Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

В. В. Пупышев, Строение регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева в пределе линейной конфигурации трех частиц, *ТМФ*, 2008, том 155, номер 3, 415–438

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf6220>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением <http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 18.208.226.222

26 апреля 2023 г., 15:16:49

© 2008 г.

В. В. Пупышев*

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

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

Ключевые слова: задача трех частиц, дифференциальные уравнения Шредингера и Фаддеева, регулярные решения, линейная конфигурация трех частиц.

1. ВВЕДЕНИЕ

Приведем основные определения. Будем использовать систему единиц, в которой заряд e электрона и постоянная Планка $\hbar$ равны единице. В трехмерном координатном пространстве $\mathbb{R}^3$ фиксируем декартову систему координат S с осями $\hat{\mathbf{e}}_1, \hat{\mathbf{e}}_2$ и $\hat{\mathbf{e}}_3$ и начальной точкой O , совпадающей с центром масс исследуемой системы $\{p_1, p_2, p_3\}$ трех частиц p_1, p_2 и p_3 с массами m_1, m_2, m_3 и зарядами z_1, z_2, z_3 . Пусть в этой системе $\mathbf{a}_{ij}$ – разность радиус-векторов $\mathbf{a}_i$ и $\mathbf{a}_j$ частиц p_i и p_j , а $\mathbf{x}_k$ и $\mathbf{y}_k$ – приведенные векторы Якоби [1]:

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

*Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна, Московская обл., Россия.
E-mail: pupyshev@thsun1.jinr.ru

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

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

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

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

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

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

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

полученным разложением является ключевой в предложенном ниже выводе соответствующего разложения фаддеевской компоненты Ψ_i^ε .

В случае центральных парных взаимодействий, например кулоновских

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

или взаимодействий более общего вида

$$V_k(x_k) = \frac{q_k}{x_k} + \bar{V}_k(x_k), \quad \bar{V}_k(x_k) = \sum_{n=0}^{\infty} x_k^n \bar{V}_{kn}, \quad \bar{V}_{kn} = \text{const}, \quad k = 1, 2, 3, \quad (5)$$

с гамильтонианом H коммутируют сам гамильтониан H , квадрат оператора полного углового момента $\mathbf{l}$, его компонента l_3 и оператор P_r инверсии $\mathbf{r}_i \rightarrow -\mathbf{r}_i$. Набор $\varepsilon \equiv \{E, \ell, m, \sigma\}$ состоит из собственных чисел этих операторов. В качестве соответствующих собственных функций часто используются бисферические гармоники

$\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$ и симметризованные линейные комбинации D -функций Вигнера $D_{mm'}^{\ell}$. Бисферические гармоники выражаются через коэффициенты Клебша–Гордана $C_{a\alpha b\beta}^{\ell m}$ и сферические функции

$$Y_{fg}(\hat{a}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-ig\varphi_a} \Theta_{fg}(\cos \theta_a), \quad \hat{a} \equiv (\theta_a, \varphi_a), \quad \hat{a} = \hat{x}_i, \hat{y}_i, \quad (6)$$

формулами [4]

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Знание явных разложений волновых функций и их фаддеевских компонент в этой области 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 [9] классу относятся трехчастичные системы, состоящие из иона и двух медленных электронов

и образовавшиеся в результате однократной ионизации атома или иона электроном. Конфигурация таких систем близка к линейной. Этот факт впервые доказан в работе [10]. Второй класс – хорошо известный в квантовой химии [11], [12] класс линейных трехатомных молекул. Его образуют все трехатомные *sp*-гибридизированные молекулы. Такими, например, являются молекулы CO_2 , HCN и BeCl_2 .

В силу перечисленных выше причин вывод и анализ асимптотических (в пределе линейной конфигурации трех частиц) разложений регулярных решений уравнений Шредингера и Фаддеева представляются интересными и важными как с теоретической, так и с прикладной точек зрения. Однако в этом пределе для таких решений не известны не только асимптотические, но даже простые формальные разложения в виде бесконечных рядов по целым степеням расстояния от одной частицы до центра масс двух других частиц и искомым функциям других трехчастичных координат.

Основная цель настоящей работы – построение и анализ формальных рядов указанного выше типа для регулярных решений уравнений Шредингера (2) и Фаддеева (3) с центральными парными взаимодействиями более общего вида (5), чем кулоновские потенциалы (4). Следует отметить, что в настоящей работе асимптотическая сходимость построенных рядов не доказана, но предполагается: явными асимптотиками рядов считаются подсуммы их нескольких наиболее медленно убывающих слагаемых, а из таких подсумм выводятся связи типа (9).

2. РЯДЫ ПАРНЫХ И ПОЛНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ

Пусть некулоновские слагаемые $\bar{V}_k$, $k \neq i$, парных взаимодействий (5) являются аналитическими функциями. Далее будем полагать, что

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

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

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

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_k \\ \mathbf{y}_k \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} c_{ki} & s_{ki} \\ -s_{ki} & c_{ki} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_i \\ \mathbf{y}_i \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} c_{ki} \\ s_{ki} \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} \cos \gamma_{ki} \\ \sin \gamma_{ki} \end{pmatrix}, \quad \gamma_{ki} \in \left[-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2} \right],$$

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

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

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

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

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

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

Следовательно, каждый член T_p ряда Тейлора функции $\bar{V}_k(x_k(x, y, u))$ с центром в точке $y = 0$ можно записать в виде суммы по полиномам $P_s(u)$ с индексом $s \leq p$:

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

Если P_y и P_u – операторы инверсии $y \rightarrow -y$ и $u \rightarrow -u$, то

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

и представление (6), то нетрудно получить искомые выражения

$$\langle Y_{a\alpha}(\hat{y}) | P_s(u) | Y_{a'\alpha'}(\hat{y}) \rangle = (-1)^s \left(\frac{4\pi}{2s+1} \right)^{1/2} C_{s0a0}^{a'0} C_{s\beta a\alpha}^{a\alpha} Y_{s\beta}^*(\hat{x}), \quad (14)$$

