Записки научных
семинаров ПОМИ
Том 521, 2023 г.

А. М. Будылин, С. Б. Левин

О ГЛАВНОМ ЧЛЕНЕ АСИМПТОТИКИ ЗАДАЧИ НЕСКОЛЬКИХ ЗАРЯЖЕННЫХ ЧАСТИЦ ПРИ НАЛИЧИИ СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ

§1. Постановка задачи

Мы изучаем систему N трехмерных частиц равных масс, взаимодействующих посредством парных потенциалов. Предположение о равенстве масс частиц не является принципиальным и вводится лишь для упрощения громоздких вычислений. Данная работа является одним из первых шагов в направлении исследования влияния дискретного спектра в подсистемах на структуру координатной асимптотики решения задачи нескольких заряженных квантовых частиц. Мы рассматриваем здесь случаи $N = 3$ и $N = 4$.

Конфигурационным пространством системы в лабораторной системе отсчета является $\mathbb{R}^{3N}$. Останавливая движние центра масс, мы приходим к конфигурационному пространству

$$\Gamma = \Big\{\mathbf{r} :\, \mathbf{r} \in \mathbb{R}^{3N},\, \mathbf{r} = \{\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, ..., \mathbf{r}_N\},\, \sum_{j=1}^{N} \mathbf{r}_j = 0\Big\}, \qquad (1)$$

где $\mathbf{r}_j$, $\; j = 1, 2, \ldots, N$ – координата j-й трехмерной частицы в лабораторной системе отсчета. На Γ существует скалярное произведение $\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle$, индуцированное скалярным произведением на $\mathbb{R}^{3N}$. Динамика системы на Γ описывается уравнением Шредингера

$$H\Psi = E\Psi, \quad \Psi = \Psi(\mathbf{r}) \in \mathbb{C}, \quad \mathbf{r} \in \Gamma, \qquad (2)$$

$$H = -\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}), \quad V(\mathbf{r}) = \sum_{i,j=1; i<j}^{N} v_{ij}(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j), \quad \mathbf{r}_j \in \mathbb{R}^3, \; j = 1, 2, ..., N. \qquad (3)$$

Здесь $\Delta_{\mathbf{r}}$ – оператор Лапласа на Γ.

Ключевые слова: многочастичные квантовые системы, кулоновские парные потенциалы, связанные состояния в подсистемах, асимптотика собственных функций непрерывного спектра.

Авторы благодарят Российский Научный Фонд за поддержку в рамках гранта РНФ 22-11-00046.

§2. Задача трех тел

Мы остановимся вначале на наиболее простой многочастичной ситуации – на задаче трех частиц. Пусть $N = 3$, введем на Γ (1) три системы координат Якоби $(\mathbf{x}_j, \mathbf{y}_j)$, $j = 1, 2, 3$, каждая из которых связана с одной из трех парных подсистем. Все три системы координат равноправны и связаны друг с другом преобразованиями поворота. А именно:

$$\mathbf{x}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_3 - \mathbf{r}_2), \quad \mathbf{x}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3), \quad \mathbf{x}_3 = \frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1), \tag{4}$$

$$\mathbf{y}_j = \sqrt{\frac{3}{2}}\mathbf{r}_j, \quad j = 1, 2, 3.$$

Отметим также соотношения, связывающие парные координаты Якоби с выбранной системой координат:

$$\mathbf{x}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{x}_1, \quad \mathbf{x}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{x}_1. \tag{5}$$

В новых обозначениях мы приходим к следующему уравнению Шредингера на Γ:

$$H\Psi = E\Psi, \quad H = -\Delta_{\mathbf{X}} + V(\mathbf{X}), \quad V(\mathbf{X}) = v_1(x_1) + v_2(x_2) + v_3(x_3). \tag{6}$$

Мы используем здесь обозначения

$$\mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix}, \quad \Delta_{\mathbf{X}} = \Delta_{\mathbf{x}} + \Delta_{\mathbf{y}},$$

опуская индекс нумерации пары, поскольку оператор Лапласа инвариантен относительно выбора определенной системы координат Якоби.

Хорошо известно, что главный член асимптотики задачи трех трехмерных квантовых частиц, взаимодействующих посредством короткодействующих парных потенциалов отталкивания (убывающих на бесконечности по координате быстрее размерности частицы, т.е. $v(x) = o\left(\frac{1}{x^{3+\varepsilon}}\right)$, $\varepsilon > 0$), описывается плоской волной

$$\Psi_0 \sim e^{i\langle \mathbf{P}, \mathbf{X}\rangle}, \quad \mathbf{X} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P} = \begin{pmatrix} \mathbf{k} \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{P}, \mathbf{X} \in \mathbf{R}^6,$$

где моменты $\mathbf{k}$, $\mathbf{p}$ сопряжены по Фурье координатам $\mathbf{x}$, $\mathbf{y}$. В то же время в случае медленно убывающих, например, кулоновских парных потенциалов

$$v_j = \frac{\alpha_j}{|x|}, \quad \alpha_j \in \mathbb{R}$$

построение координатной асимптотики решения задачи рассеяния даже в случае $N = 3$ является существенной проблемой.

Тем не менее для системы трех заряженных частиц так называемое BBK-приближение известно, начиная с середины прошлого века. Оно описывает старший член асимптотики задачи рассеяния для тех конфигураций, в которых все частицы хорошо разделены

$$\Psi_c^{BBK} \sim e^{i\langle \mathbf{P},\mathbf{X}\rangle}\Phi_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{k}_1)\Phi_2(\mathbf{x}_2,\mathbf{k}_2)\Phi_3(\mathbf{x}_3,\mathbf{k}_3), \quad \mathbf{x}_j,\mathbf{k}_j \in \mathbb{R}^3,\ j=1,2,3. \tag{7}$$

Здесь

$$\Phi_j(\mathbf{x}_j,\mathbf{k}_j) = \Phi\left(-i\eta_j, 1, i(|\mathbf{k}_j||\mathbf{x}_j| - \langle \mathbf{k}_j,\mathbf{x}_j\rangle)\right), \quad j = 1,2,3, \tag{8}$$

– вырожденная гипергеометрическая функция [2], $\eta_j = \frac{\alpha_j}{2k}$, $j = 1,2,3$ – параметр Зоммерфельда. Это приближение подробно описано в [1], см. также [3], хотя использовалось и ранее [4, 5].

Более того, в работах [6, 7] было описано обобщение представления (7) на конфигурации трехчастичной системы, отвечающие возможным попарным сближениям частиц при наличии парных кулоновских потенциалов отталкивания. В работах [8,9] обобщение распространялось на системы N одноименно заряженных частиц. Мы рассмотрим сейчас ситуацию кулоновского притяжения, то есть наличия кулоновского дискретного спектра в парных подсистемах.

§3. BBK-приближение для задачи трех тел при наличии кулоновского связанного состояния в паре

Рассмотрим задачу трех заряженных кулоновских частиц в случае, когда пара находится в связанном состоянии, а третья частица удалена. Опираясь на результаты работы [7], мы предьявим анзац решения типа BBK для этого случая и покажем, что невязка предложенного построения убывает на бесконечности быстрее парного потенциала.

