Письма в ЖЭТФ, том 116, вып. 4, с. 260 – 266 © 2022 г. 25 августа

Асимптотика волновой функции для рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием

С. Л. Яковлев[1)]

Санкт-Петербургский государственный университет, 199034 С.-Петербург, Россия

Поступила в редакцию 27 мая 2022 г.
После переработки 23 июня 2022 г.
Принята к публикации 28 июня 2022 г.

Построена координатная асимптотика волновой функции для задачи рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием. Представление трехчастичных гиперсферических функций использовано для редукции уравнения Шредингера к системе парциальных одномерных уравнений. Асимптотические решения этой системы построены прямыми асимптотическими методами.

DOI: 10.31857/S1234567822160121, EDN: jhzvtr

1. Введение. Координатная асимптотика волновой функции для задачи рассеяния играет решающую роль в описании столкновений частиц, так как с ее помощью определяются амплитуды процессов при столкновениях частиц и соответствующие сечения. Для двухчастичных столкновений асимптотический вид волновой функции как суперпозиции сходящейся и расходящейся сферических волн достаточно очевиден. Однако, для трехчастичных столкновений со свободными частицами в начальном состоянии вид асимптотики волновой функции не в полной мере был установлен вплоть до настоящего времени [1]. При этом достаточно полно асимптотика исследована для случая короткодействующих взаимодействий между частицами [2, 3]. Наибольшая трудность связана с построением асимптотики волновой функции для рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием [4]. Попытки улучшить старшие члены асимптотики из [4], сделанные в работах [5, 6] (и в ряде последующих работ авторов и их последователей), вряд ли могут считаться успешными в силу недостаточной полноты подходов этих работ. Следует также упомянуть работу [7], в которой систематически применялся формализм гиперсферических координат для построения приближений для решения задачи ионизации атомов при столкновении с электронами.

В недавней работе автора [8] предложен новый строгий подход для построения асимптотических решений для трехчастичного уравнения Шредингера с короткодействующими потенциалами взаимодействия, основанный на формализме слабых асимптотик и интегральных уравнениях Фаддеева. Такой подход позволил получить корректные асимптотики парциальных компонент волновой функции в представлении гиперсферических гармоник и, как следствие, получить корректные асимптотические граничные условия для уравнения Шредингера в представлении гиперсферических функций. В то же время данный результат открывает путь построения асимптотики волновой функции с помощью асимптотик парциальный компонент, являющихся решением системы одномерных парциальных уравнений. Последнее существенно упрощает формализм, так как сводит задачу построения асимптотики решения многомерного уравнения Шредингера к хорошо контролируемой процедуре нахождения асимптотик решений системы одномерных дифференциальных уравнений для парциальных компонент. Хотя методы разложения решений задачи рассеяния для трех частиц с короткодействующими взаимодействиями по базису гиперсферических функций и разрабатывались в ряде работ, однако достаточной строгости результатов достигнуто не было и кулоновский случай остался не исследованным. Упомянем в этой связи работу [9], а также ссылки на работы других авторов из этой работы. В настоящей работе реализуется новый подход из [8] для построения асимптотики волновой функции для задачи рассеяния трех частиц с кулоновским взаимодействием на основе строгих асимптотических методов.

2. Уравнение Шредингера в представлении гиперсферических функций. Гамильтониан системы трех частиц в приведенных (нормированных на соответствующие массовые множители [1]) координатах Якоби имеет вид

$$H = -\Delta_{\mathbf{x}_\beta} - \Delta_{\mathbf{y}_\beta} + \sum_{\gamma=1}^{3} V_\gamma(\mathbf{x}_\gamma).$$

[1)]e-mail: s.yakovlev@spbu.ru

Три пары векторов Якоби $\mathbf{x}_\beta$, $\mathbf{y}_\beta$ с $\beta = 1, 2, 3$, связанные друг с другом ортогональными преобразованиями, образуют конфигурационное пространство $\mathbb{R}^6$ векторов $\mathbf{X} = \{\mathbf{x}_\beta, \mathbf{y}_\beta\}$. Гиперсферические координаты состоят из гиперрадиуса $R = \sqrt{\mathbf{x}_\beta^2 + \mathbf{y}_\beta^2}$ и угловых переменных. В качестве последних можно выбрать угловые координаты векторов Якоби $\hat{x}_\beta, \hat{y}_\beta$ и гиперугол $\alpha_\beta = \tan^{-1}(y_\beta/x_\beta)$. Здесь и далее модули векторов обозначаются нежирным шрифтом, например, $x = |\mathbf{x}|$, а символом таким как $\hat{x} = \mathbf{x}/x$ обозначается единичный вектор по направлению вектора $\mathbf{x}$. Хорошо известна форма шестимерного оператора Лапласа $\Delta = \Delta_{\mathbf{x}_\beta} + \Delta_{\mathbf{y}_\beta}$ в гиперсферических координатах $R, \alpha_\beta, \hat{x}_\beta, \hat{y}_\beta$

$$\Delta = R^{-5}\partial_R R^5 \partial_R - R^{-2}\mathbf{K}^2,$$

где оператор квадрата гипермомента $\mathbf{K}^2$ действует только по переменным $\hat{X} = \{\alpha_\beta, \hat{x}_\beta, \hat{y}_\beta\}$. Для целей данной работы явный вид этого оператора не играет существенной роли, тогда как наборы его собственных функций и собственных значений, удовлетворяющих уравнению

$$\mathbf{K}^2 Y_{\mathcal{K}}(\hat{X}) = k(k+4) Y_{\mathcal{K}}(\hat{X}), \tag{1}$$

