\ell \pm \mu(\sigma)|, |\ell \pm (2 - \mu(\sigma))|$:

$$\begin{aligned} \Psi_{a2}^\varepsilon(x, y) = & \frac{x^2}{2} \left\{ 1 + \frac{qx}{6} + \frac{x^2}{84} [6h_a + q^2] \right\} \partial_x^2 \Psi_{a2}^\varepsilon(x, y)|_{x=0-} \\ & - (-1)^{\ell+a} \frac{x^4}{7} V^{11} \sum_{a'=|a\pm 1|} (2a' + 1)^{1/2} C_{a'010}^{a0} \begin{Bmatrix} a & a' & 1 \\ 1 & 2 & \ell \end{Bmatrix} \partial_x \Psi_{a'1}^\varepsilon(x, y)|_{x=0+} \\ & + \left[\frac{x^4}{14\sqrt{5}} \right] V^{22} C_{\ell 020}^{a0} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(0, y) + O(x^5). \quad (3.45) \end{aligned}$$

Вычисляя частные производные ∂_x^n , $n \leq 4$, от этих асимптотик, получаем следующие связи (1.66) при $x = 0$ и $y > 0$: для компоненты $\Psi_{\ell 0}^\varepsilon$

$$\begin{aligned} (2\partial_x - q)\Psi_{\ell 0}^\varepsilon = 0, \quad (6\partial_x^2 - 2h_\ell - q^2)\Psi_{\ell 0}^\varepsilon = 0, \\ \left[24\partial_x^3 - q(8h_\ell + q^2) - 12V^{10} \right] \Psi_{\ell 0}^\varepsilon = 0, \\ \left[120(6V^{20} - \partial_x^4) + 5h_\ell(6h_\ell + 5q^2) + q^4 + 84qV^{10} \right] \Psi_{\ell 0}^\varepsilon = \\ = 48\sqrt{3}V^{11} \sum_{a'=|\ell\pm 1|} C_{\ell 010}^{a'0} \partial_x \Psi_{a'1}^\varepsilon, \quad (3.46) \end{aligned}$$

для компонент Ψ_{a1}^ε , $a = |\ell \pm (1 - \mu(\sigma))|$,

$$\begin{aligned} \partial_x(2\partial_x - q)\Psi_{a1}^\varepsilon = 0, \\ [20\partial_x^3 - 3(4h_a + q^2)\partial_x] \Psi_{a1}^\varepsilon = -4\sqrt{3}V^{11} C_{\ell 010}^{a0} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon, \quad (3.47) \\ \{30\partial_x^4 - [q(14h_a + q^2) + 40V^{10}] \partial_x\} \Psi_{a1}^\varepsilon = -(16/\sqrt{3}) qV^{11} C_{\ell 010}^{a0} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon, \end{aligned}$$

а для компонент Ψ_{a2}^ε , $a = |\ell \pm \mu(\sigma)|, |\ell \pm (2 - \mu(\sigma))|$,

$$\begin{aligned} \partial_x^2(2\partial_x - q)\Psi_{a2}^\varepsilon &= 0, \\ \sqrt{5}\partial_x^2(7\partial_x^2 - 6h_a - q^2)\Psi_{a2}^\varepsilon &= 12V^{22}C_{\ell 020}^{a0}\Psi_{\ell 0}^\varepsilon - \\ &- 24\sqrt{5}(-1)^{\ell+a}V^{11}\sum_{a'=|a\pm 1|} (2a'+1)^{1/2}C_{a'010}^{a0}\left\{\begin{matrix} a & a' & 1 \\ 1 & 2 & \ell \end{matrix}\right\}\partial_x\Psi_{a'1}^\varepsilon. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Чтобы воспроизвести соотношения (3.5) и (3.6), рассмотрим асимптотику $\Psi^\varepsilon \sim \Psi^{\varepsilon 0} + x\Psi^{\varepsilon 1}$ ряда (3.35) с компонентами (3.41) в частном случае $\ell = 0$, $m_3 = \infty$, $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}_2$, когда согласно (1.1) и (1.30) $\mathbf{x} = \mathbf{a}_1\sqrt{2m_1}$ и $q = z_3\sqrt{2m_1}$. Представим второе слагаемое суммы $\Psi^{\varepsilon 1}$ (см. (3.41)) скалярным произведением $(\mathbf{a}_1\mathbf{A})$ с неопределенным вектором \mathbf{A} :

$$\begin{aligned} \Psi^{1\varepsilon}(y)\mathcal{Y}_{11}^{00}(\hat{x}, \hat{y}) &= -\frac{\sqrt{3}}{4\pi}\Psi_{11}^{1\varepsilon}(y)u = (\mathbf{a}_1\mathbf{A}), \\ \mathbf{A} &\equiv -\frac{\sqrt{3}}{4\pi}\Psi_{11}^{1\varepsilon}(y)\mathbf{y}/(a_1y). \end{aligned}$$

Тогда исследуемая асимптотика сведется к равенству (3.6), доказанному в [128], а после ее интегрирования по всем углам \hat{x}, \hat{y} получится условие Като [127] в его изначальной форме (3.5).

Замечания. Соотношения (3.35)–(3.48) верны во всех случаях (1.32), но наиболее просты в особом случае С. Так как в этом случае $q = 0$, а V — сумма (3.19) с четным $(p + s)$, то в уравнениях (3.32) для компонент $\Psi_{b\beta}^n$ все $C_{sob0}^{b'0}$ и V^{ps} равны нулю при нечетных $(b' + s + b)$ и $(p + s)$ и по индукции несложно доказать правила отбора $\Psi_{b\beta}^n \equiv 0$ при $(-1)^{n+b} \neq 1$. Благодаря им компоненты $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ с нечетной суммой $n + b$ индексов n и b равны нулю. Поэтому разложения (3.38) и (3.37) решения Ψ^ε и ключевые для его построения уравнения (3.39) содержат только функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y)$ с четной суммой $n + b$.

Разложение частного регулярного решения в D^σ -базисе. Исследуем то же самое частное решение Ψ^ε в случае А, но в D^σ -базисе (1.9). Используем две «подвижные» системы координат S^t , $t = x, y$. В D^σ -базисе (1.9) оператор $\Pi^{\varepsilon t}$, проектирующий Ψ на Ψ^ε , — сумма (1.17). Разложения (1.11) и (1.12) функций $Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x})$ и $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y})$ по функциям $D_{mm'}^{\ell\sigma*}$ будут ключевыми для построения D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$ образа $\Psi^\varepsilon = \Pi^{\varepsilon t}\Psi$,

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \Psi_{m'}^{\varepsilon t}(x, y, \theta) D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t), \quad (3.49)$$

как проекций

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

сферического и бисферического рядов (3.23), (3.24) и (3.36).

Приступим к анализу строения D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$ ряда (3.49). Применяя (1.17) и (1.11), построим образ $\Psi^\varepsilon = P^{\varepsilon t} \Psi$ ряда (3.23) с компонентами (3.24) и таким образом докажем, что D^σ -компоненты $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$ — ряды по целым степеням x и конечным суммам $\Psi_{m'}^{n\varepsilon t}$ проекций $\langle Y_{a\alpha} | \Psi_{b\beta}^n \rangle$ компонент $\Psi_{b\beta}^n$ общего решения:

$$\Psi_{m'}^{\varepsilon t}(x, y, \theta) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} x^n \Psi_{m'}^{n\varepsilon t}(y, \theta), \quad m' = \mu(\sigma), \dots, \ell, \quad t = x, y, \quad (3.50)$$

$$\Psi_{m'}^{n\varepsilon t}(y, \theta) = \sum_{b=\mu(\sigma)}^n \sum_a \sum_{\alpha=-a}^a \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t) | Y_{a\alpha}(\hat{y}) Y_{b\beta}(\hat{x}) \rangle \langle Y_{a\alpha}(\hat{y}) | \Psi_{b\beta}^n(\mathbf{y}) \rangle. \quad (3.51)$$

Следовательно, асимптотики D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$, т.е. конечные подсуммы ($n = \mu(\sigma), \dots, n' < \infty$) рядов (3.50), можно найти, заменив функции $\Psi_{b\beta}^n$ в суммах (3.51) их явными выражениями, например, при $n \leq 3$ — правыми частями равенств (3.30), (3.31), (3.33) и (3.34).

Другой вывод представления (3.50) реализуем проектированием бисферического ряда (3.36) с помощью формул (1.17) и (1.12) на D^σ -базис (1.9). В итоге при $t = x$ функция $\Psi_{m'}^{n\varepsilon t}$ представится конечной суммой по индексу a :

$$\Psi_{m'}^{n\varepsilon x}(y, \theta) = \sum_{a=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} \Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(y) \Theta_{am'}(u) \quad (3.52)$$

с Θ -компонентами

$$\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(y) \equiv \langle \Theta_{am'}(u) | \Psi_{m'}^{n\varepsilon x}(y, \theta) \rangle = \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^n T_{ab}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y), \quad (3.53)$$

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

$$\Psi_{m'}^{n\varepsilon y}(y, \theta) = \sum_{b=m'}^n \Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}(y) \Theta_{bm'}(u) \quad (3.54)$$

с Θ -компонентами

$$\Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}(y) \equiv \langle \Theta_{bm'}(u) | \Psi_{m'}^{n\varepsilon y}(\theta, y) \rangle = \sum_{a=|\ell-b+\mu(\sigma)|}^{\ell+b-\mu(\sigma)} (-1)^{m'} T_{ba}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y). \quad (3.55)$$

В этих суммах $a \leq \ell + n - \mu(\sigma)$, поскольку $\mathbf{a} = \mathbf{1} - \mathbf{b}$, $(-1)^{a+b} = \sigma$ и $b \leq n$. Далее, $a \geq m'$ и $b \geq m'$, потому что согласно (1.12) $T_{ab}^{\ell m'} = 0$ при $a < m'$ и $T_{ba}^{\ell m'} = 0$ при $b < m'$. По той же причине $\Psi_{am'}^{n\epsilon x} \equiv 0$ при $m' > a$ и $\Psi_{bm'}^{n\epsilon y} \equiv 0$ при $m' > b$. Так как $n \geq b \geq m'$, то $\Psi_{bm'}^{n\epsilon y} \equiv 0$, если $m' > n$, но, вообще говоря, $\Psi_{am'}^{n\epsilon x} \neq 0$ при $m' > n$. Поэтому ряд (3.52) более сложный, чем ряд (3.54).

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

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

Следовательно, формулы (3.52) и (3.54) означают, что компоненты $\Psi_{m'}^{n\epsilon x}$ и $\Psi_{m'}^{n\epsilon y}$ 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 (3.50), т. е. D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\epsilon t}$, можно построить заменой в (3.53) или (3.55) бисферических компонент $\Psi_{ab}^{n\epsilon}$ их явными выражениями (например, (3.41) и (3.42)) через неопределенные бисферические компоненты $\Psi_{ab}^{n'\epsilon}$, $b = n' \leq n$. Согласно (3.53) и (3.55) при такой замене функции $\Psi_{m'}^{n\epsilon x}$ и $\Psi_{m'}^{n\epsilon y}$ с данным n выразятся через произвольные функции $f_{am'}^{n'x}$ и $f_{m'}^{n'y}$:

$$\begin{aligned} f_{am'}^{n'x}(y) &= T_{ab}^{\ell m'} f_a^{n'x}(y), \quad f_a^{n'x}(y) \equiv \Psi_{ab}^{n'\epsilon}(y), \\ f_{m'}^{n'y}(y) &= \sum_{a=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} (-1)^{m'} T_{ba}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n'\epsilon}(y), \quad b = n' \leq n. \end{aligned} \tag{3.56}$$

Третий способ построения асимптотик компонент $\Psi_{m'}^{\epsilon t}$ суммы (3.49) опишем более подробно. Этот способ представляется оптимальным, потому что в нем, в отличие от двух упомянутых выше способов, не нужны ни функции $\Psi_{b\beta}^n$, ни функции $\Psi_{ab}^{n\epsilon}$, а ключевыми являются доказанные представления (3.50), (3.52) и (3.54). Благодаря им для решения (3.49) верны два разложения

$$\Psi^\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} x^n \sum_{a=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} \Psi_{am'}^{n\epsilon x}(y) \Theta_{am'}(u), \tag{3.57}$$

$$\Psi^\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^y) \sum_{n=m'}^{\infty} x^n \sum_{b=m'}^n \Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(y) \Theta_{bm'}(u) \tag{3.58}$$

по трем системам линейно независимых функций:

$$(x^0, x^1, \dots), \quad (D_{mm'}^{\ell\sigma*}, m' = \mu(\sigma), \dots, \ell) \text{ и } (\Theta_{am'}, a \geq m') \text{ или } (\Theta_{bm'}, b \geq m').$$

Поэтому неизвестные функции $\Psi_{am'}^{n\epsilon t}(y)$ удастся подчинить линейным системам уравнений. Для сравнения выведем их в двух случаях $t = x$ и $t = y$.

Пусть $t = x$, т. е. выбрана система S^x . Тогда действие проектора (1.17) с $t = x$ на цепочку (3.27)–(3.29) дает рекуррентную по индексу n цепочку систем уравнений для искомых компонент $\Psi_{m'}^{n\epsilon x}$ ряда (3.50):

$$\begin{aligned} & [\ell(\ell + 1) - 2(m')^2 + Q_{m'm'}(\theta) - (n + 2)(n + 3)] \Psi_{m'}^{n+2,\epsilon x}(y, \theta) - \\ & - \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} Q_{m'm''}(\theta) \Psi_{m''}^{n+2,\epsilon x}(y, \theta) = -q \Psi_{m'}^{n+1,\epsilon x}(y, \theta) - \\ & - h_{m'}^x(y, \theta) \Psi_{m'}^{n\epsilon x}(y, \theta) - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p V^{ps}(y) P_s(u) \Psi_{m'}^{n-p,\epsilon x}(y, \theta). \quad (3.59) \end{aligned}$$

Здесь $\Psi_{m'}^{n\epsilon x} \equiv 0$ при $n < 0$; $m' = \mu(\sigma), \dots, \ell$ при каждом $n = -2, 1, \dots$; операторы $Q_{m'm''}(\theta)$ и коэффициенты $\gamma_{m',m'\pm 1}^{\ell\sigma}$ определены формулами (1.24) и (1.22), а оператор $h_{m'}^x(y, \theta)$ порожден оператором (3.26):

$$\begin{aligned} h_{m'}^x(y, \theta) & \equiv \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) | h(\mathbf{y}) | D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) \rangle = \\ & = -y^{-2} \partial_y (y^2 \partial_y) + y^{-2} Q_{m'm'}(\theta) + V^{00}(y) - E. \quad (3.60) \end{aligned}$$

При действии на функцию $\Theta_{am'}$ оператор $Q_{m'm'}$ и оператор (3.22) умножения на $P_s(u)$ сохраняют индекс m' , а в силу (1.3) образы $Q_{m',m'\pm 1} \Theta_{a,m'\pm 1}$ подобны функции $\Theta_{am'}$. Поэтому при данном n каждое $(m' = \mu(\sigma), \dots, \ell)$ уравнение системы (3.59) заменой всех функций $\Psi_{m''}^{n'\epsilon x}$, $n' = 0, \dots, n + 2$; $m'' = m', m' \pm 1$, их анзацами (3.52) 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 допустимого a

$$\begin{aligned} & [\ell(\ell + 1) - 2(m')^2 - (n + 2)(n + 3)] \Psi_{am'}^{n+2,\epsilon x}(y) - \\ & - \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^a \Psi_{am''}^{n+2,\epsilon x}(y) = -q \Psi_{am'}^{n+1,\epsilon x}(y) - h_{am'}^x(y) \Psi_{am'}^{n\epsilon x}(y) - \\ & - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s V^{ps}(y) \sum_{a'=m'}^{\ell+n-p-\mu(\sigma)} C_{s0a0}^{a'0} C_{s0a'm'}^{am'} \Psi_{a'm'}^{n-p,\epsilon x}(y), \quad (3.61) \end{aligned}$$

где $\Psi_{am'}^{n\epsilon x} \equiv 0$ при $n < 0$ или $a < m'$ или же при $a > \ell + n - \mu(\sigma)$ и, как следует из (3.40), (3.60) и (1.3),

$$h_{am'}^x(y) \equiv \langle \Theta_{am'}(u) | h_{m'}^x(y, \theta) | \Theta_{am'}(u) \rangle = h_a(y).$$

Таким образом цепочка дифференциальных уравнений (3.59) сводится к рекуррентной по индексу n цепочке систем линейных уравнений (3.61) для искомого Θ -компонент $\Psi_{am'}^{n\epsilon x}$ рядов (3.52). Эти системы нумеруются индексами n и a . Система с данными n и a состоит из уравнений для неизвестных $\Psi_{am'}^{n+2, \epsilon x}$, причем $m' = \mu(\sigma), \dots, \ell$, если $a > \ell$ и $m' = a, \dots, \ell$, если $a \leq \ell$. Матрица такой системы — трехдиагональная, а ее неизвестные зацеплены по индексу m' , что существенно затрудняет их нахождение в явном виде. Ключевыми для построения решения $F_{am'}^{n+2, x}$, $m' \leq a$, однородной системы с такой матрицей являются известные связи [16] для коэффициентов Клебша–Гордана с индексами проекций моментов, отличающихся на единицу, и следующий из представлений (3.53) и (3.56) анзац

$$F_{am'}^{n+2, x}(y) = T_{a, n+2}^{\ell m'} f_a^{n+2, x}(y), \quad f_a^{n+2, x}(y) \equiv \Psi_{a, n+2}^{n+2, \epsilon}(y), \quad m' \leq a.$$

Общие решения $\Psi_{am'}^{n\epsilon x}(y)$, $n \leq 3$, цепочки (3.61) выглядят не столь сложно, как уже при $n = 4$, что позволяет по формулам (3.52) выразить компоненты $\Psi_{m'}^{n\epsilon x}(y, \theta)$, $n \leq 3$, $\forall m'$, рядов (3.50) через неопределенные функции $f_a^{nx}(y)$, известные операторы $h_{am'}^x(y)$ и функции $V^{ps}(y)$ и $\Theta_{am'}(u)$:

$$\begin{aligned} \Psi_{m'}^{0\epsilon x} &= T_{\ell 0}^{\ell m'} f_{\ell}^{0x} \Theta_{\ell m'}, \quad \Psi_{m'}^{1\epsilon x} = \frac{q}{2} \Psi_{m'}^{0\epsilon x} + \sum_{a=|\ell-1|}^{\ell+1} T_{a1}^{\ell m'} f_a^{1x} \Theta_{am'}, \\ \Psi_{m'}^{2\epsilon x} &= \frac{1}{12} (2h_{\ell m'}^x + q^2) \Psi_{m'}^{0\epsilon x} + \frac{q}{4} \sum_{a=|\ell-1|}^{\ell+1} T_{a1}^{\ell m'} f_a^{1x} \Theta_{am'} + \sum_{a=|\ell-2|}^{\ell+2} T_{a2}^{\ell m'} f_a^{2x} \Theta_{am'}, \\ \Psi_{m'}^{3\epsilon x} &= \frac{1}{144} [q(8h_{\ell m'}^x + q^2) + 12V^{10}] \Psi_{m'}^{0\epsilon x} + \\ &+ \frac{1}{40} \sum_{a=|\ell-1|}^{\ell+1} (4h_{\ell m'}^x + q^2) T_{a1}^{\ell m'} f_a^{1x} \Theta_{am'} - \frac{V^{11}}{10\sqrt{3}} f_{\ell}^{0x} \sum_{a=|\ell\pm 1|} C_{\ell 0 10}^{a0} T_{a1}^{\ell m'} \Theta_{am'} + \\ &+ \frac{q}{6} \sum_{a=|\ell-2|}^{\ell+2} T_{a2}^{\ell m'} f_a^{2x} \Theta_{am'}(u) + \sum_{a=|\ell-3|}^{\ell+3} T_{a3}^{\ell m'} f_a^{3x} \Theta_{am'}. \end{aligned}$$

Используя эти представления, и предположив, что $f_a^{nx}(y) \neq 0$ при $n \leq 3$, а ряды (3.50) асимптотические, доказываем их явные асимптотики

$$\begin{aligned} \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = & \left[1 + \frac{qx}{2} + \frac{x^2}{12} (2h_{\ell m'}^x + q^2) \right] \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(0, y, \theta) + \\ & + \frac{x^3}{144} [q(8h_{\ell m'}^x + q^2) + 12V^{10}] \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(0, y, \theta) + \\ & + x^2 \sum_{a=\ell, |\ell \pm 2|} \left(1 + \frac{qx}{6} \right) T_{a2}^{\ell m'} f_a^{2x}(y) \Theta_{am'}(u) + \\ & + x \sum_{a=|\ell \pm 1|} \left[1 + \frac{qx}{4} + \frac{x^2}{40} (4h_{am'}^x + q^2) \right] T_{am'}^{\ell m'} f_a^{1x}(y) \Theta_{am'}(u) + \\ & + x^3 \sum_{a=|\ell \pm 1|} \left[T_{a3}^{\ell m'} f_a^{3x}(y) - \left[\frac{V^{11}}{10\sqrt{3}} \right] C_{\ell 010}^{a0} T_{a1}^{\ell m'} f_a^{0x}(y) \right] \Theta_{am'}(u) + \\ & + x^3 \sum_{a=|\ell \pm 3|} T_{a3}^{\ell m'} f_a^{3x}(y) \Theta_{3m'}(u) + O(x^4), \quad \sigma = (-1)^\ell; \quad (3.62) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = & x \left[1 + \frac{qx}{4} + \frac{x^2}{40} (4h_{\ell m'}^x + q^2) \right] \partial_x \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta)|_{x=0} + \\ & + x^2 \sum_{a=|\ell \pm 1|} \left(1 + \frac{qx}{6} \right) T_{a2}^{\ell m'} f_a^{2x}(y) \Theta_{am'}(u) + \\ & + x^3 \sum_{a=\ell, |\ell \pm 2|} T_{a3}^{\ell m'} f_a^{3x}(y) \Theta_{am'}(u) + O(x^4), \quad \sigma = (-1)^{\ell+1}. \end{aligned}$$

При $x = 0$ производные $\partial_x^n \Psi_{m'}^{\varepsilon x} = (n!) \Psi_{m'}^{n\varepsilon x}$, $n = 0, 1, 2, 3$, асимптотик (3.62) содержат разное число неизвестных функций $f_a^{n'x}$, $n' \leq n$. Поэтому не существует линейной комбинации производных разных порядков, не содержащей ни одной функции $f_a^{n'x}$. Для проекций $\partial_x^n \Psi_{am'}^{\varepsilon x}$ производных $\partial_x^n \Psi_{m'}^{\varepsilon x}$ на функции $\Theta_{am'}(u)$ такие комбинации, т. е. связи (1.66), имеются. Например, в случае $a = \ell$ при $\sigma = (-1)^\ell$ и $n = 0$ или $\sigma = (-1)^{\ell+1}$ и $n = 1$:

$$\partial_x^n (2\partial_x - q) \Psi_{\ell m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = 0, \quad (3.63)$$

$$\left[12\partial_x^{2+n} (2\partial_x - q) - q(4h_{\ell m'}^x - q^2) - (12 + 20n)V^{10} \right] \Psi_{\ell m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = 0.$$

Отметим, что асимптотика (3.8), доказанная в [130], следует из (3.62) при $\sigma = (-1)^\ell$. Чтобы в этом убедиться, в этой сумме нужно положить $\mathbf{x} = \mathbf{x}_3$ и $q = z_1 z_2 \sqrt{2\mu_{12}}$, затем по формулам (1.1) выразить \mathbf{x}_3 и \mathbf{y}_3 через \mathbf{R} и ρ и, наконец, оставить слагаемые, убывающие медленнее, чем $O(R^2)$.