Предварительно мы предъявим и обоснуем, следуя результатам работы [10], удобное в наших построениях представление для связанного состояния $\varphi_n(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})$, где индекс n обозначает главное квантовое число кулоновского связанного состояния. Такое представление возникает как некоторое аналитическое продолжение по модулю момента $\mathbf{k}$ двухчастичной кулоновской собственной функции абсолютно непрерывного спектра. В следующем разделе мы также покажем, что построенное представление связанного состояния допускает стандартное разложение по сферическим функциям [12] и, тем самым, может быть легко перестроено (путем интегрирования по единичной сфере с некоторой гладкой функцией) в состояние, обладающее симметрией, отвечающей начальной постановке задачи.

3.1. Определение состояния $\varphi_n(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}})$. Рассмотрим собственную функцию абсолютно непрерывного спектра $\widetilde{\psi}_c(\mathbf{x}, \mathbf{k})$ кулоновского двухчастичного оператора Шредингера h_1,

$$h_1 = -\Delta_{\mathbf{x}} + \frac{\alpha}{|x|}, \quad \alpha < 0,$$

удовлетворяющую уравнению Шредингера

$$h_1 \psi_c = k^2 \psi_c, \tag{9}$$

определенную стандартным образом с точностью до нормировки (нормировочный коэффициент положен равным единице):

$$\widetilde{\psi}_c(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{i\langle \mathbf{k}, \mathbf{x} \rangle} \Phi(-i\gamma, 1, ikx(1 - \langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle)) \tag{10}$$

и проведем ее парциальный анализ (разложение по сферическим функциям). В ситуации, когда функция является инвариантной относительно поворота системы координат (в данном случае угловая зависимость содержится лишь в скалярном произведении $\langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle$), такой анализ эквивалентен разложению по полиномам Лежандра [11].

Для того, чтобы провести такое разложение, воспользуемся преобразованием Куммера (9.212.1) [2]

$$\Phi(a, c, z) = e^z \Phi(c - a, c, -z),$$

что позволяет переписать (10) в виде

$$\widetilde{\psi}_c(\mathbf{x}, \mathbf{k}) = e^{ikx} \Phi(1 + i\gamma, 1, -ikx(1 - \langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle)). \tag{11}$$

Теперь угловая зависимость сосредоточена только в вырожденной гипергеометрической функции. Проведем ее разложение в ряд по ортогональным полиномам Лежандра P_l. Согласно, например, (8.904) [2] это разложение принимает вид

$$\Phi(1 + i\gamma, 1, -ikx(1 - t)) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \Phi_l^{(\mathrm{comp})}(k, x) P_l(t). \tag{12}$$

Здесь введены обозначения: $t = \langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle$, $\Phi_l^{(\mathrm{comp})}(k,x)$ – парциальные компоненты функции $\Phi(1+i\gamma, 1, -ikx(1-t))$, которые согласно условиям ортогональности полиномов Лежандра вычисляются следующим образом:

$$\Phi_l^{(\mathrm{comp})}(k,x) = \frac{1}{2}\int\limits_{-1}^{1} dt \Phi(1+i\gamma, 1, -ikx(1-t)) P_l(t). \tag{13}$$

Для вычисления интеграла в (13) воспользуемся гипергеометрическим разложением

$$\begin{gathered} \Phi(a,1,b(1-t)) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a)_j}{(j!)^2} b^j (1-t)^j, \\ a = 1+i\gamma, \quad b = -ikx, \quad (a)_j = \frac{\Gamma(a+j)}{\Gamma(a)}, \end{gathered} \tag{14}$$

в терминах которого

$$\Phi_l^{(comp)}(k,x) = \frac{1}{2}\sum_{j=0}^{\infty} \frac{(a)_j}{(j!)^2} b^j \int\limits_{-1}^{1} dt (1-t)^j P_l(t). \tag{15}$$

Делая в интеграле замену переменной $s^2 = \frac{1-t}{2}$, вычислим его явно и получим новое гипергеометрическое разложение, ведущее к следующему предельному соотношению для парциальной компоненты

$$\Phi_l^{(comp)}(k,x) = \frac{(-1)^l}{\Gamma(l+2)} \lim_{u\to -m} \frac{1}{\Gamma(u)} {}_2F_2(a,1;u,l+2;2b), \quad m = l-1. \tag{16}$$

Воспользуемся теперь выражением [13]

$$\begin{aligned} &\lim_{u\to -m} \frac{1}{\Gamma(u)} {}_2F_2(A,B;u,D;z) \\ &= \frac{(A)_{m+1}(B)_{m+1}}{(D)_{m+1}} \frac{z^{m+1}}{(m+1)!} {}_2F_2(A+m+1, B+m+1; m+2, D+m+1; z), \end{aligned} \tag{17}$$

где

$$A = a, \quad B = 1, \quad m = l-1, \quad D = l+2, \quad z = 2b.$$

Подставляя (17) в (16), получим окончательное выражение для парциальной компоненты

$$\Phi_l^{(\mathrm{comp})}(k,x)=\frac{\Gamma(i\gamma+l+1)}{\Gamma(i\gamma+1)\Gamma(2l+2)}(2ikx)^l\Phi(i\gamma+l+1,2l+2,-2ikx). \quad (18)$$

Наконец, возвращаясь с учетом (18) к разложению (11)-(12) для собственной функции непрерывного спектра кулоновского двухчастичного оператора Шредингера, получаем

$$\begin{aligned}&\widetilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k})\\ &=e^{ikx}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\frac{\Gamma(i\gamma+l+1)}{\Gamma(i\gamma+1)\Gamma(2l+2)}(2ikx)^l\Phi(i\gamma+l+1,2l+2,-2ikx)P_l(t),\\ &\qquad t=\langle\widehat{\mathbf{k}},\widehat{\mathbf{x}}\rangle. \quad (19)\end{aligned}$$

Рассмотрим теперь аналитическое продолжение построенной нами функции в верхнюю полуплоскость комплексной плоскости k при

$$k=k_n=i\frac{|\alpha|}{2n},\quad \alpha<0,\quad i\gamma=i\frac{\alpha}{2k}|_{k=k_n}=i\frac{\alpha}{2k_n}=-n,\quad n=1,2,3,\dots.$$

Здесь $k_n^2=-\frac{|\alpha|}{4n^2}$ – энергия двухчастичного связанного состояния, отвечающего главному квантовому числу n. Отметим, что построенное нами аналитическое продолжение по-прежнему будет решением уравнения (9), поскольку $k_n^2=-\frac{|\alpha|}{4n^2}$ является точкой дискретного спектра оператора h_1, а соответствующее уравнение Шредингера вырождено относительно направления $\widehat{\mathbf{k}}$. Отметим, что если точка непрерывного спектра была бесконечнократно вырожденной, и все состояния с фиксированным значением k^2 нумеровались направлением $\widehat{\mathbf{k}}$ на единичной сфере, то в случае перехода спектрального параметра в точку дискретного спектра направление $\widehat{\mathbf{k}}$ оказывается связанным с направлением полного вращательного момента L связанной системы частиц. При этом число различных состояний определяется числом допустимых при данном значении главного квантового числа n сферических функций и равно n^2 [12].