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

$$\langle \Theta_{a\alpha}(u) | P_s(u) | \Theta_{a'\alpha'}(u) \rangle = \delta_{\alpha\alpha'} (-1)^s \left(\frac{2s+1}{2} \right)^{1/2} C_{s0a0}^{a'0} C_{s0a'\alpha}^{a\alpha} \quad (16)$$

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

3. СТРОЕНИЕ ОБЩЕГО РЕГУЛЯРНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Докажем, что общее регулярное решение Ψ уравнения Шредингера (2) с взаимодействиями (5) является формальным рядом по целым степеням y :

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

а каждая компонента Ψ^n этого ряда ортогональна любой сферической гармонике $Y_{a\alpha}(\hat{x})$ с $a > n$, т.е. представима в виде конечного сферического ряда s , вообще говоря, ненулевыми сферическими компонентами $\Psi_{a\alpha}^n$, $a \leq n$,

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

Учитывая разложение (13), для гамильтониана H запишем представление

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

где

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

Уравнение Шредингера (2) заменой искомого решения Ψ рядом (17) сводится к рекуррентной по индексу n цепочке уравнений:

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

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

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

Поэтому доказательство существования представления (17) сводится к доказательству разрешимости такой цепочки. Согласно теории дифференциальных уравнений 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 $Y_{n+2,\alpha}(\hat{y})$ с $|\alpha| \leq n+2$. Докажем такую ортогональность по индукции.

Общее регулярное решение уравнения (21) является произведением сферической гармоники $Y_{00}(\hat{y})$ и произвольной функции Ψ_{00}^0 аргумента $\mathbf{x}$:

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

Общее регулярное решение уравнения (22) можно записать в виде суммы

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

где $\Psi_{1\alpha}^1(\mathbf{x})$, $\alpha = 0, \pm 1$, – произвольные функции.

Итак, решения Ψ^0 и Ψ^1 являются сферическими рядами (18) с произвольными сферическими компонентами Ψ_{00}^0 и $\Psi_{1\alpha}^1$. 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 (18), но искомое решение Ψ^{n+2} является, вообще говоря, бесконечным сферическим рядом. В уравнении (23) заменим все функции $\Psi^{n'}$ с $n' \leq n+2$ их рядами. С помощью (14) спроецируем получившееся уравнение на сферический базис (6). В итоге для иско- мых проекций $\Psi_{a\alpha}^{n+2}(\mathbf{x})$ получаются алгебраические уравнения, не зацепляющиеся ни по индексу $a = 0, 1, \dots$, ни по индексу $\alpha = -a, \dots, a$:

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{a\alpha}^{n+2}(\mathbf{x}) = -h(\mathbf{x}) \Psi_{a\alpha}^n(\mathbf{x}) - \\ - \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s \left(\frac{4\pi}{2s+1} \right)^{1/2} V^{ps}(x) \sum_{a'=0}^{n-p} \sum_{\alpha'=-a'}^{a'} C_{s0a0}^{a'0} C_{s\beta a\alpha'}^{a\alpha} Y_{s\beta}^*(\hat{x}) \Psi_{a'\alpha'}^{n-p}(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (26)$$

где $n = -2, -1, \dots$. По определению $\Psi_{a\alpha}^n \equiv 0$ при $n < 0$ и, кроме того, $V^{ps} \equiv 0$, если $p+s$ нечетно, а $C_{s0a0}^{a'0} = 0$, если $s+a-a'$ нечетно.

В полученных уравнениях $\alpha' \leq n-p$, а $s \leq p$, следовательно, $\alpha' + s \leq n$. Поэтому при $a > n$ все коэффициенты $C_{s0a0}^{a'0}$, а значит, и суммы по индексам a' и α' , обращаются в нуль. Следовательно, при $a > n+2$, когда по предположению индукции $\Psi_{a\alpha}^{n+1}, \Psi_{a\alpha}^n = 0$, уравнения (26) становятся однородными и имеют только тривиальные решения: $\Psi_{a\alpha}^{n+2} \equiv 0$, $|\alpha| \leq a$. При $a = n+2$ и любом $\alpha = -a, \dots, a$ эти уравнения являются тождествами типа $0 \cdot \Psi_{n+2,\alpha}^{n+2} = 0$. Им подчиняются произвольные функции $\Psi_{n+2,\alpha}^{n+2}(\mathbf{x})$. При $a \leq n+1$ исследуемые уравнения (26) всегда имеют нетривиальные решения $\Psi_{a\alpha}^{n+2}$, $|\alpha| \leq a$, которые однозначно выражаются через произвольные функции $\Psi_{n+2,\alpha}^{n+2}(\mathbf{x})$, поэтому Ψ^{n+2} – конечная сумма типа (18). Следовательно, вся цепочка исходных уравнений (21)–(23) разрешима, а для всех ее решений Ψ^n верны представления (18), что и требовалось доказать. Попутно мы показали, что все

сферические компоненты $\Psi_{a\alpha}^n$, $|\alpha| \leq a$, с максимально возможным при данном n значении $a = n$ являются произвольными функциями переменной $\mathbf{x}$, через которые однозначно и явно выражаются все остальные компоненты $\Psi_{a\alpha}^n$ с $a < n$. Вывод таких представлений несложен и заключается в решении уравнений (26) в порядке возрастания индекса n и убывания индекса a при данном n .

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

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

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

$$\begin{aligned} \Psi_{00}^3(\mathbf{x}) &= 0, & \Psi_{2\alpha}^3(\mathbf{x}) &= 0, \\ \Psi_{1\alpha}^3(\mathbf{x}) &= \frac{1}{10}h(\mathbf{x})\Psi_{1\alpha}^1(\mathbf{x}) + \frac{\sqrt{\pi}}{15}V^{11}(x)\Psi_{00}^0(\mathbf{x})Y_{1\alpha}^*(\hat{x}). \end{aligned} \quad (28)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{00}^4(\mathbf{x}) &= \frac{1}{20}\left(\frac{1}{6}h^2 + V^{20}\right)\Psi_{00}^0, & \Psi_{1\alpha}^4(\mathbf{x}), \Psi_{3\alpha}^4(\mathbf{x}) &= 0, \\ \Psi_{2\alpha}^4(\mathbf{x}) &= \frac{1}{14}\left[h\Psi_{2\alpha}^2 + \frac{\sqrt{8\pi}}{15}V^{11}\sum_{\alpha'=-1}^1 C_{1\beta 1\alpha'}^{2\alpha}\Psi_{1\alpha'}^1 Y_{1\beta}^*(\hat{x}) + \frac{\sqrt{4\pi}}{5}V^{22}\Psi_{00}^0 Y_{2\alpha}^*(\hat{x})\right]. \end{aligned} \quad (29)$$