Пусть теперь $t = y$, т.е. выбрана система S^y . Все построения в этом случае реализуем в той же последовательности, что и в случае $t = x$. Сначала действием проектора (1.17) с $t = y$ на систему (3.27)–(3.29) подчиним неизвестные $\Psi_{m'}^{n\epsilon y}$ ряда (3.50) дифференциальным уравнениям

$$\begin{aligned} [Q_{m'm'}(\theta) - (n+2)(n+3)] \Psi_{m'}^{n+2,\epsilon y}(y, \theta) = & -q\Psi_{m'}^{n+1,\epsilon y}(y) + \\ & + y^{-2} \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} Q_{m'm''}(\theta) \Psi_{m''}^{n\epsilon y}(y, \theta) - \\ & - h_{m'}^y(y, \theta) \Psi_{m'}^{n\epsilon y}(y, \theta) - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p V^{ps}(y) P_s(u) \Psi_{m'}^{n-p,\epsilon y}(y, \theta), \end{aligned} \quad (3.64)$$

где $\Psi_{m'}^{n\epsilon y} \equiv 0$ при $n < 0$ или $n < m' = \mu(\sigma), \dots, \ell$; $Q_{m'm''}$ — операторы (1.24), а $h_{m'}^y$ — оператор $h(\mathbf{y})$ (см. (3.26)) в обкладках функций $D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^y)$:

$$\begin{aligned} h_{m'}^y(y, \theta) \equiv & -y^2 \partial_y (y^2 \partial_y) + \\ & + y^{-2} Q_{m'm'}(\theta) + y^{-2} [\ell(\ell+1) - 2(m')^2] + V^{00}(y) - E. \end{aligned}$$

Заменой (3.54) сведем уравнения (3.64) к алгебраическим уравнениям

$$\begin{aligned} [b(b+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{bm'}^{n+2,\epsilon y}(y) = & -q\Psi_{bm'}^{n+1,\epsilon y}(y) + \\ & + y^{-2} \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^b \Psi_{bm''}^{n\epsilon y}(y) - h_{bm'}^y(y) \Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(y) - \\ & - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s V^{ps}(y) \sum_{b'=m'}^{n-p} C_{s0b0}^{b'0} C_{s0b'm'}^{bm'} \Psi_{b'm'}^{n-p,\epsilon y}(y), \end{aligned} \quad (3.65)$$

где $m' = \mu(\sigma), \dots, \min\{b, n+2\}$, и $\Psi_{bm'}^{n\epsilon y} = 0$, если $n < 0$ или $m' > b$ или же $n > b$, а $h_{bm'}^y$ — оператор $h_{m'}^y$ в обкладках одинаковых функций $\Theta_{bm'}(\theta)$:

$$\begin{aligned} h_{bm'}^y(y) \equiv & -y^{-2} \partial_y (y^2 \partial_y) + \\ & + y^{-2} [\ell(\ell+1) + b(b+1) - 2(m')^2] + V^{00}(y) - E. \end{aligned}$$

При данных n и b неизвестные $\Psi_{bm'}^{n+2,\varepsilon y}$, $m' = \mu(\sigma), \dots, \min\{b, n+2\}$, системы (3.65), в отличие от решений $\Psi_{am'}^{n+2,\varepsilon y}$ уравнений (3.61), не зацеплены по индексу m' . Нетривиальное решение $F_{bm'}^{n+2,y}$, $\forall m'$, соответствующей однородной системы существует только при $b = n+2$ и элементарно выражается ($F_{bm'}^{n+2,y} = f_{m'}^{n+2,y}$) через произвольные функции $f_{m'}^{n+2,y}(y)$, равные линейным комбинациям (3.56) произвольных бисферических компонент $\Psi_{a,n+2}^{n+2,\varepsilon}$. По указанным причинам построение общего решения $\Psi_{bm'}^{n+2,\varepsilon y}$, $m' \leq b \leq n+2$, цепочки систем (3.65) в порядке возрастания n и убывания b при каждом n не вызывает затруднений:

$$\begin{aligned} \Psi_{n+2,m'}^{n+2,\varepsilon y}(y) &= f_{m'}^{n+2,y}(y), \quad \Psi_{n+1,m'}^{n+2,\varepsilon y}(y) = [q/(2n+4)]f_{m'}^{n+1,y}(y), \\ \Psi_{nm'}^{n+2,\varepsilon y}(y) &= \left[\frac{1}{4n+6} \right] \left[\left(h_{nm'}^y(y) + \frac{q^2}{2n+2} \right) f_{m'}^{ny}(y) - \right. \\ &- y^{-2} \sum_{m''=m' \pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^n f_{m''}^{ny}(y) - C_{10n0}^{n-10} C_{10n-1m'}^{nm'} V^{11}(y) f_{m'}^{n-1,y}(y) + \\ &\left. + C_{20n0}^{n-20} C_{20n-2m'}^{nm'} V^{22}(y) f_{m'}^{n-2,y}(y) \right], \dots \end{aligned}$$

В итоге Θ -компоненты $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}(y)$, а затем и функции $\Psi_{m'}^{n\varepsilon y}(y, \theta)$ (суммы (3.54)) выражаются через произвольные функции $f_{m'}^{n'y}(y)$ с $n' \leq n$, известные операторы $h_{bm'}^y(y)$ и функции $V^{ps}(y)$ и $\Theta_{bm'}(u)$. Например,

$$\begin{aligned} \Psi_{m'}^{0\varepsilon y} &= \Psi_{m'}^{0\varepsilon y} = f_0^{0y} \Theta_{00} \delta_{m'0} = 2^{-1/2} f_0^{0y}, \\ \Psi_{m'}^{1\varepsilon y} &= \frac{q}{2} \Psi_{m'}^{0\varepsilon y} + f_{m'}^{1y} \Theta_{1m'}, \\ \Psi_{m'}^{2\varepsilon y} &= \frac{1}{12} (2h_{00}^y + q^2) \Psi_{m'}^{0\varepsilon y} + \frac{q}{4} f_{m'}^{1y} \Theta_{1m'} + f_{m'}^{2y} \Theta_{2m'}, \\ \Psi_0^{3\varepsilon y} &= \frac{1}{144} [q(8h_{00}^y + q^2) + 12V^{10}] \Psi_{m'}^{0\varepsilon y} + \frac{q}{6} f_0^{2y} \Theta_{20} + f_0^{3y} \Theta_{30} + \quad (3.66) \\ &+ \frac{1}{40} \left[(4h_{10}^y + q^2) f_0^{1y} - 4y^{-2} \gamma_{01}^{\ell\sigma} q_{01}^1 f_1^{1y} + \frac{4}{\sqrt{3}} V^{11} f_0^{0y} \right] \Theta_{10}, \\ \Psi_1^{3\varepsilon y} &= \left[(4h_{11}^y + q^2) f_1^{1y} - 4y^{-2} \gamma_{10}^{\ell\sigma} q_{10}^1 f_0^{1y} \right] \frac{\Theta_{11}}{40} + \frac{q f_1^{2y} \Theta_{21}}{6} + f_1^{3y} \Theta_{31}, \\ \Psi_2^{3\varepsilon y} &= \frac{q}{6} f_2^{2y} \Theta_{22} + f_2^{3y} \Theta_{32}, \\ \Psi_3^{3\varepsilon y} &= f_3^{3y} \Theta_{33}, \end{aligned}$$

где $f_0^{ny}(y) \equiv 0$ при любом n , если $\sigma = (-1)^{\ell+1}$. Используя эти представления и предполагая, что $f_{m'}^{ny} \neq 0$ при $n \leq 3$, а ряды (3.50) асимптотические, находим их явные асимптотики, т. е. асимптотики D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon y}$:

$$\begin{aligned}
 \Psi_0^{\varepsilon y}(x, y, \theta) &= \left\{ 1 + \frac{qx}{2} + \frac{x^2}{12}(2h_{00}^y + q^2) + \right. \\
 &\quad \left. + \frac{x^3}{144} [q(8h_{00}^y + q^2) + 12V^{10}] \right\} f_0^{0y}(y)\Theta_{00}(u) + \\
 &\quad + x \left[1 + \frac{qx}{4} + \frac{x^2}{40}(4h_{10}^y + q^2) \right] f_0^{1y}(y)\Theta_{10}(u) + \\
 &\quad + \left[\frac{x^3}{10\sqrt{3}y^2} \right] \left\{ y^2 V^{11} f_0^{0y}(y) - \right. \\
 &\quad \left. - [6\ell(\ell+1)(1+\sigma(-1)^\ell)]^{1/2} f_1^{1y}(y) \right\} \Theta_{10}(u) + \quad (3.67) \\
 &\quad + x^2 \left(1 + \frac{qx}{6} \right) f_0^{2y}(y)\Theta_{20}(u) + x^3 f_0^{3y}(y)\Theta_{30}(u) + O(x^4), \\
 \Psi_1^{\varepsilon y}(x, y, \theta) &= x \left[1 + \frac{qx}{4} + \frac{x^2}{40}(4h_{11}^y + q^2) \right] f_1^{1y}(y)\Theta_{11}(u) - \\
 &\quad - \left[\frac{x^3}{5y^2} \right] [\ell(\ell+1)]^{1/2} f_0^{1y}(y)\Theta_{11}(u) + \\
 &\quad + x^2 \left(1 + \frac{qx}{6} \right) f_1^{2y}(y)\Theta_{21}(u) + x^3 f_1^{3y}(y)\Theta_{31}(u) + O(x^4), \\
 \Psi_2^{\varepsilon y}(x, y, \theta) &= x^2 \left[1 + \frac{qx}{6} \right] f_2^{2y}(y)\Theta_{22}(u) + x^3 f_2^{3y}(y)\Theta_{32}(u) + O(x^4).
 \end{aligned}$$

Затем из этих асимптотик выводим связи (1.66) при $x = 0$, $y > 0$ для проекций $\partial_x^n \Psi_{bm'}^{\varepsilon y} \equiv (n!) \Psi_{bm'}^{\varepsilon y}$, производных $\partial_x^n \Psi_{m'}^{\varepsilon y}$ на функции $\Theta_{bm'}(u)$:

$$\begin{aligned}
 \partial_x^b (2\partial_x - q) \Psi_{bm'}^{\varepsilon y}(x, y) &= 0, \quad b \geq m' = 0, 1, 2, \\
 [6\partial_x^2 - 2h_{00}^y - q^2] \Psi_{00}^{\varepsilon y}(x, y) &= 0, \\
 [24\partial_x^3 - q(8h_{00}^y + q^2) - 12V^{10}] \Psi_{00}^{\varepsilon y}(x, y) &= 0, \quad (3.68) \\
 \partial_x [20\partial_x^2 - 3(4h_{10}^y + q^2)] \Psi_{10}^{\varepsilon y}(x, y) &= \\
 = 4 \left\{ \sqrt{3} V^{11} \Psi_{00}^{\varepsilon y}(x, y) - 3y^{-2} [2\ell(\ell+1)(1+\sigma(-1)^\ell)]^{1/2} \partial_x \Psi_{11}^{\varepsilon y}(x, y) \right\}, \\
 \partial_x [20\partial_x^2 - 3(4h_{11}^y + q^2)] \Psi_{11}^{\varepsilon y}(x, y) &= -\frac{24}{y^2} \sqrt{\ell(\ell+1)} \partial_x \Psi_{10}^{\varepsilon y}(x, y).
 \end{aligned}$$

Как видно из (3.38), (3.62) и (3.67), ожидаемые асимптотики бисферических и D^σ -компонент Ψ_{ab}^ε , $\Psi_m^{\varepsilon t}$ зависят от b , m' , σ и t : $\Psi_{ab}^\varepsilon = O(x^b)$, $b \geq \mu(\sigma)$; если $t = y$, то $\Psi_m^{\varepsilon t} = O(x^{m'})$ при любом σ ; если же $t = x$, то $\Psi_m^{\varepsilon t} = O(1)$ при $\sigma = (-1)^\ell$ и $\Psi_m^{\varepsilon t} = O(x)$ при $\sigma = (-1)^\ell$. Эти соотношения подтверждают главные качественные выводы работы [130].

Замечания. Как отмечалось в предыдущем параграфе, в случае S компоненты $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ с нечетной суммой $n + b$ равны нулю. Поэтому суммы (3.55), т. е. Θ -компоненты $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}$, равны нулю при нечетном значении суммы $n + b$. Так как в разложении (3.54) компоненты $\Psi_{m'}^{n\varepsilon y} \equiv 0$ с данными n и m' сумма $n + b$ — четное число, то $b = m', m' + 2, \dots, n$ при четном $n + m'$ и $b = m' + 1, m' + 3, \dots, n$ при нечетном $n + m'$, следовательно,

$$\Psi_{m'}^{n\varepsilon x}(x, \theta) = (-1)^{n+m'} \Psi_{m'}^{n\varepsilon x}(x, \pi - \theta).$$

Приложения и основные результаты. Как известно, шестимерное уравнение Шредингера (1.39) сводится подстановкой (3.49) с $t = x$ или $t = y$ к конечной системе трехмерных уравнений для искомого D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon x}$ или $\Psi_{m'}^{\varepsilon y}$ функции Ψ^ε . При построении дискретных аналогов таких систем предлагается использовать связи (3.63) или (3.68) как дополнительные граничные условия. Таким способом можно улучшить поточечную сходимость вычисляемых D^σ -компонент к точным вблизи точки парного удара.

Основные результаты настоящего раздела — доказательство следующей теоремы существования.

Теорема 3.2. Пусть все центральные парные взаимодействия — степенные ряды (1.31). Тогда в любом из трех случаев (1.32) уравнение Шредингера (1.39) при $x \rightarrow 0$ и $y > 0$ имеет формальные регулярные решения Ψ и Ψ^ε , представимые рядами (3.23), (3.35) и (3.38), (3.57), (3.58) по целым степеням x . Компоненты $\Psi_{b\beta}^n$, $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}$ этих рядов подчинены простым и разрешимым цепочкам алгебраических уравнений (3.32), (3.39) и (3.65), рекуррентных по индексу n и незацепляющихся при данном n по индексу b , индексам a , b или b, m' .

3.4. Разложения решений уравнений Фаддеева. Следуя работе [80], кратко опишем в наиболее общем случае A исключительно простой способ построения разложения регулярных решений дву- и трехмерных уравнений Фаддеева в точке парного удара. Сначала регулярные решения представим бесконечными рядами по целым степеням расстояния между двумя частицами и искомым функциям других трехчастичных координат. Затем эти функции подчиним цепочке алгебраических рекуррентных уравнений. Используя такую цепочку, для исследуемых решений уравнений Фаддеева выведем граничные условия в точке парного удара.

Разложения в бисферическом базисе. Исследуем строение фаддеевской компоненты Ψ_i^ε в бисферическом базисе.

Пусть решение Ψ^ε уравнения Шредингера представлено рядом (3.38) с известными компонентами $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y)$. Докажем, что такое представление порождает аналогичные представления фаддеевской компоненты Ψ_i^ε :

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{ab} \Psi_{iab}^\varepsilon(x, y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \quad (-1)^{a+b} = \sigma, \quad (3.69)$$

и ее бисферических компонент Ψ_{iab}^ε :

$$\Psi_{iab}^\varepsilon(x, y) \equiv \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) | \Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle = \sum_{n=b \geq \mu(\sigma)}^{\infty} x^n \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(y). \quad (3.70)$$

Для этого исследуем только одно уравнение фаддеевской системы (1.52), а именно, уравнение, содержащее в левой части компоненту Ψ_i^ε . В этом уравнении представим операторы V_i , H_0 и решение Ψ^ε уравнения Шредингера соответствующими суммами (1.31), (1.18) и (3.38). Правая часть получившегося уравнения — ряд по степеням x и базисным функциям $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$. Поэтому искомое регулярное решение Ψ_i^ε может быть только рядом того же типа, но пока без дополнительных ограничений на индексы a , b и n :

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \sum_{ab} \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}). \quad (3.71)$$

Заменяем Ψ_i^ε таким рядом. Спроецируем полученное уравнение на функции $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y})$ и выведем для каждой пары $\{a, b\}$ алгебраическую и рекуррентную по индексу n цепочку уравнений

$$\begin{aligned} [b(b+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{iab}^{n+2, \varepsilon}(y) = - [h_a(y) - V^{00}(y)] \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(y) - \\ - q \Psi_{ab}^{n+1, \varepsilon}(y) - \sum_{p=0}^n V_{ip} \Psi_{ab}^{n-p, \varepsilon}(y), \quad n = -2, -1, \dots, \end{aligned} \quad (3.72)$$

где h_a — оператор (3.40).

Пусть в этой цепочке $n < b$ или $b < \mu(\sigma)$, тогда $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y) \equiv 0$ и поэтому $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(y) \equiv 0$. Далее полагаем $n \geq b \geq \mu(\sigma)$. При таких ограничениях пробный ряд (3.71) становится рядом (3.69), а исследуемая цепочка однозначно разрешима: при данных a и b все искомые функции $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}$ с $n > b$ выражаются через неопределенную функцию $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(y)$ с $n = b$ и известные функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$. Следовательно, разложения (3.69) и (3.70) существуют, что и требовалось доказать.

Теперь построим явные асимптотики рядов (3.70) с $b \leq 2$ как подсуммы их трех наиболее медленно убывающих при $x \rightarrow 0$ слагаемых, а затем получим связи при $x = 0$ для производных $\partial_x^n \Psi_{iab}^\varepsilon$. Сначала в уравнениях (3.72)

заменяем функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(y)$ с $n \leq 3$ их явными выражениями, найденными в предыдущем пункте. Решим полученные уравнения и выразим функции $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(y)$ как комбинации неопределенных функций $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}$ с $n = b$, равных производным $(n!)^{-1} \partial_x^n \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y)$ и $(n!)^{-1} \partial_x^n \Psi_{iab}^\varepsilon(x, y)$ при $x = 0$ и $n = b$. Используя такие комбинации, выведем искомые асимптотики рядов (3.70), а именно, асимптотику компоненты $\Psi_{i\ell 0}^\varepsilon$:

$$\begin{aligned} \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(x, y) = & \left\{ 1 + \frac{x^2}{6} (h_\ell - V^{00}) \left[1 + \frac{x^2}{20} (h_\ell - V^{00}) \right] \right\} \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(0, y) + \\ & + \frac{x}{2} \left\{ q + \frac{x}{6} (2V_{i0} + q^2) + \frac{x^2}{72} [q^3 + 2q(4h_\ell + 3V_{i0} - 3V^{00}) + 12V_{i1}] + \right. \\ & \quad \left. + \frac{x^3}{1440} [q^4 + 4q^2(5h_\ell + 3V_{i0} - 3V^{00}) + \right. \\ & \quad \left. + 84qV_{i1} + 24(6V_{i2} + V_{i0}(2h_\ell - V^{00}))] \right\} \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(0, y) + O(x^5), \quad (3.73) \end{aligned}$$

асимптотики компонент Ψ_{ia1}^ε с индексом $a = |\ell \pm (1 - \mu(\sigma))|$:

$$\begin{aligned} \Psi_{ia1}^\varepsilon(x, y) = & x \left[1 + \frac{x^2}{10} (h_a - V^{00}) \right] \partial_x \Psi_{ia1}^\varepsilon(x, y)|_{x=0} + \\ & + \frac{x^2}{4} \left\{ q + \frac{x}{10} (4V_{i0} + q^2) + \frac{x^2}{180} [q^3 + 2q(7h_a + 5V_{i0} - 5V^{00}) + 40V_{i1}] \right\} \times \\ & \times \partial_x \Psi_{a1}^\varepsilon(x, y)|_{x=0} - \frac{x^4}{180\sqrt{3}} qV^{11} C_{\ell 010}^{a0} \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(0, y) + O(x^5) \quad (3.74) \end{aligned}$$

и асимптотики компонент Ψ_{ia2}^ε с индексом $a = |\ell + \mu(\sigma)|, |\ell \pm (2 - \mu(\sigma))|$:

$$\begin{aligned} \Psi_{ia2}^\varepsilon(x, y) = & \frac{x^2}{2} \left[1 + \frac{x^2}{14} (h_a - V^{00}) \right] \partial_x^2 \Psi_{ia2}^\varepsilon(x, y)|_{x=0} + \\ & + \frac{x^3}{12} \left[q + \frac{x}{14} (6V_{i0} + q^2) \right] \partial_x^2 \Psi_{2a}^\varepsilon(x, y)|_{x=0} + O(x^5). \quad (3.75) \end{aligned}$$

Вычислив производные ∂_x^n , $n \leq 4$, этих асимптотик, получаем серию связей при $x = 0$ и $y > 0$ для компонент Ψ_{iab}^ε и Ψ_{ab}^ε . В этой серии при любом q имеются связи

$$\partial_x^b [2\partial_x \Psi_{iab}^\varepsilon(x, y) - q\Psi_{ab}^\varepsilon(x, y)] = 0, \quad b \geq n = 0, 1, 2. \quad (3.76)$$

Из таких связей в случае $q \neq 0$ следуют равенства

$$\partial_x^b \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) = \frac{2}{q} \partial_x^{b+1} \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y), \quad b = 0, 1, 2; \quad x = 0, \quad y > 0.$$

Используя эти равенства, исключим производные $\partial_x^b \Psi_{ab}^\varepsilon$ из других связей исследуемой серии и в результате выведем связи, но уже только для фаддеевских компонент Ψ_{iab}^ε :

$$\begin{aligned}
 & [3q\partial_x^2 - (2V_{i0} + q^2)\partial_x - q(h_\ell - V^{00})] \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(x, y) = 0, \\
 & \partial_x \{12q\partial_x^2 - [q^3 + 2q(4h_\ell + 3V_{i0} - 3V^{00}) + 12V_{i1}]\} \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(x, y) = 0, \\
 & \{60q\partial_x^4 - [q^4 + 4q^2(5h_\ell + 3V_{i0} - 3V^{00}) + 84qV_{i1} + \\
 & + 24(6V_{i2} + V_{i0}(2h_\ell - V^{00}))]\} \partial_x - 12q(h_\ell - V^{00})^2 \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(x, y) = 0, \quad (3.77) \\
 & \partial_x [10q\partial_x^2 - 3(4V_{i0} + q^2)\partial_x - 3(h_a - V^{00})] \Psi_{ia1}^{\varepsilon y}(x, y) = 0, \\
 & \sqrt{3}\partial_x^2 [15q\partial_x^2 - [q^2 + 2q(7h_a + 5V_{i0} - 5V^{00}) + 40V_{i1}]] \Psi_{ia1}^{\varepsilon y}(x, y) = \\
 & = 4qV^{11} C_{\ell 010}^{a0} \partial_x \Psi_{i\ell 0}^{\varepsilon y}(x, y) = 0, \\
 & \partial_x^2 [7q\partial_x^2 - 2\partial_x - 6(h_a - V^{00})] \Psi_{ia2}^\varepsilon(x, y) = 0.
 \end{aligned}$$

В случаях В и С, когда $q = 0$, все связи (3.76) и (3.77) становятся тривиальными: $\partial_x^{b+1} \Psi_{iab}^\varepsilon = 0$, $b = 0, 1, 2$; между компонентами Ψ_{iab}^ε и Ψ_{ab}^ε имеются связи

$$\begin{aligned}
 & (3\partial_x^2 + V^{00} - h_\ell) \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(x, y) = V_{i0} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(x, y), \\
 & \partial_x [5\partial_x^2 - 3(h_a - V^{00})] \Psi_{ia1}^\varepsilon(x, y) = 3V_{i0} \partial_x \Psi_{a1}^\varepsilon(x, y), \quad (3.78) \\
 & \partial_x^2 [7\partial_x^2 - 6(h_a - V^{00})] \Psi_{ia2}^\varepsilon(x, y) = 6\partial_x^2 \Psi_{a2}^\varepsilon(x, y),
 \end{aligned}$$

а компоненты Ψ_{iab}^ε , $b = 0, 1$, удовлетворяют следующим связям:

$$\begin{aligned}
 & [2V_{i0}\partial_x^3 - V_{i1}(3\partial_x^2 + V^{00} - h_\ell)] \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(x, y) = 0, \\
 & \{5V_{i0}\partial_x^4 - 3[6V_{i2} + V_{i0}(2h_\ell - V^{00})]\} \partial_x^2 + \\
 & + (6V_{i2} + V_{i0}h_\ell)(h_\ell - V^{00}) \Psi_{i\ell 0}^\varepsilon(x, y) = 0, \\
 & \partial_x [9\partial_x^3 - 20\partial_x^2 + 12(h_a - V^{00})] \Psi_{ia1}^\varepsilon(x, y) = 0.
 \end{aligned} \quad (3.79)$$

Разложения в D^σ -базисе. Теперь исследуем строение фаддеевской компоненты Ψ_i^ε в D^σ -базисе.

