

**J-МАТРИЧНЫЙ МЕТОД
ВЫЧИСЛЕНИЯ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ
КУЛОНОВСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ
И СЕЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

*Ю. В. Попов**

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, Москва

С. А. Зайцев

Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск, Россия

*С. И. Винуцкий***

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

ВВЕДЕНИЕ	1312
МАТРИЧНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ: ПСЕВДОСОСТОЯНИЯ	1317
Математический формализм для вычисления спектральной функции с одним асимптотически свободным электроном в поле иона	1317
Два асимптотически свободных электрона	1321
МАТРИЧНЫЕ ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА– МЕРКУРЬЕВА	1322
Интегральное уравнение для волновой функции двух асимптотически свободных электронов в поле ядра	1322
Матричные интегральные уравнения и псевдосоостояния	1328
Однократная ионизация атома гелия	1329
Двукратная ионизация атома гелия	1334
Проблемы и их обсуждение	1337
ПАРАБОЛИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ	1341
Формулировка проблемы	1342
Дискретный аналог уравнения Липпмана–Швингера	1345

*E-mail: popov@srd.sinp.msu.ru

**E-mail: vinsky2008@gmail.com

Матрица одномерной и двумерной кулоновской функции Грина	1347
Матрица шестимерной кулоновской функции Грина	1354
Обсуждение результатов разд.3	1357
ЗАКЛЮЧЕНИЕ	1358
ПРИЛОЖЕНИЕ	1359
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	1362

***J*-МАТРИЧНЫЙ МЕТОД ВЫЧИСЛЕНИЯ ТРЕХЧАСТИЧНЫХ КУЛОНОВСКИХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ И СЕЧЕНИЙ ФИЗИЧЕСКИХ ПРОЦЕССОВ**

*Ю. В. Попов**

Научно-исследовательский институт ядерной физики им. Д. В. Скобельцына
Московского государственного университета им. М. В. Ломоносова, Москва

С. А. Зайцев

Тихоокеанский государственный университет, Хабаровск, Россия

*С. И. Виноцкий***

Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

Обзор посвящен одному из широко известных методов численного решения кулоновской трехчастичной проблемы, а именно методу *J*-матрицы. Особое внимание уделено способам решения интегрального уравнения Липпмана–Швингера без привлечения псевдосостояний. Показаны трудности, вытекающие из формулировки интегрального уравнения в сферических координатах, которые ведут к расходимости его интегрального члена в случае расчета волновой функции с двумя асимптотически свободными электронами. При этом оказывается неясным соотношение точного и приближенного решений при ограничении матрицы остаточного потенциала конечным числом базисных функций и увеличением этого числа. Показано, как, в принципе, этих проблем можно избежать переформулировкой задачи в параболических координатах.

The review is devoted to widely known method of a numerical solution of the three-body Coulomb problem, namely the *J*-matrix method. The special attention is focused on the ways of solution of the integral Lippmann–Schwinger equation without attraction of pseudostates. There are revealed difficulties connected with a formulation of the integral equation in the spherical coordinates, which lead to a divergence of its integral part if one calculates the wave function with two asymptotically free electrons. The relation between exact and approximate solutions remains unclear, when the matrix of a residual potential is restricted to a finite number of basis functions, and this number goes up. It is shown that, in principle, these problems can be avoided by reformulating them in the parabolic coordinates.

PACS: 34.80.Dg; 03.65.Nk; 34.10.+x

*E-mail: popov@srd.sinp.msu.ru

**E-mail: vinitsky2008@gmail.com

Посвящается памяти Виктора Андреевича Кныра

ВВЕДЕНИЕ

Чуть менее сорока лет назад вышла в свет замечательная книга В. П. Жи-гунова и Б. Н. Захарьева «Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния» [1], в которой помимо введения в методы нерелятивистской квантовой теории рассеяния, открывающие пути численного решения многочастичного уравнения Шредингера, был представлен обзор состояния данного направления науки на тот период. Настоящая работа в определенном смысле отражает развитие этих методов и подходов, произошедших с тех пор в области атомной физики, где доминируют кулоновские потенциалы с их специфическим влиянием на теорию рассеяния нескольких квантовых частиц. При этом подробно освещаются подходы, широко применяемые в последнее время в мировой практике, в совершенствовании которых авторы принимали непосредственное участие.

Напомним кратко основные идеи, лежащие в основе метода сильной связи каналов. Гамильтониан квантовой системы представляется в виде суммы

$$H = H_0 + V, \quad (\text{B.1})$$

где оператор V определяется как взаимодействие и не считается малым. Предполагается, что мы можем решить квантовую спектральную задачу

$$H_0|\psi_\alpha\rangle = \varepsilon_\alpha|\psi_\alpha\rangle. \quad (\text{B.2})$$

Представляя собственную функцию гамильтониана в виде разложения в ряд

$$|\Psi\rangle = \sum_\alpha C_\alpha|\psi_\alpha\rangle, \quad (\text{B.3})$$

получаем из стационарного уравнения $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ систему алгебраических уравнений

$$(E - \varepsilon_\alpha)C_\alpha = \sum_\beta \langle\psi_\alpha|V|\psi_\beta\rangle C_\beta \quad (\text{B.4})$$

для коэффициентов разложения C_α . Эта система должна быть решена с учетом подходящих граничных условий задачи многочастичного рассеяния, обеспечивающих однозначную разрешимость аппроксимируемых компактных интегральных уравнений или соответствующих им краевых задач [2–5].

Во-первых, бесконечную систему уравнений (B.4) в общем случае решить невозможно, и ее следует урезать из каких-то соображений, выбирая, вероятно, важные каналы реакции. Например, в ряде формулировок

задачи двукратной ионизации атома гелия среди спектральных функций присутствуют функции, описывающие два асимптотически свободных электрона в поле бесконечно тяжелого ядра (в современной литературе по квантовой теории рассеяния атомных частиц их часто называют функциями двукратного континуума — double continuum wave functions). Термин «асимптотически свободные» для заряженных частиц носит условный характер, но мы будем им пользоваться для краткости. Так вот, матричные элементы, описывающие переходы между такими функциями посредством потенциала отталкивания двух электронов, не поддаются численному расчету, и их по этим соображениям опускают (!). Во-вторых, в кулоновском случае, как правило, невозможно произвести разбиение (В.1) так, чтобы и иметь аналитическое решение задачи (В.2), и удовлетворять адекватным граничным условиям задачи рассеяния (о некоторых исключениях будет сказано ниже, в разд. 3).

В последние десятилетия для анализа процессов столкновений и реакций были развиты алгебраические подходы, основанные на представлении гамильтониана в полном базисе квадратично-интегрируемых (L^2) функций. Представление гамильтониана в конечном базисе квадратично-интегрируемых функций давно и широко используется в атомной и ядерной физике для расчета структуры квантовой системы. Вместе с тем наибольший интерес при описании процессов рассеяния и реакций представляет L^2 -дискретизация континуума. Представление непрерывного спектра гамильтониана в контексте полных L^2 -базисов позволяет использовать в этих задачах алгебраические методы вместо решения систем дифференциальных уравнений. Таковым очевидным полным базисом для угловых переменных являются шаровые функции, используемые в подавляющем большинстве подходов, поэтому далее в основном обсуждаются базисы для радиальных переменных.

По-видимому, первые попытки применения L^2 -базиса так называемых штурмовских функций к задаче упругого рассеяния позитронов и электронов на атоме водорода даны в работах [6, 7]. При этом сам термин штурмовские функции (Sturmian function) не имеет специального исторического значения и был введен автором работы [6] с целью подчеркнуть, что эти функции являются решениями одной из возможных формулировок задачи Штурма–Лиувилля [8]. Существуют различные способы матричного представления гамильтониана в конечном L^2 -базисе. Например, в методе псевдосостояний и техники эквивалентных квадратур [9–13] (см. также работу [14] и цитируемую в ней литературу) используют дискретизацию непосредственно как способ интерполяции функции спектральной плотности. Иная концепция реализована в так называемом методе дискретных базисов (discrete basis set method) [15–20], основанном на вариационном принципе Швингера [21, 22], в рамках которого дальнедействующую часть гамильтониана пытаются учесть точно. При этом представление дальнедействующей части \hat{H}_0 гамильтониана $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ в полном базисе комбинируется с аппроксимацией короткодей-

ствующего остаточного потенциала \hat{V} в конечном подпространстве базисных функций, в качестве которых используются функции гармонического осциллятора. В результате исходное интегральное уравнение Липпмана–Швингера (ЛШ) сводится к системе алгебраических уравнений относительно элементов T -матрицы (K -матрицы).

К этой второй группе методов дискретизации континуума можно отнести и один из наиболее эффективных дискретных подходов, известных в атомной физике, — метод J -матрицы (матрица Якоби, трехдиагональная матрица) [23–25], — в рамках которого волновая функция состояния непрерывного спектра формально представляется в виде бесконечного разложения по собственным функциям гармонического осциллятора (в ядерной физике) или по лагеровским базисным функциям (в атомной физике). Представление дальнедействующей части \hat{H}_0 гамильтониана \hat{H} в этих базисах имеет вид трехдиагональной матрицы. Таким образом, соответствующее \hat{H}_0 уравнение Шредингера преобразуется в трехчленное рекуррентное соотношение для коэффициентов разложения волновой функции. Тем самым устанавливается связь метода с теорией ортогональных полиномов и открывается возможность использования этого мощного математического аппарата в теории рассеяния.