являются главными составляющими формализма разложений по гиперсферическим функциям. В формуле (1) $k = 0, 1, 2, ...$ – целые неотрицательные числа, а мультииндекс $\mathcal{K}$ обозначает полный набор квантовых чисел, специфицирующих собственные функции, например, $\mathcal{K} = \{k, \ell_x, m_x, \ell_y, m_y\}$, где ℓ_x, m_x – квантовые числа момента и его проекции для оператора орбитального момента, отвечающего вектору $\mathbf{x}$, и аналогично для вектора $\mathbf{y}$. В дальнейшем будем систематически пользоваться такими мультииндексами для спецификации парциальных компонент волновой функции и матриц, представляющих гамильтониан и другие величины. Довольно общий и достаточно инвариантный подход к построению гиперсферических функций $Y_{\mathcal{K}}$ можно найти в [10]. Соотношения ортогональности

$$\int \mathrm{d}\hat{X} Y_{\mathcal{K}}(\hat{X}) Y^*_{\mathcal{K}'}(\hat{X}) = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}$$

и полноты

$$\sum_{\mathcal{K}} Y^*_{\mathcal{K}}(\hat{X}) Y_{\mathcal{K}}(\hat{X}') = \delta(\hat{X}, \hat{X}')$$

позволяют получить представление гиперсферических функций для волновой функции

$$\Psi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) = (PR)^{-5/2} \sum_{\mathcal{K},\mathcal{N}} \Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P) Y_{\mathcal{K}}(\hat{X}) Y^*_{\mathcal{N}}(\hat{P}) \tag{2}$$

и уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{\ell_k(\ell_k+1)}{R^2} - P^2\right)\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P) = = -\sum_{\mathcal{K}'} V_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}(R)\Psi_{\mathcal{K}'\mathcal{N}}(R, P). \tag{3}$$

Здесь $\ell_k = k + 3/2$. Матричные элементы потенциалов и парциальные компоненты волновой функции даются интегралами

$$V_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}(R) = \sum_{\beta=1}^{3} \int \mathrm{d}\hat{X}\, Y^*_{\mathcal{K}}(\hat{X}) V_\beta(\mathbf{x}_\beta) Y_{\mathcal{K}'}(\hat{X}),$$

$$\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P) = (PR)^{5/2} \int \mathrm{d}\hat{X}\,\mathrm{d}\hat{P}\, \Psi(\mathbf{X}, \mathbf{P}) Y^*_{\mathcal{K}}(\hat{X}) Y_{\mathcal{N}}(\hat{P}). \tag{4}$$

Вектор $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^6$ составлен из относительных импульсов $\mathbf{q}_\beta$, $\mathbf{p}_\beta$, задающих свободную динамику частиц в начальном состоянии, и сопряженных якобиевым векторам $\mathbf{x}_\beta, \mathbf{y}_\beta$. В данной работе под короткодействующими потенциалами мы понимаем такие функции $V(\mathbf{x})$, которые при $x \to \infty$ убывают как $V(\mathbf{x}) \sim O(x^{-3-\rho})$), $\rho > 0$.

В данной работе рассматривается задача трехчастичного рассеяния с тремя свободными частицами в начальной конфигурации, т.е. $3 \to 3, 2$ рассеяние. Известно, что соответствующая волновая функция имеет довольно сложную асимптотику в полном конфигурационном пространстве $\mathbb{R}^6$ [2, 3]. Эта асимптотика содержит вклады упругого рассеяния $3 \to 3$, включая однократное и двукратное перерассеяние частиц, а также вклады неупругого рассеяния $3 \to 2$ с образованием двухчастичных связанных состояний в конечных конфигурациях.