Напомним, что разложение решения Ψ^ε уравнения Шредингера по D^σ -базису — конечная сумма (3.49), а вследствие представлений (3.57) и (3.58) все D^σ -компоненты $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$ этой суммы в случае $t = x$ являются рядами

$$\Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = \sum_{n=m'}^{\infty} x^n \sum_{a=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} \Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(y) \Theta_{am'}(u), \quad (3.80)$$

а в случае $t = y$ — рядами

$$\Psi_{m'}^{\varepsilon y}(x, y, \theta) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} x^n \sum_{b=m'}^n \Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}(y) \Theta_{bm'}(u). \quad (3.81)$$

Пусть решение Ψ^ε уравнения Шредингера представлено рядом (3.49) с D^σ -компонентами (3.80) или рядом (3.49) с D^σ -компонентами (3.81), а все компоненты этих рядов $\Psi_{im'}^{n\varepsilon t}(y)$, где $t = x$ или $t = y$, известны. Используя те же приемы, что и при доказательстве формул (3.69), нетрудно показать, что обоим ($t = x, y$) представлениям функции Ψ^ε отвечают аналогичные по строению разложения фаддеевской компоненты Ψ_i^ε и разложения ее D^σ -компонент $\Psi_{im'}^{\varepsilon t}$: при $t = x$

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) \Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta), \quad (3.82)$$

$$\Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} x^n \sum_{a=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} \Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}(y) \Theta_{am'}(u), \quad (3.83)$$

а в случае $t = y$

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^y) \Psi_{im'}^{\varepsilon y}(x, y, \theta), \quad (3.84)$$

$$\Psi_{im'}^{\varepsilon y}(x, y, \theta) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} x^n \sum_{b=m'}^n \Psi_{ibm'}^{n\varepsilon y}(y) \Theta_{bm'}(u). \quad (3.85)$$

Вывод уравнений для неизвестных Θ -компонент $\Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}$ и $\Psi_{ibm'}^{n\varepsilon y}$ из уравнения (1.52), содержащего в левой части компоненту Ψ_i^ε , несложен. Сначала V_i , H_0 и Ψ^ε заменяются соответствующими суммами (1.31), (1.18) и (3.49),

(3.80) или (3.49), (3.81), а Ψ_i^ε — искомым рядом (3.82) или (3.84). Затем полученные уравнения проецируются сначала на функции $D_{mm'}^{\ell\sigma^*}(\omega^t)$ с $t = x$ или $t = y$, а затем на соответствующие базисные функции $\Theta_{am'}(u)$ или $\Theta_{bm'}(u)$. Все правила для такого последовательного проецирования подробно описаны в работе [79].

В итоге для искомых Θ -компонент $\Psi_{iam'}^{n\varepsilon t}(y)$, $t = x, y$, получаются рекуррентные по индексу n цепочки алгебраических уравнений. В случае $t = x$ при любых $n > \mu(\sigma)$ и m' уравнения цепочки для неизвестных $\Psi_{iam''}^{n\varepsilon x}(y)$ зацепляются по индексу $m'' = m', m' \pm 1$, и поэтому цепочка неудобна для ее анализа и далее не рассматривается. В случае $t = y$ для каждого $m' = \mu(\sigma), \mu(\sigma) + 1, \dots, \ell$ получается простая рекуррентная ($n = -2, -1, \dots$) цепочка

$$\begin{aligned} & [b(b+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{ibm'}^{n+2,\varepsilon y}(y) = \\ & = -q\Psi_{bm'}^{n+1,\varepsilon y}(y) - \sum_{p=0}^n V_{ip} \Psi_{b'm'}^{n-p,\varepsilon y}(y) + \\ & + y^{-2} \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^b \Psi_{ibm''}^{n\varepsilon y}(y) - [h_{bm'}^y(y) - V^{00}(y)] \Psi_{ibm'}^{n\varepsilon y}(y), \quad (3.86) \end{aligned}$$

где $\Psi_{ibm'}^{n\varepsilon x} \equiv 0$ при $n < b$ и при $b < m'$, $h_{bm'}^y(y)$ — дифференциальный оператор:

$$h_{bm'}^y(y) \equiv -\frac{1}{y^2} \partial_y (y^2 \partial_y) + \frac{1}{y^2} [\ell(\ell+1) + b(b+1) - 2m'^2] + V^{00}(y) - E,$$

а коэффициенты $\gamma_{m'm''}^{\ell\sigma}$ и $q_{m'm''}^b$ вычисляются по формулам (1.23) и (1.3).

Решения $\Psi_{ibm'}^{n+2,\varepsilon y}$ уравнений (3.86) удобно искать в порядке возрастания ($n = -2, -1, \dots$) индекса n и убывания ($b = n, n-1, \dots$) индекса b при каждом n . Уравнение с $b = n+2$ имеет вид $0 \Psi_{ibm'}^{n+2,\varepsilon y} = 0$, поэтому $\Psi_{im'}^{n+2,\varepsilon y}(y) = g_{im'}^{n+2,y}(y)$, где $g_{im'}^{n+2,y}(y)$ — некоторая нетривиальная функция. Исключение составляет случай $\sigma = (-1)^{\ell+1}$, $m' = 0$, когда согласно (3.85) $\Psi_{im'}^{n\varepsilon y} = 0$ при всех n . Поэтому в этом случае полагаем $g_{i0}^{ny}(y) \equiv 0$ при всех n .

Теперь построим явные асимптотики рядов (3.85) с $m' \leq 2$ в виде подсумм их трех наиболее медленно убывающих при $x \rightarrow 0$ слагаемых и выведем связи для Θ -компонент $\Psi_{ibm'}^{\varepsilon y}$. Сначала в уравнениях (3.86) с $m' \leq 2$ заменим функции $\Psi_{bm'}^{n\varepsilon}(y)$ с $n \leq 3$ их явными выражениями, найденными в работе [79]. Затем решим полученные уравнения и выразим решения $\Psi_{ibm'}^{n\varepsilon y}(y)$ через неопределенные функции $f_{m'}^{ny} \equiv \Psi_{bm'}^{n\varepsilon y}$ и $g_{im'}^{ny} \equiv$

$\Psi_{ibm'}^{n\epsilon y}$, равные производным $(n!)^{-1}\partial_x^n \Psi_{m'}^{\epsilon y}(x, y)$ и $(n!)^{-1}\partial_x^n \Psi_{im'}^{\epsilon y}(x, y)$ при $x = 0$ и $n = b$. Используя полученные выражения, представим асимптотики рядов (3.85) с $m' \leq 2$, т. е. асимптотики D^σ -компонент $\Psi_{im'}^{\epsilon y}$, $m' \leq 2$, в обоих случаях $\sigma = \pm(-1)^\ell$ в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{i0}^{\epsilon y}(x, y, \theta) = & \left\{ g_{i0}^{0y} + \frac{qx}{2} f_0^{0y} + \frac{x^2}{12} [(2V_{i0} + q^2) f_0^{0y} + 2(h_{00}^y - V^{00}) g_{i0}^{0y}] + \right. \\ & \left. + \frac{x^3}{144} [q^3 + 2q(4h_{00}^y + 3V_{i0} - 3V^{00}) + 12V_{i1}] f_0^{0y} \right\} \Theta_{00}(u) + \\ & + x \left[g_{i0}^{1y} + \frac{qx}{4} f_0^{1y} + \frac{x^2}{40} (4V_{i0} + q^2) f_0^{1y} \right] \Theta_{10}(u) + \\ & + \frac{x^3}{10y^2} \left\{ y^2 [h_{10}^y - V^{00}] g_{i0}^{1y} - [2\ell(\ell + 1)(1 + \sigma(-1)^\ell)]^{1/2} g_{i1}^{1y} \right\} \Theta_{10}(u) + \\ & + x^2 \left[g_{i1}^{2y} + \frac{qx}{6} f_0^{2y} \right] \Theta_{20}(u) + x^3 g_{i0}^{3y} \Theta_{30}(u) + O(x^4); \quad (3.87) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{i1}^{\epsilon y}(x, y, \theta) = & x \left[g_{i1}^{1y} + \frac{qx}{4} f_1^{1y} + \frac{x^2}{40} (4V_{i0} + q^2) f_1^{1y} \right] \Theta_{11}(u) + \\ & + \frac{x^3}{10y^2} \left\{ y^2 (h_{11}^y - V^{00}) g_{i1}^{1y} - 2[\ell(\ell + 1)]^{1/2} g_{i0}^{1y} \right\} \Theta_{11}(u) + \\ & + x^2 \left[g_{i1}^{2y} + \frac{qx}{6} f_1^{2y} \right] \Theta_{21}(u) + x^3 g_{i1}^{3y} \Theta_{31}(u) + O(x^4); \end{aligned}$$

$$\Psi_{i2}^{\epsilon y}(x, y, \theta) = x^2 \left[g_{i2}^{2y} + \frac{qx}{6} f_2^{2y} \right] \Theta_{22}(u) + x^3 g_{i2}^{3y} \Theta_{32}(u) + O(x^4),$$

где $f_{m'}^{ny}(y), g_{im'}^{ny}(y)$ — произвольные функции, но $f_0^{ny}, g_{i0}^{ny} \equiv 0$ при $\sigma = (-1)^{\ell+1}$.

Теперь найдем производные ∂_x^n полученных асимптотик и таким образом выведем связи при $x = 0, y > 0$ для проекций $\partial_x^n \Psi_{ibm'}^{\epsilon y} \equiv (n!) \Psi_{ibm'}^{n\epsilon y}$ производных $\partial_x^n \Psi_{m'}^{\epsilon y}$ на функции $\Theta_{bm'}(u)$. При $x = 0$ и $q \neq 0$ проекции $\Psi_{ibm'}^{\epsilon y}$ фаддеевской компоненты Ψ_i^ϵ связаны с проекциями $\Psi_{bm'}^{\epsilon y}$ функции Ψ^ϵ соотношениями

$$\partial_x^b [2\partial_x \Psi_{ibm'}^{\epsilon y}(x, y) - q\Psi_{bm'}^{\epsilon y}(x, y)] = 0, \quad b \geq m' = 0, 1, 2, \quad (3.88)$$

а для проекций $\Psi_{ibm'}^{\varepsilon y}$, имеются связи

$$\begin{aligned}
 & [3q\partial_x^2 - (2V_{i0} + q^2)\partial_x - q(h_{00}^y - V^{00})] \Psi_{i00}^{\varepsilon y}(x, y) = 0, \\
 & \partial_x \{12q\partial_x^2 - [q^3 + 2q(4h_{00}^y + 3V_{i0} - 3V^{00}) + 12V_{i1}]\} \Psi_{i00}^{\varepsilon y}(x, y) = 0, \\
 & \partial_x [10q\partial_x^2 - 3(4V_{i0} + q^2)\partial_x - 6q(h_{10}^y - V^{00})] \Psi_{i10}^{\varepsilon y}(x, y) = \quad (3.89) \\
 & \quad = -\frac{6q}{y^2} [2\ell(\ell + 1)(1 + \sigma(-1)^\ell)]^{1/2} \partial_x \Psi_{i11}^{\varepsilon y}(x, y), \\
 & \partial_x [10q\partial_x^2 - 3(4V_{i0} + q^2)\partial_x - 6q(h_{11}^y - V^{00})] \Psi_{i11}^{\varepsilon y}(x, y) = \\
 & \quad = -12q[\ell(\ell + 1)]^{1/2} \partial_x \Psi_{i10}^{\varepsilon y}(x, y).
 \end{aligned}$$

В случаях В и С, когда $q = 0$, все эти связи вырождаются в равенства

$$\partial_x^{a+1} \Psi_{iam'}^{\varepsilon y}(x, y)|_{x=0} = 0, \quad a = 0, 1,$$

и, кроме того, имеются связи

$$\begin{aligned}
 & [3\partial_x^2 - (h_{00}^y - V^{00})] \Psi_{i00}^{\varepsilon}(x, y) = V_{i0} \Psi_{00}^{\varepsilon y}(x, y); \\
 & \{2V_{i0}\partial_x^3 - V_{i1} [3\partial_x^2 - (h_{00}^y - V^{00})]\} \Psi_{i00}^{\varepsilon y}(x, y) = 0; \\
 & \partial_x [5\partial_x^2 - 3(h_{10}^y - V^{00})] \Psi_{i10}^{\varepsilon y}(x, y) + \quad (3.90) \\
 & \quad + \frac{3}{y^2} [2\ell(\ell + 1)(1 + \sigma(-1)^\ell)]^{1/2} \partial_x \Psi_{i11}^{\varepsilon y}(x, y) = 3V_{i0} \partial_x \Psi_{10}^{\varepsilon}(x, y), \\
 & \partial_x [5\partial_x^2 - 3(h_{11}^y - V^{00})] \Psi_{i11}^{\varepsilon y}(x, y) + \\
 & \quad + \frac{6}{y^2} [\ell(\ell + 1)]^{1/2} \partial_x \Psi_{i10}^{\varepsilon y}(x, y) = 3V_{i0} \partial_x \Psi_{11}^{\varepsilon}(x, y).
 \end{aligned}$$

Замечания. Выше было показано, как построить разложения одной фаддеевской компоненты Ψ_i^{ε} и ее парциальных компонент Ψ_{iab}^{ε} и $\Psi_{im'}^{\varepsilon y}$ вблизи точки парного удара двух выбранных частиц p_j и p_k . Полагая последовательно $i = 1, 2, 3$ и повторяя каждый раз все построения, нетрудно найти разложения всех парциальных компонент Ψ_{iab}^{ε} и $\Psi_{im'}^{\varepsilon y}$, $i = 1, 2, 3$, вблизи

точек столкновения соответствующих частиц p_j и p_k . Таким образом завершается построение разложений решений $\{\Psi_{jab}^\varepsilon\}$ и $\{\Psi_{jm'}^{\varepsilon y}\}$ дву- и трехмерных уравнений Фаддеева вблизи любой из трех точек парных ударов.

Приложения и основные результаты. Сравнительный анализ дискретных сплайн-аналогов двумерных уравнений Фаддеева дан в обзоре [83]. Во все такие аналоги несложно включить связи (3.76)–(3.79), чтобы улучшить поточечную сходимость вычисляемого решения к точному решению $\{\Psi_{jab}^\varepsilon\}$ вблизи точки парного удара. Пример такого включения дан в [74].

Как было показано выше, выбор системы S^y в качестве «подвижной» является предпочтительным, потому что при таком выборе фаддеевские D^σ -компоненты $\Psi_{im'}^{\varepsilon y}$, $m' \geq \mu(\sigma)$, вблизи точки парного удара частиц p_j и p_k устроены довольно просто. Поэтому для оптимизации численных расчетов предлагается использовать выведенные в [69] трехмерные уравнения Фаддеева в случае $t = y$. Доказанные связи (3.88)–(3.90) стоит включать в дискретные сплайн-аналоги таких уравнений для ускорения поточечной сходимости вычисляемых фаддеевских D^σ -компонент $\Psi_{im'}^{\varepsilon y}$ к точным вблизи соответствующих ($i = 1, 2, 3$) точек парных соударений.

Основной итог данного выше анализа уравнений Фаддеева вблизи точки парного удара — доказательство следующей теоремы соответствия.

Теорема 3.3. *Если все центральные парные взаимодействия — ряды (1.31), то при $x \rightarrow 0$ и $y > 0$ представлениям (3.35), (3.37) и (3.49), (3.52), (3.54) формального решения $\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ уравнения Шредингера (1.39) соответствуют аналогичные по строению разложения (3.69)–(3.70) и (3.82)–(3.85) фаддеевской компоненты $\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ этого решения. Компоненты $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{ibm'}^{n\varepsilon y}$ этих разложений подчинены разрешимым в явном виде рекуррентным цепочкам алгебраических уравнений (3.72) и (3.86).*

4. РАЗЛОЖЕНИЯ В ПРЕДЕЛЕ ЛИНЕЙНОЙ КОНФИГУРАЦИИ

Настоящий раздел посвящен анализу строения регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева в пределе линейной конфигурации трех частиц. В этом пределе исследуются шестимерные уравнения Шредингера (1.39) и Фаддеева (1.52) для системы трех частиц с центральными парными взаимодействиями (1.31) более общего вида, чем кулоновские. Регулярные общие и частные решения таких уравнений представляются 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 (1.5) и бисферическими (1.6) гармониками или симметризованными D -функциями Вигнера (1.9), сводится к решению простых алгебраических рекуррентных

уравнений. Для проекций частных решений Ψ^ε и $\{\Psi_1^\varepsilon, \Psi_2^\varepsilon, \Psi_3^\varepsilon\}$ уравнений Шредингера и Фаддеева на угловые базисные функции выводятся граничные условия в пределе линейной конфигурации трех частиц.

Впервые предложенные в недавней работе [81] способы построения разложений общего и частного решений Ψ и Ψ^ε уравнений Шредингера и фаддеевских компонент таких решений при $x > 0$ и $y \rightarrow 0$ принципиально ничем не отличаются от использованных для вывода разложений при $x \rightarrow 0$ и $y > 0$ и реализуются по аналогичным схемам. Поэтому ниже приводятся только основные формулы без их подробного доказательства. Для такого краткого изложения имеется еще одна простая причина. Чтобы ее пояснить в виде замечаний, завершающих следующий пункт, выведем в нем разложения парных и полного взаимодействий.

4.1. Разложения парных и полного взаимодействий. Пусть потенциалы V_k , $k \neq i$, — ряды (1.31). Потенциал $V_i(x)$ не зависит от y , поэтому никакое его разложение далее не потребуется. Вместо (3.13) используем представление

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | x_k \rangle = x_k(x, y, u) = \frac{c_{ki} x}{(1 - 2uv + v^2)^{-1/2}}, \quad v \equiv \frac{-y s_{ki}}{c_{ki} x}, \quad (4.1)$$

поэтому вместо рядов (3.14) для слагаемых q_k/x_k сумм (1.31) получаем

$$\frac{q_k}{x_k} = \frac{q_k}{c_{ki} x} \sum_{n=0}^{\infty} \left(-\frac{s_{ki} y}{c_{ki} x} \right)^n P_n(u), \quad k \neq i, \quad (4.2)$$

и выводим формулу дифференцирования

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

Благодаря ей ряд Тейлора для \bar{V}_k , $k \neq i$, сводится к аналогу суммы (3.17)

$$\bar{V}_k(x_k(x, y, u)) = \sum_{p=0}^{\infty} y^p \sum_{s=0}^p \bar{V}_k^{ps}(c_{ki} x) P_s(u), \quad (-1)^{p+s} = 1. \quad (4.3)$$

Вследствие (4.2), (4.3) полное взаимодействие $V = V_1 + V_2 + V_3$ в любом из трех случаев (1.32) — двойной ряд того же типа, что и сумма (3.19)

$$V(x, y, u) = V(x, -y, -u) = V^{00}(x) + \sum_{p=1}^{\infty} y^p \sum_{s=0}^p V^{ps}(x) P_s(u), \quad (4.4)$$

$$V^{ps}(x) \equiv \delta_{ps} \sum_{k \neq i} \frac{q_k}{c_{ki} x} \left(-\frac{s_{ki}}{c_{ki} x} \right)^p + \sum_{k \neq i} \bar{V}_k^{ps}(x), \quad (-1)^{p+s} = 0.$$

В частности, этот ряд не имеет сингулярных при $y \rightarrow 0$ слагаемых, из-за правила отбора $(-1)^{p+s} = 1$ этот ряд инвариантен относительно замены $y \rightarrow -y$, $u \rightarrow -u$, а его «коэффициенты» $V^{ps}(x)$ с $p \leq 2$ таковы:

$$V^{00}(x) = V_i(x) + \sum_{k \neq i} \left[\frac{q_k}{c_{ki} x} + \bar{V}_k(c_{ki} x) \right];$$

$$V^{10}(x) \equiv 0, \quad V^{11}(x) = \sum_{k \neq i} s_{ki} \left[\bar{V}'_k - \frac{q_k}{(c_{ki} x)^2} \right];$$

$$V^{20}(x) = \frac{1}{6} \sum_{k \neq i} s_{ki}^2 \left[\bar{V}''_k + \frac{2\bar{V}'_k}{c_{ki} x} \right],$$

$$V^{22}(x) = \frac{1}{3} \sum_{k \neq i} s_{ki}^2 \left[\bar{V}''_k - \frac{\bar{V}'_k}{c_{ki} x} + \frac{3q_k}{(c_{ki} x)^3} \right],$$

где \bar{V}'_k и \bar{V}''_k — производные по x_k в точке $x_k = c_{ki} x$, т. е. при $y = 0$. Из-за упомянутых свойств ряда (4.4) компоненты всех обсуждаемых ниже разложений подчинятся простым правилам отбора.