С точки зрения формализма и численной реализации метод J -матрицы аналогичен R -матричной теории рассеяния (см., например, [26, 27]). В рамках J -матричного подхода язык конфигурационного пространства, на котором сформулирована теория R -матрицы, переведен на язык пространства базисных функций. Кроме того, как показано в работе [28], если определить оператор проектирования \hat{P}_N на подпространство первых N базисных функций, то точное решение проблемы рассеяния на модельном потенциале $\hat{V}^N = \hat{P}_N \hat{V} \hat{P}_N$ может быть также получено с использованием формализма Фешбаха [29]. Тем самым была доказана эквивалентность теории Фешбаха и метода J -матрицы, в рамках которого пространство L^2 -функций с помощью проекторов \hat{P}_N и $\hat{Q}_N = \hat{I} - \hat{P}_N$ разделяется на «внутреннюю» и «внешнюю» области.

Авторы работы [30] попытались распространить формализм метода J -матрицы на произвольный базис L^2 -функций. Сейчас активно используются, например, В-сплайны [31, 32] — определенным образом сконструированные кусочно-полиномиальные функции в ограниченной области пространства.

Примерно в этот же период времени был предложен и развит так называемый метод сепарабельного разложения потенциала (PSE) [33–40], подобный по концепции, но несколько отличающийся технически от J -матричного подхода к проблеме рассеяния. В рамках PSE-метода также используется представление оператора потенциальной энергии в конечном подпространстве L^2 -базисных функций. В результате исходное интегральное уравнение

ЛШ преобразуется в систему линейных уравнений относительно неизвестных коэффициентов разложения волновой функции системы по базисным функциям. При удачном выборе базиса функций матричные элементы функции Грина, которые присутствуют в этом дискретном аналоге уравнения ЛШ, вычисляются аналитически. Были разработаны два варианта метода.

В работах [33–40] используются собственные функции гармонического осциллятора, для которых получено аналитическое представление свободной функции Грина. Таким образом, этот вариант PSE-метода применим к задачам рассеяния со свободной асимптотикой, что присуще ядерной физике [41].

В свою очередь, в работах [42–47] применяется так называемый кулоновско-штурмовский базис, что позволяет включить дальнедействующий кулоновский потенциал в функцию Грина и тем самым как-то учесть кулоновскую асимптотику. Этот вариант PSE-метода — так называемый «Coulomb–Sturmian separable expansion method» (CSSE) — был обобщен на случай кулоновской проблемы трех тел, которая решается на основе уравнений Фаддеева. К настоящему моменту применение CSSE-метода позволило достичь хороших результатов в описании связанных [48] и резонансных [49–51] состояний кулоновской трехчастичной системы, а также получить решение проблемы рассеяния при энергии ниже порога трехчастичного развала для случаев сил кулоновского отталкивания [52] и притяжения [53].

PSE-метод, очевидно, эквивалентен методу J -матрицы в той же степени, в какой уравнение ЛШ эквивалентно уравнению Шредингера. Аппроксимация потенциала \hat{V} его проекцией V^N на подпространство первых N базисных функций, которая применяется в J -матричном подходе, является одним из способов сепарабельного разложения потенциала. В свою очередь, при вычислении матричных элементов функции Грина в рамках CSSE-метода [54, 55] используются трехчленные рекуррентные соотношения, следующие из J -матричной структуры асимптотического гамильтониана. PSE-метод применяется к решению интегральных уравнений, при этом происходит автоматический учет заданных граничных условий.

В работе [56] проведено сопоставление метода J -матрицы с другими методами L^2 -дискретизации континуума. В частности, предложена J -матричная интерпретация положительных собственных значений обрезанной матрицы гамильтониана (псевдосостояний). Обобщение J -матричной теории на случай многоканального рассеяния в формализме сильной связи с конечным числом дискретных псевдосостояний мишени было также выполнено в работах [23, 24, 57, 58] и с успехом применено к описанию фоторасщепления иона H^- [59]. В этих расчетах сечение рассеяния обнаруживает аномальное поведение при энергиях, лежащих в окрестности энергий псевдосостояний. В работе [60] показано, что проблема ложных резонансов может быть решена путем увеличения порядка матрицы гамильтониана, что, впрочем, приводит к возрастанию числа псевдосостояний.

В работах [61–64] продемонстрировано, что комплексный скейлинг в сочетании с формализмом метода J -матрицы позволяют получить эффективную процедуру поиска резонансных полюсов S -матрицы рассеяния. Показано, что точный учет оператора кинетической энергии существенно повышает скорость сходимости результатов по сравнению со стандартным методом комплексного скейлинга, в котором используется конечный L^2 -базис. Применение этой процедуры к расчету структуры двухатомных молекул рассмотрено в работах [65, 66]. Метод вычисления полюсов S -матрицы в случае атомных систем также обсуждается в работе [67].

Матричные представления свободной и кулоновской функций Грина в осцилляторном и лагеровском базисах получены в работах [68, 69]. Обобщение этих результатов на случай сильной связи каналов приводится в работе [70], где также получено решение дискретного аналога многоканального уравнения ЛШ.

В настоящее время возможности J -матричного подхода в описании непрерывного спектра широко используются при исследовании временного уравнения Шредингера, которым описывается взаимодействие электромагнитного импульсного (лазерного) поля с атомной структурой. Так, например, комбинация спектрального метода (spectral method) [71] и метода J -матрицы была применена к расчету сечений многофотонной однократной и двукратной ионизации He и H^- [72].

Несмотря на достигнутые огромные успехи в дискретизации и последующем численном решении трехчастичных дифференциальных и интегральных уравнений теории кулоновского рассеяния, целый ряд математических проблем, связанных с этим, остается открытым. Особенно это стало ясно, когда метод J -матрицы и его вариации стали применяться для расчетов волновых функций с тремя асимптотически свободными заряженными частицами. Тут сказывается невозможность как-то разумно разложить по угловым шаровым функциям правильную асимптотику такой задачи и получить при этом простые выражения для радиальных частей, проекция которых на базисные радиальные функции выражается известными специальными аналитическими функциями (см., например, обзорную работу [73]). Любые другие представления свободного оператора H_0 неэффективны в традиционном J -матричном подходе со сферическим угловым базисом, так как приводят к расходимостям интегрального члена уравнения ЛШ. Когда такое уравнение дискретизируется в бесконечное матричное уравнение, его обрезание по числу базисных функций ведет, по сути, к обрезанию кулоновских потенциалов. При этом сходимость решения такого уравнения к ожидаемому точному и их соотношение является до сих пор открытым вопросом. Использование псевдосостояний с положительной энергией для описания асимптотики хотя бы одной из конечных заряженных частиц еще более запутывает вопрос математической

корректности такого подхода. Освещению этих вопросов и посвящена предлагаемая работа.

Работа организована следующим образом. В разд. 1 излагается математический аппарат метода псевдосостояний в применении к дифференциальному уравнению Шредингера (УШ), при этом в качестве примера рассматривается реакция однократной и двукратной ионизации атома гелия быстрым электроном, который в данном контексте описывается плоской волной. В разд. 2 на примере тех же реакций рассматривается один из способов дискретизации интегрального уравнения ЛШ, свободный от использования псевдосостояний. В п. 2.2 рассматриваются матричные уравнения для амплитуд переходов с использованием псевдосостояний (так называемая ССС-схема) и ставится вопрос о соответствии этой схемы точной теории многочастичных интегральных уравнений с кулоновскими потенциалами. Все трудности и проблемы PSE-метода подробно обсуждаются в п. 2.5. Математический аппарат альтернативного подхода, сохраняющего преимущества J -матрицы и обеспечивающего совпадение асимптотик собственных функций операторов H и H_0 в случае двух асимптотически свободных электронов, а именно, представление УШ в параболических координатах, рассмотрен в разд. 3.

Там, где не оговорено особо, при записи формул используются атомные единицы $e = m_e = \hbar = 1$.

1. МАТРИЧНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ: ПСЕВДОСОСТОЯНИЯ

Как отмечалось во введении, метод псевдосостояний — это разновидность более общего метода сильной связи каналов. Он позволяет эффективно учесть влияние закрытых каналов развала в случае упругого (неупругого) рассеяния частицы связанной парой. Для энергий выше трехчастичного порога развала метод псевдосостояний теряет свою эффективность. В частности, возникают ложные резонансы при энергиях, близких к энергиям псевдосостояний пары, хотя с этим явлением борются путем увеличения базиса [60]. Кроме того, этот метод никак не согласуется с корректной структурой кулоновских сингулярностей S -матрицы в случае рассеяния заряженных частиц [74]. Мы, однако, решили представить здесь этот метод более подробно, поскольку он активно используется в последнее время для описания состояний с двумя асимптотически свободными электронами [75–77], т. е. выше порога трехчастичного развала.