При $n = 3, 4, \dots$ можно построить функции $\Psi_{a\alpha}^{n+2}$ с $a = n + 1, n, \dots, 0$:

$$\begin{aligned} \Psi_{n+1,\alpha}^{n+2}(\mathbf{x}) &= 0, \\ \Psi_{n\alpha}^{n+2}(\mathbf{x}) &= \frac{1}{2(2n+3)}h(\mathbf{x})\Psi_{n\alpha}^n(\mathbf{x}) + \frac{\sqrt{4\pi}}{2(2n+3)}\sum_{p=1}^n \frac{(-1)^p}{\sqrt{2p+1}}C_{n0p0}^{n-p,0}V^{pp}(x) \times \\ &\times \sum_{\alpha'=p-n}^{n-p} C_{p\beta,n-p,\alpha'}^{n\alpha}\Psi_{n-p,\alpha'}^{n-p}(\mathbf{x})Y_{p\beta}^*(\hat{x}), \quad \dots \end{aligned}$$

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

4. СТРОЕНИЕ ЧАСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В БИСФЕРИЧЕСКОМ БАЗИСЕ

В бисферическом базисе (7) оператор P^ε , проецирующий Ψ на Ψ^ε , является суммой

$$\begin{aligned} P^\varepsilon &= \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{a}+\mathbf{b}=\mathbf{1}} [1 + \sigma(-1)^{a+b}] |\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y})\rangle \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y})| = \\ &= \sum_{b=\mu(\sigma)}^{\infty} \sum_a |\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y})\rangle \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y})|. \end{aligned} \quad (30)$$

Здесь и далее по определению

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

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

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

Образом $\Psi^\varepsilon = P^\varepsilon \Psi$ ряда (17) является степенной ряд

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

в котором вследствие (18) функции $\Psi^{n\varepsilon}$ представлены конечными суммами:

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

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

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

где $\Psi_{ab}^{n\varepsilon} \equiv 0$ при нечетном $n + a$, так как в этом случае $\Psi_{a\alpha}^{n\varepsilon} \equiv 0$.

Этот же образ можно представить как разложение решения Ψ^ε по базису (7):

$$\begin{aligned} \Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \sum_{ab} \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \Psi_{ab}^\varepsilon(x, y) &\equiv \langle \mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) | \Psi(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \rangle = \sum_{n=a \geq \mu(\sigma)}^{\infty} y^n \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x), \quad (-1)^{n+a} = 1, \end{aligned} \quad (34)$$

и тем самым доказать два свойства бисферических компонент Ψ_{ab}^ε такого разложения: 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 $x > 0$.

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

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

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

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

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{ab}^{n+2,\varepsilon}(x) = & -h_b(x) \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) - \\ & - (-1)^{a+b-\ell} \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s V^{ps}(x) \sum_{a'=\mu(\sigma)}^{n-p} (2a'+1)^{1/2} \sum_{b'=|\ell-a'|}^{\ell+a} (2b'+1)^{1/2} \times \\ & \times C_{s0a'0}^{a0} C_{s0b'0}^{b0} \left\{ \begin{matrix} a & a' & s \\ b' & b & \ell \end{matrix} \right\} \Psi_{a'b'}^{n-p,\varepsilon}(x), \quad n = -2, -1, \dots, \quad a = 0, 1, \dots, n, \end{aligned} \quad (36)$$

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

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

Для цепочки уравнений (36) имеет место следующее правило отбора: функция $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ не равна тождественно нулю, если $n+b$ и $\ell+\mu(\sigma)$ одновременно четные или нечетные, $n \geq a \geq \mu(\sigma)$ и $n+a$ – четное число. Доказательство однозначной разрешимости цепочки (36) и этого правила отбора принципиально не отличается от данного выше анализа системы (23) и поэтому опускается.

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

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

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

$$\begin{aligned}\Psi^{2\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}) &= \frac{1}{6} h_\ell(x) \Psi_{0\ell}^{0\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{0\ell}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) + \sum_b \Psi_{2\ell}^{2\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{2b}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}), \\ \Psi^{3\varepsilon}(\mathbf{x}, \hat{y}) &= \frac{1}{10} \sum_b h_b(x) \Psi_{1b}^{1\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{1b}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) - \\ &\quad - \frac{V^{11}(x)}{10\sqrt{3}} \Psi_{0\ell}^{0\varepsilon}(x) \sum_{b=|\ell\pm 1|} C_{\ell 0 10}^{b0} \mathcal{Y}_{1b}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) + \sum_b \Psi_{3b}^{3\varepsilon}(x) \mathcal{Y}_{3b}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}).\end{aligned}\quad (39)$$

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

Выразив решения $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ цепочки (36) при $n \leq 4$ через неизвестные функции $\partial_y^n \Psi_{ab}^\varepsilon|_{y=0} = (n!) \Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ с $a = n$, получаем следующие асимптотические формулы:

$$\begin{aligned}\Psi_{0\ell}^\varepsilon(x, y) &= \left\{ 1 + \frac{y^2}{6} h_\ell(x) + \frac{y^4}{120} [h_\ell^2(x) + 6V^{20}(x)] \right\} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(x, 0) - \\ &\quad - \frac{\sqrt{3}}{60} y^4 V^{11}(x) \sum_{b'=|\ell\pm 1|} C_{\ell 0 10}^{b'0} \partial_y \Psi_{1b'}^\varepsilon(x, y)|_{y=0} + O(y^6),\end{aligned}\quad (40)$$

$$\begin{aligned}\Psi_{1b}^\varepsilon(x, y) &= y \left[1 + \frac{y^2}{10} h_b(x) \right] \partial_y \Psi_{1b}^\varepsilon(x, y)|_{y=0} - \\ &\quad - \frac{\sqrt{3}}{30} y^3 V^{11}(x) C_{\ell 0 10}^{b0} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(x, 0) + O(y^5),\end{aligned}\quad (41)$$