Замечания. Предел линейной конфигурации трех частиц ($x > 0, y \rightarrow 0$) получается из предела парного удара ($x \rightarrow 0, y > 0$) заменой $\mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{y}$. При такой замене свободный гамильтониан $H_0(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ не изменяется. Рассмотрим разложение (3.18) полного взаимодействия V вблизи точки парного удара в случае С, когда $q = 0$ и $V_{i1} = 0$. После замен $c_{ki} \leftrightarrow s_{ki}$, $x \leftrightarrow y$ такое разложение примет вид разложения (4.4) полного взаимодействия V в пределе линейной конфигурации трех частиц. Следовательно, уравнение Шредингера в пределе ($x > 0, y \rightarrow 0$) получается из уравнения Шредингера в пределе ($x \rightarrow 0, y > 0$) подстановкой $q, V_{i1} = 0$ и заменами $c_{ki} \leftrightarrow s_{ki}$, $\mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{y}$. В бисферических гармониках (1.6) при такой замене индексы a и b меняются местами, а подвижная система координат S^x становится системой S^y и наоборот. Поэтому все разложения решений уравнений Шредингера и Фаддеева в исследуемом ниже пределе линейной конфигурации трех частиц, все уравнения для неизвестных функций таких разложений, все асимптотики и связи несложно получить из соответствующих по смыслу формул предыдущего раздела совокупностью замен

$$\mathbf{x} \leftrightarrow \mathbf{y}, \quad c_{ki} \leftrightarrow s_{ki}, \quad q \rightarrow 0, \quad V_{i1} \rightarrow 0, \quad a \leftrightarrow b, \quad a' \leftrightarrow b', \quad S^x \leftrightarrow S^y.$$

4.2. Разложения решений уравнения Шредингера. Построим разложения общего, а затем частного решений Ψ и Ψ^ε шестимерного уравнения Шредингера (1.39) в наиболее общем случае А.

Разложение общего решения. Исследуем общее регулярное решение Ψ уравнения Шредингера (1.39). Вместо (3.18) и (3.25) используем ряд (4.4) и представления

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = -\partial_y^2 - \frac{2}{y}\partial_y + \frac{1_y^2}{y^2} + \sum_{p=1}^{\infty} y^p \sum_{s=0}^p V^{ps}(x) P_s(u) + h(\mathbf{x}) + E, \quad (4.5)$$

$$h(\mathbf{x}) \equiv -\partial_x^2 - \frac{2}{x}\partial_x + \frac{1_x^2}{x^2} + V^{00}(x) - E,$$

а вместо представлений (3.23) и (3.24) для Ψ предполагаем разложения

$$\Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n \Psi^n(\mathbf{x}, \hat{y}), \quad (4.6)$$

$$\Psi^n(\mathbf{x}, \hat{y}) = \sum_{a=0}^n \sum_{\alpha=-a}^a \Psi_{a\alpha}^n(\mathbf{x}) Y_{a\alpha}(\hat{y}), \quad \Psi_{a\alpha}^n(\mathbf{x}) \equiv \langle Y_{a\alpha}(\hat{y}) | \Psi(\mathbf{x}, \hat{y}) \rangle. \quad (4.7)$$

Используя (4.5)–(4.7), выведем из уравнения Шредингера (1.39) аналог цепочки (3.32), а именно цепочку рекуррентных по n уравнений

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{a\alpha}^{n+2}(\mathbf{x}) = \\ = -h(\mathbf{x}) \Psi_{a\alpha}^n(\mathbf{x}) - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s \left[\frac{4\pi}{2s+1} \right]^{1/2} \times \\ \times V^{ps}(x) \sum_{a'=0}^{n-p} \sum_{\alpha'=-a'}^{a'} C_{s0a0}^{a'0} C_{s\beta a'\alpha'}^{a\alpha} Y_{s\beta}^*(\hat{x}) \Psi_{a'\alpha'}^{n-p}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (4.8)$$

где $n = -2, -1, \dots$ и по определению $\Psi_{a\alpha}^n \equiv 0$ при $n < 0$. В этой цепочке $V^{ps} \equiv 0$, если $(p+s)$ нечетное и $C_{s0a0}^{a'0} = 0$, если $(a'+s+a)$ нечетное. Поэтому несложно доказать по индукции следующие утверждения $\Psi_{a\alpha}^n \equiv 0$, если $a > n$ или $(n+a)$ нечетное, функции $\Psi_{a\alpha}^n$ с $a = n$ — произвольные, а все остальные функции $\Psi_{a\alpha}^n \equiv 0$ с $a < n$ выражаются явно через них. Например, аналоги формул (3.33), (3.34) — довольно простые выражения

$$\begin{aligned} \Psi_{1\alpha}^2(\mathbf{x}) = 0, \quad \Psi_{00}^2(\mathbf{x}) = \frac{1}{6} h(\mathbf{x}) \Psi_{00}^0(\mathbf{x}); \\ \Psi_{2\alpha}^3(\mathbf{x}) \equiv 0, \quad \Psi_{00}^3(\mathbf{x}) = 0, \\ \Psi_{1\alpha}^3(\mathbf{x}) = \frac{1}{10} h(\mathbf{x}) \Psi_{1\alpha}^1(\mathbf{x}) + \frac{\sqrt{\pi}}{15} V^{11}(x) \Psi_{00}^0(\mathbf{x}) Y_{1\alpha}^*(\hat{x}). \end{aligned} \quad (4.9)$$

Разложения частного регулярного решения в бисферическом базисе. Построим разложения бисферических компонент Ψ_{ab}^ε ряда (1.40) частного

решения Ψ^ε . Используя проектор (1.15), доказываем, что образ $\Psi^\varepsilon = \Pi^\varepsilon \Psi$ ряда (4.6) — степенной ряд

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \Psi^{n\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}), \quad \Psi^{n\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}) \equiv \Pi^\varepsilon \Psi^n(\hat{x}, \mathbf{y}), \quad (4.10)$$

в котором вследствие формул (4.7) функции $\Psi^{n\varepsilon}$ — конечные суммы

$$\begin{aligned} \Psi^{n\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}) &= \sum_{a=\mu(\sigma)}^n \sum_b \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) &\equiv \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) | \Psi^n(\mathbf{x}, \hat{y}) \rangle, \end{aligned} \quad (4.11)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) &= \sum_{\beta=-b}^b C_{\alpha\alpha b\beta}^{\ell m} \langle Y_{\alpha\alpha}(\hat{y}) Y_{b\beta}(\hat{x}) | \Psi^n(\mathbf{x}, \hat{y}) \rangle = \\ &= \sum_{\beta=-b}^b C_{\alpha\alpha b\beta}^{\ell m} \langle Y_{b\beta}(\hat{x}) | \Psi_{\alpha\alpha}^n(\mathbf{x}) \rangle, \end{aligned} \quad (4.12)$$

где $\Psi_{ab}^{n\varepsilon} \equiv 0$ при нечетном $(n+a)$, так как в этом случае $\Psi_{\alpha\alpha}^{n\varepsilon} \equiv 0$.

Теперь образ $\Psi^\varepsilon = \Pi^\varepsilon \Psi$ ряда (4.6) представим в виде разложения по бисферическому базису (1.6):

$$\begin{aligned} \Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sum_{ab} \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) &\equiv \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) | \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle = \sum_{n=a \geq \mu(\sigma)}^{\infty} y^n \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x), \quad (-1)^{n+a} = 1, \end{aligned} \quad (4.13)$$

и выведем для искомым компонент Ψ_{ab}^n аналог рекуррентной цепочки (3.39):

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{ab}^{n+2, \varepsilon}(x) &= -h_b(x) \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) - \\ &- (-1)^{a+b-\ell} \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s V^{ps}(x) \sum_{a'=0}^{n-p} (2a'+1)^{1/2} \times \\ &\times \sum_{b'=|\ell-a'|}^{\ell+a} (2b'+1)^{1/2} \times C_{s0a'0}^{a0} C_{s0b'0}^{b0} \left\{ \begin{matrix} a & a' & s \\ b' & b & \ell \end{matrix} \right\} \Psi_{a'b'}^{n-p, \varepsilon}(x), \\ &n = -2, -1, \dots; \quad a = 0, 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (4.14)$$

где h_b — диагональный матричный элемент оператора $h(\mathbf{x})$ в базисе (1.6):

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m} | h(\mathbf{x}) | \mathcal{Y}_{a'b'}^{\ell m} \rangle &= \delta_{aa'} \delta_{bb'} h_b(x), \\ h_b(x) &\equiv -\partial_x^2 - (2/x)\partial_x + b(b+1)/x^2 + V^{00}(x) - E, \end{aligned} \quad (4.15)$$

суммы $(n+b)$ и $(\ell + \mu(\sigma))$ — четные или нечетные одновременно, $n \geq a \geq 0$ и $(n+a)$ — четное, а функции $\Psi_{ab}^{n\epsilon x}$ с иными индексами тождественно равны нулю. При $n = a$ цепочке (4.14) удовлетворяют произвольные функции $\Psi_{ab}^{n\epsilon x}$, через которые выражаются все остальные функции $\Psi_{ab}^{n\epsilon x}$ с $a < n$.

Пусть $\Psi_{ab}^{n\epsilon} \neq 0$ при $n = a \leq 4$. Выразив решения $\Psi_{ab}^{n\epsilon}$, $n \leq 4$, цепочки (4.14) через неизвестные функции $\partial_y^n \Psi_{ab}^{\epsilon} |_{y=0} = (n!) \Psi_{ab}^{n\epsilon}$ с $a = n$, доказываем асимптотику компоненты $\Psi_{0\ell}^{\epsilon}$:

$$\begin{aligned} \Psi_{0\ell}^{\epsilon}(x, y) &= \left\{ 1 + \frac{y^2}{6} h_{\ell}(x) + \frac{y^4}{120} [h_{\ell}^2(x) + 6V^{20}(x)] \right\} \Psi_{\ell 0}^{\epsilon}(x, 0) - \\ &- \frac{\sqrt{3}}{60} y^4 V^{11}(x) \sum_{b'=|\ell \pm 1|} C_{\ell 0 1 0}^{b' 0} \partial_y \Psi_{1b'}^{\epsilon}(x, y) |_{y=0} + O(y^6), \end{aligned} \quad (4.16)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{1b}^{\epsilon}(x, y) &= y \left[1 + \frac{y^2}{10} h_b(x) \right] \partial_y \Psi_{1b}^{\epsilon}(x, y) |_{y=0} - \\ &- \frac{\sqrt{3}}{30} y^3 V^{11}(x) C_{\ell 0 1 0}^{b 0} \Psi_{0\ell}^{\epsilon}(x, 0) + O(y^5) \end{aligned} \quad (4.17)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{2b}^{\epsilon}(x, y) &= \frac{y^2}{2} \left[1 + \frac{y^2}{14} h_b(x) \right] \partial_y^2 \Psi_{2b}^{\epsilon}(x, y) |_{y=0} - \frac{(-1)^{\ell+b}}{7\sqrt{2}} y^4 V^{11}(x) \times \\ &\times \sum_{b'=|b \pm 1|} (2b' + 1)^{1/2} C_{b' 0 1 0}^{b 0} \left\{ \begin{matrix} 2 & 1 & 1 \\ b' & b & \ell \end{matrix} \right\} \partial_y \Psi_{1b'}^{\epsilon}(x, y) |_{y=0} + \\ &+ \left[\frac{y^4}{14\sqrt{5}} \right] V^{22}(x) C_{\ell 0 2 0}^{b 0} \Psi_{0\ell}^{\epsilon}(x, 0) + O(y^6). \end{aligned} \quad (4.18)$$

Затем находим связи при $y = 0$ и $x > 0$: для компоненты $\Psi_{\ell 0}^{\epsilon}$

$$[3\partial_y^2 - h_{\ell}(x)] \Psi_{0\ell}^{\epsilon}(x, y) = 0, \quad (4.19)$$

$$[5\partial_y^4 - h_{\ell}^2(x) - 6V^{20}(x)] \Psi_{0\ell}^{\epsilon}(x, y) = -2\sqrt{3}V^{11}(x) \sum_{b'=|\ell \pm 1|} C_{\ell 0 1 0}^{b' 0} \partial_y \Psi_{1b'}^{\epsilon}(x, y),$$

для компонент Ψ_{1b}^ε с индексом $b = |\ell \pm (1 - \mu(\sigma))|$

$$\partial_y [5\partial_y^2 - 3h_b(x)] \Psi_{1b}^\varepsilon(x, y) = -\sqrt{3} V^{11}(x) C_{\ell 010}^{b0} \Psi_{0\ell}^\varepsilon(x, y) \quad (4.20)$$

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

$$\begin{aligned} & \sqrt{10} \partial_y^2 [7\partial_x^2 - 6h_b(x)] \Psi_{2b}^\varepsilon(x, y) = \\ & = 12\sqrt{2} V^{22}(x) C_{\ell 020}^{b0} \Psi_{0\ell}^\varepsilon(x, y) - 24\sqrt{5} (-1)^{\ell+b} V^{11}(x) \times \\ & \times \sum_{b'=|b\pm 1|} (2b'+1)^{1/2} C_{b'010}^{b0} \left\{ \begin{matrix} 2 & 1 & 1 \\ b' & b & \ell \end{matrix} \right\} \partial_y \Psi_{1b'}^\varepsilon(x, y). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Замечания. Укажем важные следствия правила отбора $(-1)^{n+a} = 1$ для ряда (4.13). Каждая его компонента Ψ_{ab}^ε — степенной ряд по четным (нечетным) степеням аргумента y , если a четное (нечетное), а $\Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) = O(y^a)$ при $y \rightarrow 0$ и $x > 0$. Поэтому все компоненты Ψ_{ab}^ε подчиняются при $y = 0$ и $x > 0$ тривиальным связям: $\partial_y^n \Psi_{ab}^\varepsilon = 0$, где n — четное, a — нечетное или наоборот. По той же причине и в силу равенств (4.10)–(4.13) верно представление

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \sum_{a=\mu(\sigma)}^n \sum_b \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \quad (-1)^{n+a} = 1, \quad (4.22)$$

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

Разложения частного регулярного решения в D^σ -базисе. Получим разложения D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$ ряда (3.49). Действуя проектором (1.17) на бисферический ряд (4.11) и применяя формулы (1.12), выводим аналоги представлений (3.50)–(3.55), а именно доказываем, что

$$\Psi_{m'}^{\varepsilon t}(x, y, \theta) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n \Psi_{m'}^{n\varepsilon t}(x, \theta), \quad m' = \mu(\sigma), \dots, \ell, \quad t = x, y, \quad (4.23)$$

где при $t = x$ индекс $n \geq m'$, а $\Psi_{m'}^{n\varepsilon t}$ — конечная сумма по индексу a :

$$\Psi_{m'}^{n\varepsilon x}(x, \theta) = \sum_{a=m'}^n \Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(x) \Theta_{am'}(u), \quad (-1)^{n+a} = 1, \quad (4.24)$$

с Θ -компонентами

$$\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(x) \equiv \langle \Theta_{am'}(u) | \Psi_{m'}^{n\varepsilon x}(x, \theta) \rangle = \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^{\ell+a-\mu(\sigma)} T_{ab}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x), \quad (4.25)$$

а при $t = y$ — конечная сумма индексу b :

$$\Psi_{m'}^{n\epsilon y}(x, \theta) = \sum_{b=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} \Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(x) \Theta_{bm'}(u), \quad (4.26)$$

с Θ -компонентами

$$\Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(x) \equiv \langle \Theta_{bm'}(u) | \Psi_{m'}^{n\epsilon y}(x, \theta) \rangle = \sum_{a=|\ell-b+\mu(\sigma)|}^n (-1)^{m'} T_{ba}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n\epsilon}(x). \quad (4.27)$$

Рассмотрим суммы (4.24) и (4.25). Пусть $n = a$, тогда все компоненты $\Psi_{ab}^{n\epsilon}$ суммы (4.25) — неопределенные функции, значит, и эта сумма, т. е. функция $\Psi_{am'}^{n\epsilon x}$ с $a = n$, является неопределенной функцией аргумента x . Далее, в суммах (4.24) и (4.25) всегда $a \geq m'$, потому что согласно определению (1.12) $T_{ab}^{\ell m'} = 0$ при $a < m'$. По той же причине $\Psi_{am'}^{n\epsilon x} \equiv 0$, если $m' > a$. Так как $n + a$ — четное, то в сумме (4.24) $a = m', m' + 2, \dots, n$ при четном $n + m'$ и $a = m' + 1, m' + 3, \dots, n$ при нечетном $n + m'$. В сумме (4.25) $\Psi_{ab}^{n\epsilon} \equiv 0$, если $a > n$, поэтому $\Psi_{am'}^{n\epsilon x} \equiv 0$ при $a > n$, а в суммах (4.24) и (4.25) индексы таковы, что $n \geq a \geq m'$. Следовательно, таким же ограничениям подчиняются индексы n , a и m' и в полученном из (4.23) и (4.24) разложении

$$\Psi_{m'}^{\epsilon x}(x, y, \theta) = \sum_{n=m'}^{\infty} y^n \sum_{a=m'}^n \Psi_{am'}^{n\epsilon x} \Theta_{am'}(u), \quad m' = \mu(\sigma), \mu(\sigma) + 1, \dots, \ell. \quad (4.28)$$

Поэтому два первых слагаемых асимптотики каждой компоненты $\Psi_{m'}^{\epsilon x}$ при $y \rightarrow 0$, $x > 0$ содержат только неопределенные функции $\Psi_{nm'}^{n\epsilon x}$, $n = m', m' + 1$:

$$\begin{aligned} \Psi_{m'}^{\epsilon x}(x, y, \theta) = y^{m'} & \left[\Psi_{m'm'}^{m'\epsilon x}(x) \Theta_{m'm'}(u) + \right. \\ & \left. + y \Psi_{m'+1,m'}^{m'+1,\epsilon x}(x) \Theta_{m'+1,m'}(u) + O(y^2) \right]. \quad (4.29) \end{aligned}$$

Значит, каждая компонента $\Psi_{m'}^{\epsilon x}(x, y, \theta)$ при $y \rightarrow 0$ и $x > 0$ должна иметь асимптотику $\Psi_{m'}^{\epsilon x} = O(y^{m'})$. Этот факт был доказан ранее в работе [130].

Теперь рассмотрим суммы (4.26) и (4.27). В них $b \geq m'$, потому что согласно определению (1.12) $T_{ba}^{\ell m'} = 0$ при $b < m'$. По той же причине $\Psi_{bm'}^{n\epsilon x} \equiv 0$, если $m' > b$. Однако $\Psi_{bm'}^{n\epsilon y} \neq 0$ при $b > n$, и поэтому сумма (4.26) более сложная, чем сумма (4.24), в которой $\Psi_{am'}^{n\epsilon x} \equiv 0$ при $a > n$.

Укажем важные свойства симметрии компонент $\Psi_{m'}^{n\epsilon x}$ и $\Psi_{m'}^{n\epsilon y}$. Так как в представлении (4.24) сумма $(n + a)$ — четное число, то $a = m', m' + 2, \dots, n$ при четном $n + m'$ и $a = m' + 1, m' + 3, \dots, n$ при нечетном $n + m'$, поэтому

$$\Psi_{m'}^{n\epsilon x}(x, \theta) = (-1)^{n+m'} \Psi_{m'}^{n\epsilon x}(x, \pi - \theta).$$

По той же причине в представлении (4.26) суммы $(a + b)$ и $(\ell + \mu(\sigma))$ одновременно четные или нечетные. Поэтому $(n + b)$ и $(\ell + \mu(\sigma))$ одновременно четные или нечетные, следовательно,

$$\Psi_{m'}^{n\epsilon y}(x, \theta) = (-1)^{\ell + \mu(\sigma)} \Psi_{m'}^{n\epsilon y}(x, \pi - \theta).$$

В силу (4.23), (4.24) и (4.26) для решения (3.49) вместо рядов (3.52) и (3.54) верны два разложения:

$$\Psi^\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) \sum_{a=m'}^n \Psi_{am'}^{n\epsilon x}(x) \Theta_{am'}(u), \quad (4.30)$$

$$\Psi^\epsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^y) \sum_{b=m'}^{\ell+n-\mu(\sigma)} \Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(x) \Theta_{bm'}(u) \quad (4.31)$$

по трем системам линейно независимых функций:

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

Поэтому неизвестные функции $\Psi_{am'}^{n\epsilon x}(x)$ и $\Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(x)$ удается подчинить линейным системам уравнений. При $t = y$ получается неудобная для анализа система с трехдиагональной матрицей, а при $t = x$ — довольно простая система незацепляющихся по m' и рекуррентных по n уравнений

$$\begin{aligned} & [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{am'}^{n+2, \epsilon x}(x) = \\ & = x^{-2} \sum_{m''=m' \pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^a \Psi_{am''}^{n\epsilon x}(x) - h_{am'}^x(x) \Psi_{am'}^{n\epsilon x}(x) - \\ & - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s V^{ps}(x) (1 - \delta_{p1} \delta_{s0}) \sum_{a'=m'}^{n-p} C_{s0a0}^{a'0} C_{s0a'm'}^{am'} \Psi_{a'm'}^{n-p, \epsilon x}(x), \quad (4.32) \end{aligned}$$

где коэффициенты $\gamma_{m'm''}^{\ell\sigma}$ и $q_{m'm''}^a$ вычисляются по формулам (1.22) и (1.3), введено обозначение

$$\begin{aligned} h_{am'}^x(x) \equiv & -x^{-2} \partial_x (x^2 \partial_x) + \\ & + x^{-2} [\ell(\ell+1) + a(a+1) - 2(m')^2] + V^{00}(x) - E, \quad (4.33) \end{aligned}$$

индексы n, a, m' такие, что $n \geq a \geq m' \geq \mu(\sigma)$ и $(n+a)$ четное, и поэтому $\Psi_{am'}^{n\epsilon x} = 0$, если $n < 0$ или $m' > a$ или же если $(n+a)$ нечетное. При $n = a$ и всех $m' \geq \mu(\sigma)$ уравнениям (4.32) удовлетворяют любые функции

$\Psi_{am'}^{n\epsilon x} \equiv f_{m'}^{nx}(x)$ аргумента x . Через них выражаются все остальные функции $\Psi_{am'}^{n\epsilon x}$ с $n > a$ и $a \geq m' \geq \mu(\sigma)$. Например, при $n \leq 3$ и любом σ

$$\begin{aligned} \Psi_{00}^{0\epsilon x} &= f_0^{0x}; \quad \Psi_{1m'}^{1\epsilon x} = f_{m'}^{1x}, \quad m' = 0, 1; \\ \Psi_{00}^{2\epsilon x} &= \frac{1}{6} h_{00}^x f_0^{0x}, \quad \Psi_{2m'}^{2\epsilon x} = f_{m'}^{2x}, \quad m' = 0, 1, 2; \\ \Psi_{10}^{3\epsilon x} &= \frac{1}{10} h_{10}^x f_0^{1x} + \frac{\sqrt{3}}{30} V^{11} f_0^{0x} - \\ &\quad - \frac{1}{10x^2} \{2\ell(\ell+1)[1 + \sigma(-1)^\ell]\}^{1/2} f_1^{1x}, \\ \Psi_{11}^{3\epsilon x} &= \frac{1}{10} h_{11}^x f_1^{1x} - [\ell(\ell+1)]^{1/2} f_0^{1x}/(5x^2), \end{aligned} \tag{4.34}$$

если $\sigma = (-1)^{\ell+1}$, то $f_0^{nx} \equiv 0$ при всех n , а все остальные функции $\Psi_{am'}^{n\epsilon x}$ с $n \leq 3$ всегда тождественно равны нулю.