В работе [8] асимптотика парциальных волн, заданных интегралами (4), вычислена с помощью представления волновой функции, полученного из интегральных уравнений Фаддеева. В отличие от случая полного конфигурационного пространства было строго показано, что главные члены асимптотики при $PR \to \infty$ парциальных компонент $\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R, P)$ волновой функции $3 \to 3, 2$ содержат вклады только тех процессов, в которых все три частицы находятся в состояниях непрерывного спектра как до, так и после взаимодействия. Такая асимптотическая фильтрация происходит благодаря интегрированию в (4) волновой функции с гладкими базисными функциями [8]. Также в работе [8] показано, что альтернативно эту асимптотику можно построить, используя асимптотические решения парциального уравнения Шредингера (3). Последний результат мы приводим здесь как основу для дальнейшего обобщения на случай потенциалов кулоновского взаимодействия между частицами. Для этого асимптотику парциальных компонент из [8] удобно записать в виде

$$\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R,P) \sim \frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}} \left[e^{-i(RP-\ell_k\pi/2)}\delta_{\mathcal{K}\mathcal{N}} - \right. \\ \left. -e^{+i(RP-\ell_k\pi/2)} S_{\mathcal{K}\mathcal{N}} \right]. \qquad (5)$$

Здесь $S_{\mathcal{K}\mathcal{N}}$ - элементы S-матрицы, отвечающие переходам между состояниями в которых частицы свободны как до, так и после взаимодействия. Из (5) следует, что функциональный вид этой асимптотики определяется решениями уравнений (3) при сохранении в них только самых старших при $PR \to \infty$ членов

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2\right) e^{\pm i(RP)} = 0. \qquad (6)$$

Важно отметить, что несмотря на то, что в уравнении (6) отсутствует центробежный член, дополнительные фазы волн в (5) содержат в неявном виде информацию об этом члене, так как выполняется асимптотическое равенство

$$h^{\pm}_{\ell_k}(PR) \sim e^{\pm i(RP-\ell_k\pi/2)},$$

в котором функции Риккати–Ханкеля $h^{\pm}_{\ell_k}(PR)$ [11] удовлетворяют уже уравнению с центробежным членом

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{\ell_k(\ell_k+1)}{R^2} - P^2\right) h^{\pm}_{\ell_k}(R,P) = 0.$$

Асимптотика (5) теперь может быть заменена на эквивалентную в терминах функций Риккати–Ханкеля

$$\Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R,P) \sim \frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}} \left[h^{-}_{\ell_k}(PR)\delta_{\mathcal{K}\mathcal{N}} - h^{+}_{\ell_k}(PR) S_{\mathcal{K}\mathcal{N}} \right]. \qquad (7)$$

Функция в правой части (7) удовлетворяет уравнениям (3) при $PR \to \infty$ с невязкой, определяемой только матричными элементами потенциалов $O(V_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R))$, ведущих себя в короткодействующем случае как $O(R^{-3})$. В результате асимптотика решения задачи рассеяния для уравнений (3) построена как суперпозиция асимптотических решений этих уравнений, заданных функциями Риккати–Ханкеля $h^{\pm}_{\ell_k}$, которая явно учитывает центробежные члены.

3. Построение асимптотических решений и асимптотики решения задачи рассеяния для уравнения Шредингера с кулоновскими потенциалами. Основной целью настоящей работы является обобщение асимптотических представлений (5) и (7), используя метод, описанный в предыдущем разделе, для случая кулоновских взаимодействий между частицами

$$V_\beta(\mathbf{x}_\beta) = \frac{c_\beta}{x_\beta}.$$

Мы допускаем как отталкивающие $c_\beta > 0$, так и притягивающие $c_\beta < 0$ кулоновские взаимодействия между частицами. Система уравнений (3) для случая кулоновских взаимодействий приобретает вид

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{\ell_k(\ell_k+1)}{R^2} - P^2\right) \Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R,P) + \\ + \sum_{\mathcal{K}'} \frac{C_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}}{R} \Psi_{\mathcal{K}'\mathcal{N}}(R,P) = 0, \qquad (8)$$

где матричные элементы зарядовой матрицы $C_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}$ даются интегралами

$$C_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \sum_{\beta=1}^{3} c_\beta \int \mathrm{d}\hat{X}\, \frac{Y^*_{\mathcal{K}}(\hat{X}) Y_{\mathcal{K}'}(\hat{X})}{\cos\alpha_\beta}. \qquad (9)$$

Поскольку $\mathrm{d}\hat{X} = (\sin\alpha_\beta)^2(\cos\alpha_\beta)^2 d\alpha_\beta d\hat{x}_\beta d\hat{y}_\beta$ при каждом β, то интегралы в (9) не сингулярны.

Для дальнейшего полезно перейти к матричным обозначениям. Введем в рассмотрение матрицы $\mathbb{L}$, $\mathbb{C}$ и матрицу-функцию $\mathbb{F}(R,P)$ с матричными элементами вида

$$[\mathbb{L}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \ell_k(\ell_k+1)\delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}, \quad [\mathbb{C}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = C_{\mathcal{K}\mathcal{K}'},$$

и

$$[\mathbb{F}]_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R,P) = \Psi_{\mathcal{K}\mathcal{N}}(R,P).$$

С помощью этих матриц перепишем систему уравнений (8) в виде

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2 + \frac{1}{R}\mathbb{C} + \frac{1}{R^2}\mathbb{L}\right) \mathbb{F}(R,P) = 0. \qquad (10)$$

Необходимые для задачи рассеяния $3 \to 3, 2$ асимптотические решения уравнения (10) построим в два этапа.