где $b = |\ell \pm (1 - \mu(\sigma))|$,

$$\begin{aligned}\Psi_{2b}^\varepsilon(x, y) &= \frac{y^2}{2} \left[1 + \frac{y^2}{14} h_b(x) \right] \partial_y^2 \Psi_{2b}^\varepsilon(x, y)|_{y=0} - (-1)^{\ell+b} \frac{y^4}{7\sqrt{2}} V^{11}(x) \times \\ &\quad \times \sum_{b'=|b\pm 1|} (2b' + 1)^{1/2} C_{b' 0 10}^{b0} \begin{Bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ b' & b & \ell \end{Bmatrix} \partial_y \Psi_{1b'}^\varepsilon(x, y)|_{y=0} + \\ &\quad + \frac{y^4}{14\sqrt{5}} V^{22}(x) C_{\ell 0 20}^{b0} \Psi_{\ell 0}^\varepsilon(x, 0) + O(y^6),\end{aligned}\quad (42)$$

где $b = |\ell \pm \mu(\sigma)|, |\ell \pm (2 - \mu(\sigma))|$.

Вычислив производные ∂_y^n , $n \leq 4$, этих асимптотик, получаем следующие связи (9) при $y = 0$ и $x > 0$. Для компоненты $\Psi_{0\ell}^\varepsilon$

$$\begin{aligned}[3\partial_y^2 - h_\ell(x)] \Psi_{0\ell}^\varepsilon(x, y) &= 0, \\ [5\partial_y^4 - h_\ell^2(x) - 6V^{20}(x)] \Psi_{0\ell}^\varepsilon(x, y) &= -2\sqrt{3} V^{11}(x) \sum_{b'=|\ell\pm 1|} C_{\ell 0 10}^{b'0} \partial_y \Psi_{1b'}^\varepsilon(x, y),\end{aligned}\quad (43)$$

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

$$\partial_y [5\partial_y^2 - 3h_b(x)] \Psi_{1b}^\varepsilon(x, y) = -\sqrt{3} V^{11}(x) C_{\ell 0 10}^{b0} \Psi_{0\ell}^\varepsilon(x, y) \quad (44)$$

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

$$\begin{aligned} \sqrt{10} \partial_y^2 [7\partial_y^2 - 6h_b(x)] \Psi_{2b}^\varepsilon(x, y) = 12\sqrt{2} V^{22}(x) C_{\ell 0 20}^{b0} \Psi_{0\ell}^\varepsilon(x, y) - \\ - 24\sqrt{5} (-1)^{\ell+b} V^{11}(x) \sum_{b'=|b\pm 1|} (2b' + 1)^{1/2} C_{b' 0 10}^{b0} \begin{Bmatrix} 2 & 1 & 1 \\ b' & b & \ell \end{Bmatrix} \partial_y \Psi_{1b'}^\varepsilon(x, y). \end{aligned} \quad (45)$$

Отметим, что вследствие правила отбора $(-1)^{n+a} = 1$ для разложений (34) все би-сферические 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 число или наоборот.

5. СТРОЕНИЕ ЧАСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА В D^σ -БАЗИСЕ

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

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

Тогда орты $\mathbf{e}_2^x$ и $\mathbf{e}_2^y$ направлены вдоль нормали $\mathbf{n} = \mathbf{x} \times \mathbf{y}$ к плоскости трех частиц, а система S^x получается поворотом системы S^y вокруг орта $\mathbf{e}_2^y$ на угол θ между векторами $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$. Так как в системе S ориентация этих векторов задана углами $\hat{x} = (\theta_x, \varphi_x)$ и $\hat{y} = (\theta_y, \varphi_y)$, а в системе S^t – углами $\hat{x}^t$ и $\hat{y}^t$:

$$\begin{aligned} \hat{x}^t = (\theta_x^t, \varphi_x^t) = (0, 0), \quad \hat{y}^t = (\theta_y^t, \varphi_y^t) = (\theta, 0), \quad t = x, \\ \hat{x}^t = (\theta_x^t, \varphi_x^t) = (\theta, \pi), \quad \hat{y}^t = (\theta_y^t, \varphi_y^t) = (0, 0), \quad t = y, \end{aligned} \quad (46)$$

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

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

В D^σ -базисе (8) оператор, проецирующий функцию Ψ на Ψ^ε , имеет вид

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

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

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

как проекции

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

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

$$Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t) | Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x}) \rangle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t), \quad (49)$$

$$\begin{aligned} \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t) | Y_{a\alpha}(\hat{y})Y_{b\beta}(\hat{x}) \rangle &= \left[\frac{1 + \sigma(-1)^{a+b}}{1 + \delta_{m'0}} \right]^{1/2} (-1)^{m+m'} \times \\ &\times C_{a\alpha b\beta}^{\ell-m} \begin{cases} (-1)^a C_{a-m'\ell m'}^{b0} \Theta_{am'}(u), & t = x, \\ (-1)^{b+m'} C_{b-m'\ell m'}^{a0} \Theta_{bm'}(u), & t = y, \end{cases} \end{aligned}$$

а для второго разложения получаем

$$\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}(\hat{x}, \hat{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t) | \mathcal{Y}_{ab}(\hat{x}, \hat{y}) \rangle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^t), \quad (50)$$

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

$$T_{ab}^{\ell m'} \equiv \left[\frac{1 + \sigma(-1)^{a+b}}{1 + \delta_{m'0}} \right]^{1/2} (-1)^{a+m'} C_{a-m'\ell m'}^{b0},$$

где $T_{ab}^{\ell m'}$ – коэффициенты Ченга–Фано [14].