1.1. Математический формализм для вычисления спектральной функции с одним асимптотически свободным электроном в поле иона. Рассмотрим лабораторную систему координат, предполагая, что ядро атома является бесконечно тяжелым $m_3 \rightarrow \infty$ и оно помещено в центр системы

($\mathbf{r}_3 = 0$). Запишем УШ для волновой функции некоторого состояния атома гелия ($Z = 2$)

$$\left[E + \frac{1}{2}\Delta_1 + \frac{1}{2}\Delta_2 + \frac{Z}{r_1} + \frac{Z}{r_2} - \frac{1}{r_{12}} \right] \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0. \quad (1.1)$$

Рассмотрим вначале процесс однократной ионизации, где состояние иона-остатка характеризуется квантовыми числами $n_0l_0m_0$. В методе псевдосостояний предполагается, что один из электронов находится в водородоподобном состоянии, характеризуемом неким зарядом, а также квантовыми числами $n'l'm'$. Количество таких состояний полагается конечным. Второй же электрон имеет «истинную» кулоновскую асимптотику в поле иона с зарядом $Z - 1$. Заметим, что по традиции индекс n здесь и далее обозначает не главное, а радиальное квантовое число, т.е. $n \geq 0$. Главное квантовое число, которое определяет энергию связи состояния, будем обозначать буквой $q = n + l$.

Волновые функции псевдосостояний имеют вид

$$\zeta_{nlm}(\mathbf{r}) = \frac{1}{r} \chi_{nl}(r) Y_{lm}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (1.2)$$

подчиняются стандартным условиям ортогональности и нормировки

$$\langle \zeta_{nlm} | \zeta_{n'l'm'} \rangle = \langle \chi_{nl} | \chi_{n'l} \rangle \langle Y_{lm} | Y_{l'm'} \rangle = \langle \chi_{nl} | \chi_{n'l} \rangle \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

$$\langle \chi_{nl} | \chi_{n'l} \rangle = \int_0^\infty dr \chi_{nl}(r) \chi_{n'l}(r) = \delta_{nn'},$$

диагонализуют гамильтониан $\hat{h}_2 = -1/2\Delta_2 - Z/r_2$

$$\langle \zeta_{nlm} | \hat{h}_2 | \zeta_{n'l'm'} \rangle = \varepsilon_{nl} \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'},$$

и их радиальные части ищутся в виде разложения по квадратично-интегрируемым базисным лагерровским функциям

$$\chi_{nl}(r) = \sum_{n'=0}^N d_{nn'}^l \phi_{n'}^l(r). \quad (1.3)$$

В принципе, верхняя граница суммирования в (1.3) может зависеть от орбитального индекса l , но для простоты мы полагаем $N = \max(N_l)$ для всех используемых в базисе орбитальных моментов. Далее ξ_l обозначает варьируемый парциальный параметр базиса. Этот параметр не должен влиять на результаты расчетов, но его оптимальный выбор может существенно влиять на скорость сходимости расчетов.

Радиальные базисные функции записываются в виде

$$\phi_n^l(r) = \sqrt{\frac{n!}{(n+2l+1)!}} (2\xi_l r)^{l+1} e^{-\xi_l r} L_n^{2l+1}(2\xi_l r), \quad n \geq 0, \quad (1.4)$$

где $L_n^\alpha(x)$ — ассоциированные полиномы Лагерра. Эти функции ортонормированы с весом

$$\int_0^\infty \frac{dr}{r} \phi_n^l(r) \phi_{n'}^l(r) = \delta_{nn'}$$

и являются решениями дифференциального уравнения

$$\left(\frac{1}{2} \frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{l(l+1)}{2r^2} + \frac{\xi_l(n+l+1)}{r} - \frac{\xi_l^2}{2} \right) \phi_n^l(r) = 0.$$

Естественно, радиальная составляющая волновой функции иона-остатка $\phi_{n_0}^{l_0}(r)$ тоже входит в состав базиса ($\xi_{l_0} = Z/(n_0 + l_0 + 1)$).

Для численного расчета волновой функции системы целесообразно выделить полный орбитальный момент L двух электронов и его проекцию M и записать волновую функцию в виде разложения

$$\begin{aligned} \Psi_{n_0 l_0 m}^{(-)}(\mathbf{k}_e; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) &= \\ &= \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k_e} \frac{(1 + g\hat{P}_{12})}{\sqrt{2}} \sum_{L \lambda \mu} (l_0 m \lambda \mu | L M) Y_{\lambda \mu}^*(\hat{k}_e) \psi_{l_0 \lambda}^{L M}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \end{aligned} \quad (1.5)$$

а частичную функцию $\psi_{l_0 \lambda}^{L M}$ в (1.5) можно дальше разложить в ряд

$$\psi_{l_0 \lambda}^{L M}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\nu', \lambda', n', \nu'} A_{(n'l')(\nu'\lambda')}^{L(l_0\lambda)}(E) |n' l' \nu' \lambda'; LM\rangle \quad (1.6)$$

по канальным базисным функциям, которые в координатном представлении принимают вид ($n \leq N$)

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | n l \nu \lambda; LM \rangle = \frac{\mathcal{Y}_{l\lambda}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2)}{r_1 r_2} \begin{cases} \chi_{n\nu}(r_2) \chi_{\nu\lambda}(r_1), & \nu \leq N; \\ \chi_{n\nu}(r_2) \phi_\nu^\lambda(\xi_\lambda r_1), & \nu > N. \end{cases} \quad (1.7)$$

Бисферическая функция записывается стандартным образом:

$$\mathcal{Y}_{l\lambda}^{LM}(\hat{r}_1, \hat{r}_2) = \sum_{m\mu} (l m \lambda \mu | L M) Y_{lm}(\hat{r}_1) Y_{\lambda\mu}(\hat{r}_2).$$

В формуле (1.5) P_{12} — оператор перестановки координат электронов, g равно $(+1)$ для синглетного состояния и (-1) для триплетного состояния гелия. Далее мы рассматриваем синглетное состояние.

Из (1.5) и (1.6) следует, что числа $A_{(n'l')(\nu'\lambda')}^{L(l_0\lambda)}(E)$ являются коэффициентами фурье-разложения трехчастичной волновой функции по полному дискретному базису. Умножая уравнение (1.1) слева на базисную функцию, нетрудно убедиться, что эти коэффициенты удовлетворяют бесконечной системе алгебраических уравнений

$$\sum_{n''l''\nu''\lambda''} \langle n'l'\nu'\lambda'; LM | \hat{H} - E | n''l''\nu''\lambda''; LM \rangle A_{(n''l'')(\nu''\lambda'')}^{L(l_0\lambda)}(E) = 0, \quad (1.8)$$

где \hat{H} — полный гамильтониан, соответствующий уравнению (1.1). Эту систему, естественно, в таком виде решать невозможно, она решается приближенно. Приближение заключается в пренебрежении матричными элементами остаточного взаимодействия $V = (1/r_1 - 1/r_{12})$ при $\nu' > N$ и (или) $\nu'' > N$. В результате система уравнений (1.8) разбивается на две части — внутреннюю ($\nu'' \leq N$) и внешнюю ($\nu'' > N$). Бесконечная система для внешней области решается аналитически точно в рамках метода J -матрицы [24], и ее решением являются, по сути, точные кулоновские функции электрона ($Z = 1$) в выбранном дискретном представлении, умноженные на волновые функции псевдосостояний иона-остатка, куда входит и состояние с квантовыми числами (n_0l_0m) . Некоторые подробности вычисления матричных элементов можно найти в приложении. Все пары состояний удовлетворяют закону сохранения энергии $E = k_e'^2/2 + \varepsilon_{n'l'}$, где $k_e'^2$ — импульс свободного электрона и $\varepsilon_{n'l'}$ — энергия псевдосостояния конечного иона He^+ . Во внутренней области система решается диагонализацией квадратной матрицы $N \otimes N$. Наконец, сшивка внутренней и внешней (асимптотической) областей позволяет получить искомые коэффициенты разложения функции $\psi_{l_0\lambda}^{LM}$.

Та же процедура, но в гораздо более простом ее варианте, используется для поиска основного состояния атома гелия $\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, поскольку $L = M = 0$ (синглетное состояние), и суммирование в (1.8) ограничивается пределами $n'', \nu'' \leq N$, причем $n', \nu' \leq N$. Тут проводится простая диагонализация квадратной матрицы.

Имея эти две функции в виде разложения по базису, нетрудно построить в первом борновском приближении матричный элемент реакции $\text{He} + e \rightarrow e + (\text{He}^+ + e)$ с одним быстрым электроном в начальном и конечном состояниях реакции (который описывается плоской волной):

$$T_{n_0l_0m}^{(e,2e)}(\mathbf{k}_e, \mathbf{Q}) = \frac{4\pi}{Q^2} \langle \Psi_{n_0l_0m}^{(-)}(\mathbf{k}_e) | e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}_2} - 2 | \Phi_0 \rangle, \quad (1.9)$$

пригодный для численных расчетов на ограниченном числе угловых и радиальных базисных функций.