На первом этапе воспользуемся тем, что, как показано в предыдущем разделе, старшие члены асимптотических решений должны определяться решениями уравнений (10), в которых можно пренебречь членами порядка $O(R^{-2})$ и меньше

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2 + \frac{1}{R}\mathbb{C}\right) \mathbb{F}_0(R,P) = 0. \qquad (11)$$

Явные решения этого уравнения типа сходящихся и расходящихся волн строятся с помощью процедуры диагонализации зарядовой матрицы $\mathbb{C}$

$$\mathbb{V}^\dagger \mathbb{C} \mathbb{V} = \mathbb{D}_0,$$

где $\mathbb{D}_0$ – диагональная матрица с матричными элементами вида

$$[\mathbb{D}_0]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} d_{\mathcal{K}}.$$

Значек † здесь и далее означает эрмитово сопряжение матриц. В результате такой диагонализации уравнение (11) приводится к виду

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} - P^2 + \frac{1}{R}\mathbb{D}_0\right)\hat{\mathbb{F}}_0(R,P) = 0 \qquad (12)$$

для $\hat{\mathbb{F}}_0(R,P) = \mathbb{V}^\dagger \mathbb{F}_0(R,P)\mathbb{V}$ с диагональной матрицей зарядов $\mathbb{D}_0$. Матричные элементы решений для уравнения (12) типа сходящихся и расходящихся волн выберем в виде

$$[\hat{\mathbb{U}}_0^{\mp}(PR)]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} = \delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'} \frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}} u_0^{\mp}(\eta_{\mathcal{K}}, PR - \ell_k\pi/2), \quad (13)$$

где $\eta_{\mathcal{K}} = d_{\mathcal{K}}/(2P)$. Функции $u_0^{\pm}(\eta,z)$ даются в терминах регулярной F_0 и нерегулярной G_0 кулоновских функций [11] формулами

$$u_0^{\pm}(\eta,z) = e^{\mp i\sigma_0(\eta)}[G_0(\eta,z) \pm iF_0(\eta,z)],$$

в которых $\sigma_0(\eta) = \arg\Gamma(1+i\eta)$, и имеют следующую асимптотику при $|z| \to \infty$

$$u_0^{\pm}(\eta,z) \sim e^{\pm i(z-\eta\ln 2z)}.$$

Используя матрицы-функции $\hat{\mathbb{U}}_0^{\pm}(R,P)$, построим соответствующие решения уравнения (12) в виде

$$\mathbb{U}_0^{\pm}(R,P) = \mathbb{V}\hat{\mathbb{U}}_0^{\pm}(R,P)\mathbb{V}^\dagger.$$

Следующая линейная комбинация сходящихся и расходящихся волн $\mathbb{U}_0^{\mp}(R,P)$

$$\mathbb{F}_0(R,P) = \mathbb{U}_0^{-}(R,P) - \mathbb{U}_0^{+}(R,P)\mathbb{S}_c \qquad (14)$$

теперь является искомым решением недиагонализованного уравнения (11), которое представляет собой прямой аналог правой части формулы (5) для кулоновского случая. Вместе с тем матрица-функция $\mathbb{F}_0(R,P)$ дает старший член асимптотики решения задачи рассеяния для полного уравнения (10)

$$\mathbb{F}(R,P) \sim \mathbb{F}_0(R,P). \qquad (15)$$

Как и в случае короткодействующих потенциалов, в этих формулах величина $\mathbb{S}_c$ имеет смысл S-матрицы, отвечающей переходам между состояниями, в которых все три частицы находятся в состояниях непрерывного спектра. Следует подчеркнуть, что благодаря тому, что кулоновские функции $u_0^{\pm}(\eta,z)$ обладают свойством $u_0^{\pm}(0,z) = e^{\pm iz}$ формула (15) при $\mathbb{C} = 0$ преходит в (5). Так же, как и в случае короткодействующих потенциалов, правая часть (15) удовлетворяет полному уравнению (10) с невязкой $O(R^{-2})$. Итак, мы построили старшие члены асимптотики парциальных компонент волновой функции для системы трех частиц с кулоновским взаимодействием как прямое обобщение асимптотики (5).