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

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

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

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

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

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

с Θ -компонентами

$$\Psi_{am'}^{n\epsilon x}(x) \equiv \langle \Theta_{am'}(u) | \Psi_{m'}^{n\epsilon x}(x, \theta) \rangle = \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^{\ell+a-\mu(\sigma)} T_{ab}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n\epsilon}(x), \quad (54)$$

а при $t = y$ – конечной суммой по индексу b

$$\Psi_{m'}^{n\epsilon y}(x, \theta) = \sum_{b=m'}^{\ell+a-\mu(\sigma)} \Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(x) \Theta_{bm'}(u) \quad (55)$$

с Θ -компонентами

$$\Psi_{bm'}^{n\epsilon y}(x) \equiv \langle \Theta_{bm'}(u) | \Psi_{m'}^{n\epsilon y}(x, \theta) \rangle = \sum_{a=|\ell-b+\mu(\sigma)|}^n (-1)^{m'} T_{ba}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n\epsilon}(x). \quad (56)$$

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

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

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

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

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 [15].

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

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

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

Следовательно, формулы (53) и (55) означают, что компоненты $\Psi_{m'}^{n\epsilon x}$ и $\Psi_{m'}^{n\epsilon y}$ можно разложить в конечные суммы по ортонормированным системам функций $\Theta_{am'}(u)$

и $\Theta_{bm'}(u)$ с индексами $a, b \geq m'$. Благодаря конечности таких разложений асимптотики рядов (51), т.е. D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon t}$, можно построить заменой в (54) или (56) бисферических компонент $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ их явными выражениями (например, (40)–(42)) через неопределенные бисферические компоненты $\Psi_{ab}^{n'\varepsilon}$, $a = n' \leq n$. Согласно (54) и (56) при такой замене функции $\Psi_{m'}^{n\varepsilon x}$ и $\Psi_{m'}^{n\varepsilon y}$ с данным n выражаются через произвольные функции $f_{m'}^{n'x}$ и $f_{bm'}^{n'y}$:

$$\begin{aligned} f_{m'}^{n'x}(x) &= \sum_{b=|\ell-a+\mu(\sigma)|}^{\ell+a-\mu(\sigma)} T_{ab}^{\ell m'} \Psi_{ab}^{n'\varepsilon}(x), \\ f_{bm'}^{n'y}(x) &= (-1)^{m'} T_{ba}^{\ell m'} f_b^{n'y}(x), \quad f_b^{n'y}(x) \equiv \Psi_{ab}^{n'\varepsilon}(x), \quad a = n' \leq n. \end{aligned} \quad (59)$$

Третий способ построения асимптотик компонент $\Psi_m^{\varepsilon t}$ суммы (48) опишем более подробно. Этот способ представляется оптимальным, потому что в нем, в отличие от двух упомянутых выше способов, не нужны ни функции $\Psi_{a\alpha}^n$, ни функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$, а ключевыми являются доказанные представления (51), (53) и (55). Благодаря им для решения (48) верны два разложения:

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

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

по трем системам линейно независимых функций:

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

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

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

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

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

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

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

$$\begin{aligned} h_{m'}^x(x, \theta) &\equiv \langle D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) | h(\mathbf{x}) | D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) \rangle = \\ &= -\frac{1}{x^2} \partial_x (x^2 \partial_x) + \frac{1}{x^2} [Q_{m'm'}(\theta) + \ell(\ell+1) - 2(m')^2] + V^{00}(x) - E, \end{aligned} \quad (63)$$

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

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

При действии на функцию $\Theta_{am'}$ оператор $Q_{m'm'}$ и оператор умножения на полином $P_s(u)$ (см. (16)) сохраняют индекс m' , а образы $Q_{m',m'\pm 1}\Theta_{a,m'\pm 1}$ функций $\Theta_{a,m'\pm 1}$ подобны функции $\Theta_{am'}$ [4]:

$$\begin{aligned} [Q_{m'm'}(\theta) - a(a+1)]\Theta_{am'}(u) &= 0, \quad Q_{m'm''}(\theta)\Theta_{am''}(u) = q_{m'm''}^a \Theta_{am'}(u), \\ q_{m'm''}^a &\equiv [a(a+1) - m'm'']^{1/2}, \quad m'' = m' \pm 1. \end{aligned} \quad (65)$$

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

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)]\Psi_{am'}^{n+2,\varepsilon x}(x) &= \\ &= x^{-2} \sum_{m''=m'\pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^a \Psi_{am''}^{n\varepsilon x}(x) - h_{am'}^x(x) \Psi_{am'}^{n\varepsilon x}(x) - \\ &- \sum_{p=1}^n \sum_{s=0}^p (-1)^s V^{ps}(x) \sum_{a'=m'}^{n-p} C_{s0a0}^{a'0} C_{s0a'm'}^{am'} \Psi_{a'm'}^{n-p,\varepsilon x}(x), \end{aligned} \quad (66)$$

где, как следует из (63)–(65),

$$\begin{aligned} h_{am'}^x(x) &\equiv \langle \Theta_{am'}(u) | h_{m'}^x(x, \theta) | \Theta_{am'}(u) \rangle, \\ h_{am'}^x(x) &\equiv -\frac{1}{x^2} \partial_x (x^2 \partial_x) + \frac{1}{x^2} [\ell(\ell+1) + a(a+1) - 2(m')^2] + V^{00}(x) - E, \end{aligned} \quad (67)$$

а индексы n , a , m' таковы, что $n \geq a \geq m' \geq \mu(\sigma)$ и $n+a$ – четное число. Поэтому $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x} = 0$, если $n < 0$ или $m' > a$, или если $n+a$ нечетно.