Пусть в рядах (4.30) функции $f_{m'}^{nx}$ с $n \leq 3$ и $m' \leq 2$ отличны от нуля. Тогда, используя (4.34), находим явные асимптотики этих рядов:

$$\begin{aligned} \Psi_0^{\epsilon x}(x, y, \theta) &= \left[1 + \frac{y^2}{6} h_{00}^x(x)\right] f_0^{0x}(x) \Theta_{00}(u) + \\ &\quad + y \left[1 + \frac{y^2}{10} h_{10}^x(x)\right] f_0^{1x}(x) \Theta_{10}(u) + \\ &\quad + \frac{y^3}{10\sqrt{3}x^2} \left\{x^2 V^{11}(x) f_0^{0x}(x) - [6\ell(\ell+1)(1 + \sigma(-1)^\ell)]^{1/2} f_1^{1x}(x)\right\} \times \\ &\quad \times \Theta_{10}(u) + y^2 f_0^{2x}(x) \theta_{20}(u) + O(y^4); \end{aligned} \tag{4.35}$$

$$\begin{aligned} \Psi_1^{\epsilon x}(x, y, \theta) &= y^2 f_1^{2x}(x) \Theta_{21}(u) + y \left[1 + \frac{y^2}{10} h_{11}^x(x)\right] f_1^{1x}(x) \Theta_{11}(u) - \\ &\quad - \left[\frac{y^3}{5x^2}\right] [\ell(\ell+1)]^{1/2} f_0^{1x}(x) \Theta_{11}(u) + O(y^4); \end{aligned}$$

$$\Psi_2^{\epsilon x}(x, y, \theta) = y^2 f_2^{2x}(x) \Theta_{22}(u) + O(y^4)$$

и следующие из них связи для Θ -компонент $\Psi_{am'}^{\epsilon x}$, при $y = 0$, но $x > 0$:

$$\begin{aligned} \partial_y^a \Psi_{am'}^{\epsilon x}(x, y) &= 0, \quad a \geq m' = \mu(\sigma), 1, 2; \\ [3\partial_y^2 - h_{00}^x(x)] \Psi_{00}^{\epsilon}(x, y) &= 0; \\ \partial_y [5\partial_y^2 - 3h_{10}^x(x)] \Psi_{10}^{\epsilon}(x, y) - \sqrt{3} V^{11}(x) \Psi_{00}^{\epsilon x}(x, y) &= \\ &= -3x^{-2} \{2\ell(\ell+1)[1 + \sigma(-1)^\ell]\}^{1/2} \partial_y \Psi_{11}^{\epsilon x}(x, y); \\ \partial_y [5\partial_y^2 - 3h_{11}^x(x)] \Psi_{11}^{\epsilon x}(x, y) &= -\frac{6}{x^2} [\ell(\ell+1)]^{1/2} \partial_y \Psi_{10}^{\epsilon x}(x, y). \end{aligned} \tag{4.36}$$

Замечание. Вследствие представления (4.29) и формулы (1.26) при $y = 0$, $x > 0$ и всех m' имеются универсальные (не зависящие от формы парных взаимодействий) связи, содержащие производную по углу:

$$\begin{aligned} \partial_y^{m'} [\sin \theta \partial_\theta - m' \cos \theta] \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) &= 0, \\ \partial_y^{m'+1} \{ \sin \theta \Theta_{m'+1, m'}(u) [\partial_\theta - m' \cos \theta] - \\ - \sqrt{2(m'+1)} \sin \theta \Theta_{m'+1, m'+1}(u) \} \Psi_{m'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) &= 0. \end{aligned} \quad (4.37)$$

Приложения и основные результаты. Шестимерное уравнение Шредингера (1.38) подстановкой (3.49) с $t = x$ сводится к конечной системе трехмерных уравнений для искомого D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon x}$, функции Ψ^ε . При построении дискретных аналогов такой системы предлагается использовать связи (4.36) и (4.37) как дополнительные граничные условия. Таким способом можно улучшить поточечную сходимость вычисляемых D^σ -компонент к точным вблизи линейной конфигурации трех частиц.

Сформулируем основной результат настоящего раздела в виде доказанной теоремы соответствия, являющейся аналогом теоремы 3.2.

Теорема 4.1. Пусть все центральные парные взаимодействия — ряды (1.31). Тогда в любом из трех случаев (1.32) уравнение Шредингера (1.39) при $x > 0$ и $y \rightarrow 0$ имеет формальные регулярные решения Ψ и Ψ^ε , представимые рядами (4.6), (4.13) и (3.38), (4.30), (4.31) по целым степеням y . Компоненты $\Psi_{a\alpha}^n$, $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}$ этих рядов подчинены простым и разрешимым цепочкам алгебраических уравнений (4.8), (4.14) и (4.32), рекуррентных по индексу n и незацепляющихся при данном n по индексу b , индексам a , b или a , m' .

4.3. Разложения решений уравнений Фаддеева. В рассматриваемом случае $x > 0$, $y \rightarrow 0$, в отличие от ранее рассмотренного случая $x \rightarrow 0$, $y > 0$, разложение потенциала $V_i(x)$ в степенной ряд по переменной $x \equiv x_i$ не требуется. Поэтому разложения фаддеевских компонент $\Psi_{iab}^\varepsilon(x, y)$, $\Psi_{im'}^{\varepsilon t}(x, y)$ при $x \equiv x_i > 0$ и $y \equiv y_i \rightarrow 0$ являются довольно простыми рядами по целым степеням аргумента y и выводятся аналогичными описанным в п. 3.4 способами. Для изложенного выше вывода ключевыми будут разложения (3.49), (4.10) и (4.30) частного решения Ψ^ε уравнения Шредингера (1.39). Исследуем наиболее общий случай А.

Разложения в бисферическом базисе. Докажем, что представление (4.10) решения Ψ^ε уравнения Шредингера в бисферическом базисе порождает аналогичное по строению разложение фаддеевской компоненты Ψ_i^ε :

эта компонента — бисферический ряд

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{ab} \Psi_{iab}^\varepsilon(x, y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \quad (4.38)$$

бисферические компоненты Ψ_{iab}^ε такого ряда — суммы

$$\Psi_{iab}^\varepsilon(x, y) = \sum_{n=a}^{\infty} y^n \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x), \quad (-1)^{n+a} = 1, \quad (4.39)$$

и поэтому имеет место представление

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=\mu(\sigma)}^{\infty} y^n \sum_{a=\mu(\sigma)}^n \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^{\ell+a+\mu(\sigma)} \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}). \quad (4.40)$$

Для доказательства исследуем уравнение фаддеевской системы (1.52), содержащее в левой части искомую компоненту Ψ_i^ε . Заменяем в этом уравнении решение уравнения Шредингера Ψ^ε рядом (4.10). Правая часть получившегося уравнения — ряд по степеням аргумента y и базисным функциям $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$. Поэтому искомое регулярное решение Ψ_i^ε может быть только рядом того же типа, но пока без дополнительных ограничений на индексы a, b и n , кроме условий треугольника $\mathbf{a} + \mathbf{b} = \mathbf{1}$ и четности $(-1)^{a+b} = \sigma$:

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=0}^{\infty} y^n \sum_{ab} \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}). \quad (4.41)$$

В исследуемом уравнении заменим Ψ_i^ε таким рядом. Используя проектор (1.15), спроецируем полученное уравнение на базисные функции $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y})$. В результате для каждой фиксированной пары индексов a и b искомые компоненты $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x)$, $n = 0, 1, \dots$, подчинятся алгебраической и рекуррентной по индексу n цепочке уравнений

$$\begin{aligned} & [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{iab}^{n+2,\varepsilon}(x) = \\ & = - [h_b(x) - V^{00}(x)] \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x) - V_i(x) \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x), \quad n = -2, -1, \dots, \end{aligned} \quad (4.42)$$

где h_b — оператор (4.15), а $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x)$ — функции, исследованные в разд. 4.

Пусть в этой цепочке $a > n$ или $n < \mu(\sigma)$, или же $n+a$ — нечетное. Тогда $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) \equiv 0$ согласно (4.10) и поэтому $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x) \equiv 0$. Далее полагаем $a \leq n$, $a \geq \mu(\sigma)$, а сумму $n+a$ считаем четным числом. При таких ограничениях на индексы пробный ряд (4.41) становится рядом (4.40), а исследуемая цепочка устроена так же, как и цепочка (4.14) для функций $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$, и поэтому разрешима: при данных a и b все искомые функции $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}$ с $n > a$ выражаются через

неопределенную функцию $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x)$ с $n = a$ и известные функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$. Значит, ряды (4.39) и (4.40) существуют, что и требовалось доказать.

Отметим, что согласно (4.39) фаддеевские компоненты $\Psi_{iab}^{\varepsilon}(x, y)$ с четным (нечетным) индексом a — ряды по четным (нечетным) степеням аргумента y .

Получим явные асимптотики рядов (4.39) с $a \leq 2$ в виде подсумм их четырех или трех наиболее медленно убывающих при $y \rightarrow 0$ слагаемых. Затем выведем связи при $y = 0$ и $x > 0$ для производных $\partial_y^n \Psi_{iab}^{\varepsilon}$.

Сначала найдем функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x)$ с $n \leq 4$ как явные решения уравнений (4.14). Затем в уравнениях (4.42) заменим функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x)$ с $n \leq 4$ их найденными выражениями. Далее решим полученные уравнения и выразим функции $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x)$ как комбинации неопределенных функций $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}$ с $n = a$, равных производным $(n!)^{-1} \partial_y^n \Psi_{ab}^{\varepsilon}(x, y)$ и $(n!)^{-1} \partial_y^n \Psi_{iab}^{\varepsilon}(x, y)$ при $y = 0$ и $n = a$. Используя такие комбинации, выведем искомые асимптотики рядов (4.39) с $a \leq 2$, а именно, асимптотику компоненты $\Psi_{i0\ell}^{\varepsilon}$:

$$\begin{aligned} \Psi_{i0\ell}^{\varepsilon}(x, y) = & \left\{ 1 + \frac{y^2}{6} (h_{\ell} - V^{00}) \left[1 + \frac{y^2}{20} (h_{\ell} - V^{00}) \right] \right\} \Psi_{i0\ell}^{\varepsilon}(x, 0) + \\ & + \frac{y^2}{6} \left\{ V_i + \frac{y^2}{20} [(h_{\ell} - V^{00}) V_i + V_i h_{\ell}] \right\} \Psi_{0\ell}^{\varepsilon}(x, 0) + O(y^6), \end{aligned} \quad (4.43)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{i1b}^{\varepsilon}(x, y) = & y \left[1 + \frac{y^2}{10} (h_b - V^{00}) \right] \partial_y \Psi_{i1b}^{\varepsilon}(x, y)|_{y=0} + \\ & + \frac{y^3}{10} V_i \partial_y \Psi_{1b}^{\varepsilon}(x, y)|_{y=0} + O(y^5) \end{aligned} \quad (4.44)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{i2b}^{\varepsilon}(x, y) = & \frac{y^2}{2} \left[1 + \frac{y^2}{14} (h_b - V^{00}) \right] \partial_y^2 \Psi_{i2b}^{\varepsilon}(x, y)|_{y=0} + \\ & + \frac{y^4}{28} V_i \partial_y^2 \Psi_{2b}^{\varepsilon}(x, y)|_{y=0} + O(y^6). \end{aligned} \quad (4.45)$$

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

$$\begin{aligned} [3\partial_y^2 - h_{\ell}(x) + V^{00}(x)] \Psi_{i0\ell}^{\varepsilon}(x, y) &= V_i(x) \Psi_{0\ell}^{\varepsilon}(x, y), \\ \partial_y \{5\partial_y^2 - 3[h_b(x) - V^{00}(x)]\} \Psi_{i1b}^{\varepsilon}(x, y) &= 3V_i(x) \partial_y \Psi_{1b}^{\varepsilon}(x, y), \\ \partial_y^2 \{7\partial_y^2 - 6[h_b(x) - V^{00}(x)]\} \Psi_{i2b}^{\varepsilon}(x, y) &= 6V_i(x) \partial_y^2 \Psi_{2b}^{\varepsilon}(x, y) \end{aligned} \quad (4.46)$$

и связи для компонент Ψ_{iab}^ε :

$$\begin{aligned} \partial_y^{a+1} \Psi_{iab}^\varepsilon(x, y) &= 0, \quad a = 0, 1, 2; \\ \left[5\partial_y^4 - (h_\ell - V^{00})^2 \right] \Psi_{i0\ell}^\varepsilon(x, y) &= \\ &= [(h_\ell - V^{00}) V_i + V_i h_\ell] V_i^{-1} (3\partial_y^2 - h_\ell + V^{00}) \Psi_{i0\ell}^\varepsilon(x, y). \end{aligned} \quad (4.47)$$

Разложения в D^σ -базисе. Исследуем разложения фаддеевской компоненты Ψ_i^ε в D^σ -базисе. Ограничимся наиболее простым случаем $t = x$.

Пусть решение Ψ^ε уравнения Шредингера представлено рядами (3.49) и (4.30) с известными Θ -компонентами $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}$. Используя те же приемы, что и при выводе бисферического ряда (4.40), нетрудно показать, что такому представлению отвечают аналогичные по строению разложения фаддеевской компоненты Ψ_i^ε и ее D^σ -компонент $\Psi_{im'}^{\varepsilon x}$:

$$\Psi_i^\varepsilon(x, y) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) \Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta), \quad (4.48)$$

$$\Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = \sum_{n=m'}^{\infty} y^n \sum_{a=m'}^n \Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}(x) \Theta_{am'}(u), \quad (-1)^{n+a} = 1. \quad (4.49)$$

Вывод уравнений для неизвестных функций $\Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}$ несложен. Для этого используется только одно уравнение фаддеевской системы (1.52), содержащее в левой части искомую компоненту Ψ_i^ε . Сначала в этом уравнении функция Ψ^ε заменяется рядом (4.30), а фаддеевская компонента Ψ_i^ε — искомым рядом (4.48) с D^σ -компонентами (4.49). Затем полученное уравнение последовательно проецируется на базисные функции $D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x)$ и $\Theta_{am'}(u)$. В итоге для искомого Θ -компонент $\Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}(x)$ выводится простая и рекуррентная по индексу $n = -2, -1, \dots$ цепочка алгебраических уравнений

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{iam'}^{n+2,\varepsilon x}(x) &= -V_i(x) \Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(x) + \\ + x^{-2} \sum_{m''=m' \pm 1}^{\ell\sigma} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^a \Psi_{iam''}^{n\varepsilon x}(x) &- [h_{am'}^x(x) - V^{00}(x)] \Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}(x), \end{aligned} \quad (4.50)$$

где $n+a$ — четное, $n \geq a \geq m'$, а $h_{am'}^x(x)$ — оператор (4.33). Эта цепочка устроена так же, как и цепочка (4.32) для компонент $\Psi_{am'}^{\varepsilon x}$, и поэтому функции $\Psi_{iam'}^{n+2,\varepsilon x}$ удобно вычислять в порядке возрастания индекса $n = -2, -1, \dots$ и убывания индекса $a = n, n-1, \dots$ при каждом n . Первое уравнение ($a = n+2$) имеет вид $0\Psi_{iam'}^{n+2,\varepsilon x} = 0$. Его решение $\Psi_{iam'}^{n+2,\varepsilon x}(x) = g_{im'}^{n+2,x}(x)$ — некоторая нетривиальная функция аргумента x . Исключение составляет случай $\sigma = (-1)^{\ell+1}$ и $m' = 0$, когда $\Psi_{in0}^{n\varepsilon x} \equiv 0$ при всех n . Поэтому в этом

случае $g_{im'}^{nx}(x) \equiv 0$ при $m' = 0$ и всех n . Обсуждаемая цепочка уравнений (4.50) однозначно разрешима: все функции $\Psi_{iam'}^{n\epsilon x}$, с $n > a$ выражаются через неопределенные функции $g_{im'}^{nx}$ и функции $\Psi_{am'}^{n\epsilon x}$, для которых затем используется представление через произвольные функции $f_m^{nx}(x)$.

Способом, использованным при выводе соотношения (4.29), нетрудно доказать следующее утверждение: так как в ряду (4.49) сумма $n + a$ — четное число, то два первых слагаемых асимптотики каждой компоненты $\Psi_{m'}^{\epsilon x}$ при $y \rightarrow 0$, $x > 0$ содержат только неопределенные функции g_{in}^{nx} с $n = m'$, $m' + 1$:

$$\Psi_{im'}^{\epsilon x}(x, y, \theta) = y^{m'} \left[g_{im'}^{m'x}(x) \Theta_{m'm'}(u) + y g_{i,m'+1}^{m'+1,x}(x) \Theta_{m'+1,m'}(u) + O(y^2) \right]. \quad (4.51)$$

Теперь выведем явные асимптотики рядов (4.49) с $m' \leq 2$ как подсуммы их трех наиболее медленно убывающих при $y \rightarrow 0$ слагаемых, а затем получим связи для Θ -компонент $\Psi_{iam'}^{\epsilon x}$. Сначала найдем функции $\Psi_{am'}^{n\epsilon}(x)$ с $n \leq 3$ как проекции сумм (3.66) на функции $\Theta_{am'}(u)$. В уравнениях (4.50) с $m' \leq 2$ заменим эти функции их найденными выражениями. Решив полученные уравнения, выразим функции $\Psi_{iam'}^{n\epsilon x}(x)$ через неопределенные функции $f_m^{nx} \equiv \Psi_{am'}^{n\epsilon x}$ и $g_{im'}^{nx} \equiv \Psi_{iam'}^{n\epsilon y}$, равные производным $(n!)^{-1} \partial_y^n \Psi_{m'}^{\epsilon x}(x, y)$ и $(n!)^{-1} \partial_y^n \Psi_{im'}^{\epsilon x}(x, y)$ при $y = 0$ и $n = a$. Используя такие представления, запишем асимптотики рядов (4.49) с $m' \leq 2$ в обоих случаях $\sigma = \pm(-1)^\ell$ в виде

$$\begin{aligned} \Psi_{i0}^{\epsilon x}(x, y, \theta) = & \left\{ g_{i0}^{0x} + \frac{y^2}{6} [(h_{00}^x - V^{00}) g_{i0}^{0x} + V_i f_0^{0x}] \right\} \Theta_{00}(u) + \\ & + y \left[g_{i0}^{1x} + \frac{y^2}{10} V_i f_0^{1x} \right] \Theta_{10}(u) + \\ & + \frac{y^3}{10x^2} \left\{ x^2 [h_{10}^x - V^{00}] g_{i0}^{1x} - [2\ell(\ell+1)(1 + \sigma(-1)^\ell)]^{1/2} g_{i1}^{1x} \right\} \Theta_{10}(u) + \\ & + y^2 g_{i0}^{2x} \Theta_{20}(u) + y^3 g_{i0}^{3x} \Theta_{30}(u) + O(y^4), \quad (4.52) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \Psi_{i1}^{\epsilon x}(x, y, \theta) = & y \left\{ g_{i1}^{1x} + \frac{y^2}{10} [(h_{11}^x - V^{00}) g_{i1}^{1x} + V_i f_1^{1y}] \right\} \Theta_{11}(u) - \\ & - \frac{y^3}{5x^2} [\ell(\ell+1)]^{1/2} g_{i0}^{1x} \Theta_{11}(u) + y^2 g_{i1}^{2x} \Theta_{21}(u) + y^3 g_{i1}^{3x} \Theta_{31}(u) + O(y^4); \\ \Psi_{i2}^{\epsilon x}(x, y, \theta) = & y^2 g_{i2}^{2x} \Theta_{22}(u) + y^3 g_{i3}^{3x} \Theta_{32}(u) + O(y^4). \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} [3\partial_y^2 - (h_{00}^x - V^{00})] \Psi_{i00}^{\varepsilon x}(x, y) &= V_i(x) \Psi_{00}^{\varepsilon x}(x, y), \\ \partial_y \left\{ 5\partial_y^2 + 3x^{-2} [2\ell(\ell + 1)(1 + \sigma(-1)^\ell]^{1/2} \right\} \Psi_{i10}^{\varepsilon x}(x, y) + \\ &+ 3(h_{10}^x - V^{00}) \partial_y \Psi_{i00}^{\varepsilon x}(x, y) = 3V_i(x) \partial_y \Psi_{10}^{\varepsilon x}(x, y), \quad (4.53) \\ \partial_y \left\{ 5\partial_y^2 - 3[h_{11}^x(x) - V^{00}(x)] \right\} \Psi_{i11}^{\varepsilon x}(x, y) + \\ &+ 6x^{-2} [\ell(\ell + 1)]^{1/2} \partial_y \Psi_{i00}^{\varepsilon x}(x, y) = 3V_i(x) \partial_y \Psi_{11}^{\varepsilon x}(x, y). \end{aligned}$$

Замечание. Вследствие формул (1.26) и (4.51) при $y = 0$, $x > 0$ и всех m' имеются универсальные связи, содержащие производную по углу:

$$\begin{aligned} \partial_y^{m'} [\sin \theta \partial_\theta - m' \cos \theta] \Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) &= 0, \\ \partial_y^{m'+1} \left\{ \sin \theta \Theta_{m'+1, m'}(u) [\partial_\theta - m' \cos \theta] - \right. \\ &\left. - \sqrt{2(m'+1)} \sin \theta \Theta_{m'+1, m'+1}(u) \right\} \Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = 0. \quad (4.54) \end{aligned}$$

Приложения и основные результаты. Во все известные дискретные сплайн-аналоги [83] систем двумерных уравнений Фаддеева предлагается включить полученные асимптотики (4.43)–(4.45) искомых компонент Ψ_{iab}^ε и доказанные связи (4.47). Использование этих асимптотик и связей позволит улучшить поточечную сходимость вычисляемых решений к точным в пределе линейной конфигурации трех частиц.