Перейдем ко второму этапу построения асимптотических решений уравнения (10), на котором учтем центробежный член. Поскольку матрицы $\mathbb{C}$ и $\mathbb{L}$ не коммутируют в общем случае, то построить искомые решения простой заменой в формулах типа (14) функций $u_0^{\pm}$ на функции

$$u_\ell^{\pm}(\eta,z) = e^{\mp i\sigma_\ell(\eta)}[G_\ell(\eta,z) \pm iF_\ell(\eta,z)],$$

где F_ℓ и G_ℓ – кулоновские функции, отвечающие моменту ℓ, и $\sigma_\ell(\eta) = \arg\Gamma(\ell+1+i\eta)$, подобно тому как это было сделано в предыдущем разделе для случая короткодействующих потенциалов, не получится. Для построения требуемых асимптотических решений используем метод, аналогичный методу адиабатических разложений. Диагонализуем R-зависящую матрицу $\mathbb{C} + \frac{1}{R}\mathbb{L}$

$$\mathbb{W}^\dagger(R)\left[\mathbb{C} + \frac{1}{R}\mathbb{L}\right]\mathbb{W}(R) = \mathbb{D}(R).$$

Здесь $\mathbb{W}(R)$ – унитарна, а $\mathbb{D}(R)$ – диагональна. Представляя решение уравнения (10) в виде

$$\mathbb{F}(R,P) = \mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{F}}(R,P)\mathbb{W}^\dagger(R), \qquad (16)$$

получаем для $\hat{\mathbb{F}}(R,P)$ уравнение

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2} + \frac{1}{R}\mathbb{D}(R) - P^2\right)\hat{\mathbb{F}}(R,P) =$$
$$2\mathbb{W}^\dagger(R)\frac{d\mathbb{W}(R)}{dR}\frac{d\hat{\mathbb{F}}(R,P)}{dR} + \mathbb{W}^\dagger(R)\frac{d^2\mathbb{W}(R)}{dR^2}\hat{\mathbb{F}}(R,P). \qquad (17)$$

Решение уравнения (17) требуется при $R \to \infty$, поэтому матрицы $\mathbb{W}(R)$ и $\mathbb{D}(R)$ достаточно построить при больших значениях R как следующие разложения по обратным степеням R

$$\mathbb{D}(R) = \mathbb{D}^{(0)} + \frac{1}{R}\mathbb{D}^{(1)} + O(R^{-2}),$$
$$\mathbb{W}(R) = \mathbb{W}^{(0)} + \frac{1}{R}\mathbb{W}^{(1)} + O(R^{-2}). \qquad (18)$$

Для независящих от R матриц $\mathbb{D}^{(j)}$, $\mathbb{W}^{(j)}$ получаются стандартные уравнения теории возмущений

$$\mathbb{C}\mathbb{W}^{(0)} = \mathbb{W}^{(0)}\mathbb{D}^{(0)}, \qquad (19)$$
$$\mathbb{C}\mathbb{W}^{(1)} - \mathbb{W}^{(1)}\mathbb{D}^{(0)} = \mathbb{W}^{(0)}\mathbb{D}^{(1)} - \mathbb{L}\mathbb{W}^{(0)}. \qquad (20)$$

Из (19) следует, что матрица $\mathbb{W}^{(0)}$ диагонализует $\mathbb{C}$ и, следовательно, $\mathbb{W}^{(0)}=\mathbb{V}$ и $\mathbb{D}^{(0)}=\mathbb{D}_0$, так что

$$[\mathbb{D}^{(0)}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}=\delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}d_{\mathcal{K}}.$$

Условие разрешимости уравнения (20) стандартным образом позволяет найти матрицу $\mathbb{D}^{(1)}$

$$[\mathbb{D}^{(1)}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}=\delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}d^{(1)}_{\mathcal{K}},\quad d^{(1)}_{\mathcal{K}}=\left[\mathbb{V}^\dagger\mathbb{L}\mathbb{V}\right]_{\mathcal{K}\mathcal{K}}.$$

Заметим, что в силу неотрицательности матрицы $\mathbb{L}$ для диагональных элементов матрицы $\mathbb{D}^{(1)}$ выполняется неравенство

$$d^{(1)}_{\mathcal{K}}\geq 0.$$

Матричные элементы решения уравнения (20) даются при этом формулами

$$[\mathbb{W}^{(1)}]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}=-\sum_{\mathcal{N}\neq\mathcal{K}'}[\mathbb{V}]_{\mathcal{K}\mathcal{N}}\frac{[\mathbb{V}^\dagger\mathbb{L}\mathbb{V}]_{\mathcal{N}\mathcal{K}'}}{d_{\mathcal{N}}-d_{\mathcal{K}'}}.$$

Вычисляя производные от $\mathbb{W}(R)$ с помощью (18), получаем

$$\mathbb{W}^\dagger(R)\frac{d}{dR}\mathbb{W}(R)=-\frac{1}{R^2}\mathbb{V}^\dagger\mathbb{W}^{(1)}+O(R^{-3}),$$
$$\mathbb{W}^\dagger(R)\frac{d^2}{dR^2}\mathbb{W}(R)=\frac{2}{R^3}\mathbb{V}^\dagger\mathbb{W}^{(1)}+O(R^{-4}).$$