Итак, цепочка дифференциальных уравнений (62) сведена к рекуррентной по индексу n цепочке систем линейных алгебраических уравнений (66) для искомого Θ -компонент $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}$ рядов (53). Эти системы нумеруются индексами n и a . Система с данными n и a состоит из уравнений для неизвестных $\Psi_{am'}^{n+2,\varepsilon x}$, причем $m' = \mu(\sigma), \dots, \ell$, если $a > \ell$, и $m' = a, \dots, \ell$, если $a \leq \ell$. Матрица такой системы диагональная, а нетривиальное решение $F_{am'}^{n+2,\varepsilon x}$, $m' = \mu(\sigma), \dots, \min\{a, n+2\}$,

соответствующей однородной системы существует только при $a = n + 2$ и элементарно выражается ($F_{am'}^{n+2,x} = f_{m'}^{n+2,x}$) через произвольные функции $f_{m'}^{n+2,x}(x)$, равные линейным комбинациям (59) произвольных бисферических компонент $\Psi_{n+2,b}^{n+2,\varepsilon}$. По указанным причинам построение общего решения $\Psi_{am'}^{n+2,\varepsilon x}$, $m' \leq a \leq n + 2$, цепочки систем (66) в порядке возрастания n и убывания a при каждом n не вызывает затруднений:

$$\begin{aligned} \Psi_{n+2,m'}^{n+2,\varepsilon x}(x) &= f_{m'}^{n+2,x}(x), & \Psi_{n+1,m'}^{n+2,\varepsilon y}(x) &= 0, \\ \Psi_{nm'}^{n+2,\varepsilon x}(x) &= \frac{1}{4n+6} \left\{ h_{nm'}^x(x) f_{m'}^{ny}(y) - x^{-2} \sum_{m''=m' \pm 1} [\gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^n f_{m''}^{nx}(x) - \right. \\ &\quad \left. - C_{10n0}^{n-10} C_{10n-1m'}^{nm'} V^{11}(x) f_{m'}^{n-1,x}(x) + \right. \\ &\quad \left. + C_{20n0}^{n-20} C_{20n-2m'}^{nm'} V^{22}(x) f_{m'}^{n-2,x}(x)] \right\}, \quad \dots \end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{m'}^{0\varepsilon x} &= f_0^{0x} \Theta_{00} \delta_{m'0} = 2^{-1/2} f_0^{0x}, & \Psi_{m'}^{1\varepsilon x} &= f_{m'}^{1x} \Theta_{1m'}, \\ \Psi_{m'}^{2\varepsilon x} &= \frac{1}{6} h_{00}^{0x} f_0^{0x} \delta_{m'0} + f_{m'}^{2x} \Theta_{2m'}, \\ \Psi_0^{3\varepsilon x} &= \frac{1}{10} \left\{ \left[h_{10}^x + \frac{1}{\sqrt{3}} V^{11} \right] f_0^{0x} - \frac{1}{x^2} \gamma_{01}^{\ell\sigma} q_{01}^1 f_1^{1x} \right\} \Theta_{10} + f_0^{3x} \Theta_{30}, \\ \Psi_1^{3\varepsilon x} &= \frac{1}{10} \left[h_{11}^x f_1^{1x} - \frac{1}{x^2} \gamma_{01}^{\ell\sigma} q_{01}^1 f_0^{1x} \right] \Theta_{11} + f_1^{3x} \Theta_{31}, \\ \Psi_2^{3\varepsilon x} &= f_2^{3x} \Theta_{32}, & \Psi_3^{3\varepsilon x} &= f_3^{3x} \Theta_{33}, \end{aligned} \tag{68}$$

где $f_0^{n,x}(x) \equiv 0$ при любом n , если $\sigma = (-1)^{\ell+1}$.

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

$$\begin{aligned} \Psi_0^{\varepsilon x}(x, y, \theta) &= \left[1 + \frac{y^2}{6} h_{00}^x(x) \right] f_0^{0x}(x) \Theta_{00}(u) + \\ &\quad + y \left[1 + \frac{y^2}{10} h_{00}^x(x) \right] f_0^{1x}(x) \Theta_{10}(u) + \frac{y^3}{10\sqrt{3}x^2} \{ x^2 V^{11}(x) f_0^{0x}(x) - \\ &\quad - [6\ell(\ell+1)(1+\sigma(-1)^\ell)]^{1/2} f_1^{1x}(x) \} \Theta_{10}(u) + \\ &\quad + y^2 f_0^{2x}(x) \Theta_{20}(u) + y^3 f_0^{3x}(x) \Theta_{30}(u) + O(y^4), \\ \Psi_1^{\varepsilon y}(x, y, \theta) &= y \left[1 + \frac{y^2}{10} h_{11}^x(x) \right] f_1^{1x}(x) \Theta_{11}(u) - \\ &\quad - \frac{y^3}{5x^2} [\ell(\ell+1)]^{1/2} f_0^{1x}(x) \Theta_{11}(u) + \\ &\quad + y^2 f_1^{2x}(x) \Theta_{21}(u) + y^3 f_1^{3x}(x) \Theta_{31}(u) + O(y^4), \\ \Psi_2^{\varepsilon x}(x, y, \theta) &= y^2 f_2^{2x}(x) \Theta_{22}(u) + y^3 f_2^{3x}(x) \Theta_{32}(u) + O(y^4). \end{aligned} \tag{69}$$

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

$$\begin{aligned} \partial_y^a \Psi_{am'}^{\varepsilon x}(x, y) &= 0, \quad a \geq m' = \mu(\sigma), 1, 2, \\ [3\partial_y^2 - h_{00}^x(x)] \Psi_{00}^{\varepsilon}(x, y) &= 0, \\ \partial_y [5\partial_y^2 - 3h_{10}^x(x)] \Psi_{10}^{\varepsilon}(x, y) - \sqrt{3} V^{11}(x) \Psi_{00}^{\varepsilon x}(x, y) &= \\ = -\frac{3}{x^2} \{2\ell(\ell+1)[1 + \sigma(-1)^\ell]\}^{1/2} \partial_y \Psi_{11}^{\varepsilon x}(x, y), \\ \partial_y [5\partial_y^2 - 3h_{11}^x(x)] \Psi_{11}^{\varepsilon}(x, y) &= -\frac{6}{x^2} [\ell(\ell+1)]^{1/2} \partial_y \Psi_{10}^{\varepsilon x}(x, y). \end{aligned} \quad (70)$$

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

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

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

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

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

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

6. СТРОЕНИЕ ЧАСТНОГО РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА

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

Докажем, что представление (31)–(35) решения Ψ^ε уравнения Шредингера в бисферическом базисе порождает аналогичное по строению разложение фаддеевской компоненты Ψ_i^ε . Эта компонента является бисферическим рядом

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

бисферические компоненты Ψ_{iab}^ε такого ряда можно записать в виде суммы

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

Поэтому имеет место представление

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

Для доказательства исследуем уравнение Фаддеева (3), содержащее в левой части искомую компоненту Ψ_i^ε . Заменяем в этом уравнении решение уравнения Шредингера Ψ^ε рядом (35). Правая часть получившегося уравнения является рядом 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 $(-1)^{a+b} = \sigma$:

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

В исследуемом уравнении заменим Ψ_i^ε таким рядом. Используя проектор (30), 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

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{iab}^{n+2,\varepsilon}(x) = \\ = -[h_b(x) - V^{00}(x)] \Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x) - V_i(x) \Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x), \quad n = -2, -1, \dots, \end{aligned} \quad (77)$$

где h_b – оператор (37), а $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x)$ – функции, исследованные в разделе 4.