В этом случае выражение (19) принимает вид

$$\widetilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}_n) = e^{-\frac{|\alpha|}{2n}x}\sum_{l=0}^{\infty}\beta_{nl}\frac{2l+1}{\Gamma(2l+2)}(-\frac{|\alpha|}{n}x)^l\Phi\left(-n+l+1,2l+2,\frac{|\alpha|}{n}x\right)P_l(t),\quad t=\langle\widehat{\mathbf{k}},\widehat{\mathbf{x}}\rangle. \tag{20}$$

Мы понимаем здесь вектор $\mathbf{k}_n$ как вектор с направлением, совпадающим с направлением исходного вектора $\mathbf{k}$ $(\widehat{\mathbf{k}}_n=\widehat{\mathbf{k}})$, и длиной, принимающей чисто мнимое значение в верхней полуплоскости комплексной плоскости k $(k_n = i\frac{|\alpha|}{2n})$. Здесь коэффициент β_{nl} определяется следующим образом

$$\beta_{nl} = (1-n)(2-n)\dots(l-n). \tag{21}$$

Отметим, что согласно (21), коэффициент β_{nl} обращается в ноль при $l\geqslant n$. Таким образом, выражение (20) оказывается конечной суммой слагаемых и может быть записано в виде

$$\begin{aligned}\widetilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}_n) &= e^{-\frac{|\alpha|}{2n}x}\Phi\left(1-n,1,\frac{|\alpha|}{2n}x(1-\langle\widehat{\mathbf{k}},\widehat{\mathbf{x}}\rangle)\right)\\ &= 4\pi e^{-\frac{|\alpha|}{2n}x}\sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l}\beta_{nl}\frac{1}{(2l+1)!}(-\frac{|\alpha|}{n})^l x^l\\ &\quad\times\Phi\left(-n+l+1,2l+2,\frac{|\alpha|}{n}x\right)Y_l^m(\widehat{\mathbf{x}})Y_l^{m*}(\widehat{\mathbf{k}}),\end{aligned} \tag{22}$$

где Y_l^m – соответствующие сферические функции. Последнее равенство справедливо в силу теоремы сложения сферических гармоник (5.17.9) [11]

$$\frac{2l+1}{4\pi}P_l\left(\langle\widehat{\mathbf{k}},\widehat{\mathbf{x}}\rangle\right) = \sum_{m=-l}^{l}Y_l^m(\widehat{\mathbf{x}})Y_l^{m*}(\widehat{\mathbf{k}}).$$

Фиксируя состояния дискретного спектра, функцию $\widetilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}_n)$ естественно переобозначить

$$\varphi_n(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}}) \equiv \widetilde{\psi}_c(\mathbf{x},\mathbf{k}_n) \tag{23}$$

согласно выражению (22). Мы предъявили функцию, парциальные компоненты которой с точностью до нормировки совпадают с кулоновскими радиальными функциями дискретного спектра [12]

$$R_{nl} = \rho^l e^{-\rho/2}\Phi(-n+l+1, 2l+2, \rho), \quad l = 0, 1, 2, \ldots, n-1$$

при фиксированном главном квантовом числе n.

Интегрируя функцию φ_n по $d\widehat{\mathbf{k}}$ на единичной сфере с некоторой гладкой функцией $\widehat{a}(\widehat{\mathbf{k}})$, получим стандартное разложение вида

$$\int\limits_{\mathbb{S}^2} \varphi_n(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}})\widehat{a}(\widehat{\mathbf{k}})d\widehat{\mathbf{k}} = \sum_{l=0}^{n-1}\sum_{m=-l}^{l} D_{nlm}R_{nl}(x)Y_l^m(\widehat{\mathbf{x}}) \tag{24}$$

по полному набору кулоновских парных состояний дискретного спектра, отвечающих фиксированному главному квантовому числу n. Угловые переменные на единичной сфере фиксируются относительно некоторого выделенного направления, оси OZ. При этом набор амплитуд D_{nlm} будет полностью определяться аналитическим видом функции $\widehat{a}(\widehat{\mathbf{k}})$, угловые переменные которой также фиксируются некоторым выделенным направлением.

Полученное разложение (24) вообще говоря является разложением по полному базису n^2 сферических функций, что соответствует максимальному вырождению связанного состояния с главным квантовым числом n. Воспользовавшись ортогональностью сферических функций мы можем однозначно определить ядро $\widehat{a}(\widehat{\mathbf{k}})$ (или ядро $a(\widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{k}}'))$ для того, чтобы выражение вида (24) порождало состояние с симметрией, отвечающей физике задачи.

3.2. Формулировка основного утверждения при $N = 3$. Прежде чем сформулировать основное утверждение, мы воспользуемся естественным предположением о том, что нам известны свойства симметрии двухчастичного связанного состояния, а именно: нам известно ядро $a(\widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{k}}')$, такое, что интеграл

$$\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}}) \equiv \int\limits_{\mathbb{S}^2} \varphi_n(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}}')a(\widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{k}}')d\widehat{\mathbf{k}}' \tag{25}$$

в смысле сказанного выше обладает такими свойствами. Согласно выражениям (22) и (25)

$$\begin{aligned}\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}}) &= e^{-\frac{|\alpha|x}{2n}}\int\limits_{\mathbb{S}^2} d\widehat{\mathbf{k}}'\Phi\left(1-n,1,\frac{|\alpha|x}{2n}(1-\langle\widehat{\mathbf{k}}',\widehat{\mathbf{x}}\rangle\right)a(\widehat{\mathbf{k}},\widehat{\mathbf{k}}')\\ &= e^{-\frac{|\alpha|x}{2n}}\int\limits_{\mathbb{S}^2} d\widehat{\mathbf{k}}' L_{n-1}\left(\frac{|\alpha|x}{2n}(1-\langle\widehat{\mathbf{k}}',\widehat{\mathbf{x}}\rangle\right)a(\widehat{\mathbf{k}},\widehat{\mathbf{k}}'),\quad n=1,2,\ldots\end{aligned}\tag{26}$$

Здесь $L_m(t)$ – полином Лагерра. Мы воспользовались здесь соотношением (8.972.1) [2].

Будем считать, что связанное состояние соответствует паре частиц с индексом $j=1$, содержащей частицы 2 и 3. Если это не оговорено специально, будем для простоты опускать в формулах индекс 1.

Рассмотрим выражение $\widetilde{\Psi}^{BBK}(\mathbf{X},\mathbf{P})$, являющееся модификацией выражения (7):

$$\widetilde{\Psi}^{BBK}(\mathbf{X},\mathbf{P}) = \varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})\widetilde{\Psi}_1(\mathbf{X},\mathbf{P}),\tag{27}$$

$$\widetilde{\Psi}_1(\mathbf{X},\mathbf{P}) = N_c^{(23)}e^{i\langle\mathbf{y},\mathbf{p}\rangle}\Phi_2(\widetilde{\mathbf{x}}_2,\mathbf{k}_2)\Phi_3(\widetilde{\mathbf{x}}_3,\mathbf{k}_3),\quad .$$

Мы пользуемся здесь обозначением для нормировочной постоянной

$$N_c^{(23)} = (2\pi)^{-\frac{3}{2}}e^{-\frac{\pi(\eta_j+\eta_3)}{2}}\Gamma(1+i\eta_2)\Gamma(1+i\eta_3).$$

Индекс n обозначает главное квантовое число, отвечающее связанному состоянию в паре 1.