Формулы (4.52) и (4.53) представляются полезными в вычислительной практике: соотношения (4.52) дают представление о явной зависимости искомых D^σ -компонент $\Psi_{im'}^{\varepsilon x}$ от переменных y и θ , а связи (4.53) 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 (4.54) предлагается учитывать при построении дискретных аналогов трехмерных уравнений Фаддеева для ускорения поточечной сходимости вычисляемого решения таких уравнений к точному вблизи линейной конфигурации трех частиц.

Итог выполненного выше анализа уравнений Фаддеева в пределе линейной конфигурации трех частиц — доказательство следующей теоремы соответствия, являющейся аналогом теоремы 3.3.

Теорема 4.2. *Если центральные парные взаимодействия V_k , $k \neq i$, — ряды (1.31), то при $x > 0$ и $y \rightarrow 0$ представлениям (3.35), (4.12) и (3.49),*

(4.24), (4.26) формального решения $\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ уравнения Шредингера (1.39) соответствуют аналогичные по строению разложения (4.39), (4.40) и (4.48), (4.49) фаддеевской компоненты $\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ этого решения. Компоненты $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{iam}^{n\varepsilon}$ этих разложений подчинены разрешимым в явном виде рекуррентным цепочкам алгебраических уравнений (4.42) и (4.50).

5. ОСОБЫЕ СЛУЧАИ

В настоящем разделе для полноты обсуждается строение некоторых регулярных решений уравнений Фаддеева и Шредингера вблизи точек тройного и парного ударов в четырех особых случаях. В этих случаях парные взаимодействия не представляются рядами (1.31) или же не являются центральными. Особое внимание уделяется вычислительным и физическим приложениям основных результатов обсуждения.

5.1. Ложные решения уравнений Фаддеева. Используемое нами определение ложного решения таково: нетривиальное решение $\{\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3\}$ уравнений Фаддеева (1.50), сумма (1.49) всех компонент которого тождественно равна нулю, а каждая из них принадлежит выбранному классу функций, называется ложным решением уравнений Фаддеева в этом классе.

Чтобы отличать ложные решения от всех остальных, компоненты Ψ_1, Ψ_2 и Ψ_3 ложного решения обозначим соответствующими символами S_1, S_2 и S_3 . По определению в данном классе функций ложному решению уравнений Фаддеева отвечает тривиальное решение ($\Psi \equiv 0$) уравнения Шредингера. Поэтому уравнения Фаддеева (1.50) для ложных решений расщепляются на совокупность трех несвязанных друг с другом свободных уравнений Шредингера для компонент ложного решения и равенство нулю суммы таких компонент:

$$[H_0(r, \Omega_i) - E] S_i(r, \Omega_i) = 0, \quad i = 1, 2, 3; \quad (5.1)$$

$$S_i(r, \Omega_i) + \sum_{k \neq i} S_k(r, \Omega_k(\Omega_i; \gamma_{ki})) = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.2)$$

Теперь поясним, зачем необходимо знание ложных решений в явном виде. Для этого обсудим четыре проблемы.

Первая из них — расчет четырехчастичных систем методом кластерной редукции [42–44]. В этом методе компоненты четырехчастичной волновой функции подчиняются уравнениям Фаддеева–Якубовского, а затем заменяются конечными подсуммами их рядов по избранным собственным функциям гамильтонианов трехчастичных подсистем. К таким базисным функциям относятся и ложные решения трехчастичных уравнений Фаддеева.

Вторая и малоизученная проблема — анализ асимптотик решений уравнений Фаддеева в пределах одной, двух и трех больших по модулю констант

связи парных взаимодействий. Для примера рассмотрим случай трех одинаковых констант, равных параметру λ . Пусть $V_i = \lambda v_i$, тогда система (1.50) эквивалентна системе

$$\frac{1}{\lambda} (H_0 - E) \Psi_i = v_i \Psi = v_i \sum_{k=1}^3 \Psi_k.$$

Предположим, что при любом λ имеются регулярные решения, для которых $|H_0 \Psi_i| \leq \infty$, $i = 1, 2, 3$. Тогда рассматриваемое семейство уравнений может вырождаться в систему уравнений (5.1), (5.2), определяющую ложное решение:

$$(H_0 - E) \Psi_i \rightarrow 0, \quad \Psi_1 + \Psi_2 + \Psi_3 \rightarrow 0, \quad |\lambda| \rightarrow \infty.$$

В этом случае $\Psi_i \rightarrow S_i$, $i = 1, 2, 3$, следовательно, S_i — старший член асимптотики компоненты Ψ_i при $|\lambda| \rightarrow \infty$. Примеры такой ситуации описаны в работах [71, 72], посвященных точным решениям уравнений Фаддеева с парными взаимодействиями центробежного типа.

Третья проблема — тестирование алгоритмов численного решения уравнений Фаддеева путем решения краевых задач для известных в явном виде ложных решений и последующего сравнения вычисленных решений с ложными как с эталонными. Так как ложные решения не зависят от формы парных взаимодействий, то их можно использовать как эталонные при любых парных взаимодействиях. В этом смысле ложные решения особо значимы как универсальные эталонные решения. Примеры использования ложных решений в качестве эталонных приведены в [84].

Четвертая проблема — формулировка простых граничных условий, исключающих ложные решения при вычислении физических фаддеевских компонент, подчиненных редуцированным уравнениям Фаддеева и обладающих физическими асимптотиками при больших расстояниях между частицами.

Ложные решения неоднократно обсуждались в обзорах [65, 83] и во многих упомянутых в них оригинальных работах.

Простые методы построения всех ложных решений дву- и трехмерных уравнений Фаддеева в классе \mathcal{A}^ε в самом общем случае нетождественных частиц и произвольного полного углового момента ℓ предложены в [68, 69] и реализуются по однотипной схеме. Напомним ее.

В качестве фундаментального решения каждого ($i = 1, 2, 3$) из уравнений (5.1) используется соответствующая функция (1.36):

$$S_i^L(r, \Omega_i) = r^{-2} J_{L+2}(r\sqrt{E}) \sum_{ab} B_{iab}^L Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i), \quad (5.3)$$

где коэффициенты B_{iab}^L пока не определены, а индексы a и b пробегают все возможные при данных L, ℓ, m и σ значения. Вследствие правила (1.13)

из всех функций (5.3) системе (5.2) удовлетворяют только те функции, чьи коэффициенты B_{iab}^L подчиняются однородной системе линейных уравнений

$$B_{iab}^L + \sum_{k \neq i} \sum_{a'b'} \langle ab | K(\gamma_{ki}) | a'b' \rangle_{L\ell} B_{ka'b'}^L = 0, \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.4)$$

где число пар $\{a, b\}$ и пар $\{a', b'\}$ равно N . Поэтому матрица \mathbf{M}^L этой системы имеет конечную размерность: $\dim \mathbf{M}^L = 3N < \infty$.

Таким образом, построение любого фундаментального ложного решения сводится к решению конечной системы линейных уравнений (5.4). Любое ложное решение с квантовыми числами $\varepsilon = \{\ell, m, \sigma\}$ представляется в виде линейных комбинаций фундаментальных ложных решений (5.3) и некоторых числовых коэффициентов C_L :

$$S_i^\varepsilon(r, \Omega_i) = r^{-2} \sum_L C_L J_{L+2}(r\sqrt{E}) \sum_{ab} B_{iab}^L Y_{Lab}^{\ell m}(\Omega_i). \quad (5.5)$$

Проецирование такого представления с помощью соотношений (1.7) и (1.12) дает явные формулы для бисферических компонент

$$S_{iab}^\varepsilon(r, \varphi_i) = 2 \operatorname{cosec} 2\varphi_i \sum_L C_L J_{L+2}(r\sqrt{E}) \sum_{ab} B_{iab}^L \tilde{W}_{Lab}(\varphi_i)$$

и D^σ -компонент

$$S_{im'}^{\varepsilon t}(r, \theta_i, \varphi_i) = 2 [\sin 2\varphi_i (1 - u_i^2)^{1/2}]^{-1} \sum_L C_L J_{L+2}(r\sqrt{E}) \times \\ \times \sum_{ab} B_{iab}^L \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t) | \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}_i, \hat{y}_i) \rangle, \quad t = x_i, y_i.$$

При любых парных взаимодействиях компоненты S_{iab}^ε и $S_{im'}^{\varepsilon t}$ удовлетворяют соответственно двумерным (1.63) и трехмерным уравнениям Фаддеева [69].

Как известно [5], функция Бесселя $J_{L+2}(r\sqrt{E})$ с целым индексом $L + 2$ является рядом по целым степеням ее аргумента. Поэтому близи точек тройного и парных соударений и в пределе линейной конфигурации трех частиц все компоненты S_{iab}^ε и $S_{im'}^{\varepsilon t}$ любого ложного решения представляются рядами по целым степеням соответствующего аргумента r , x_i или y_i и не удовлетворяют ни одной из связей (2.47), (3.8)–(3.79), (3.88)–(3.90), (4.46), (4.47) или (4.53). Все эти связи содержат коэффициенты разложений парных взаимодействий.

Для исключения ложных решений при численном интегрировании дву- или трехмерных уравнений Фаддеева предлагается использовать такие зависимости от взаимодействий связи в качестве граничных условий.

5.2. Случай нецентральных парных взаимодействий. Стоит особо отметить, что представленные в разд. 3 и 4 авторские методы анализа регулярных решений вблизи точки парного удара и в пределе линейной конфигурации трех частиц стартуют с уравнения Шредингера (1.39) и реализуются исключительно просто благодаря тому, что для анализа этого уравнения и лишь одного из уравнений системы Фаддеева (1.52) используется только собственное для этих уравнений координатное представление $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} | \equiv \langle \mathbf{x}_i, \mathbf{y}_i |$.

Альтернативный нашему метод построения разложений фаддеевских парциальных компонент в точке парного удара впервые предложен в [29]. В этом методе решение Ψ^ε уравнения Шредингера вовсе не используется, а ключевыми являются одновременно все три шестимерные уравнения Фаддеева (1.52) и разложения всех ($k = 1, 2, 3$) парных взаимодействий $V_k(x_k)$ и всех искомым компонент Ψ_k^ε в ряды Тейлора с центром в точке $x = x_i = 0$:

$$\Psi_k^\varepsilon(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \Psi_k^{n\varepsilon}(\hat{x}, \mathbf{y}), \quad \Psi_k^n(\hat{x}, \mathbf{y}) = (n!)^{-1} \partial_x^n \Psi_k^\varepsilon(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k)|_{x=0}.$$

Переменные x_k и y_k являются функциями (1.3) аргументов x и y , поэтому уже при $n = 3$ производные $\partial_x^n \Psi_k^\varepsilon(\mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k)$ — довольно сложные комбинации производных $\partial_x^p x_k$ и $\partial_x^p y_k$ и производных функции Ψ_k^ε по аргументам x_k и y_k . Так как функция Ψ^ε считается неизвестной, то приходится решать все три уравнения Фаддеева и выводить одновременно разложения при $x_i \rightarrow 0$ и $y_i > 0$ для всех трех компонент Ψ_i^ε и Ψ_k^ε , $k \neq i$. Решение существенно усложняется тем, что искомые разложения необходимо записывать в каждом из трех координатных представлений $\langle \mathbf{x}_k, \mathbf{y}_k |$, $k = 1, 2, 3$. По той же причине сложным оказывается и решение заключительной задачи восстановления разложений функции Ψ^ε по найденным разложениям ее компонент Ψ_i^ε .

В случае центральных парных взаимодействий наш подход более экономичен и прост по сравнению с альтернативным подходом работы [29].

В ядерной физике низких энергий [18] наряду с центральными кулоновскими взаимодействиями часто используются нецентральные парные взаимодействия, включенные в конечном числе парных парциальных волн. К ним относятся S -волновые взаимодействия

$$V_k(\mathbf{x}_k) = V_k(x_k) I_k^0, \quad I_k^0 \equiv |Y_{00}(\hat{x}_k)\rangle \langle Y_{00}(\hat{x}_k)|, \quad k = 1, 2, 3, \quad (5.6)$$

где I_k^0 — проектор на S -волновое состояние подсистемы $\{p_i, p_j\}$.

Если парные взаимодействия включены в конечном числе парциальных волн, то в бисферическом базисе система уравнений Шредингера бесконечная, а система двумерных уравнений Фаддеева конечная. Поэтому в этом случае выгоднее сначала вывести разложения бисферических фаддеевских компонент Ψ_{iab}^ε , т. е. применить метод обсужденной выше работы [29], но не

к шестимерным, а к двумерным уравнениям Фаддеева, а затем по найденным представлениям воспроизвести разложения компонент Ψ_i^ε и их суммы Ψ^ε , подчиненной уравнению Шредингера.

В случае парных взаимодействий, включенных в конечном числе парциальных волн, такой подход представляется наиболее простым и перспективным для вывода и анализа разложений регулярных решений одно- и двумерных уравнений Шредингера и Фаддеева вблизи точек тройного и парных ударов и в пределе линейной конфигурации трех частиц. Для систем из трех тождественных бозонов с S -волновыми парными взаимодействиями, представимых рядами (1.31), анализ таких решений вблизи точек тройного и парного ударов выполнен, соответственно, в [77] и в [80].

В [77] впервые исследована зависимость регулярных решений уравнений Фаддеева и Шредингера при $r \rightarrow 0$ от строения (1.32) парных S -волновых взаимодействий. В случае нулевого полного углового момента ($\ell = 0$) такая зависимость решения Ψ^ε уравнения Шредингера описывается формулами

$$\text{A) } \Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) = 1 + \frac{3}{2} V_{1,-1} r \left(\cos \varphi_i + \sum_{k \neq i} \cos \varphi_k \right) + O(r^2),$$

$$\text{B) } \Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) = 1 + \frac{3V_{10} - E}{12} r^2 + \frac{V_{11}}{4} r^3 \left[(\cos \varphi_i)^3 + \sum_{k \neq i} (\cos \varphi_k)^3 \right] + O(r^4),$$

$$\text{C) } \Psi^\varepsilon(r, \Omega_i) = 1 + \frac{3V_{10} - E}{12\pi^{3/2}} r^2 + O(r^4),$$

где $r \rightarrow 0$, а φ_k — функция (1.4) аргументов φ_i и u_i .

В [80] для системы трех тождественных бозонов с S -волновыми парными взаимодействиями впервые доказано, что в случае А при любом полном угловом моменте ℓ регулярное решение Ψ^ε уравнения Шредингера обладает вблизи точки парного удара ($x \equiv x_i \rightarrow 0, y \equiv y_i > 0$) свойством

$$\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(x, y) \mathcal{Y}_{\ell 0}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) [1 + o(1)] = \left(1 + \frac{qx}{2} \right) \Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})|_{x=0} + O(x^2)$$

и поэтому подчиняется связи

$$(2\partial_x - q)\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0, \quad x = 0, \quad y > 0, \quad q \equiv q_i.$$

При $q \neq 0$ и $\ell = 0$ эта связь является аналогом условия Като, давно доказанного в [127], но в случае центральных кулоновских парных взаимодействий.

5.3. Коллапсирующие волновые функции. В квантовой механике [13] под коллапсом (захватом, стягиванием) частицы в силовом поле подразумевается локализация ее волновой функции в бесконечно малой окрестности центра этого поля. Локализация физически интерпретируется как падение частицы в этот центр.

Волновая функция связанного состояния системы нескольких частиц с полной энергией $E < 0$, сосредотачивающаяся при $E \rightarrow -\infty$ в окрестности хотя бы одной точки, принадлежащей области изменения ее аргументов, называется для краткости коллапсирующей.

Для примера напомним задачу о движении квантовой частицы в силовом поле $V(x) = c/x^2$ с нулевым угловым моментом и полной энергией e . В этом случае волновая функция частицы представляется в виде $\Psi(\mathbf{x}) = x^{-1}\psi(x)$, физически допустимая радиальная функция ψ подчиняется краевой задаче Шредингера

$$(-\partial_x^2 + c/x^2)\psi(x) = e\psi(x), \quad \psi(0) = 0, \quad x \in \mathcal{R}_+^1 = \{x : 0 \leq x < \infty\}, \quad (5.7)$$

а известное условие коллапса и его математическую и физическую интерпретацию [13] можно сформулировать в виде следующей теоремы.

Теорема 5.1. *При любом $c < -1/4$ задача (5.7) имеет сплошной и неограниченный снизу спектр $\{e\}$ отрицательных собственных значений, каждому из которых отвечает одна квадратично-суммируемая на полуоси \mathcal{R}_+^1 волновая функция $\psi(x)$. В основном (нормальном) состоянии частица обладает энергией $e = -\infty$ и поэтому локализована в бесконечно малой окрестности точки $x = 0$.*

Для системы трех частиц с центральными парными взаимодействиями центробежного типа $V_k(\mathbf{x}_k) = c_k/x_k^2$, где c_k — константы, а $k = 1, 2, 3$, теоремы существования и единственности физически приемлемых решений уравнений Шредингера и Фаддеева в общем случае неизвестны.

В [71, 72] впервые доказано, что эти уравнения при $E > 0$ и вполне определенных значениях действительных констант c_k имеют точные регулярные решения, представимые произведениями функции Бесселя $J_{L+2}(r\sqrt{E})$ и конечными линейными комбинациями гипергармоник (1.7). Такие решения, как и ложные решения (5.5), не описывают никакого физического состояния системы трех частиц, а вблизи точек тройного и парных ударов или в пределе линейной конфигурации трех частиц являются рядами по целым степеням аргументов r , x_i или y_i .

Построим коллапсирующие волновые функции для системы трех тождественных бозонов в случае $\ell = 0$ и S -волновых взаимодействий (5.6) с потенциалами $V_k(x_k) = (c/x_k^2)$ центробежного типа, где $k = 1, 2, 3$, а c — действительная константа.

Сначала, следуя [73], выведем условия, достаточные для коллапса трех бозонов. Для этого подстановкой

$$\Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i) = 2r^{-5/2} \operatorname{cosec} 2\varphi_i R_p(r; E) f(\varphi_i; p^2), \quad i = 1, 2, 3, \quad (5.8)$$

сведем фаддеевские уравнения (1.54) к двум одномерным и однородным краевым задачам шредингеровского типа. Спектр первой задачи для функции f при условиях $f = 0$, если $\varphi_i = 0, \pi/2$, детально исследован в [74,75]. Вторая задача является радиальной ($r \in \mathcal{R}_+^1$) задачей Шредингера с центробежным потенциалом $(p^2 - 1/4)r^{-2}$ и искомыми собственным значением E и отвечающей ему собственной функцией $R_p(r; E)$:

$$\begin{aligned} [-\partial_r^2 + (p^2 - 1/4)r^{-2}] R_p(r; E) &= ER_p(r; E); \\ R_p(0; E) &= 0; \quad |R_p(r; E)| < \infty, \quad r \in \mathcal{R}_+^1 \equiv \{r : 0 \leq r < \infty\}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

В случае действительного p^2 исследуемая задача (5.9) получается из задачи (5.7) заменой аргумента и параметров: $x \rightarrow r$, а $c \rightarrow p^2 - 1/4$ и $e \rightarrow E$. Поэтому теорема 5.1 справедлива и для задачи (5.9). Следовательно, при условии $p^2 - 1/4 < -1/4$, т. е. $p^2 < 0$, эта задача имеет квадратично-интегрируемое на полуоси \mathcal{R}_+^1 решение, описывающее гиперрадиальную зависимость волновой функции трехбозонного связанного состояния с бесконечно большой энергией связи ($-E = \infty$). Другими словами, все три бозона могут стягиваться в их центр масс, если p — чисто мнимое число ($p = i|p|$). Как доказано в [75], при таком условии задача для функции f имеет решение, если в ней $c < 0$. Следовательно, совокупность неравенств $c < 0$, $p^2 < 0$ и $E < 0$ является достаточным условием коллапса трех бозонов.

Теперь при таких условиях найдем вещественное, всюду ограниченное решение задачи (5.9). Подстановкой $R_p(r; E) = \sqrt{z} Z_p(z)$, $z \equiv r\sqrt{E}$, сведем ее к уравнению Бесселя (1.35) с чисто мнимыми ν и z и условиями

$$\lim_{|z| \rightarrow 0} \sqrt{z} Z_\nu(z) = 0, \quad |\sqrt{z} Z_\nu(z)| < \infty, \quad \forall |z|.$$

Единственным ограниченным при $|z| \rightarrow \infty$ решением этой задачи является функция Ханкеля $H_{i|p|}^{(1)}(z)$. Поэтому исходной задаче (5.9) при любых данных $p^2 < 0$ и $E < 0$ удовлетворяет единственная вещественная функция

$$R_p(r; E) = C(p)\sqrt{z} H_{i|p|}^{(1)}(z), \quad C(p) \equiv \left(\frac{\pi}{2}\right)^{1/2} \exp\left(\frac{i\pi}{4} - \frac{\pi|p|}{2}\right). \quad (5.10)$$

Функция R_p экспоненциально убывает при $r \rightarrow \infty$:

$$R_p(r; E) \sim \exp(-|z|), \quad |z| = r\sqrt{|E|} \rightarrow \infty,$$

и поэтому локализуется вблизи точки $r = 0$, если $E \rightarrow \infty$. Функция R_p имеет быстроциллирующую асимптотику при $r \rightarrow 0$:

$$R_p(r; E) = - \left(\frac{2|z|}{|p|\operatorname{sh}(\pi|p|)} \right)^{1/2} \sin[|p|\ln|z/2| - \arg \Gamma(1 + i|p|)] \quad (5.11)$$

и поэтому обращается в нуль в точке $r = 0$, а все ее остальные нули r_n экспоненциально сгущаются с ростом n к этой точке:

$$r_n \approx \frac{2}{\sqrt{|E|}} \exp \left\{ -|p|^{-1} [\pi n - \arg \Gamma(1 + i|p|)] \right\}, \quad n = N, N + 1, \dots,$$

где целое N настолько велико, что $r_n \sqrt{|E|} \ll 1$ уже при $n = N$.