Пусть в этой цепочке $a > n$ или $n < \mu(\sigma)$, или же $n + a$ – нечетное число. Тогда $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x) \equiv 0$ согласно (35), и поэтому $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}(x) \equiv 0$. Далее полагаем, что $a \leq n$, $a \geq \mu(\sigma)$, а сумму $n + a$ считаем четным числом. При таких ограничениях на индексы пробный ряд (76) становится рядом (75), а исследуемая цепочка устроена

так же, как и цепочка (36) для функций $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$, 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 $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$. Следовательно, разложения (74) и (75) существуют, что и требовалось доказать.

Отметим, что согласно (74) фаддеевские компоненты $\Psi_{iab}^{\varepsilon}(x, y)$ с четным (нечетным) индексом a являются рядами по четным (нечетным) степеням аргумента y .

Получим явные асимптотики рядов (74) с $a \leq 2$ в виде подсумм их четырех или трех слагаемых, наиболее медленно убывающих при $y \rightarrow 0$. 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 проекции сумм (38) и (39) на функции $\mathcal{Y}_{ab}^{\ell m}$, а затем, используя формулу (29), определим компоненты $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x)$ с $n = 4$. В уравнениях (77) заменим функции $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}(x)$ с $n \leq 4$ их найденными явными выражениями. 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 (74) с $a \leq 2$. Получаем следующие формулы:

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

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

где $b = |\ell \pm (1 - \mu(\sigma))|$,

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

где $b = |\ell + \mu(\sigma)|, |\ell \pm (2 - \mu(\sigma))|$. Вычислив производные ∂_y^n , $n \leq 4$, этих асимптотик, получаем связи при $y = 0$ и $x > 0$ между компонентами Ψ_{iab}^{ε} и Ψ_{ab}^{ε} :

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

и связи для компонент Ψ_{iab}^{ε} :

$$\begin{aligned} \partial_y^{a+1} \Psi_{iab}^{\varepsilon}(x, y) &= 0, \quad a = 0, 1, 2, \\ [5\partial_y^4 - (h_{\ell} - V^{00})^2] \Psi_{i0\ell}^{\varepsilon}(x, y) &= \\ &= [(h_{\ell} - V^{00}) V_i + V_i h_{\ell}] V_i^{-1} (3\partial_y^2 - h_{\ell} + V^{00}) \Psi_{i0\ell}^{\varepsilon}(x, y). \end{aligned} \quad (82)$$

Редукция шестимерных уравнений Фаддеева с помощью подстановки (73) к бесконечным системам интегро-дифференциальных уравнений для фаддеевских би-сферических компонент Ψ_{iab}^{ε} описана в известной монографии [1] и в обзоре [16].

Сравнительный анализ дискретных сплайн-аналогов таких систем дан в обзоре [17]. Во всех таких аналогах уравнений Фаддеева несложно использовать полученные асимптотики (78)–(80) искомых компонент Ψ_{iab}^ε и доказанные связи (82). Пример такого включения дан в недавней работе [18].

Теперь исследуем разложения фаддеевской компоненты Ψ_i^ε в D^σ -базисе.

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

$$\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{m'=\mu(\sigma)}^{\ell} D_{mm'}^{\ell\sigma*}(\omega^x) \Psi_{im'}^{\varepsilon x}(x, y, \theta), \quad (83)$$

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

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

$$\begin{aligned} [a(a+1) - (n+2)(n+3)] \Psi_{iam'}^{n+2,\varepsilon x}(x) = & -V_i(x) \Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}(x) + \\ & + x^{-2} \sum_{m''=m' \pm 1} \gamma_{m'm''}^{\ell\sigma} q_{m'm''}^a \Psi_{iam''}^{n\varepsilon x}(x) - [h_{am'}^x(x) - V^{00}(x)] \Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}(x), \end{aligned} \quad (85)$$

где $n+a$ – четное число, $n \geq a \geq m'$, а $h_{am'}^x(x)$ – оператор (67). Эта цепочка устроена так же, как и цепочка (66) 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 $0 \cdot \Psi_{iam'}^{n+2,\varepsilon x} = 0$. Его решением $\Psi_{iam'}^{n+2,\varepsilon x}(x) = g_{im'}^{n+2,x}(x)$ является 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 $g_{im'}^{n,x}(x) \equiv 0$ при $m' = 0$ и всех n . Цепочка уравнений (85) однозначно разрешима: все функции $\Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}$ с $n > a$ выражаются через неопределенные функции $g_{im'}^{n,x}$ и функции $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}$, для которых затем используется представление через произвольные функции $f_{m'}^{n,x}(x)$.

Способом, использованным при выводе соотношения (58), нетрудно доказать следующее утверждение: так как в ряду (84) сумма $n+a$ – четное число, то первые два слагаемых асимптотики каждой компоненты $\Psi_{im'}^{\varepsilon x}$ при $y \rightarrow 0$, $x > 0$ содержат только неопределенные функции $g_{in}^{n,x}$ с $n = m'$, $m' + 1$:

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

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

$$\begin{aligned} \Psi_{i0}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = & \left\{ g_{i0}^{0x} + \frac{y^2}{6} [(h_{00}^x - V^{00})g_{i0}^{0x} + V_i f_0^{0x}] \right\} \Theta_{00}(u) + \\ & + y \left[g_{i0}^{1x} + \frac{y^2}{10} V_i f_0^{1x} \right] \Theta_{10}(u) + \\ & + \frac{y^3}{10x^2} \{ x^2 [h_{10}^x - V^{00}] g_{i0}^{1x} - [2\ell(\ell+1)(1 + \sigma(-1)^\ell)]^{1/2} g_{i1}^{1x} \} \Theta_{10}(u) + \\ & + y^2 g_{i0}^{2x} \Theta_{20}(u) + y^3 g_{i0}^{3x} \Theta_{30}(u) + O(y^4), \end{aligned} \quad (87)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{i1}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = & y \left\{ g_{i1}^{1x} + \frac{y^2}{10} [(h_{11}^x - V^{00})g_{i1}^{1x} + V_i f_1^{1y}] \right\} \Theta_{11}(u) - \\ & - \frac{y^3}{5x^2} [\ell(\ell+1)]^{1/2} g_{i0}^{1x} \Theta_{11}(u) + y^2 g_{i1}^{2x} \Theta_{21}(u) + y^3 g_{i1}^{3x} \Theta_{31}(u) + O(y^4), \\ \Psi_{i2}^{\varepsilon x}(x, y, \theta) = & y^2 g_{i2}^{2x} \Theta_{22}(u) + y^3 g_{i3}^{3x} \Theta_{32}(u) + O(y^4). \end{aligned}$$

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

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

Учитывая формулы (71) и (86), при $y = 0$, $x > 0$ и всех m' получаем связи, содержащие производную по углу:

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

Завершим настоящий раздел следующими важными замечаниями.

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

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

7. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Перечислим главные результаты настоящей работы.

В разделах 3–5 показано, что в случае центральных взаимодействий (5) довольно широкого класса общее Ψ и частное Ψ^ε регулярные решения уравнения Шредингера (2) вблизи линейной конфигурации трех частиц представляются рядами (17), (31) и (34), (60), (61) по целым степеням аргумента y . Ключевые для построения таких рядов компоненты $\Psi_{a\alpha}^n$, $\Psi_{ab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{am'}^{n\varepsilon x}$ удалось подчинить простым цепочкам алгебраических уравнений (26), (36) и (66), рекуррентных по индексу n и незацепляющихся при данном n по индексу a , индексам a, b или a, m' . Предложенная редукция исходного шестимерного уравнения Шредингера (2) к таким цепочкам позволила вывести в явном виде асимптотики (40)–(42) и (69) бисферических Ψ_{ab}^ε и D^σ -компонент $\Psi_{m'}^{\varepsilon x}$ частного решения Ψ^ε вплоть до слагаемых $O(y^4)$. Из этих асимптотик выведены ранее неизвестные связи (43)–(45) и (70), (72).

Как было доказано в разделе 6, представлениям (31), (33) и (48), (53), (55) частного решения $\Psi^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ уравнения Шредингера (2) соответствуют аналогичные по строению разложения (74), (75) и (83), (84) фаддеевской компоненты $\Psi_i^\varepsilon(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ этого решения. Для компонент $\Psi_{iab}^{n\varepsilon}$ и $\Psi_{iam'}^{n\varepsilon x}$ этих разложений удалось вывести разрешимые в явном виде рекуррентные цепочки алгебраических уравнений (77) и (85), а затем найти явные асимптотики (78)–(80) и (86), (87) и следующие из них связи (81), (82) и (88), (89).

Предложенный в разделах 4–6 метод построения и анализа формальных разложений регулярных решений двумерных и трехмерных уравнений Шредингера и Фаддеева является довольно общим и простым по следующим причинам. Во-первых, метод применим для системы трех разных частиц с центральными парными взаимодействиями довольно общего для задач атомной и молекулярной физики типа (5) и при любых допустимых значениях полного углового момента и пространственной

четности. Во-вторых, метод позволяет исследовать полные (бесконечные) разложения регулярных решений двумерных и трехмерных уравнений Шредингера и Фаддеева вблизи линейной конфигурации трех частиц. В-третьих, в обсуждаемом методе построение разложений всех исследуемых функций сводится к решению соответствующих довольно простых рекуррентных цепочек алгебраических уравнений.

Список литературы

- [1] С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, М., 1985.
- [2] V. V. Kostykin, A. A. Kvitsinsky, S. P. Merkuriev, *Few-Body Systems*, **6**:2 (1989), 97–113.
- [3] А. А. Квицинский, В. В. Кострыкин, С. П. Меркурьев, *ЭЧАЯ*, **21**:6 (1990), 1301–1359.
- [4] Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, М., 1975.
- [5] С. И. Веницкий, Л. И. Пономарев, *ЭЧАЯ*, **13**:6 (1982), 1336–1418.
- [6] Г. И. Марчук, *Методы вычислительной математики*, Наука, М., 1989.
- [7] P. M. Prenter, *Splines and Variational Methods*, Wiley, New York, 1975.
- [8] Ю. С. Завьялов, Б. И. Квасов, В. Л. Мирошниченко, *Методы сплайн-функций*, Наука, М., 1980.
- [9] Р. К. Петеркоп, *Теория ионизации атомов электронным ударом*, Зинатне, Рига, 1975.
- [10] G. H. Wannier, *Phys. Rev.*, **90**:5 (1953), 817–825.
- [11] И. В. Абаринков, В. Ф. Братцев, А. В. Тулуб, *Начала квантовой химии*, Высш. школа, М., 1989.
- [12] Н. Ф. Степанов, В. И. Пупышев, *Квантовая механика молекул и квантовая химия*, Изд-во МГУ, М., 1991.
- [13] F. T. Smith, *J. Chem. Phys.*, **31** (1959), 1352–1359.
- [14] E. S. Chang, U. Fano, *Phys. Rev. A*, **6**:1 (1972), 173–185.
- [15] В. И. Коробов, *ЯФ*, **50**:6 (1989), 1595–1604.
- [16] В. В. Пупышев, *ЭЧАЯ*, **3**:6 (1999), 1561–1649.
- [17] В. В. Пупышев, *ЭЧАЯ*, **35**:2 (2004), 256–347.
- [18] В. В. Пупышев, *Письма в ЭЧАЯ*, **3**:2 (2006), 28–42.
- [19] В. В. Пупышев, *ЭЧАЯ*, **33**:4 (2002), 843–914.
- [20] В. В. Пупышев, *ТМФ*, **148**:2 (2006), 227–242.

Поступила в редакцию 29.03.2007