Сравним предложенное в (27) выражение со стандартным BBK-приближением (7), справедливым в ситуации, когда все парные координаты Якоби $\mathbf{x}_j$, $\;j=1,2,3$ велики. Отметим, что аргументы вырожденных гипергеометрических функций $\mathbf{x}_2$ и $\mathbf{x}_3$ (5) теперь описываются линейной комбинацией большой по модулю величины $\mathbf{y}$ и заведомо ограниченной величины $\mathbf{x}$. Отметим, что, хотя при больших значениях главного квантового числа n в паре 1 значение $|\mathbf{x}|$ может быть большим, оно заведомо меньше $|\mathbf{y}|$. В этом случае в соответствии с основными принципами квантовой механики является естественным заменить малую координату $\mathbf{x}$ в выражениях $\mathbf{x}_2$ и $\mathbf{x}_3$ (5) соответствующим ей квантовым оператором, а именно:

$$\mathbf{x}\;\to\;-i\nabla_{\mathbf{k}},\quad |\mathbf{k}| = i\frac{|\alpha_1|}{2n} = \mathrm{Const},\quad \alpha_1<0.\tag{28}$$

Учитывая, что парная подсистема существенно удалена от третьей частицы, все ее возможные состояния в старшем порядке определяются функцией $\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})$ (25). Учитывая, что оператор координаты является оператором умножения, а функция $\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})$ исчерпывает всю его область определения, получаем, согласно (28):

$$\mathbf{x}\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}}) \;=\; -i\nabla_{\mathbf{k}}\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}}).$$

Это означает, что

$$\mathbf{x} = -i\frac{\nabla_{\mathbf{k}}\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})}{\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})}. \tag{29}$$

Именно такого типа замена возникла в работах [6–9] на независимом пути согласования решения трехчастичной задачи рассеяния трех заряженных частиц в перекрытии областей существенного разделения частиц (область ВВК) и области локализации (сближения) пары частиц при наличии удаленной третьей частицы (окрестность "экрана"). Отметим, что наблюдаемый эффект является характерным именно для случая медленно убывающих парных потенциалов. В случае короткодействующих парных потенциалов он заведомо отсутствует.

Мы вернемся теперь к выражению (27), описывающему ВВК-представление искаженной плоской волны для случая, когда частицы пары 1 находятся в связанном состоянии. Поскольку $x_1 \ll y_1$, в соответствии с приведенными выше рассуждениями необходимо сделать подстановку в выражениях (5), определяющих аргументы специальных функций:

$$\mathbf{x}_2 \;\to\; \widetilde{\mathbf{x}}_2, \quad \mathbf{x}_3 \;\to\; \widetilde{\mathbf{x}}_3,$$

где

$$\widetilde{\mathbf{x}}_2 \equiv -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y} + i\frac{1}{2}\frac{\nabla_{\mathbf{k}}\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})}{\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})}, \quad \widetilde{\mathbf{x}}_3 \equiv \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y} + i\frac{1}{2}\frac{\nabla_{\mathbf{k}}\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})}{\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})}. \tag{30}$$

Сформулируем теперь основное утверждение, касающееся случая $N{=}3$.

Теорема 1. *Рассмотрим взаимодействие кластера, пары кулоновских частиц, находящихся в связанном состоянии с главным квантовым числом* n*, и третьей существенно удаленной заряженной частицы. Выражение* (27) *с учетом модификации координатных функций* (30) *порождает невязку в уравнении Шредингера* (6)*, убывающую на бесконечности по координате быстрее кулоновского потенциала.*

Прямое доказательство сформулированного результата:
В качестве первого шага доказательства вычислим невязку выражения (27) в уравнении Шредингера

$$Q[\widetilde{\Psi}^{BBK}] \equiv (H-E)\widetilde{\Psi}^{BBK}$$

в тривиальном случае $a(\widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{k}}') = \delta(\widehat{\mathbf{k}} - \widehat{\mathbf{k}}')$. В этом случае, согласно выражению (26), функция $\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}})$ принимает вид

$$\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}}) \equiv \varphi_n^{(s,\delta)}(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}}) = e^{-\frac{|\alpha|x}{2n}} L_{n-1}\left(\frac{|\alpha|x}{2n}(1 - \langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}}\rangle\right). \qquad (31)$$

Это выражение экспоненциально затухает на бесконечности по переменной x при любом фиксированном значении n.

Выделяя в решении $\varphi_n^{(s,\delta)}(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}})$ аналог плоской волны, введем переобозначение

$$\begin{aligned} \varphi_n^{(s,\delta)}(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}}) &\equiv e^{-\frac{|\alpha|x}{2n}\langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}}\rangle} \Phi_1^{(s,\delta)}(\mathbf{x}, \mathbf{k}), \\ \Phi_1^{(s,\delta)}(\mathbf{x}, \mathbf{k}) &\equiv e^{-\frac{|\alpha|x}{2n}(1-\langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}}\rangle)} L_{n-1}\left(\frac{|\alpha|x}{2n}(1 - \langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}}\rangle\right). \end{aligned} \qquad (32)$$

Выражение для невязки в этих обозначениях принимает следующий вид:

$$e^{\frac{|\alpha|x}{2n}\langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}}\rangle} e^{-i\langle \mathbf{p}, \mathbf{y}\rangle} Q[\widetilde{\Psi}^{BBK}] = R_1 + R_2 + R_3 + R_4 + R_5 + R_6 + R_7 + O\left(\frac{1}{y^{1+\varepsilon}}\right). \qquad (33)$$

Мы пользуемся здесь обозначениями

$$R_1 \equiv \Phi_1^{(s,\delta)} \Phi_2'' \Phi_3 \left\{ \frac{k_2^2}{4} |\nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_2|^2 - \frac{1}{2} k_2^2 (1 - \langle \widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_2, \widehat{\mathbf{k}}_2 \rangle) \right\},$$

$$R_2 \equiv -\Phi_1^{(s,\delta)} \Phi_2' \Phi_3 \left\{ i\frac{k_2}{2} \Delta_{\mathbf{x}} \Lambda_2 - k_2 \langle \nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_2, \mathbf{k}_1 \rangle + k_1 k_2 \langle \widehat{\mathbf{k}}_2 - \widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_2, \widehat{\mathbf{k}}_1 \rangle - \frac{i}{2} \frac{k_2}{|\widetilde{\mathbf{x}}_2|} \right\},$$

$$R_3 \equiv \Phi_1^{(s,\delta)} \Phi_2 \Phi_3'' \left\{ \frac{k_3^2}{4} |\nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_3|^2 - \frac{1}{2} k_3^2 (1 - \langle \widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_3, \widehat{\mathbf{k}}_3 \rangle) \right\},$$

$$R_4 \equiv -\Phi_1^{(s,\delta)} \Phi_2 \Phi_3' \left\{ i\frac{k_3}{2} \Delta_{\mathbf{x}} \Lambda_3 - k_3 \langle \nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_3, \mathbf{k}_1 \rangle + k_3 k_1 \langle \widehat{\mathbf{k}}_3 - \widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_3, \widehat{\mathbf{k}}_1 \rangle - \frac{i}{2} \frac{k_3}{|\widetilde{\mathbf{x}}_3|} \right\},$$

$$R_5 \equiv \Phi_1^{(s,\delta)} \Phi_2' \Phi_3' \frac{k_2 k_3}{2} \langle \nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_2, \nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_3 \rangle,$$

$$R_6 \equiv \Phi_1^{(s,\delta)\prime} \Phi_2' \Phi_3 k_1 k_2 \langle \widehat{\mathbf{x}}_1 - \widehat{\mathbf{k}}_1, \nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_2 \rangle,$$

$$R_7 \equiv \Phi_1^{(s,\delta)\prime} \Phi_2 \Phi_3' k_1 k_3 \langle \widehat{\mathbf{x}}_1 - \widehat{\mathbf{k}}_1, \nabla_{\mathbf{x}} \Lambda_3 \rangle.$$