1.2. Два асимптотически свободных электрона. Попробуем эту схему распространить на случай двух асимптотически свободных электронов в поле ядра. Из предыдущего материала видно, что если волновая функция одного электрона выходит на кулоновскую асимптотику, то второй электрон пребывает в конечном числе псевдосостояний, в том числе и с положительными энергиями, лишь бы выполнялось условие $E = k_e'^2/2 + \varepsilon_{nl}$. Возникает простое предложение описывать матричный элемент $(e, 3e)$ -реакции формулой

$$T^{(e,3e)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{Q}) = \sum_{\mu} \langle \varphi^-(\mathbf{k}_2, Z) | \zeta_{\mu} \rangle T_{\mu}^{(e,2e)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{Q}). \quad (1.10)$$

Тут используется модель недемократичного распада, основное приближение которой заключается в наличии промежуточного псевдосостояния иона He^+ с энергией, равной энергии одного из выбитых в реакции $(e, 3e)$ электронов, т. е. $k_2^2/2 = \varepsilon_{\mu}$, и суммирование ведется по всем таким вырожденным состояниям. В (1.10) $\varphi^-(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}; Z)$ — парная кулоновская волновая функция непрерывного спектра:

$$\varphi^{(-)}(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}; Z) = e^{-\pi t/2} \Gamma(1 - it) e^{i\mathbf{k}_2 \mathbf{r}} F(it, 1, -i(k_2 r + \mathbf{k}_2 \mathbf{r})), \quad t = -\frac{Z}{k_2}. \quad (1.11)$$

Метод сильной связи каналов в применении к кулоновским $(e, 3e)$ -реакциям имеет один существенный дефект: учет конечного числа псевдосостояний не удается удовлетворительно описать эффект сильного отталкивания испущенных из мишени электронов при уменьшении угла между ними и близости их энергий. Для учета электрон-электронного отталкивания волновая функция конечного состояния может быть умножена на так называемый гамов-фактор

$$g(|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|) = \exp\left(-\frac{\pi}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}\right) \Gamma\left(1 - \frac{i}{|\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}_2|}\right).$$

Гамов-фактор является частью приближенной трехчастичной функции конечного состояния, имеющей правильную трехчастичную асимптотику (см., например, [78]). Следствием такого умножения, однако, является потеря свойства ортогональности функций, что приводит к сильному уменьшению дифференциального сечения $(e, 3e)$ -реакции $\sigma^{(5)}$ по абсолютной величине. Для восстановления правильной абсолютной величины результат можно нормировать следующим образом:

$$\sigma_{\text{eff}}^{(5)} = \frac{\sigma^{(5)} |g|^2}{\int_0^{\pi} \sigma^{(5)} |g|^2 d\theta_2} \int_0^{\pi} \sigma^{(5)} d\theta_2.$$

2. МАТРИЧНЫЕ ИНТЕГРАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА–МЕРКУРЬЕВА

В данном разделе рассматривается вариант описания кулоновской системы трех тел в рамках J -матричной теории рассеяния. В предлагаемой схеме удастся учесть и сумму по связанным состояниям, и интеграл по непрерывному спектру выделенной парной подсистемы. Идея изучения состояний непрерывного спектра трех ядерных частиц с короткодействием методом J -матрицы с использованием осцилляторных базисных функций была впервые сформулирована в [79, 80]. Позднее этот подход был распространен на случай дальнодействующих кулоновских потенциалов [81–83].

Метод основан на дифференциальных уравнениях Фаддеева–Меркурьева для компонент Ψ_α полной волновой функции $\Psi = \sum_\alpha \Psi_\alpha$. Каждая компонента Ψ_α представляется в виде разложения по собственным функциям двухчастичной подсистемы $(\beta\gamma)$ с зарядом Z_α . Такой выбор позволяет выделить дальнодействующую часть взаимодействия и, следовательно, корректно описать асимптотическое поведение функции Ψ только в двухчастичной области Ω_α , где взаимное расстояние x_α между частицами β и γ много меньше, чем расстояние y_α между их центром масс и частицей α . В свою очередь, собственные функции раскладываются по стандартному бисферическому базису угловых переменных и лаггерровскому базису радиальных переменных. На этом пути мы приходим к дискретному аналогу уравнения ЛШ для компоненты Ψ_α в области Ω_α . В этом заключается общая схема данного подхода.

Метод близок к схеме, предложенной и развитой З. Паппом и др. (см., например, [52, 53]).

2.1. Интегральное уравнение для волновой функции двух асимптотически свободных электронов в поле ядра. Здесь представлен вариант теории, изложенный ранее в [84] для случая атома гелия. Более общий случай частиц с разными массами и зарядами рассмотрен в [81–83, 87]. Вернемся снова к уравнению (1.1). Следуя Меркурьеву [3], разобьем кулоновские потенциалы на короткодействующую и дальнодействующую части:

$$\frac{Z}{r_i} = V_i^{(s)}(r_1, r_2) + V_i^{(l)}(r_1, r_2),$$

где

$$V_i^{(s)}(r_1, r_2) = \frac{Z}{r_i} \zeta(r_i, r_j), \quad V_i^{(l)}(r_1, r_2) = \frac{Z}{r_i} [1 - \zeta(r_i, r_j)]$$

и

$$\zeta(r_i, r_j) = \frac{2}{1 + \exp[(r_i/a)^\kappa / (1 + r_j/b)]}. \quad (2.1)$$

Функция разделения ζ содержит три подгоночных параметра a , b и $\kappa > 2$. Роль этой функции заключается в определении границы между областью «истинно» трехчастичного рассеяния Ω_0 , где асимптотически $r_1 \sim r_2$, и областями двухчастичного рассеяния Ω_1 ($r_1 \gg r_2$) или Ω_2 ($r_2 \gg r_1$).

Введем две функции $\Psi_i^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ ($i = 1, 2$), такие, что

$$\Psi^{(-)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\Psi_1^{(-)} + \Psi_2^{(-)} \right].$$

Принимая во внимание симметрию двухэлектронной волновой функции $\Psi_i^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g\Psi_i^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1)$, где $g = +1$ (-1) для синглетного (триплетного) состояния, потребуем

$$\Psi_2^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = g\hat{P}_{12}\Psi_1^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$$

(\hat{P}_{12} — оператор перестановки координат) и определим эти новые функции посредством фаддеевской редукции

$$\left[E + \frac{1}{2}\Delta_1 + \frac{1}{2}\Delta_2 + V_1^{(l)} + V_2^{(l)} - \frac{1}{r_{12}} \right] \Psi_1^{(-)} = -\sqrt{2}V_2^{(s)}\Psi^{(-)},$$

$$\left[E + \frac{1}{2}\Delta_1 + \frac{1}{2}\Delta_2 + V_1^{(l)} + V_2^{(l)} - \frac{1}{r_{12}} \right] \Psi_2^{(-)} = -\sqrt{2}V_1^{(s)}\Psi^{(-)},$$

или

$$\left[E + \frac{1}{2}\Delta_1 + \frac{1}{2}\Delta_2 + V_1^{(l)} + V_2^{(l)} - \frac{1}{r_{12}} \right] \Psi_1^{(-)} = -V_2^{(s)}(1 + g\hat{P}_{12})\Psi_1^{(-)}, \quad (2.2)$$

поскольку $\Psi^{(-)} = 1/\sqrt{2} [1 + g\hat{P}_{12}] \Psi_1^{(-)}$. Таким образом, мы получаем уравнение для компоненты $\Psi_1^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$, которое полностью эквивалентно уравнению (1.1).

Перепишем теперь уравнение (2.2) следующим образом:

$$\left[E + \frac{1}{2}\Delta_1 + \frac{1}{2}\Delta_2 + \frac{Z-1}{r_1} + \frac{Z}{r_2} \right] \Psi_1^{(-)} = V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)\Psi_1^{(-)} \quad (2.3)$$

с потенциалом

$$V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \frac{1}{r_{12}} - V_1^{(l)}(r_1, r_2) + \frac{Z-1}{r_1} - gV_2^{(s)}(r_1, r_2)\hat{P}_{12}. \quad (2.4)$$

Легко убедиться, что этот потенциал короткодействующий в асимптотической области пространства Ω_1 , где $r_1 \gg r_2$.

Уравнение (2.3) является отправным для последующих численных расчетов. Заметим, что оператор в левой части (2.3) действует в двух независимых подпространствах $\{\mathbf{r}_1\}$ и $\{\mathbf{r}_2\}$. Его частное решение есть произведение $\varphi^-(\mathbf{k}_i, \mathbf{r}_2; Z) \varphi^-(\mathbf{k}_j, \mathbf{r}_1; Z - 1)$ двух кулоновских волн. Физически это означает, что электрон 2 «видит» заряд ядра Z , тогда как электрон 1 «видит» экранированный электроном 2 заряд $Z - 1$, т.е. один электрон находится гораздо ближе к ядру, чем другой, что и соответствует определению двухчастичной области Ω_1 .