С помощью этих выражений преобразуем уравнение (17) к виду

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2}+\frac{1}{R}\mathbb{D}^{(0)}+\frac{1}{R^2}\mathbb{D}^{(1)}-P^2\right)\hat{\mathbb{F}}(R,P)+ \\ +\frac{2}{R^2}\mathbb{V}^\dagger\mathbb{W}^{(1)}\frac{d\hat{\mathbb{F}}(R,P)}{dR}=O(R^{-3}), \qquad (21)$$

где в $O(R^{-3})$ собраны члены, убывающие при $R\to\infty$ как $1/R^{-3}$ и быстрее. Подчеркнем, что единственная недиагональная в (21) матрица $\mathbb{V}^\dagger\mathbb{W}^{(1)}$ имеет по построению нулевую диагональ. Для решения уравнения (21) воспользуемся методами, разработанными в [13] для уравнений подобного типа. Решим сначала диагональную систему

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2}+\frac{1}{R}\mathbb{D}^{(0)}+\frac{1}{R^2}\mathbb{D}^{(1)}-P^2\right)\check{\mathbb{U}}(R,P)=0.$$

Два набора решений этого уравнения типа сходящихся и расходящихся волн выберем согласовано с (13) в виде

$$[\check{\mathbb{U}}^{\mp}(PR)]_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}=\delta_{\mathcal{K}\mathcal{K}'}\frac{i^{k+1}}{\sqrt{2\pi}}u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}},PR).$$

Здесь $L_{\mathcal{K}}=-1/2+\sqrt{1/4+d^{(1)}_{\mathcal{K}}}$ – неотрицательное решение уравнения $L_{\mathcal{K}}(L_{\mathcal{K}}+1)=d^{(1)}_{\mathcal{K}}$, а $u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}},PR)$ – кулоновские сходящиеся и расходящиеся волны [11, 12], удовлетворяющие уравнению

$$\left(-\frac{d^2}{dR^2}+\frac{d_{L_{\mathcal{K}}}}{R}+\frac{L_{\mathcal{K}}(L_{\mathcal{K}}+1)}{R^2}-P^2\right)u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}},PR)=0$$

и имеющие при $R\to\infty$ асимптотику

$$u^{\mp}_{L_{\mathcal{K}}}(\eta_{\mathcal{K}},PR)\sim e^{\mp i(PR-\eta_{\mathcal{K}}\ln(2PK)-L_{\mathcal{K}}\pi/2)}.$$

Нам осталось учесть недиагональный член в уравнении (21). В работе [13] показано, что решения уравнения такого типа как (21) могут быть построены с помощью представления

$$\hat{\mathbb{U}}^{\pm}(R,P)=\mathbb{Z}^{\pm}(R,P)\check{\mathbb{U}}^{\pm}(R,P). \qquad (22)$$

Для амплитуд $\mathbb{Z}^{\pm}$ после подстановки этого выражения в (21) получаются следующие уравнения

$$-\frac{1}{R}[\mathbb{D}^{(0)},\mathbb{Z}^{\pm}]+\frac{1}{R^2}[\mathbb{D}^{(1)},\mathbb{Z}^{\pm}]- \\ -\frac{d^2\mathbb{Z}^{\pm}}{dR^2}-2\frac{d\mathbb{Z}^{\pm}}{dR}\frac{d\check{\mathbb{U}}^{\pm}}{dR}(\check{\mathbb{U}}^{\pm})^{-1}+ \\ +\frac{2}{R^2}\mathbb{A}\frac{d\mathbb{Z}^{\pm}}{dR}+\frac{2}{R^2}\mathbb{A}\mathbb{Z}^{\pm}\frac{d\check{\mathbb{U}}^{\pm}}{dR}(\check{\mathbb{U}}^{\pm})^{-1}=O(R^{-3}),$$

где для краткости введено обозначение $\mathbb{A}=\mathbb{V}^\dagger\mathbb{W}^{(1)}$, а через $[.,.]$ обозначен коммутатор матриц. Асимптотическое решение для $\mathbb{Z}^{\pm}$ построим в виде

$$\mathbb{Z}^{\pm}(R,P)=\mathbb{Z}^{(0)\pm}+\frac{1}{R}\mathbb{Z}^{(1)\pm}+O(R^{-2}) \qquad (23)$$

и, воспользовавшись асимптотикой

$$\frac{d\check{\mathbb{U}}^{\pm}}{dR}(\check{\mathbb{U}}^{\pm})^{-1}=\pm iP\mathbb{I}+O(R^{-1})$$

из [13], где $\mathbb{I}$ – единичная матрица, придем к следующему уравнению

$$\frac{1}{R}\left[\mathbb{D}^{(0)},\left(\mathbb{Z}^{(0)\pm}+\frac{1}{R}\mathbb{Z}^{(1)\pm}\right)\right]+\frac{1}{R^2}[\mathbb{D}^{(1)},\mathbb{Z}^{(0)\pm}]+ \\ +\frac{(\pm 2iP)}{R^2}\mathbb{Z}^{(1)\pm}+\frac{(\pm 2iP)}{R^2}\mathbb{A}\mathbb{Z}^{(0)\pm}=O(R^{-3}),$$