Мы используем также следующие обозначения:

$$\Lambda_2 \equiv \langle \widehat{\mathbf{k}}_2 + \widehat{\mathbf{y}} + \frac{1}{2\sqrt{3}y}\mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle, \qquad \Lambda_3 \equiv \langle \widehat{\mathbf{k}}_3 - \widehat{\mathbf{y}} + \frac{1}{2\sqrt{3}y}\mathbf{u}, \mathbf{u} \rangle, \tag{34}$$

$$\mathbf{u} \equiv \mathbf{x} + \mathbf{v}, \qquad \mathbf{v} \equiv -i\frac{\nabla_{\mathbf{k}}\Phi_1^{(s,\delta)}}{\Phi_1^{(s,\delta)}}. \tag{35}$$

Штрих обозначает производную по аргументу. Отметим, что множитель $e^{\frac{|\alpha|x}{2n}\langle \widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{x}} \rangle}$ в левой части уравнения (33) полностью компенсируется выражением в правой части согласно определению $\Phi_1^{(s,\delta)}$ (32).

Мы рассматриваем ситуацию, когда переменная x ограничена

$$x \sim 1 \tag{36}$$

(речь идет о связанных состояниях в паре 1) или по крайней мере

$$x \ll y,$$

что имеет смысл при большом значении главного квантового числа $n \gg 1$, отвечающего паре 1.

Рассмотрим также асимптотическую область конфигурационного пространства, отвечающую следующим условиям на дополнительные парные координаты $\mathbf{x}_2$, $\mathbf{x}_3$

$$k_j\widetilde{x}_j(1 - \langle \widehat{\mathbf{k}}_j, \widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_j \rangle) \underset{y\to\infty}{\sim} y^{\frac{1}{2}+\varepsilon}, \quad \varepsilon > 0, \quad j = 2, 3. \tag{37}$$

что фактически позволяет описать окрестности парных направлений рассеяния вперед. Можно показать, что и эти условия могут быть существенно ослаблены.

Покажем, что невязка (33) убывает быстрее, чем потенциал при условиях (37).

Мы будем в существенном опираться на асимптотическое поведение производных вырожденной гипергеометрической фунции [2]

$$\Phi'(-i\gamma, 1, ix) = O\left(x^{-i\gamma-1}\right), \quad \Phi''(-i\gamma, 1, ix) = O\left(x^{-i\gamma-2}\right), \\ \gamma,\ x \in \mathbb{R}, \quad x \to \infty \tag{38}$$

применительно к функциям Φ_2 и Φ_3 с большими аргументами $\widetilde{\mathbf{x}}_2$ и $\widetilde{\mathbf{x}}_3$ (30) соответственно.

Согласно (38) выражения R_1 и R_3 уравнения (33) убывают как $O\left(\frac{1}{y^{1+2\varepsilon}}\right)$, что заведомо быстрее, чем кулоновский потенциал $\frac{1}{y}$. По той же причине выражение R_5 также убывет быстро на бесконечности по координате. Однако, функция $\Phi_1^{(s,\delta)\prime}$ вследствие ограниченности аргумента (условие (36)) не порождает дополнительную малость. Единственная возможность доказать, что невязка, тем не менее, убывает достаточно быстро, заключается в следующем: показать, что сумма выражений R_2 и R_6 уравнения (33), а также сумма выражений R_4 и R_7 уравнения (33) независимым образом быстро убывают на бесконечности.

Это, в свою очередь, требует выполнения следующих утверждений:

$$\begin{gathered}-\Phi_1^{(s,\delta)}\left\{i\frac{k_2}{2}\Delta_{\mathbf{x}}\Lambda_2-k_2\langle\nabla_{\mathbf{x}}\Lambda_2,\mathbf{k}_1\rangle+k_1k_2\langle\widehat{\mathbf{k}}_2-\widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_2,\widehat{\mathbf{k}}_1\rangle-\frac{i}{2}\frac{k_2}{|\widetilde{\mathbf{x}}_2|}\right\}\\ +\Phi_1^{(s,\delta)\prime}k_1k_2\langle\widehat{\mathbf{x}}_1-\widehat{\mathbf{k}}_1,\nabla_{\mathbf{x}}\Lambda_2\rangle=O\left(\frac{1}{y}\right),\end{gathered}\tag{39}$$

$$\begin{gathered}-\Phi_1^{(s,\delta)}\left\{i\frac{k_3}{2}\Delta_{\mathbf{x}}\Lambda_3-k_3\langle\nabla_{\mathbf{x}}\Lambda_3,\mathbf{k}_1\rangle+k_3k_1\langle\widehat{\mathbf{k}}_3-\widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_3,\widehat{\mathbf{k}}_1\rangle-\frac{i}{2}\frac{k_3}{|\widetilde{\mathbf{x}}_3|}\right\}\\ +\Phi_1^{(s,\delta)\prime}k_1k_3\langle\widehat{\mathbf{x}}_1-\widehat{\mathbf{k}}_1,\nabla_{\mathbf{x}}\Lambda_3\rangle=O\left(\frac{1}{y}\right).\end{gathered}\tag{40}$$

Покажем, что они действительно выполняются. Рассмотрим выражение (39). Запишем его следующим образом:

$$-\Delta_{\mathbf{x}}\omega-2i\langle\mathbf{k},\nabla_{\mathbf{x}}\omega\rangle+\frac{\alpha}{|\mathbf{x}|}\omega=-2k\Phi^{(s,\delta)\prime}\langle\mathbf{a},\widehat{\mathbf{x}}-\widehat{\mathbf{k}}\rangle,\tag{41}$$

пренебрегая членами порядка $O(1/y)$. Мы использовали здесь следующие обозначения:

$$\omega\equiv\langle\mathbf{a},\nabla_{\mathbf{k}}\Phi^{(s,\delta)}\rangle,\quad \mathbf{a}\equiv\widehat{\mathbf{k}}_2+\widehat{\mathbf{y}}.\tag{42}$$

Проверка того факта, что уравнение (41) эквивалентно уравнению (39) с точностью до членов порядка $O(1/y)$ не трудна, но достаточно громоздка. Мы позволим себе опустить здесь эти вычисления. Таким образом, остается доказать справедливость уравнения (41).