Перейдем к интегральной форме уравнения (2.3)

$$\begin{aligned} \Psi_1^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & [\varphi^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_2; Z) \varphi^-(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_1; Z - 1) \theta(k_2 - k_1) + \\ & + \varphi^-(\mathbf{k}_2, \mathbf{r}_2; Z) \varphi^-(\mathbf{k}_1, \mathbf{r}_1; Z - 1) \theta(k_1 - k_2)] + \\ & + \int \int d\mathbf{r}'_1 d\mathbf{r}'_2 G^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; E) V(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) \Psi_1^{(-)}(\mathbf{k}_0, \mathbf{p}_0; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2), \end{aligned} \quad (2.5)$$

где $\theta(x)$ — ступенчатая функция ($\theta(0) = 1/2$). Такой выбор свободного члена обусловлен тем, что, во-первых, мы не знаем, какой из кулоновских функций с различными зарядами принадлежит тот или иной импульс, а во-вторых, интуитивно ясно, что частица с большим импульсом улетает дальше от системы «медленный электрон + ядро» и «видит» экранированный заряд. В свою очередь, функция Грина двух независимых подсистем в (2.5) может быть представлена контурным интегралом

$$G^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2; E) = \frac{1}{2\pi i} \int_C d\mathcal{E} g^{(-)}(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}'_2; \mathcal{E}; Z) g^{(-)}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1; E - \mathcal{E}; Z - 1),$$

определенным образом обходящим сингулярности обеих подынтегральных функций.

Волновую функцию $\Psi_1^{(-)}$ можно представить в виде частичного разложения по бисферическому базису

$$\begin{aligned} \Psi_1^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = & \frac{2}{\pi} \frac{1}{k_1 k_2} \sum_{\substack{L l_0 \lambda_0 \\ m_0 \mu_0}} (l_0 m_0 \lambda_0 \mu_0 | L M) \times \\ & \times \left[\psi_{l_0 \lambda_0}^{L M}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; k_1, k_2) Y_{l_0 m_0}^*(\hat{\mathbf{k}}_1) Y_{\lambda_0 \mu_0}^*(\hat{\mathbf{k}}_2) \theta(k_1 - k_2) + \right. \\ & \left. + g \psi_{l_0 \lambda_0}^{L M}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; k_2, k_1) Y_{l_0 m_0}^*(\hat{\mathbf{k}}_2) Y_{\lambda_0 \mu_0}^*(\hat{\mathbf{k}}_1) \theta(k_2 - k_1) \right], \end{aligned} \quad (2.6)$$

а частичную функцию $\psi_{l_0 \lambda_0}^{L M}$ в (2.6) можно дальше разложить в ряд (для удобства обозначения опускаем индексы $(l_0 \lambda_0)$ в записи коэффициентов разложения C)

$$\psi_{l_0 \lambda_0}^{L M}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; k_i, k_j) = \sum_{l, \lambda, n, \nu} C_{n \nu}^{L(l \lambda)}(k_i, k_j) |n l \nu \lambda; L M\rangle$$

по базису

$$\langle \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 | n l \nu \lambda; LM \rangle = \frac{\phi_n^l(r_2)}{r_2} \frac{\phi_\nu^\lambda(r_1)}{r_1} \mathcal{Y}_{l\lambda}^{LM}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2), \quad (2.7)$$

который несколько отличается от базиса (1.7).

Наконец, парциальную кулоновскую спектральную функцию можно разложить в ряд по лаггеровскому базису $\varphi_l^\alpha(r; Z) = \sum_n \mathcal{S}_{nl}^\alpha(Z) \phi_n^l(r)$, и индекс α пробегает весь спектр. Фурье-образы $\mathcal{S}_{nl}^\alpha(Z)$ также образуют полную ортогональную систему функций относительно индекса α , который может быть как дискретным, так и непрерывным. В последнем случае под суммированием по этому индексу подразумевается интегрирование. Аналитические выражения для этих функций приведены в приложении.

Собирая все вместе, получаем из (2.5) систему уравнений для коэффициентов $C_{n\nu}^{L(l\lambda)}(k_1, k_2)$:

$$\begin{aligned} C_{n\nu}^{L(l\lambda)}(k_1, k_2) &= \\ &= i^{l_0+\lambda_0} \delta_{(l\lambda)(l_0\lambda_0)} e^{-i(\sigma_{l_0}(k_1, Z-1) + \sigma_{\lambda_0}(k_2, Z))} \mathcal{S}_{nl_0}(k_1, Z-1) \mathcal{S}_{\nu\lambda_0}(k_2, Z) + \\ &+ \sum_{n' \nu', n'' \nu''=0} \left[\frac{1}{2\pi i} \int_c d\mathcal{E} g_{n n'}^{(-)l}(\mathcal{E}, Z-1) g_{\nu \nu'}^{(-)\lambda}(E-\mathcal{E}, Z) \right] \times \\ &\times \sum_{l'' \lambda''} V_{n' \nu', n'' \nu''}^{L(l\lambda)(l'' \lambda'')} C_{n'' \nu''}^{L(l'' \lambda'')}(k_1, k_2). \quad (2.8) \end{aligned}$$

В уравнении (2.8) выражение

$$V_{n\nu, n' \nu'}^{L(l\lambda)(l' \lambda')} = \langle n l \nu \lambda; LM | V(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | n' l' \nu' \lambda'; LM \rangle$$

обозначает матричный элемент потенциала (2.4) в базисе (2.7), а функции $g_{n n'}^{(-)l}(\mathcal{E}, Z-1)$ и $g_{\nu \nu'}^{(-)\lambda}(E-\mathcal{E}, Z)$ под интегралом — это матричные элементы парциальных двухчастичных функций Грина в лаггеровском базисе.

Система уравнений (2.8) бесконечна, и работать с ней нельзя. Ее надо обрезать, ограничив суммирование по всем радиальным индексам n', n'', ν', ν'' некоей величиной $(N-1)$. Тем самым предполагается, что матричный элемент потенциала (2.4) равен нулю (очень мал), когда любой радиальный индекс превышает номер N , и электроны выходят на асимптотический режим движения. Это утверждение весьма сильное, и последствия такого предположения мы обсудим позже.

Парциальная кулоновская функция Грина может быть стандартно представлена в виде разложения по кулоновским спектральным функциям

$$g^{(\pm)l}(r, r'; E; Z) = \sum_\alpha \frac{\varphi_l^{\alpha*}(r; Z) \varphi_l^\alpha(r'; Z)}{E - \varepsilon_\alpha \pm i0}. \quad (2.9)$$

Принимая во внимание разложение кулоновских функций в ряд Фурье по функциям Лагерра $\mathcal{S}_{nl}^\alpha(Z)$, получаем для выражения в квадратных скобках в (2.8)

$$\int_C \frac{d\mathcal{E}}{2\pi i} g_{nn'}^{(-)l}(\mathcal{E}, Z-1) g_{\nu\nu'}^{(-)\lambda}(E-\mathcal{E}, Z) = \sum_\alpha \mathcal{S}_{nl}^{\alpha*}(Z-1) \mathcal{S}_{n'l}^\alpha(Z-1) g_{\nu\nu'}^{(-)\lambda}(E-\varepsilon_\alpha, Z). \quad (2.10)$$

В этом месте мы могли бы применить разложение (2.9) снова и получить двойное суммирование-интегрирование выражения (2.10), но это неудобно с точки зрения численных расчетов. Полезно вспомнить следующее представление матричного элемента $g_{\nu\nu'}^{(\pm)\lambda}(E)$ [68]:

$$\mathcal{G}_{\nu\nu'}^{(\pm)\lambda}(p; Z) = -\frac{2}{p} \mathcal{S}_{\nu<}^\lambda(p, Z) \mathcal{C}_{\nu>}^{(\pm)\lambda}(p, Z), \quad (2.11)$$

$$\nu_{<} = \min\{\nu, \nu'\}, \quad \nu_{>} = \max\{\nu, \nu'\},$$

где $p = \sqrt{2E}$. Аналитическое выражение для функции Поллачека $\mathcal{C}_{nl}^{(\pm)}(p, Z)$ приведено в приложении. Функция $\mathcal{C}_{nl}^{(+)}(p, Z)$ [$\mathcal{C}_{nl}^{(-)}(p, Z)$] определена в области $\text{Im}(p) > 0$ [$\text{Im}(p) < 0$] комплексной плоскости p , и аналитическое продолжение имеет вид [85]

$$\mathcal{C}_{nl}^{(+)}(p, Z) = \mathcal{C}_{nl}^{(-)}(p, Z) + 2i\mathcal{S}_{nl}(p, Z). \quad (2.12)$$