Согласно (5.8) функции (5.10) отвечают фаддеевские компоненты

$$\Psi_i^\varepsilon(r, \Omega_i) = r^{-5/2} C(p) \sqrt{z} H_{i|p|}^{(1)}(z) \operatorname{cosec} 2\varphi_i f(\varphi_i; p^2), \quad i = 1, 2, 3. \quad (5.12)$$

Сумма трех таких компонент вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} \Psi^\varepsilon(r, \Omega_i; p^2, E) = \sum_{k=1}^3 \Psi_k^\varepsilon(r, \Omega_k) = r^{-5/2} C(p) \sqrt{z} H_{i|p|}^{(1)}(z) \times \\ \times \left\{ \frac{f(\varphi_i; p^2)}{\sin 2\varphi_i} + \sum_{k \neq i} \frac{f(\varphi_k(\varphi_i, u_i; \gamma_{ki}); p^2)}{\sin 2\varphi_k(\varphi_i, u_i; \gamma_{ki})} \right\}, \quad (5.13) \end{aligned}$$

где φ_k — функции (1.4) переменных φ_i, u_i и параметра $\gamma_{ki} = \pm\pi/3$.

Компоненты (5.12), а значит и их сумма (5.13), квадратично-интегрируемы в \mathcal{R}^6 с весом $r^5 (\sin \varphi_i \cos \varphi_i)^2$. Следовательно, при любом $p^2 < 0$ такую сумму можно считать волновой функцией связанного состояния трех бозонов с полной энергией $E < 0$. Поэтому совокупность (5.12) трех фаддеевских компонент является физически приемлемым решением уравнений Фаддеева (1.54). Данным отрицательным p^2 и E отвечает единственная волновая функция (5.13). При фиксированном p^2 и $E \rightarrow -\infty$ она локализуется в точке $r = 0$, что физически интерпретируется как коллапс системы трех бозонов, основным состоянием которой является состояние с бесконечно большой энергией связи ($-E = \infty$).

Взаимодействия центробежного типа не принадлежат классу взаимодействий (1.31) и не подчиняются ограничениям Като (3.1). Поэтому вблизи точек тройного ($r \rightarrow 0$) и парных ($x_i \rightarrow 0, y_i > 0$) соударений или в пределе линейной конфигурации ($x_i > 0, y_i \rightarrow 0$) трех бозонов найденные решения (5.12) и (5.13) уравнений Фаддеева и Шредингера нельзя представить рядами фоковского типа, или же рядами по целым степеням переменных x_i или y_i . Действительно, эти решения содержат в качестве множителя функцию R_p с осциллирующей асимптотикой (5.11) и поэтому быстро осциллируют и при $r \rightarrow 0$, и в случае $x_i \rightarrow 0, y_i > 0$, и в случае $y_i \rightarrow 0, x_i > 0$.

Так как семейство волновых функций (5.13) определяется двумя параметрами p^2 и E , то имеется уникальная возможность моделирования физически

разных трехчастичных конфигураций. Например, пусть значение $p^2 < 0$ зафиксировано, тогда при небольшом значении $|E|$ функция (5.13) будет волновой функцией слабосвязанного состояния трех бозонов, а в противном случае большого значения $|E|$ — локализованной (коллапсирующей) вблизи точки $r = 0$ волновой функцией сильносвязанного состояния.

5.4. Каналирование частиц в кристалле. Эффект каналирования [21,22] заключается в том, что заряженная или нейтральная частица, инжектированная в кристалл под малым углом к одной из кристаллографических осей, после серии касательных столкновений с атомами, близкими к этой оси, не меняет своего направления и движется с минимальной потерей энергии. Каналирование возможно и между двумя смежными кристаллографическими плоскостями.

Явление каналирования быстрых заряженных частиц в кристалле впервые предсказано в 1912 г. в работе [143]. Более чем через полвека, а именно в 1963 г., это явление было подтверждено в [144] расчетами с помощью компьютерного моделирования, а в 1968 г. — первыми экспериментами [145,146]. В 1969 г. Линхард представил в [147] созданную им первую теорию каналирования. Согласно этой теории пучок частиц, каналируемых в кристалле, фокусируется и является нанотрубкой, потому что его поперечный размер ($\sim 10^{-8}$ см) сравним по порядку величины с размером атомных ячеек кристалла. Поэтому эффективность взаимодействия двух пучков частиц или же пучка и неподвижной мишени, пропорциональная плотности потока частиц, существенно возрастает, если реакция взаимодействия осуществляется в кристалле.

В середине 1970-х гг. появились работы (см. монографию [22]), указывающие на возможность каналирования релятивистских частиц с энергией в несколько ГэВ и выше, причем не только протонов, но и отрицательно заряженных электронов, движущихся, в отличие от положительно заряженных частиц, в непосредственной близости к цепочкам атомов кристалла.

В 1976 г. Э. Н. Цыганов в [148] предложил использовать явление каналирования частиц в изогнутых кристаллах для управления траекториями частиц высоких энергий. Все полученные позже экспериментальные результаты [149] подтвердили эффективность использования изогнутых кристаллов в качестве технических элементов для вывода пучков частиц из камер ускорителей и для разводки пучков между экспериментальными установками.

В 1980-х гг. М. А. Кумахов [22] обобщил ранее созданную теорию каналирования и предложил методы управления движением нейтронов и жестких фотонов с помощью трубок, искусственно сконструированных из параллельно изогнутых пластин. В этой теории впервые указывалось на перераспределение плотности потока частиц внутри кристалла в процессе каналирования и устанавливалась зависимость максимумов и минимумов интенсивности потока от его продольной координаты. Известный эффект Кумахова заключа-

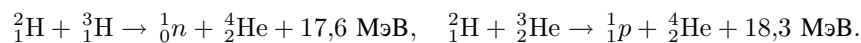
ется в спонтанном излучении заряженными частицами при каналировании в направлении их движения. Использование этого эффекта на периодически изогнутых кристаллах дает возможность получения нового источника высокоэнергетического гамма-излучения [150, 151]. Подобные устройства генерации когерентных фотонов каналируемыми частицами называются кристаллическими ондуляторами и широко используются.

Выполненные в 1986 г. первые экспериментальные исследования [152] поперечных импульсов частиц в канале показали, что такие распределения подобны радуге или каустикам.

Как отмечалось в [153], недавно Ю. Н. Демков объединил в теоретическом рассмотрении зависимость максимумов и минимумов интенсивности каналируемого потока от его продольной координаты и поперечных импульсов частиц в канале. Главным результатом такого объединения [154, 155] стало предсказание эффекта сверхфокусировки, заключающегося в том, что в потоке каналируемых частиц имеются фокусирующие области, где его плотность возрастает в сотни раз по сравнению с плотностью потока частиц, входящих в кристалл. Предсказанный эффект подтвержден расчетами [156] по методу Монте-Карло и предложен в [154] как идейная основа для создания субатомного микроскопа и генерации контролируемых реакций ядерного синтеза. Согласно этой идее эффект сверхфокусировки можно использовать для существенного увеличения эффективности взаимодействия частиц, помещая один из объектов взаимодействия (имплантированное в кристалл ядро-мишень) в заранее рассчитанные положения фокусов либо осуществляя процесс встречного каналирования частиц таким образом, чтобы точка встречи для обоих пучков совпадала с их фокусами.

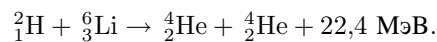
Конкретные предложения по стимулированию ядерных реакций синтеза на каналируемых в монокристалле пучках ионов высказаны Н. Ж. Такибаевым в [157] и обсуждались позже в [158–161].

Первый вариант [158] реализации ядерного синтеза основан на каналировании в кристалле встречных пучков ионов, например, пучков дейтерия и трития или же пучков дейтерия и гелия:



Согласно данным в [159] оценкам выход этих ядерных реакций может быть существенно увеличен подбором кристалла и микрофокусировкой встречных пучков на входе в кристалл.

Другой вариант [158] реализации ядерного синтеза требует предварительной имплантации в кристалл ядер-мишеней. Пример такой реализации — реакция дейтронов, каналируемых в кристалле, с имплантированными в него ядрами лития:



Еще один перспективный способ [160] ядерного синтеза основан на использовании ядра-имплантанта, находящегося в таком резонансном состоянии, средний размер которого существенно превышает размер его основного состояния.

Из представленного выше краткого хронологического обзора следует, что использование принципа движения частиц внутри нанотрубок, получаемых в кристаллах, имеет множество приложений в бурно развивающейся в настоящее время области нанотехнологий. Поэтому теоретическое описание процессов каналирования и столкновений частиц в кристаллах является актуальной задачей современной квантовой теории рассеяния.

Обсудим, а затем дополним недавнее теоретическое описание [161] столкновения двух каналируемых положительно заряженных частиц p_j и p_k . В этом описании сначала предполагается, что частицы p_j и p_k взаимодействуют со всеми атомами только одного, причем ближайшего к каналу, ряда атомов посредством суммарных кулоновских потенциалов U_j и U_k , а взаимодействие между частицами описывается некоторым центральным потенциалом $V_i(x_i)$. Далее выбирается система декартовых координат S_3 с ортом e_3 , направленным вдоль канала, и после разложения усредненных по координатам всех атомов указанного ряда взаимодействий U_j и U_k в ряды Тейлора с центрами, лежащими на канале ($\theta_x = 0$), получается шестимерное уравнение Шредингера, которое в частном случае $m_j z_k = m_k z_j$ распадается на два уравнения. Первое уравнение Шредингера описывает движение центра масс частиц в трехмерном осцилляторном потенциале, а второе уравнение записывается в системе центра масс частиц p_j и p_k в виде двумерного уравнения Шредингера для волновой функции ψ относительного движения этих частиц с энергией e .

Представим это уравнение в сферических координатах (x, θ_x, φ_x) вектора Якоби $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}_i$, соединяющего частицы p_j и p_k . Обсудим получившееся уравнение

$$[-x^{-2}\partial_x(x^2\partial_x) + \mathbf{I}_x^2(\hat{x})x^{-2} + V_{\text{chan}}(x) + V_i(x) - e]\psi(\mathbf{x}) = 0. \quad (5.14)$$

Движение частиц во всех направлениях, не совпадающих с каналом ($\theta_x \neq 0$), ограничивается ловушечным (запирающим) потенциалом

$$V_{\text{chan}}(x) \equiv \gamma^2 (x \sin \theta_x)^2, \quad \gamma^2 = 1/4.$$

Этот потенциал бесконечно возрастает при $\theta_x \neq 0$ и $x \rightarrow \infty$ и поэтому не подчиняется ограничению Като (3.1). Более того, полное взаимодействие $V_i + V_{\text{chan}}$ — нецентральное, поэтому полный угловой момент системы двух каналируемых частиц не сохраняется. Тем не менее вблизи точки парного удара любое регулярное решение обсуждаемого уравнения является рядом по целым степеням переменной x . Докажем это утверждение, предположив, что

взаимодействие V_i подчиняется условиям (1.31) в самом общем случае А и полагая для краткости $q \equiv q_i > 0$.

Сначала докажем, что общее регулярное решение ψ уравнения (5.14) представится формальным рядом по целым степеням x :

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \psi^n(\hat{x}), \quad (5.15)$$

а каждая компонента ψ^n этого ряда ортогональна любой сферической функции $Y_{b\beta}(\hat{x})$ с $b > n$, т.е. раскладывается в конечный сферический ряд с, вообще говоря, ненулевыми сферическими компонентами $f_{b\beta}^n$, $b \leq n$:

$$\psi^n(\hat{x}) = \sum_{b=0}^n \sum_{\beta=-b}^b f_{b\beta}^n Y_{b\beta}(\hat{x}), \quad f_{b\beta}^n \equiv \langle Y_{b\beta}(\hat{x}) | \Psi(\hat{x}) \rangle. \quad (5.16)$$

Положим по определению $\psi^m \equiv 0$ при $m < 0$. Используя (1.31), (5.16) и соотношение

$$(\sin \theta_x)^2 = \frac{2}{3} [1 - P_2(\cos \theta_x)],$$

сведем уравнение (5.14) к рекуррентной по индексу $n = -2, -1, \dots$ цепочке уравнений

$$\begin{aligned} [\mathbf{1}_x^2 - (n+2)(n+3)] \psi^{n+2}(\hat{x}) = -q\psi^{n+1}(\hat{x}) + \\ + e\psi^n(\hat{x}) - \sum_{p=0}^n \bar{V}_{ip} \psi^{n-p}(\hat{x}) - \frac{2}{3} \gamma [1 - P_2(\cos \theta_x)] \psi^{n-2}(\hat{x}). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Если эта цепочка нетривиально разрешима, то представление (5.15) существует. Уравнение для ψ^{n+2} , $n \geq -2$, имеет решение тогда и только тогда, когда его правая часть ортогональна общему решению соответствующего однородного уравнения, т.е. всем функциям $Y_{n+2,\beta}(\hat{x})$ с $|\beta| \leq n+2$. Докажем такую ортогональность по индукции. Общее регулярное решение первого ($n = -2$) уравнения (5.17) — произведение функции $Y_{00}(\hat{x})$ и произвольного числового коэффициента f_{00}^0 :

$$\psi^0(\hat{x}) = f_{00}^0 Y_{00}(\hat{x}). \quad (5.18)$$

Поэтому правая часть второго ($n = -1$) уравнения (5.17) для неизвестной функции ψ^1 ортогональна функциям $Y_{1\beta}(\hat{x})$, $\beta = 0, \pm 1$. Значит, решение ψ^1 существует и равно сумме частного решения $q\psi^0/2$ исследуемого неоднородного уравнения и общего решения соответствующего однородного уравнения

$$\psi^1(\hat{x}) = \frac{q}{2} f_{00}^0 Y_{00}(\hat{x}) + \sum_{\beta=0,\pm 1} f_{1\beta}^1 Y_{1\beta}(\hat{x}). \quad (5.19)$$

Итак, ψ^0 и ψ^1 — ряды (5.16) с произвольными константами f_{00}^0 и $f_{1\beta}^1$. 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 (5.16), но искомого решения ψ^{n+2} , вообще говоря, бесконечный сферический ряд. В уравнении (5.17) заменим все функции $\Psi^{n'}$ с $n' \leq n+2$ их рядами. С помощью (3.20) спроектируем получившееся уравнение на сферический базис (1.5). В итоге для искомого проекций $f_{b\beta}^{n+2}$ получатся алгебраические и незацепляющиеся ни по индексу $b = 0, 1, \dots$, ни по индексу $\beta = -b, \dots, b$ уравнения

$$[b(b+1) - (n+2)(n+3)] f_{b\beta}^{n+2} = -q f_{b\beta}^{n+1} + e f_{b\beta}^n - \sum_{p=0}^n \bar{V}_{ip} f_{b\beta}^{n-p} - \\ - \frac{2}{3} \gamma f_{b\beta}^{n-2} - (-1)^b \frac{\sqrt{5}}{6\pi} \gamma \sum_{b'=b, b\pm 2} (2b'+1)^{1/2} C_{b'0b0}^{20} C_{b'\beta'20}^{b\beta} f_{b'\beta'}^{n-p}. \quad (5.20)$$

В этих уравнениях $b' \leq n-p$, а $s \leq p$, следовательно, $b'+2 \leq n$, и поэтому при $b > n$ все коэффициенты $C_{s0b0}^{b'0}$, а значит и сумма по индексам b', β' , обращаются в нуль. Следовательно, при $b > n+2$, когда по предположению индукции $f_{b\beta}^{n+1}, f_{b\beta}^n = 0$, уравнения (5.20) становятся однородными и имеют только тривиальные решения: $f_{b\beta}^{n+2} \equiv 0, |\beta| \leq b$. При $b = n+2$ и любом $\beta = -b, \dots, b$ эти уравнения — тождества типа $0 f_{n+2, \beta}^{n+2} = 0$. Им подчиняются произвольные константы $f_{n+2, \beta}^{n+2}$. Так как при $b \leq n+1$ исследуемые уравнения (5.20) всегда имеют нетривиальные решения $f_{b\beta}^{n+2}, |\beta| \leq b$, то ψ^{n+2} — конечная сумма типа (5.16). Следовательно, вся цепочка исходных уравнений (5.17) разрешима, а для всех ее решений ψ^n верны представления (5.16), что и требовалось доказать.

Теперь построим разложения частных регулярных решений ψ^ε уравнения (5.14), обладающих полным набором квантовых чисел ε . Определим такой набор. С гамильтонианом исследуемого уравнения коммутируют только два оператора: азимутальная компонента $l_{\varphi_x} = i\partial_{\varphi_x}$ оператора углового момента l_x и оператор P_θ замены $\theta_x \rightarrow \pi - \theta_x$. Поэтому набор ε состоит из двух чисел: $\varepsilon = \{\beta, v\}$. Ими являются собственное число $\beta = 0, 1, \dots$ оператора l_{φ_x} и собственное число $v = \pm 1$ оператора P_θ . Сферические функции $Y_{b\beta}(\hat{x})$ являются собственными функциями обоих операторов:

$$(l_{\varphi_x} - \beta) Y_{b\beta}(\hat{x}) = 0, \quad [P_\theta - (-1)^b] Y_{b\beta}(\hat{x}) = 0.$$

Поэтому общее решение ψ станет искомым частным решением ψ^ε , если в рядах (5.15) и (5.16) оставить только те слагаемые, которые являются соб-

ственными функциями операторов l_{φ_x} и P_{θ} . В результате получится представление

$$\psi^\varepsilon(\mathbf{x}) = \sum_{n=0}^{\infty} x^n \sum_b^n f_{b\beta}^n Y_{b\beta}(\hat{x}), \quad (5.21)$$

в котором индекс β — квантовое число, а индекс b принимает только четные или нечетные значения, если $v = 1$ или $v = -1$. Коэффициенты $f_{b\beta}^n$ ряда (5.21) подчиняются цепочке уравнений (5.17), в которой теперь $\beta' = \beta$. Нетрудно найти все коэффициенты $f_{b\beta}^n$ с $n \leq 4$, а затем получить явную асимптотику функции ψ^ε при $x \rightarrow 0$ и из нее вывести связи при $x = 0$.

Для примера рассмотрим случай $\beta = 0$. Если $v = 1$, то при $x \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \psi^\varepsilon(x, \hat{x}) = & \left[1 + \frac{qx}{2} + \frac{x^2}{12} (q^2 + 2\bar{V}_{i0} - 2e) + \right. \\ & \left. + \frac{x^3}{144} (q^3 + 4q\bar{V}_{i0} - 4eq + 12\bar{V}_{i1}) \right] \psi^\varepsilon(0, \hat{x}) + \\ & + x^2 \left(1 + \frac{qx}{6} \right) f_{20}^2 Y_{20}(\hat{x}) + O(x^4), \quad (5.22) \end{aligned}$$

где $\psi^\varepsilon(0, \hat{x}) = f_{00}^0 Y_{00}(\hat{x})$, а при $x = 0$ имеются связи

$$(2\partial_x - q)\psi^\varepsilon(x, \hat{x}) = 0, \quad [12(2\partial_x - q) + q^3 - 12\bar{V}_{i1}] \psi^\varepsilon(x, \hat{x}) = 0. \quad (5.23)$$

Если же $v = -1$, то при $x \rightarrow 0$

$$\begin{aligned} \psi^\varepsilon(x, \hat{x}) = & x \left\{ 1 + \frac{qx}{4} + \frac{x^2}{40} (q^2 + 4\bar{V}_{i0} - 4e) + \right. \\ & \left. + \frac{x}{7200} [q^3 + 14q(\bar{V}_{i0} - e) + 40\bar{V}_{i0}] \right\} \partial_x \psi^\varepsilon|_{x=0} + \\ & + x^3 \left(1 - \frac{qx}{8} \right) f_{30}^3 Y_{30}(\hat{x}) + O(x^5), \quad (5.24) \end{aligned}$$

где $\partial_x \psi^\varepsilon|_{x=0} = f_{10}^1 Y_{10}(\hat{x})$, а при $x = 0$ выполняются связи

$$\begin{aligned} (2\partial_x - q)\partial_x \psi^\varepsilon(x, \hat{x}) = & 0, \\ [60(2\partial_x - q) + 13q^2 - 47q(e - \bar{V}_{i0}) + 40\bar{V}_{i1}] \partial_x \psi^\varepsilon(x, \hat{x}) = & 0. \quad (5.25) \end{aligned}$$

Отметим, что первая из связей (5.22) воспроизводит классическое условие Като (3.3) для двух заряженных частиц, взаимодействующих посредством потенциала V_i вне кристалла, т. е. в случае $\gamma = 0$.

Замечания. Ни в одной из упомянутых работ [153–161] при обсуждении ядерного синтеза в кристаллах не дано сравнения энергозатрат на реализацию

процесса каналирования с полезной энергией, выделяемой при синтезе, и не предложено практических способов ее использования. Поэтому ни одну из известных на сегодняшний день теоретически возможных схем ядерного синтеза в кристаллах нельзя считать инновационным проектом ядерной энергетики, современные тенденции развития которой, в частности, инновационные проекты ядерных реакторов, обсуждены в недавнем обзоре [162].

Суммарное воздействие атомов кристалла на каналируемую систему двух частиц приводит к локализации волновой функции вблизи оси канала. Поэтому система трех частиц, состоящая из имплантированного в кристалл ядра-мишени и двух каналируемых частиц, с большой вероятностью находится в конфигурации, близкой к линейной. Для приближенного описания состояний такой системы в рамках уравнения Шредингера предлагается использовать конечные подсуммы разложений его регулярных решений в пределе линейной конфигурации трех частиц в кристалле. Метод построения таких разложений принципиально ничем не отличается от метода, представленного в разд. 4.