Рассмотрим двухчастичное уравнение Шредингера с кулоновским парным потенциалом для функции $\varphi_n^{(s,\delta)}(\mathbf{x},\widehat{\mathbf{k}})$ (31)

$$-\Delta_{\mathbf{x}}\varphi_n^{(s,\delta)}+\frac{\alpha}{|x|}\varphi_n^{(s,\delta)}=k^2\varphi_n^{(s,\delta)},\quad \mathbf{k}=k\widehat{\mathbf{k}},\quad k=i\frac{|\alpha|}{2n}$$

и применим к этому уравнению с правой стороны оператор $\nabla_{\mathbf{k}}$. Проектируем результат на постоянный вектор $\mathbf{a}$, определенный в выражении (42). Полученное уравнение совпадает с уравнением (41). Это означает, что уравнение (39) является тождеством, порожденным двухчастичным уравнением Шредингера, и поэтому, очевидно, справедливо. Справедливость уравнения (40) доказывается аналогично.

Отметим, что сформулированное выше основное утверждение о скорости убывания невязки будет справедливо для состояния $\varphi_n^{(s)}(\mathbf{x}, \widehat{\mathbf{k}})$ (25) с ядром $a(\widehat{\mathbf{k}}, \widehat{\mathbf{k}}')$ произвольного вида. Это следует из линейности и однородности уравнения (39).

На этом доказательство Теоремы завершается.

Рассмотрим теперь более общую систему, включающую три заряженные частицы в произвольном связанном состоянии и четвертую существенно удаленную частицу.

§4. Система четырех заряженных частиц. Взаимодействие трехчастичного кластера и четвертой удаленной частицы.

Мы рассмотрим теперь случай $N = 4$, по-прежнему считая массы частиц одинаковыми. Уравнение Шредингера принимает следующий вид:

$$(-\Delta_{\mathbf{Z}} + \sum_{j=1}^{6} v_j(x_j) - E)\Psi(\mathbf{Q}, \mathbf{Z}) = 0. \tag{43}$$

Здесь

$$\mathbf{Z} = \begin{pmatrix} \mathbf{x} \\ \mathbf{y} \\ \mathbf{z} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{k} \\ \mathbf{p} \\ \mathbf{q} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Z}, \mathbf{Q} \in \mathbb{R}^9, \quad \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in \mathbb{R}^3, \quad \mathbf{k}, \mathbf{p}, \mathbf{q} \in \mathbb{R}^3.$$

Мы будем считать, что координаты Якоби $\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1$ ограничены и описывают положение частиц в трехчастичном кластере, а координата $\mathbf{z}$ описывает положение четвертой частицы относительно центра масс кластера, то есть

$$x_1 \sim 1, \quad y_1 \sim 1, \quad z_1 \gg 1. \tag{44}$$

При этом мы будем считать, что парные потенциалы ведут себя кулоновским образом лишь асимптотически, то есть

$$v_j(x_j) \underset{x_j \to \infty}{\sim} \frac{\alpha_j}{|\mathbf{x}_j|}.$$

Определим систему парных координат согласно, например, [3], следующим образом

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}, \quad \mathbf{x}_2 = -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{x}_1, \quad \mathbf{x}_3 = \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{y}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{x}_1, \\
&\mathbf{x}_4 = \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}_1 - \frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{y}_1, \quad \mathbf{x}_5 = -\sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}_1 - \frac{1}{2\sqrt{3}}\mathbf{y}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{x}_1, \\
&\mathbf{x}_6 = \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}_1 + \frac{1}{2\sqrt{3}}\mathbf{y}_1 - \frac{1}{2}\mathbf{x}_1.
\end{aligned} \tag{45}
$$

Отметим, что согласно условиям (44) координаты $\mathbf{x}_1,\ \mathbf{x}_2,\ \mathbf{x}_3$ являются ограниченными (парные координаты внутри трехчастичного кластера), а координаты $\mathbf{x}_4,\ \mathbf{x}_5,\ \mathbf{x}_6$ велики (отвечают парным расстояниям между четвертой удаленной частицей и частицами кластера).

Стандартное BBK-приближение при $N = 4$ в ситуации, когда все парные координаты велики принимает вид:

$$
\begin{aligned}
\Psi_{N=4}^{BBK}(\mathbf{Z},\mathbf{Q}) \sim {} & e^{i\langle \mathbf{k}_1,\mathbf{x}_1\rangle} e^{i\langle \mathbf{p}_1,\mathbf{y}_1\rangle} \Phi_1(\mathbf{x}_1,\mathbf{k}_1)\Phi_2(\mathbf{x}_2,\mathbf{k}_2)\Phi_3(\mathbf{x}_3,\mathbf{k}_3) \\
& \times e^{i\langle \mathbf{q}_1,\mathbf{z}_1\rangle} \Phi_4(\mathbf{x}_4,\mathbf{k}_4)\Phi_5(\mathbf{x}_5,\mathbf{k}_5)\Phi_6(\mathbf{x}_6,\mathbf{k}_6).
\end{aligned} \tag{46}
$$

При этом выражение в первой строке (46) фактически описывает асимптотическое BBK-приближение для трехчастичной подсистемы, рассмотренное в предыдущем разделе. В ситуации, когда координаты $\mathbf{x}_1,\ \mathbf{x}_2,\ \mathbf{x}_3$ становятся ограниченными, асимптотическое описание трехчастичной подсистемы теряется. Тем не менее, динамика изолированной подсистемы описывается уравнением Шредингера

$$
\left[-\Delta_{\mathbf{x}_1} - \Delta_{\mathbf{y}_1} + V^{(3)}(\mathbf{x}_1,\mathbf{y}_1) - \varepsilon\right]\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P}) = 0, \quad \mathbf{X},\mathbf{P} \in \mathbb{R}^6. \tag{47}
$$

Здесь использованы обозначения

$$
V^{(3)}(\mathbf{x}_1,\mathbf{y}_1) \equiv v_1(x_1) + v_2(x_2) + v_3(x_3), \quad \varepsilon \equiv k_1^2 + p_1^2.
$$

В смысле сказанного выше мы можем рассматривать спектральный параметр ε как положительным (точка непрерывного спектра трехчастичной подсистемы), так и отрицательным (точка дискретного спектра трехчастичной подсистемы).

4.1. Построение анзаца для описания взаимодействия трехчастичного кластера и четвертой частицы. Мы будем рассматривать ситуацию, когда трехчастичная подсистема локализуется в ограниченной области (парные координаты $\mathbf{x}_1,\ \mathbf{x}_2,\ \mathbf{x}_3$ ограничены), а парные координаты $\mathbf{x}_4,\ \mathbf{x}_5,\ \mathbf{x}_6$ остаются большими и, согласно выражениям (45), являются линейной комбинацией большой величины $\mathbf{z}_1$ и ограниченных величин $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{y}_1$. Такие линейные комбинации должны быть модифицированы. Модификация вновь, как это уже было сделано в задаче трех тел, заключается в замене операторов умножения на ограниченные величины $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{y}_1$ на соответствующие им операторы:

$$\mathbf{x}_1 \ \to\ -i\nabla_{\mathbf{k}_1}, \qquad \mathbf{y}_1 \ \to\ -i\nabla_{\mathbf{p}_1}.$$

Поскольку динамика изолированной трехчастичной подсистемы описывается решением $\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})$ уравнения Шредингера (47), которое и исчерпывает всю область определения такого оператора умножения, получаем

$$\mathbf{x}_1\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P}) = -i\nabla_{\mathbf{k}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P}), \qquad \mathbf{y}_1\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P}) = -i\nabla_{\mathbf{p}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P}).$$