Интеграл (2.10) достаточно быстро (с численной точки зрения) считается ниже порога развала иона He^+ , т.е. при $E < 0$. С деталями можно ознакомиться в [81, 83]. Для реакций двукратной ионизации атома гелия, когда $E > 0$, расчет интеграла (2.10) можно провести, вращая контур интегрирования, следуя Шейкшафту [86] (рис. 1). Эта техника более подробно описана в [82, 83]. Также много полезных деталей для численного счета представлено в диссертации [87]. Приведем здесь лишь конечный результат. Для удобства сделаем замену $g_{\nu\nu'}^{(\pm)\lambda}(E; Z) = \mathcal{G}_{\nu\nu'}^{\lambda(\pm)}(p; Z)$ и перепишем матричный элемент трехчастичной функции Грина следующим образом:

$$G_{nn'; \nu\nu'}^{l\lambda(-)}(E) = \frac{1}{4\pi i} \int_C d\mathcal{E} \mathcal{G}_{nn'}^{l(-)}(\sqrt{\mathcal{E}_0 + \mathcal{E}}; Z-1) \mathcal{G}_{\nu\nu'}^{\lambda(-)}(\sqrt{\mathcal{E}_0 - \mathcal{E}}; Z), \quad (2.13)$$

где $\mathcal{E}_0 = E$. Теперь поворачиваем контур \mathcal{C} на угол φ против часовой стрелки, и новый контур $\mathcal{C}' = \mathcal{E}_0 e^{i\varphi} t$ пересекает разрезы обеих функций Грина. Используя аналитическое продолжение (2.12) при интегрировании вдоль неффи-

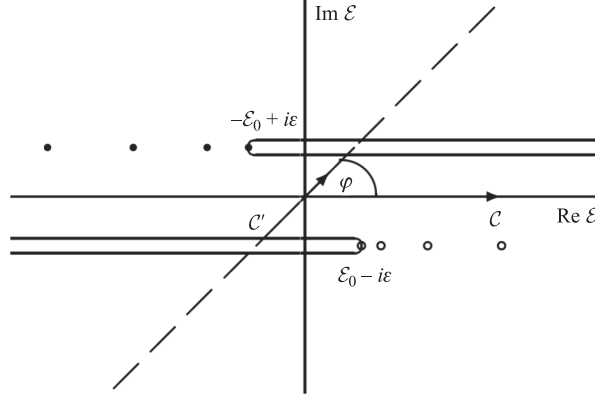


Рис. 1. Контур интегрирования в интеграле-свертке (2.10). Полюсы, отвечающие дискретному спектру гамильтониана h_1 , отмечены темными кружками. $-\mathcal{E}_0 + i\epsilon$ означает начало соответствующего унитарного разреза. Светлыми кружками и $\mathcal{E}_0 - i\epsilon$ отмечены аналогичные величины для гамильтониана h_2

зических листов, приходим к выражению

$$\begin{aligned}
 G_{n n'; \nu \nu'}^{l \lambda (-)}(E) &= \\
 &= \frac{\mathcal{E}_0 e^{i\varphi}}{4\pi i} \left\{ \int_{-\infty}^0 dt \mathcal{G}_{n n'}^{l (-)}(k; Z-1) \left[\mathcal{G}_{\nu \nu'}^{\lambda (+)}(p; Z) + \frac{4i}{p} \mathcal{S}_{\nu \lambda}(p; Z) \mathcal{S}_{\nu' \lambda}(p; Z) \right] + \right. \\
 &\quad \left. + \int_0^{\infty} dt \left[\mathcal{G}_{n, n'}^{l (+)}(k; Z-1) + \frac{4i}{k} \mathcal{S}_{n l}(k; Z-1) \mathcal{S}_{n' l}(k; Z-1) \right] \mathcal{G}_{\nu \nu'}^{\lambda (-)}(p; Z) \right\}. \tag{2.14}
 \end{aligned}$$

В (2.14) $k = \sqrt{\mathcal{E}_0(1 + t e^{i\varphi})}$ и $p = \sqrt{\mathcal{E}_0(1 - t e^{i\varphi})}$, т.е. $k^2 + p^2 = 2E$. Этот одномерный интеграл вычисляется численно.

В заключение этого пункта следует сказать несколько слов о расчетах $(e, 2e)$ -реакций, когда под действием быстрого электрона атом гелия (или другая квантовая система) испускает электрон, а ион остается в основном (возбужденном) состоянии. В этом случае формула (2.6) заменяется на

$$\Psi_{n_0 l_0 m}^{(-)} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{k_e} \frac{(1 + g\hat{P}_{12})}{\sqrt{2}} \sum_{L \lambda_0 \mu_0} (l_0 m \lambda_0 \mu_0 | L M) Y_{\lambda_0 \mu_0}^*(\hat{k}_e) \psi_{l_0 \lambda_0}^{L M} \tag{2.15}$$

и в уравнении (2.8) величина $i^{\lambda_0} e^{-i\sigma_{\lambda_0}(k_2, Z)} \mathcal{S}_{\nu \lambda_0}(k_2, Z)$ в свободном члене заменяется на $\mathcal{S}_{\nu \lambda_0}^{(j)}(Z)$ (П.4). В остальном исходная схема для численных расчетов существенно не изменяется.

2.2. Матричные интегральные уравнения и псевдосостояния. В последнее время в практику численных расчетов в атомной физике широко вошла разновидность метода сильной связи каналов, а именно так называемый сходящийся метод сильной связи (convergent close-coupling — ССС) [60, 88–90], который также основан на интегральном уравнении, но при этом эксплуатирует псевдосостояния. Оригинальная версия этого метода применялась для расчетов трехчастичной кулоновской волновой функции системы $\text{He}^+ + e$ (в англоязычной литературе по атомной физике такая функция носит название single electron continuum wave function). Детали техники расчетов приводятся в [91], и мы не будем их здесь подробно излагать. Остановимся лишь на одном принципиальном моменте.

Из теории многочастичного интегрального уравнения ЛШ для кулоновских потенциалов следует [92], что физическая амплитуда не есть решение этого уравнения, а связана с ним посредством определенного коэффициента, сингулярность в котором возникает при выполнении закона дисперсии, когда энергия и импульсы связаны между собой. Из схемы ССС не ясно, есть ли вообще какая-то связь между точным и приближенным (матричным) интегральными уравнениями. Этот вопрос затрагивается в [74] (см. также для полноты ответ авторов [93]) и связан с компактностью ядра интегрального уравнения [3].

Напомним в силу важности проблемы кратко содержание работы [74] (общий взгляд на проблему дан также в обзоре [92]). Там рассматривается ионизация атома водорода налетающим электроном ($Z = 1$). Уравнение ЛШ для несимметризованной амплитуды (а именно уравнения для амплитуд используются в оригинальной версии ССС-схемы) принимает вид

$$T_0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_e; \mathbf{k}_0) \equiv \langle \langle \mathbf{k}_1, \varphi^-(\mathbf{k}_e; Z) | T | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle \rangle = \langle \mathbf{k}_1, \varphi^-(\mathbf{k}_e; Z) | V_2 | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle + \sum_{\alpha} \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{k}_1, \varphi^-(\mathbf{k}_e; Z) | V_2 | \varphi_{\alpha}(Z), \mathbf{k}' \rangle \langle \mathbf{k}', \varphi_{\alpha}(Z) | T | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle}{E - \varepsilon_{\alpha} - k'^2/2}, \quad (2.16)$$

где $V_2 = (r_{12}^{-1} - r_1^{-1})$ и $\varphi_{\alpha}(Z)$ — спектральные кулоновские функции двухчастичного гамильтониана $\hat{h}_2(Z)$ с собственными энергиями ε_{α} . Из [92] следует, что интегральный член не расходится, если $E \neq k_1^2/2 + k_e^2/2$, и при $\lambda = E - k_1^2/2 - k_e^2/2 \rightarrow +i0$ амплитуда (2.16) имеет следующую структуру:

$$T_0(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_e; \mathbf{k}_0) \approx \lambda^{i\eta} M(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_e; \mathbf{k}_0) + O(\lambda^{1+i\eta}), \quad \eta = -\frac{1}{k_1} + \frac{1}{|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_e|}.$$

В свою очередь, физическая амплитуда $t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_e; \mathbf{k}_0)$ ($e, 2e$ -процесса) связана с гладкой функцией M соотношением

$$t(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_e; \mathbf{k}_0) = \frac{e^{-(\pi/2)\eta + iA}}{\Gamma(1 - i\eta)} M(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_e; \mathbf{k}_0), \quad (2.17)$$

где A — фаза Долларда:

$$A = -\frac{1}{k_1} \ln(2k_1^2) + \frac{1}{|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_e|} \ln|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_e|^2.$$

Авторы ССС-схемы заменяют уравнение (2.16) другим (см. (1.2)):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1, \zeta_{\{q_N\}}(Z) | T | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle &= \langle \mathbf{k}_1, \zeta_{\{q_N\}}(Z) | V_2 | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle + \\ &+ \sum_{\gamma=0}^N \int \frac{d\mathbf{k}'}{(2\pi)^3} \frac{\langle \mathbf{k}_1, \zeta_{\{q_N\}}(Z) | V_2 | \zeta_{\{q_\gamma\}}(Z), \mathbf{k}' \rangle}{E - \bar{\epsilon}_\gamma - k'^2/2 + i0} \langle \mathbf{k}', \zeta_{\{q_\gamma\}}(Z) | T | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.18)$$

По договоренности $\zeta_{\{q_0\}}(Z) \equiv \varphi_0$. Окончательно

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}_1, \varphi^-(\mathbf{k}_e; Z) | T | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle &\approx \\ &\approx \sum_{\gamma=0}^N \langle \varphi^-(\mathbf{k}_e; Z) | \zeta_{\{q_\gamma\}}(Z) \rangle \langle \mathbf{k}_1, \zeta_{\{q_\gamma\}}(Z) | T | \varphi_0, \mathbf{k}_0 \rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

В каком соотношении находятся амплитуды (2.17) и (2.19) — не ясно. Видимо, можно говорить о каком-то их совпадении (в пределах несущественного фазового фактора) при $k_1 \gg k_e$ ($\eta \rightarrow 0$), и то с определенной математической натяжкой, что, впрочем, достаточно характерно для физики. Этот вопрос в полной мере до сих пор не исследован, хотя ССС-схема широко применяется (и в большинстве случаев довольно успешно) в практике сравнения теории с экспериментом.