Как известно [66, 67], парные взаимодействия V_k в системе трех частиц можно представить в виде разбиений

$$V_k = V_k^u + V_k^s, \quad k = 1, 2, 3; \quad V = \sum_{k=1}^3 V_k^u \neq 0, \quad \sum_{k=1}^3 V_k^s \equiv 0$$

на физические и ложные слагаемые. Сумма физических слагаемых V_k^u по всем парам частиц отлична от нуля, в то время как сумма ложных слагаемых V_k^s по всем парам частиц тождественно равна нулю. В [66] доказан критерий существования нетривиальных ($V_k^s \neq 0$) ложных слагаемых и показано, что достаточное условие этого критерия равносильно закону сохранения некоторого квантового числа. Кроме того, в [66] впервые показано, что при условии

$$z_1 z_2 \sqrt{\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}} + z_2 z_3 \sqrt{\frac{m_2 m_3}{m_2 + m_3}} + z_1 z_3 \sqrt{\frac{m_1 m_3}{m_1 + m_3}} = 0 \quad (5.26)$$

кулоновские парные взаимодействия имеют ложные слагаемые и поэтому кулоновское отталкивание V_i^u двух одноименно заряженных частиц p_j и p_k ослабляется в линейной конфигурации трех частиц примерно на 40% по сравнению с кулоновским отталкиванием V_i в отсутствие третьей частицы: $V_i^u/V_i \approx 0,4$. Можно ожидать, что этот эффект увеличит выход реакции ядерного синтеза в системе, состоящей из имплантированного в кристалл ядра-мишени p_i и двух одноименно заряженных и каналируемых навстречу друг другу частиц p_j и p_k , если, конечно, массы и заряды ядра и частиц подчиняются условию (5.26). В [67] дано детальное исследование этого условия и затабулированы значения некоторых масс и зарядов, при которых оно выполняется.

Уравнение (5.14) описывает динамику [163] системы из протона p_j и электрона p_k в сильном однородном магнитном поле при следующих условиях: протон помещен в начало системы координат S_3 , в которой вектор x имеет смысл радиуса-вектора электрона, измеряемого в атомных единицах; $V_i = q/x$ — кулоновское взаимодействие между протоном и электроном, $q = -2$; вектор напряженности магнитного поля \mathbf{B} направлен вдоль орта e_3 , а $\gamma^2 = B/(4B_0)$, где $B_0 = 2,35 \cdot 10^5$ Тл. Строение регулярных решений такого уравнения вблизи точки удара электрона с протоном зависит от квантовых чисел β и ν , и в случае $\beta = 0$ описывается формулами (5.22)–(5.25). Эти соотношения предлагается использовать для улучшения и контроля точности вычисления волновых функций атома водорода и сечений его ионизации в магнитном поле. Наиболее адаптированными и достоверными для таких расчетов являются недавно предложенные символьно-численные алгоритмы [163–168], основанные на методе Канторовича [8].

Плотность вероятности системы нескольких квантовых частиц, не взаимодействующих ни с какой средой, становится заметно большей вблизи малых окрестностей точек тройного и парных соударений лишь при довольно высоких энергиях столкновения. Системы нескольких частиц с небольшой полной энергией, но находящиеся в кристалле или в однородном магнитном поле, с большей вероятностью локализуются ловушечными потенциалами вблизи точек тройного и парных соударений и вдоль выделенной прямой: кристаллографической оси или направления магнитного поля. Поэтому исследования низкоэнергетических столкновений нескольких квантовых частиц в кристалле и в магнитных ловушках, в частности, обобщения разложений Фока и Като для таких столкновений, представляются актуальными и важными как для развития теории рассеяния, так и для практических приложений в нанотехнологиях.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленный в разд. 2 метод построения [76–78] разложений вблизи точки тройного удара является довольно общим и универсальным: его можно единообразно применить для последовательного построения и анализа разложений регулярных решений одно-, дву- и трехмерных уравнений Фаддеева и Шредингера вблизи точки тройного удара при любых значениях полного углового момента и пространственной четности системы трех частиц с любыми центральными взаимодействиями, представимыми степенными рядами (1.31) по целым степеням расстояния между двумя частицами.

Несомненное преимущество метода — простота его реализации — обусловлено тем, что стартовой и ключевой для всех построений является рекуррентная цепочка неоднородных обыкновенных дифференциальных уравнений (2.33) второго порядка с тривиальными граничными условиями.

Предложенным методом впервые исследована зависимость строения разложений вблизи точки тройного удара регулярных решений дву- и трехмерных уравнений Фаддеева и Шредингера от строения (1.32) разложений (1.31) центральных парных взаимодействий. В частности, доказано, что разложения всех этих решений вблизи точки тройного удара являются рядами по целым степеням гиперрадиуса только тогда, когда разложения парных взаимодействий содержат лишь четные степени их аргументов.

Изложенные в разд. 3 и 4 однотипные методы построения и анализа формальных разложений регулярных решений дву- и трехмерных уравнений Шредингера и Фаддеева вблизи точки парного удара [79, 80] и в пределе линейной конфигурации [81] являются довольно общими и исключительно простыми по следующим причинам.

Во-первых, эти методы применимы для системы трех разных частиц с центральными парными взаимодействиями довольно общего для задач атомной и молекулярной физики типа (1.31) и при любых допустимых значениях полного углового момента и пространственной четности.

Во-вторых, эти методы позволяют исследовать полные (бесконечные) разложения регулярных решений дву- и трехмерных уравнений Шредингера и Фаддеева вблизи точки парного удара и в пределе линейной конфигурации трех частиц.

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

Обсужденные в разд. 5 особые случаи указывают на необходимость и актуальность дальнейших исследований строения волновых функций вблизи особых конфигураций систем нескольких квантовых частиц.

Автор признателен С. И. Веницкому за полезные обсуждения и ценные замечания.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Смирнов В. И.* Курс высшей математики. М.: Наука, 1974.
2. *Сансоне Дж.* Обыкновенные дифференциальные уравнения. М.: Изд-во иностр. лит., 1953.
3. *Федорюк М. В.* Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1983.
4. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. М.: Наука, 1974. Т. 2.
5. *Абрамовиц М., Стиган И.* Справочник по специальным функциям. М.: Наука, 1979.

6. Прудников А. П., Брычков Ю. А., Маричев О. И. Интегралы и ряды. Специальные функции. М.: Наука, 1983. Т. 2.
7. Михлин С. Г. Вариационные методы в математической физике. М.: Гостехиздат, 1957.
8. Канторович Л. В., Крылов В. И. Приближенные методы высшего анализа. М.: Гостехиздат, 1952.
9. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М.: Наука, 1989.
10. Prenter P. M. Splines and Variational Methods. N. Y.: Wiley, 1975.
11. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980.
12. Роженко А. И. Теория и алгоритмы вариационной сплайн-аппроксимации. Новосибирск: ИВМ и МГ СО РАН, 2005.
13. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
14. Шмид Э., Цигельман Х. Проблема трех тел в квантовой механике. М.: Наука, 1979.
15. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
16. Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. М.: Наука, 1975.
17. Джибути Р. И., Крупенникова Н. Б. Метод гиперсферических функций в квантовой механике нескольких тел. Тбилиси: Мецниереба, 1984.
18. Вильдермут К., Тан Я. Единая теория ядра. М.: Мир, 1980.
19. Друкарев Г. Ф. Столкновение электронов с атомами и молекулами. М.: Наука, 1978.
20. Петеркоп Р. К. Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975.
21. Кумахов М. А., Шиммер Г. Атомные столкновения в кристаллах. М.: Атомиздат, 1980.
22. Кумахов М. А. Излучение каналированных частиц в кристаллах. М.: Энергоатомиздат, 1986.
23. Абаренков И. В., Братцев В. Ф., Тулуб А. В. Начала квантовой химии. М.: Высш. шк., 1989.
24. Степанов Н. Ф., Пупышев В. И. Квантовая механика молекул и квантовая химия. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991.
25. Фаддеев Л. Д. // ЖЭТФ. 1960. Т. 39. С. 1459.
26. Якубовский О. Я. // ЯФ. 1967. Т. 5. С. 1312.
27. Merkuriev S. P., Gignoux C., Laverne A. // Ann. Phys. 1976. V. 99. P. 30.
28. Квицинский А. А. и др. // ЭЧАЯ. 1986. Т. 17. С. 267.

29. *Kostrykin V. V., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* // *Few-Body Syst.* 1989. V. 6. P. 97.
30. *Квицинский А. А., Кострыкин В. В., Меркурьев С. П.* // *ЭЧАЯ.* 1990. Т. 21. С. 1301.
31. *Меркурьев С. П., Позднеев С. А.* // *ЯФ.* 1979. Т. 29. С. 620.
32. *Куперин Ю. А., Меркурьев С. П., Квицинский А. А.* // *Вестн. ЛГУ.* 1981. Вып. 4. С. 66.
33. *Куперин Ю. А., Меркурьев С. П., Квицинский А. А.* Микроскопические расчеты легких ядер: Сб. Калинин, 1982. С. 4.
34. *Куперин Ю. А., Меркурьев С. П., Квицинский А. А.* // *ЯФ.* 1983. Т. 37. С. 1440.
35. *Виницкий С. И. и др.* // *ЯФ.* 1990. Т. 51. С. 641.
36. *Квицинский А. А.* // *Письма в ЖЭТФ.* 1982. Т. 36. С. 375.
37. *Квицинский А. А., Меркурьев С. П.* // *ЯФ.* 1985. Т. 41. С. 647.
38. *Квицинский А. А., Латыпов Д. М.* // *ЯФ.* 1991. Т. 53. С. 1552.
39. *Merkuriev S. P., Motovilov A. K.* // *Lett. Math. Phys.* 1983. V. 7. P. 497.
40. *Merkuriev S. P., Motovilov A. K., Yakovlev S. L.* // *ТМФ.* 1993. Т. 94. С. 435.
41. *Яковлев С. Л., Филихин И. Н.* // *ЯФ.* 1993. Т. 56. С. 98.
42. *Яковлев С. Л., Филихин И. Н.* // Там же. С. 24.
43. *Яковлев С. Л., Филихин И. Н.* // *ЯФ.* 1995. Т. 58. С. 817.
44. *Яковлев С. Л., Филихин И. Н.* // *ЯФ.* 1997. Т. 60. С. 1926.
45. *Яковлев С. Л.* // *ТМФ.* 1995. Т. 102. С. 323.
46. *Руднев В. А., Яковлев С. Л.* // *ЯФ.* 1995. Т. 58. С. 1762.
47. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Ho Y. K.* // *Nucl. Phys. A.* 2001. V. 684. P. 623.
48. *Motovilov A. K., Sofianos S. A., Kolganova E. A.* // *Chem. Phys. Lett.* 1997. V. 275. P. 168.
49. *Motovilov A. K. et al.* // *Nucl. Phys. A.* 2001. V. 684. P. 646c.
50. *Motovilov A. K. et al.* // *Eur. Phys. J. D.* 2001. V. 13. P. 33.
51. *Sandhas W. et al.* // *Few-Body Syst.* 2004. V. 34. P. 137.
52. *Suslov V. M., Vlahovic B.* // *Few-Body Syst. Suppl.* 2003. V. 14. P. 197.
53. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* // *Phys. Rev. A.* 1992. V. 45. P. 2723.
54. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // *Ibid.* V. 46. P. 7301.
55. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // *Phys. Rev. A.* 1993. V. 47. P. 994.
56. *Hu C.-Y., Kvitsinsky A. A.* // *Phys. Rev. A.* 1994. V. 50. P. 1924.
57. *Kvitsinsky A. A., Hu C.-Y., Cohen J. S.* // *Phys. Rev. A.* 1996. V. 53. P. 255.
58. *Roudnev V. A., Yakovlev S. L.* // *Comp. Phys. Commun.* 2000. V. 126. P. 162.
59. *Roudnev V. A., Yakovlev S. L.* // *Chem. Phys. Lett.* 2000. V. 328. P. 97.
60. *Roudnev V. A.* // *Chem. Phys. Lett.* 2003. V. 367. P. 95.

61. Пупышев В. В. // ЯФ. 1986. Т. 43. С. 260.
62. Пупышев В. В. // ТМФ. 1989. Т. 81. С. 86.
63. Пупышев В. В. // ЯФ. 1998. Т. 61. С. 1960.
64. Пупышев В. В. // ЯФ. 1999. Т. 62. С. 1955.
65. Пупышев В. В. // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30. С. 1562.
66. Пупышев В. В. // ТМФ. 2000. Т. 125. С. 253.
67. Пупышев В. В. // ЭЧАЯ. 2002. Т. 33. С. 843.
68. Пупышев В. В. // ТМФ. 1996. Т. 107. С. 501.
69. Пупышев В. В. // ТМФ. 2006. Т. 148. С. 227.
70. Piryushev V. V. // Phys. Lett. A. 1989. V. 140. P. 151.
71. Пупышев В. В. // ТМФ. 2001. Т. 128. С. 268.
72. Пупышев В. В. // ЯФ. 2003. Т. 66. С. 64.
73. Piryushev V. V. // J. Phys. A. 2003. V. 36. P. L13.
74. Пупышев В. В. // Письма в ЭЧАЯ. 2006. Т. 3, вып. 2. С. 12.
75. Пупышев В. В. // Там же. С. 28.
76. Piryushev V. V. JINR Preprint E5-87-902. Dubna, 1987.
77. Piryushev V. V. // Few-Body Syst. 1990. V. 8. P. 105.
78. Пупышев В. В. Препринт ОИЯИ P5-2007-79. Дубна, 2007.
79. Пупышев В. В. // ТМФ. 2003. Т. 136. С. 90.
80. Пупышев В. В. Препринт ОИЯИ P5-2007-41. Дубна, 2007.
81. Пупышев В. В. Препринт ОИЯИ P5-2007-37. Дубна, 2007.
82. Пупышев В. В. // ЯФ. 1986. Т. 43. С. 1318.
83. Пупышев В. В. // ЭЧАЯ. 2004. Т. 35. С. 257.
84. Пупышев В. В. Препринт ОИЯИ P5-2005-139. Дубна, 2005.
85. Пупышев В. В. Методы функциональных разложений в проблеме нескольких квантовых частиц. Автореф. дис. ... д-ра физ.-мат. наук. ОИЯИ, 4-2005-154. Дубна, 2005.
86. Yakovlev S. L., Hu C.-Y., Caballero D. // J. Phys. B. 2007. V. 40. P. 1675.
87. Виноцкий С. И., Пономарев Л. И. // ЭЧАЯ. 1982. Т. 13. С. 1336.
88. Chang E. S., Fano U. // Phys. Rev. A. 1972. V. 6. P. 173.
89. Chuluunbaatar O., Puzynin I. V., Vinitsky S. I. // J. Phys. B. 2001. V. 34. P. L425.
90. Chuluunbaatar O., Puzynin I. V., Vinitsky S. I. // J. Comp. Meth. Sci. Engin. 2002. V. 2. P. 37.
91. Chuluunbaatar O. et al. // J. Comp. Meth. Sci. Engin. 2003. V. 2. P. 1.
92. Пузынин И. В. и др. // ЭЧАЯ. 1999. Т. 30. С. 210.

93. Ососоков Г. А., Полянский А., Пузынин И. В. // ЭЧАЯ. 2002. Т. 33. С. 676.
94. Рубцова О. И., Кукулин В. И. // ЯФ. 2001. Т. 64. С. 1769.
95. Рубцова О. И., Кукулин В. И. // Там же. С. 1882.
96. Кукулин В. И., Рубцова О. И. // ТМФ. 2002. Т. 130. С. 64.
97. Кукулин В. И., Рубцова О. И. // ТМФ. 2003. Т. 134. С. 459.
98. Кукулин В. И., Рубцова О. И. // ТМФ. 2004. Т. 139. С. 291.
99. Bartlett J. H., Gibson J. J., Dumm C. G. // Phys. Rev. 1935. V. 47. P. 679.
100. Bartlett J. H. // Phys. Rev. 1937. V. 51. P. 661.
101. Фок В. А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1954. Т. 18. С. 161.
102. Ермолаев А. М. // Вестн. ЛГУ. 1958. Т. 14. С. 48.
103. Ермолаев А. М. // Вестн. ЛГУ. 1961. Т. 16. С. 19.
104. Ермолаев А. М. // Докл. АН СССР. 1968. Т. 12. С. 1144.
105. Демков Ю. Н., Ермолаев А. М. // ЖЭТФ. 1959. Т. 36. С. 633.
106. Ермолаев А. М., Сочилин Г. Б. // Докл. АН СССР. 1964. Т. 155. С. 1050.
107. Ermolaev A. M., Sochilin G. B. // J. Quantum Chem. 1968. V. 5. P. 333.
108. Sochilin G. B. // J. Quantum Chem. 1969. V. 6. P. 297.
109. Macek J. H. // Phys. Rev. 1967. V. 160. P. 170.
110. Morgan III J. D. // J. Theor. Chem. Acta. 1986. V. 69. P. 181.
111. Davis C. L., Maslen E. N. // J. Phys. A. 1983. V. 16. P. 4237.
112. Hylleraas E. A. // Z. Phys. 1929. Bd. 48. S. 347.
113. Hylleraas E. A., Mitdal J. // Phys. Rev. 1956. V. 103. P. 829.
114. Frankovsky K., Pekeris C. L. // Phys. Rev. 1966. V. 146. P. 46.
115. Frankovsky K. // Phys. Rev. 1967. V. 160. P. 1.
116. Freund D. E., Huxtable B. D., Morgan III J. D. // Phys. Rev. A. 1984. V. 29. P. 980.
117. Chuluunbaator O., Puzynin V. I., Vinitzky S. I. // J. Phys. B. 2001. V. 34. P. L425.
118. Korobov V. I. // Phys. Rev. A. 2002. V. 66. P. 024501.
119. Krink D. L. // J. Chem. Phys. 1974. V. 60. P. 66.
120. Abbott P. C., Maslen E. N. // J. Phys. A. 1987. V. 20. P. 2043.
121. Gottschalk J. E., Abbott P. C., Maslen E. N. // Ibid. P. 2077.
122. Gottschalk J. E., Maslen E. N. // Ibid. P. 2781.
123. Palumbo F. // Phys. Lett. B. 1977. V. 69. P. 275.
124. Haftel M. I., Mandelzweig V. B. // Ann. Phys. (N. Y.). 1983. V. 150. P. 48.
125. Klar H. J. // Physica A. 1985. V. 18. P. 1561.
126. Popov Yu. V., Ancarani L. U. // Phys. Rev. A. 2000. V. 62. P. 42702.

127. *Kato T.* // Commun. Pure and Appl. Math. 1957. V. 10. P. 151.
128. *Bingel W. A.* // Z. Naturforsch. A. 1963. V. 18. P. 1249.
129. *Pack R. T., Brown W. B.* // J. Chem. Phys. 1966. V. 45. P. 556.
130. *Коробов В. И.* // ЯФ. 1989. Т. 50. С. 1595.
131. *Korobov V. I., Puzynin I. V., Vinitsky S. I.* // Muon Catalyzed Fusion. 1992. V. 7. P. 63.
132. *Неудачин В. Г., Попов Ю. В., Смирнов Ю. Ф.* // УФН. 1999. Т. 169. С. 1111.
133. *Lahmat-Bennani A. et al.* // Phys. Rev. A. 1999. V. 59. P. 3548.
134. *Watanabe N. et al.* // Phys. Rev. A. 2005. V. 72. P. 032705.
135. *Joulakian B., Dal Capello C.* // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. 3788.
136. *Пузынин И. В. и др.* // ЭЧАЯ. 2007. Т. 38. С. 144.
137. *Pluvinae P.* // Ann. Phys. (Paris). 1950. V. 5. P. 145.
138. *Jones J., Madison D. H.* // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 73201.
139. *Jones J., Macek J. H., Madison D. H.* // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. P. 012712.
140. *Anzarani L. U., Montagnese T., Dal Capello C.* // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. P. 012711.
141. *Chuluunbaatar O. et al.* // Phys. Rev. A. 2006. V. 74. P. 014703.
142. *Anzarani L. U.* // Симметрии и интегрируемые системы: Избр. тр. семинара (2000–2005). Дубна, 2006. Т. 1. С. 26.
143. *Starc J.* // Phys. Zn. 1912. V. 13. P. 973.
144. *Robinson M. T., Oen O. S.* // Phys. Rev. 1963. V. 132. P. 2385.
145. *Thompson M. W.* // Contemp. Phys. 1968. V. 9. P. 575
146. *Томпсон М.* // УФН. 1969. Т. 99. С. 297.
147. *Линхард Й.* // Там же. С. 249.
148. *Tsyganov E. N.* Preprint Fermi-Lab. No. 682. 1976.
149. *Тарантин М. А.* // ЭЧАЯ. 1998. Т. 29. С. 12.
150. *Korol A. V. et al.* // J. Phys. G. 1998. V. 24. P. L45.
151. *Хоконов А. Х., Хоконов М. Х., Киздермишев А. А.* // ЖТФ. 2002. Т. 72. С. 69.
152. *Krause H. F. et al.* // Phys. Rev. B. 1986. V. 33. P. 6036.
153. *Виницкий С. И., Дубовик В. М., Козлов Г. А.* Симметрии и интегрируемые системы: Избр. тр. семинара (2000–2005). Дубна, 2006. Т. 1. С. 94.
154. *Detkov Yu. N., Meyer J. D.* // Eur. Phys. J. B. 2004. V. 42. P. 361.
155. *Демков Ю. Н., Мейер Й.* Симметрии и интегрируемые системы: Избр. тр. семинара (2000–2005). Дубна, 2006. Т. 1. С. 85.
156. *Meyer J. D. et al.* // Nucl. Instr. Meth. B. 1999. V. 1995. P. 440.
157. *Такибаев Н. Ж.* // Вестн. НЯЦ РК. 2000. Т. 5. С. 35.

158. *Takibayev N. Zh.* // *Hadronic J.* 2002. V. 25. P. 459.
159. *Красовицкий П. М., Такибаев Н. Ж.* // *Вестн. НЯЦ РК.* 2001. Т. 4. С. 31.
160. *Красовицкий П. М., Такибаев Н. Ж.* // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2003. Т. 67. С. 1588.
161. *Красовицкий П. М., Такибаев Н. Ж.* // *Изв. РАН. Сер. физ.* 2006. Т. 70. С. 709.
162. *Бабенко В. А., Енковский Л. Л., Павлович В. Н.* // *ЭЧАЯ.* 2007. Т. 38. С. 1517.
163. *Gusev A. A. et al.* // *Lecture Notes in Comp. Sci.* 2006. V. 4194. P. 205.
164. *Dimova M. G., Kashiev M. S., Vinitky S. I.* // *J. Phys. B.* 2005. V. 38. P. 2337.
165. *Vinitky S. I. et al.* // *Programming and Computer Software.* 2007. V. 33. P. 105.
166. *Chuluunbaatar O. et al.* // *J. Phys. A.* 2007. V. 40. P. 11485.
167. *Chuluunbaatar O. et al.* // *Comp. Phys. Commun.* 2007. V. 177. P. 649.
168. *Chuluunbaatar O. et al.* // *Comp. Phys. Commun.* 2008. V. 178. P. 301.