Таким образом, необходимая модификация ограниченных координат в соответствующей линейной комбинации принимает вид

$$\mathbf{x}_1 = -i\frac{\nabla_{\mathbf{k}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}, \quad \mathbf{y}_1 = -i\frac{\nabla_{\mathbf{p}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}. \tag{48}$$

Окончательно, модификация ВВК-приближения, описывающая взаимодействие трехчастичного кластера и четвертой удаленной частицы строится по аналогии с трехчастичным приближением (27):

$$\widetilde{\Psi}^{BBK}_{N=4}(\mathbf{Z},\mathbf{Q}) = \Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})\widetilde{\Psi}_{1,N=4}(\mathbf{Z},\mathbf{Q}), \tag{49}$$

$$\widetilde{\Psi}_{1,N=4}(\mathbf{Z},\mathbf{Q}) = N_c^{(456)}e^{i\langle\mathbf{z},\mathbf{q}\rangle}\Phi_4(\widetilde{\mathbf{x}}_4,\mathbf{k}_4)\Phi_5(\widetilde{\mathbf{x}}_5,\mathbf{k}_5)\Phi_6(\widetilde{\mathbf{x}}_6,\mathbf{k}_6).$$

Как и выше, мы пользуемся обозначениями

$$\Phi_j(\widetilde{\mathbf{x}}_j,\mathbf{k}_j) \equiv \Phi\left(-i\eta_j, 1, ik_j|\widetilde{\mathbf{x}}_j|(1-\langle\widehat{\mathbf{k}}_j,\widehat{\widetilde{\mathbf{x}}}_j\rangle)\right), \quad j=4,5,6.$$

С учетом определения (45) и преобразования (48) мы получаем следующую модификацию больших парных координат Якоби:

$$\widetilde{\mathbf{x}}_4 = \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}_1 - \frac{-i}{\sqrt{3}}\frac{\nabla_{\mathbf{p}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})},$$

$$\widetilde{\mathbf{x}}_5 = -\sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}_1 - \frac{-i}{2\sqrt{3}}\frac{\nabla_{\mathbf{p}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})} - \frac{-i}{2}\frac{\nabla_{\mathbf{k}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})},$$

$$\widetilde{\mathbf{x}}_6 = \sqrt{\frac{2}{3}}\mathbf{z}_1 + \frac{-i}{2\sqrt{3}}\frac{\nabla_{\mathbf{p}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})} - \frac{-i}{2}\frac{\nabla_{\mathbf{k}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}.$$

Мы описали, таким образом, структуру анзаца, описывающего взаимодействие трехчастичного кулоновского кластера и четвертой удаленной заряженной частицы. Покажем теперь, что невязка построенного выражения (49) в уравнении Шредингера (43) убывает на бесконечности быстрее кулоновского потенциала.

4.2. Скорость убывания невязки выражения $\widetilde{\Psi}^{BBK}_{N=4}$ в уравнении Шредингера. Построим невязку выражения $\widetilde{\Psi}^{BBK}_{N=4}$ в уравнении Шредингера (43), сохраняя члены порядка $O(1/z)$. Мы учитываем асимптотическое поведение вырожденной гипергеометрической функции [2]:

$$\Phi_j'(\widetilde{\mathbf{x}}_j,\mathbf{k}_j) = O(1/z), \quad \Phi_j''(\widetilde{\mathbf{x}}_j,\mathbf{k}_j) = O(1/z^2), \quad j=4,5,6, \quad z\to\infty.$$

Таким образом,

$$e^{-i\langle\mathbf{q}_1,\mathbf{z}_1\rangle}(H-E)\widetilde{\Psi}^{BBK}_{N=4} = S_4 + S_5 + S_6 + O\left(\frac{1}{z^2}\right).. \tag{50}$$

Мы пользуемся здесь обозначениями

$$S_4 \equiv i\frac{k_4}{\sqrt{3}}\Phi_4'\Phi_5\Phi_6\Psi^{(3)}(\Delta_\mathbf{x}+\Delta_\mathbf{y})\langle\widehat{\mathbf{z}}-\widehat{\mathbf{k}}_4,\mathbf{u}\rangle - 2\Phi_5\Phi_6\langle\nabla_\mathbf{x}\Phi_4,\nabla_\mathbf{x}\Psi^{(3)}\rangle$$
$$-2\Phi_5\Phi_6\langle\nabla_\mathbf{y}\Phi_4,\nabla_\mathbf{y}\Psi^{(3)}\rangle - 2i\Phi_5\Phi_6\Psi^{(3)}\langle\mathbf{q},\nabla_\mathbf{z}\Phi_4\rangle + \frac{\alpha_4}{|\widetilde{\mathbf{x}}_4|}\Phi_4\Phi_5\Phi_6\Psi^{(3)}. \tag{51}$$

$$S_5 \equiv -\frac{i}{2}k_5\Phi_4\Phi_5'\Phi_6\Psi^{(3)}(\Delta_\mathbf{x}+\Delta_\mathbf{y})\langle\widehat{\mathbf{z}}+\widehat{\mathbf{k}}_5,\frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{u}+\mathbf{v}\rangle - 2\Phi_4\Phi_6\langle\nabla_\mathbf{x}\Phi_5,\nabla_\mathbf{x}\Psi^{(3)}\rangle$$
$$-2\Phi_4\Phi_6\langle\nabla_\mathbf{y}\Phi_5,\nabla_\mathbf{y}\Psi^{(3)}\rangle - 2i\Phi_4\Phi_6\Psi^{(3)}\langle\mathbf{q},\nabla_\mathbf{z}\Phi_5\rangle + \frac{\alpha_5}{|\widetilde{\mathbf{x}}_5|}\Phi_4\Phi_5\Phi_6\Psi^{(3)}. \tag{52}$$

$$S_6 \equiv -\frac{i}{2}k_6\Phi_4\Phi_5\Phi_6'\Psi^{(3)}(\Delta_\mathbf{x}+\Delta_\mathbf{y})\langle\widehat{\mathbf{z}}-\widehat{\mathbf{k}}_6,\frac{1}{\sqrt{3}}\mathbf{u}-\mathbf{v}\rangle - 2\Phi_4\Phi_5\langle\nabla_\mathbf{x}\Phi_6,\nabla_\mathbf{x}\Psi^{(3)}\rangle$$
$$-2\Phi_4\Phi_5\langle\nabla_\mathbf{y}\Phi_6,\nabla_\mathbf{y}\Psi^{(3)}\rangle - 2i\Phi_4\Phi_5\Psi^{(3)}\langle\mathbf{q},\nabla_\mathbf{z}\Phi_6\rangle + \frac{\alpha_6}{|\widetilde{\mathbf{x}}_6|}\Phi_4\Phi_5\Phi_6\Psi^{(3)}, \tag{53}$$

опуская всюду индекс, отвечающий паре 1. Также мы пользуемся обозначениями

$$\mathbf{u} \equiv -i\frac{\nabla_{\mathbf{p}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}, \qquad \mathbf{v} \equiv -i\frac{\nabla_{\mathbf{k}_1}\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}{\Psi^{(3)}(\mathbf{X},\mathbf{P})}.$$

Отметим, что

$$S_4 = O\left(\frac{1}{|\widetilde{\mathbf{x}}_4|}\right), \quad S_5 = O\left(\frac{1}{|\widetilde{\mathbf{x}}_5|}\right), \quad S_6 = O\left(\frac{1}{|\widetilde{\mathbf{x}}_6|}\right), \quad z \to \infty.$$

Остается сформулировать теорему.