2.3. Однократная ионизация атома гелия. Проиллюстрируем теперь эффективность предлагаемой в п. 2.1 схемы расчетов на примере трехкратного дифференциального сечения (TDCS) в процессе однократной ионизации электронным ударом атома гелия. Схема процесса приведена на рис. 2. В обсуждаемой ($e, 2e$)-реакции быстрый налетающий электрон с энергией в несколько килоэлектронвольт передает атому относительно малые энергию и импульс, так что решение соответствующей задачи четырех тел может быть существенно упрощено, если ограничиться первым борновским приближением при описании взаимодействия налетающего электрона с атомом, а быстрый электрон описывать плоской волной.

В используемом приближении амплитуда перехода записывается в виде [94]

$$T_{fi} = \langle \Psi_{\mathbf{p}_s \mathbf{k}_e \{q_0\}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) | \widehat{V}_0 | \Phi_{\mathbf{p}_i}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \rangle, \quad (2.20)$$

где \widehat{V}_0 — асимптотический потенциал. В выражении (2.20) \mathbf{p}_i , \mathbf{p}_s и \mathbf{k}_e — импульсы налетающего (быстрого), рассеянного (быстрого) и выбитого (медленного) электронов соответственно, $\{q_0\}$ характеризует состояние конечного

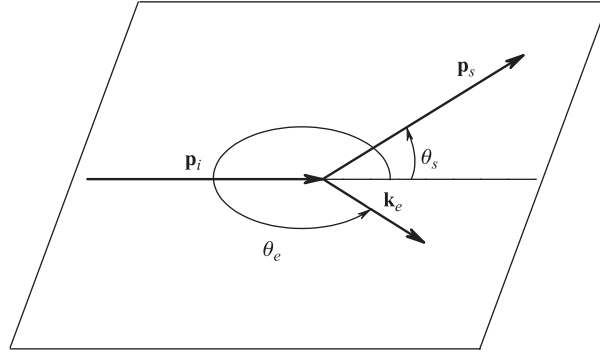


Рис. 2. Схематическая диаграмма процесса однократной ионизации

иона He^+ при фиксированном главном квантовом числе q_0 . Волновая функция $\Phi_{\mathbf{p}_i}$ начального состояния системы задается выражением

$$\Phi_{\mathbf{p}_i}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = e^{i\mathbf{p}_i \cdot \mathbf{r}_0} \Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.21)$$

где $\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновая функция основного состояния атома гелия. Волновая функция $\Psi_{\mathbf{p}_s \mathbf{k}_e \{q_0\}}$ конечного состояния системы приближается выражением

$$\Psi_{\mathbf{p}_s \mathbf{k}_e \{q_0\}}(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) \approx e^{i\mathbf{p}_s \cdot \mathbf{r}_0} \Psi_{\{q_0\}}(\mathbf{k}_e; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (2.22)$$

где $\Psi_{\{q_0\}}(\mathbf{k}_e; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — искомая волновая функция двухэлектронной системы. Таким образом, полагается, что рассеянный электрон не взаимодействует с мишенью в конечном состоянии. Потенциал \hat{V}_0 в выражении (2.20) описывает кулоновское взаимодействие между налетающим электроном и атомом гелия

$$\hat{V}_0 = -\frac{2}{r_0} + \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_1|} + \frac{1}{|\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_2|}. \quad (2.23)$$

Таким образом, в борновском приближении амплитуда (2.20) принимает вид

$$T_{fi}^{\{q_0\}} = \frac{4\pi}{Q^2} \langle \Psi_{\{q_0\}}(\mathbf{k}_e) | e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_2} - 2 | \Phi_0 \rangle, \quad (2.24)$$

где $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s$ — переданный импульс. Соответствующее TDCS реакции $\text{He}(e, 2e)\text{He}^+$ задается выражением

$$\sigma_{\{q_0\}}^{(3)} \equiv \frac{d^3 \sigma_{\{q_0\}}}{d\Omega_s dE_e d\Omega_e} = \frac{1}{(2\pi)^5} \frac{k_e p_s}{p_i} |T_{fi}^{\{q_0\}}|^2. \quad (2.25)$$

Поскольку магнитные и угловые состояния в ионе He^+ вырождены, и мы их не измеряем, то по ним надо произвести суммирование. В результате TDCS ($e, 2e$)-реакции, когда ион He^+ остается в возбужденном состоянии, выглядит как

$$\sigma_{\{q_0\}}^{(3)} = \frac{4p_s k_e}{(2\pi)^3 p_i} \frac{1}{Q^4} \sum_{l_0 m} |\langle \Psi_{q_0 l_0 m}^{(-)}(\mathbf{k}_e) | e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_1} + e^{i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}_2} - 2|\Phi_0 \rangle|^2. \quad (2.26)$$

Угловые распределения медленного электрона в ($e, 2e$)-реакции ионизации с возбуждением рассчитаны для двух экспериментальных наборов [95]. В этих экспериментах ион остается в состоянии $q_0 = 2$, $E_s = 5500$ эВ, а выбитый электрон характеризуется следующими кинематическими условиями: а) $E_e = 5$ эВ и $\theta_s = 0,35^\circ$; б) $E_e = 75$ эВ и $\theta_s = 1^\circ$, где θ_s — угол рассеяния быстрого электрона, а θ_e — угол вылета испущенного атомом электрона (в дальнейшем, на представленных ниже рисунках, этот угол отсчитывается по часовой стрелке от направления вектора \mathbf{p}_i для удобства сравнения с другими расчетами).

Волновая функция Φ_0 основного состояния атома гелия получена в результате диагонализации матрицы уравнения (1.1), рассчитанной в базисе (2.7). Здесь мы ограничились $l_{\max} = 3$ и $n_{\max} = \nu_{\max} = 15$. Выбор базисного параметра $u_0 = 1,193$ дает значение $E_0 = -2,903256$ для энергии основного состояния.

Волновая функция $\Psi_{q_0 l_0 m}^{(-)}$ (2.15) конечного состояния получена с использованием рассматриваемого здесь метода. В разложении функции (2.15) по базису мы ограничились максимальным значением полного орбитального момента $L_{\max} = 2$, $l, \lambda \leq 3$. Здесь уместно обсудить роль параметров a и b функции «разделения» (2.1). Параметр a определяет эффективный радиус короткодействующего потенциала $V_2^{(s)} \hat{P}_{12}$ в (2.4), матрица которого недиагональна по индексам $(l \lambda)$. Помимо этого члена, слагаемое r_{12}^{-1} также связывает парциальные волны с различными $(l \lambda)$ в уравнении (2.3). Таким образом, величина a управляет недиагональной по $(l \lambda)$ частью взаимодействия, которая и дает главный вклад в TDCS. Следовательно, сходимость расчетов по отношению к выбору параметра a может служить показателем сходимости конечного разложения волновой функции по парциальным волнам.

Сходимость углового распределения медленного электрона представлена на рис. 3 ($a = 3$, $b = 20$, $\kappa = 2,1$) и рис. 4 ($a = 5$, $b = 50$, $\kappa = 2,1$). N обозначает число лагерровских базисных функций, и использовалось значение параметра $u = 0,6$ базисной функции Лагерра. Оказывается, что скорость сходимости и результаты вычислений практически не зависят от значений параметров a и b .