в котором сохранены в явном виде члены до порядка $O(R^{-2})$ включительно. Приравнивая члены с одинаковыми степенями $1/R$, для $\mathbb{Z}^{(0)\pm}$ и $\mathbb{Z}^{(1)\pm}$ получаем уравнения

$$[\mathbb{D}^{(0)},\mathbb{Z}^{(0)\pm}]=0, \qquad (24)$$

$$(\pm 2iP)\mathbb{Z}^{(1)\pm}+[\mathbb{D}^{(0)},\mathbb{Z}^{(1)\pm}]=-[\mathbb{D}^{(1)},\mathbb{Z}^{(0)\pm}]- \\ -(\pm 2iP)\mathbb{A}\mathbb{Z}^{(0)\pm}. \qquad (25)$$

Из первого уравнения (24) следует, что $\mathbb{Z}^{(0)\pm}$ является произвольной диагональной матрицей. Из второго уравнения (25) находим матричные элементы матрицы $\mathbb{Z}^{(1)\pm}$

$$[\mathbb{Z}^{(1)\pm}]_{\mathcal{K}\mathcal{N}} = -(1-\delta_{KN})\frac{(\pm 2iP)[\mathbb{A}]_{\mathcal{K}\mathcal{N}}}{d_{\mathcal{K}} - d_{\mathcal{N}} \pm 2iP}[\mathbb{Z}^{(0)\pm}]_{\mathcal{N}\mathcal{N}}. \tag{26}$$

Итак, формулы (22) по построению дают асимптотические решения уравнения (17) с невязкой $O(R^{-3})$ и тем самым решают задачу построения асимптотических решений, учитывающих центробежный член. Нетрудно видеть, что в старшем порядке при $R \to \infty$ выполняется соотношение

$$\hat{\mathbb{U}}^{\pm}(R,P) \sim \mathbb{Z}_0^{\pm}\hat{\mathbb{U}}_0^{\pm}(R,P) + O(R^{-1}). \tag{27}$$

Последнее позволяет устранить произвол в решениях в выборе $\mathbb{Z}_0^{\pm}$, положив $\mathbb{Z}_0^{\pm} = \mathbb{I}$.

Асимптотические граничные условия для задачи рассеяния для уравнения (17) вновь задаются в виде суперпозиции

$$\hat{\mathbb{F}}(R,P) \sim \hat{\mathbb{U}}^{-}(R,P) - \hat{\mathbb{U}}^{+}(R,P)\hat{\mathbb{S}}_c.$$

Для решения задачи рассеяния для исходного уравнения (10) получаем отсюда следующую асимптотику

$$\mathbb{F}(R,P) \sim \mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{U}}^{-}(R,P)\mathbb{W}^{\dagger}(R) - \\ -\mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{U}}^{+}(R,P)\mathbb{W}^{\dagger}(R)\mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{S}}_c\mathbb{W}^{\dagger}(R). \tag{28}$$

Правая часть (28) с использованием (18) для $\mathbb{W}(R)$ по построению удовлетворяет уравнению (10) с невязкой $O(R^{-3})$ и тем самым формула (28) решает задачу построения асимптотики решения задачи рассеяния для случая кулоновских потенциалов, учитывающую центробежный член. Величина $\mathbb{S}_c = \mathbb{V}\hat{\mathbb{S}}_c\mathbb{V}^{\dagger}$, как и выше, играет роль S-матрицы, отвечающей переходам между конфигурациями, в которых все три частицы находятся в состояниях непрерывного спектра. Здесь мы подчеркнем прямую наследственность этого факта результату работы [8], в которой строго доказано, что все процессы, связанные с реакциями образования связанных состояний при столкновениях в системе трех частиц с короткодействующими взаимодействиями, не дают вклада в старшие члены асимптотики парциальных компонент волновых функций.

Учитывая соотношение (27) и принимая во внимание вид старшего члена для $\mathbb{W}(R)$, легко установить следующее асимптотическое равенство

$$\mathbb{W}(R)[\hat{\mathbb{U}}^{-}(R,P) - \hat{\mathbb{U}}^{+}(R,P)\hat{\mathbb{S}}_c]\mathbb{W}^{\dagger}(R) = \\ = \mathbb{V}[\hat{\mathbb{U}}_0^{-}(R,P) - \hat{\mathbb{U}}_0^{+}(R,P)\hat{\mathbb{S}}_c]\mathbb{V}^{\dagger} + O(R^{-1}). \tag{29}$$

На основании (29) можем утверждать, что асимптотически при $R \to \infty$ формулы (28) и (15) эквивалентны в старшем порядке

$$\mathbb{F}(R,P) = \mathbb{F}_0(R,P) + O(R^{-1})$$

при условии $\mathbb{W}(R)\hat{\mathbb{S}}_c\mathbb{W}^{\dagger}(R) = \mathbb{S}_c + O(R^{-1})$. Поскольку выше показано, что правая часть (15) при $\mathbb{C} = 0$ превращается в правую часть формулы (5), то и асимптотическое представление (28) обладает таким же свойством. Важно также подчеркнуть, что асимптотическое представление (28), учитывающее центробежные члены в кулоновском случае, при $\mathbb{C} = 0$ непосредственно переходит в представление (7) для задачи рассеяния без кулоновских взаимодействий, учитывающее центробежные члены в уравнении (3), соответственно.