Теорема. *Невязка модифицированного ВВК-приближения* (49) *убывает на бесконечности по координате быстрее кулоновского потенциала.*

Доказательство. Рассмотрим выражение S_4 (51):

$$S_4 = -\frac{k_4}{\sqrt{3}}\Phi_4'\Bigg\{ -(\Delta_{\mathbf{x}}+\Delta_{\mathbf{y}})g_u - 2\sqrt{2}\langle \mathbf{q}, \mathbf{z}-\widehat{\mathbf{k}}_4\rangle\Psi^{(3)}$$
$$-2\sqrt{3}k_4(1-\langle\widehat{\mathbf{k}}_4,\widehat{\mathbf{z}}\rangle)\Psi^{(3)} + \frac{1}{\Psi^{(3)}}g_u(\Delta_{\mathbf{x}}+\Delta_{\mathbf{y}})\Psi^{(3)}\Bigg\} + O\left(\frac{1}{z^2}\right). \quad (54)$$

Мы пользуемся здесь обозначением $g_u \equiv \langle \widehat{\mathbf{z}} - \widehat{\mathbf{k}}_4, \nabla_{\mathbf{p}}\Psi^{(3)}\rangle$ и в частности учитываем структуру гипергеометрического уравнения [2]

$$2k_4^2(1-\langle\widehat{\mathbf{k}}_4,\widehat{\widetilde{x}}_4\rangle)\Phi_4'' + \frac{\alpha_4}{\widetilde{x}_4}\Phi_4 - 2ik_4\frac{1}{\widetilde{x}_4}\Phi_4' - 2k_4^2(1-\langle\widehat{\mathbf{k}}_4,\widehat{\widetilde{x}}_4\rangle)\Phi_4' = 0,$$

приводящую к равенству

$$\frac{\alpha_4}{\widetilde{x}_4}\Phi_4 = 2k_4^2(1-\langle\widehat{\mathbf{k}}_4,\widehat{\widetilde{x}}_4\rangle)\Phi_4' + O\left(\frac{1}{z^2}\right).$$

Рассмотрим уравнение Шредингера (47) для изолированной подсистемы, включающей частицы с индексами 1,2 и 3, и применим к нему слева оператор $\nabla_{\mathbf{p}}$:

$$-(\Delta_{\mathbf{x}}+\Delta_{\mathbf{y}})\nabla_{\mathbf{p}}\Psi^{(3)} + V^{(3)}(\mathbf{x},\mathbf{y})\nabla_{\mathbf{p}}\Psi^{(3)} = 2\mathbf{p}\Psi^{(3)} + (k^2+p^2)\nabla_{\mathbf{p}}\Psi^{(3)}.$$

Домножим полученное уравнение слева скалярно на вектор $\widehat{\mathbf{z}} - \widehat{\mathbf{k}}_4$:

$$-(\Delta_{\mathbf{x}}+\Delta_{\mathbf{y}})g_u + V^{(3)}(\mathbf{x},\mathbf{y})g_u = 2\langle\mathbf{p},\widehat{\mathbf{z}}-\widehat{\mathbf{k}}_4\rangle\Psi^{(3)} + (k^2+p^2)g_u. \quad (55)$$

Подставим уравнение (55) в уравнение для невязки (54), учитывая связь

$$\mathbf{p} = \sqrt{2}\mathbf{q} - \sqrt{3}\mathbf{k}_4.$$

Выражение (54) обращается в ноль.

Аналогично показывается, что в ноль обращаются выражения S_5 и S_6.

На этом доказательство Теоремы завершается. □

§5. Заключение

Полученные в работе результаты, обобщающие хорошо известное в физической литературе BBK-приближение, позволяют описывать асимптотику многочастичной кулоновской системы ($N = 3, 4$) в случае, когда подсистема находится в состоянии непрерывного спектра, а также в случае, когда подсистема (двух или трехчастичная) находится в связанном состоянии. Полученные результаты основаны на основных принципах квантовой механики. Справедливость представленного анзаца проверяется непосредственным вычислением.

Список литературы

1. M. Brauner, J. S. Briggs, H. Klar, J. Phys. B **22**, (1989), 2265–2287.
2. I. S. Gradshteyn, I. M. Ryzhik, *Table of Integrals*, Series, and Products Academic Press, San Diego, 1963.
3. L. D. Faddeev, S. P. Merkuriev, *Quantum Scattering Theory for Several Particle Systems*, Kluwer, Dordrecht, 1993.
4. G. Garibotti, J. E. Miraglia, Phys. Rev. A **21** (1980), 572.
5. A. L. Godunov, Sh. D. Kunikeev, V. N. Mileev, V. S. Senashenko, 1983, Proc. 13th Int. Conf. on Physics of electronic and atomic collisions (Berlin), ed. J. Eichler (Amsterdam: Noth holland), Abstracts p. 380.
6. V. S. Buslaev, S. B. Levin, Funct. Analys. Appl. **46(2)** (2012), 147–151.
7. С. Б. Левин, *Об асимптотическом поведении собственных функций непрерывного спектра на бесконечности для системы трех трехмерных одноименно заряженных квантовых частиц.* — Зап. научн. семин. ПОМИ **451** (2016), 79–115.
8. Я. Ю. Коптелов, С. Б. Левин, *Об асимптотике задачи рассеяния нескольких заряженных квантовых частиц с отталкивательными парными потенциалами.* — Ядерная физика **77**, No. 4 (2014), 557–565.
9. S. B. Levin, Ya. Yu. Koptelov, *On asymptotics of the scattering problem solution of n like-charged quantum particles.* — Few-Body Systems **55** (2014), 809–812.

10. А. М. Будылин, Я. Ю. Коптелов, С. Б. Левин, *О реакции развала в трехчастичных кулоновских системах с приложением к описанию процессов диссоциативной рекомбинации и перезарядки в антипротонной физике.* — ЖЭТФ **160**, вып. 3, No. 9 (2021), 372–392.
11. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский, *Квантовая теория углового момента*, Наука, Ленинград, 1975
12. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика*, том 3, Квантовая Механика, Москва, Наука, 1989.
13. Milton Abramowitz and Irene A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, National Bureau of Standards, USA, 1964.

Budylin A. M., Levin S. B. On the main term of the asymptotics of the problem of few charged particles in the presence of bound states.

In the present paper, we obtained the results that generalize the BBK-approximation, well known in the physical literature, in a situation where particles in subsystems can approach each other. The results obtained allow one to describe the asymptotics of a few-body Coulomb system ($N = 3.4$) in the case when the subsystem is in a state of continuous spectrum, as well as in the case when the subsystem (two or three particles) is in a bound state.

С.-Петербургский
Государственный Университет,
Санкт-Петербург, Россия
E-mail: a.budylin@spbu.ru
E-mail: s.levin@spbu.ru

Поступило 1 октября 2023 г.