S-матрица $\mathbb{S}_c$, входящая в полученные асимптотические представления, в рамках решения задачи построения асимптотических решений остается неопределенной величиной. Стандартно, ее вычисление должно происходить на этапе нахождения физического решения задачи рассеяния на всем интервале изменения гиперрадиуса $0 \le R < \infty$ и удовлетворяющего нулевому граничному условию $\mathbb{F}(0,P) = 0$ и полученным в данной работе асимптотическим граничным условиям (28). Асимптотическое представление (28) завершает решение задачи построения асимптотики волновой функции задачи рассеяния для системы трех частиц с кулоновским взаимодействием в представлении гиперсферических функций.

В завершение статьи уместно сделать следующий комментарий. В настоящей работе не производилось усечение парциального разложения (2), и, следовательно, матрицы, задействованные в формализме, имеют бесконечную линейную размерность. Как видно из формализма, процедура построения асимптотических решений не зависит от размерности этих матриц. Таким образом, полученная асимптотика волновой функции в этом отношении является точной. Естественно, что при практическом применении бесконечная система уравнений неизбежно должна быть усечена до системы конечного числа, скажем, N уравнений. В этом случае следует ответить на вопрос о сходимости при $N \to \infty$ построенного приближенного решения. Этот вопрос тесно связан с первичными свойствами сходимости парциального разложения волновой функции (2). Вообще говоря, поскольку волновая функция $\Psi(\mathbf{X},\mathbf{P})$ как гладкая и ограниченная функция угловых переменных $\hat{X}$ и $\hat{P}$ интегрируема с квадратом на $\mathbb{S}^5_{\mathbf{X}} \times \mathbb{S}^5_{\mathbf{P}}$ относительно меры $\mathrm{d}\hat{X}\mathrm{d}\hat{P}$, то разложение (2) *априори* сходится в смысле $L_2(\mathbb{S}^5_{\mathbf{X}} \times \mathbb{S}^5_{\mathbf{P}})$. Сходимости такого типа следует ожидать для приближенного решения, если $N \to \infty$. Более подробное рассмотрение свойств сходимости обсуждаемых аппроксимаций выходит за рамки данной статьи. Это планируется сделать в другой публикации.

Исследования выполнены в рамках проекта СПбГУ INI 2021 с использованием Ресурсного центра "Вычислительный центр СПбГУ" (http://cc.spbu.ru).

1. С. П. Меркурьев, Л. Д. Фаддеев, *Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц*, Наука, М. (1985); [L. D. Faddeev and S. P. Merkuriev, *Quantum Scattering Theory for Several Particle Systems*, Springer, Dordrecht (1993)].
2. С. П. Меркурьев, ТМФ **8**(2), 235 (1971) [S. P. Merkur'ev, Theor. Math. Phys. **8**, 798 (1971)].
3. С. Л. Яковлев, ТМФ **186**(1), 152 (2016) [S. L. Yakovlev, Theor. Math. Phys. **186**(1), 126 (2016)].
4. С. П. Меркурьев, ТМФ **32**, 187 (1977) [S. P. Merkur'ev, Theor. Math. Phys. **32**, 680 (1977)].
5. H. Klar, Z. Phys. D **16**(4), 231 (1990).
6. E. O. Alt and A. M. Mukhamedzhanov, Phys. Rev. A **47**(3), 2004 (1993).
7. R. K. Peterkop, *Theory of Ionization of Atoms* Colorado Associated Univ. Press, Louisville (1977).
8. С. Л. Яковлев, ТМФ **206**(1), 79 (2021).
9. R. Ya. Kezerashvili and S. Rosati, Phys. Lett. B **318**, 23 (1993).
10. Н. Я. Виленкин, *Специальные функции и теория представлений групп*, Наука, М. (1965) [N. Ja. Vilenkin, *Special Functions and the Theory of Group Representations, Transl. Math. Monogr.*, Amer. Math. Soc., Providence, R. I. (1968).
11. M. Abramowitz and I. A. Stegun (editors), *Handbook of Mathematical Functions, Applied Mathematics Series*, National Bureau of Standards, Washington, DC (1972).
12. A. Messiah, *Quantum mechanics*, North Holland Publishing Company, Amsterdam (1962).
13. С. Л. Яковлев, ТМФ **203**(2), 269 (2020).