На рис. 5 результаты расчетов (сплошная линия) представлены в сравнении с экспериментом [95] и с результатами, полученными в рамках двух

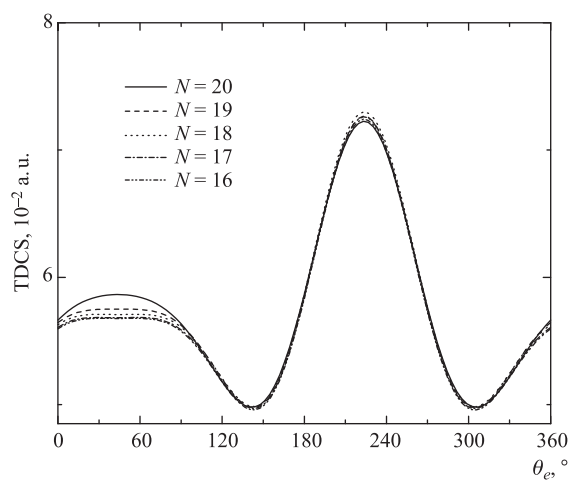


Рис. 3. Зависимость TDCS (2.26) ионизации атома гелия от количества N радиальных базисных функций. $E_s = 5500$ эВ, $E_e = 5$ эВ, $\theta_s = 0,35^\circ$. Значения параметров функции «разделения» следующие: $a = 3$, $b = 20$, $\kappa = 2,1$

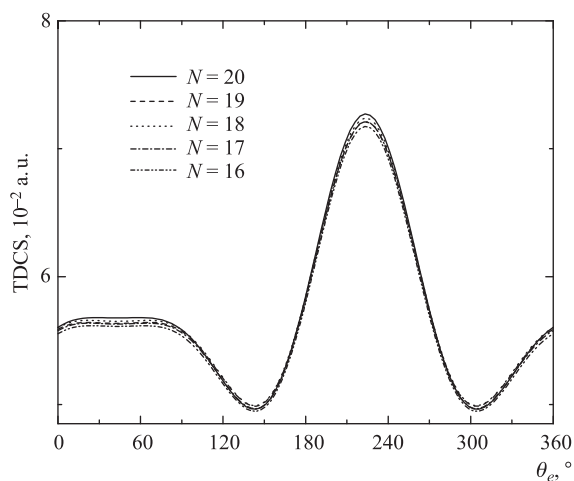


Рис. 4. То же, что и на рис. 3, но $a = 5$, $b = 50$

других моделей: ССС (штриховая линия) [96] и 5МС (пунктирная линия) [95]. Во всех теоретических подходах требуется дополнительный подгоночный множитель, чтобы описать эксперимент ($\sim 1,45$ в нашей модели и $\sim 1,6$ для 5МС). Заметим, что форма TDCS, полученного в нашей модели, ближе к экспериментальной.

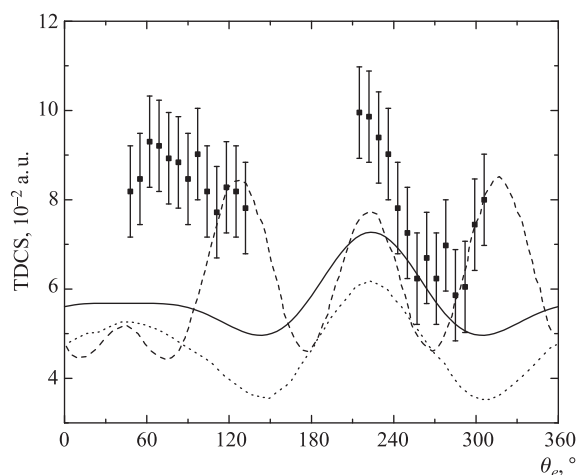


Рис. 5. TDCS (2.26) ионизации атома гелия. $E_s = 5500$ эВ, $E_e = 5$ эВ, $\theta_s = 0,35^\circ$. Сплошная линия — представленная модель; штриховая — CCC; пунктирная — 5MC (все результаты приведены без использования подгоночных множителей). Значения параметров функции «разделения» те же, что и на рис. 4

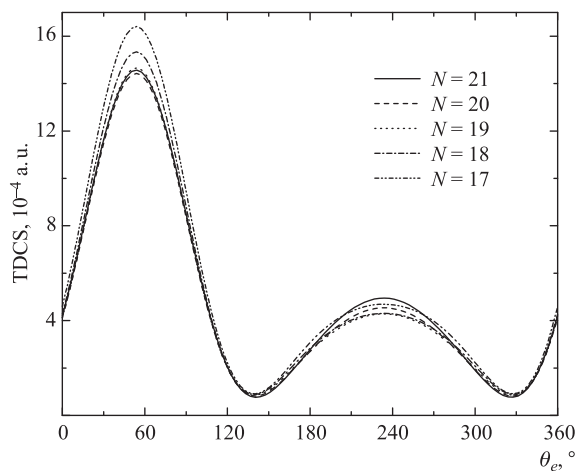


Рис. 6. То же, что и на рис. 3, но $E_e = 75$ эВ и $\theta_s = 1^\circ$

Для энергии $E_e = 75$ эВ значения TDCS $\sigma_{\{q_0\}}^{(3)}$ приблизительно в 40 раз меньше, чем при $E_e = 5$ эВ, и все численные погрешности здесь более заметны. Сходимость углового распределения медленного электрона представлена на рис. 6 ($a = 3$, $b = 20$, $\kappa = 2,1$, $u = 0,3$). На рис. 7 наши

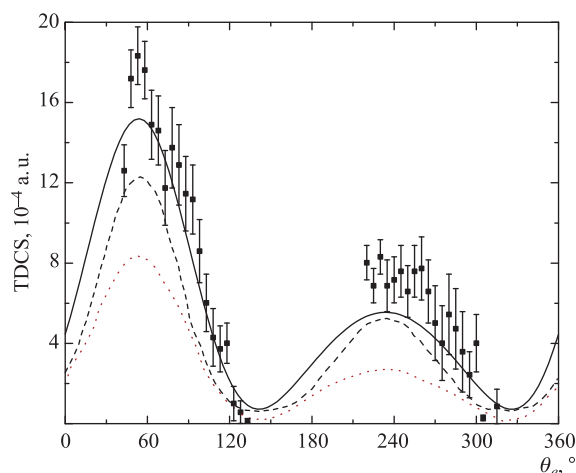


Рис. 7. TDCS (2.26) ионизации атома гелия. $E_s = 5500$ эВ, $E_e = 75$ эВ, $\theta_s = 1^\circ$. Сплошная линия — представленная модель; штриховая — CCC; пунктирная — 5DCS (все результаты приведены без использования подгоночных множителей). Значения параметров функции «разделения» те же, что и на рис. 6

результаты (сплошная линия) также представлены в сравнении с экспериментальными данными [95] и результатами CCC-расчетов (штриховая линия). Представленная модель воспроизводит эксперимент лучше, по крайней мере бинарный пик, даже без использования подгоночных множителей.

2.4. Двукратная ионизация атома гелия. В данном пункте рассмотрим теоретическое описание экспериментов по двойной ионизации гелия электронным ударом, которые были выполнены в так называемой дипольной компланарной геометрии [76,97]. Такие эксперименты характеризуются малыми значениями передаваемых импульсов и большими энергиями налетающего и рассеянного электрона: $E_i \approx E_s \approx 5-8$ кэВ, тогда как энергии выбитых электронов — порядка нескольких эВ. Такие кинематические условия позволяют опять же ограничиться в расчетах пятикратного дифференциального сечения (5DCS) реакции $\text{He}(e, 3e)\text{He}^{++}$ первым борновским приближением (FBA) и описывать быстрый электрон плоской волной. (Результаты расчетов 5DCS, выполненных без использования FBA, см., например, в [98].)

Простейшей волновой функцией конечного состояния $\Psi^{(-)}$ (когда все три частицы e , e и He^{++} свободны) является волновая функция так называемой 3С-модели (или 3С-функция) [78, 99, 100], которая асимптотически корректно ведет себя при больших взаимных расстояниях между разлетающи-

мися частицами. Расчеты 5DCS реакции двукратной ионизации атома гелия с использованием этой функции дают вполне удовлетворительные результаты при энергиях выбитых медленных электронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ с различными типами пробных волновых функций начального состояния [101–103]. (Роль согласованного описания начального и конечного состояний в расчетах реакции двойной ионизации атома гелия обсуждается также в [104–106].) Тем не менее 3С-функция является слишком грубым приближением для волновой функции конечного состояния системы. По этой причине продолжают попытки усовершенствования 3С-модели. При этом схемы расчета становятся все более сложными, а преимущества все менее очевидными. CCC-метод позволяет эффективно учесть каналы трехчастичного развала при изучении упругого и неупругого рассеяния частицы на связанной паре. Однако при энергиях выше порога трехчастичного развала метод псевдосостояний не способен адекватно описать свойства реакций. Так, расчеты 5DCS, которые были выполнены в рамках CCC-метода [77, 97], показывают необходимость введения больших значений подгоночных множителей для сравнения теории и эксперимента по абсолютной шкале. Ниже представлены расчеты пятикратных дифференциальных сечений (5DCS) в рамках данного подхода.

5DCS реакции $\text{He}(e, 3e)\text{He}^{++}$ задается выражением

$$\sigma^{(5)} \equiv \frac{d^5\sigma}{d\Omega_s dE_1 d\Omega_1 dE_2 d\Omega_2} = \frac{4p_s k_1 k_2}{(2\pi)^6 p_i Q^4} \times \\ \times |\langle \Psi^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2) | \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{r}_1) + \exp(i\mathbf{Q}\mathbf{r}_2) - 2|\Phi_0\rangle|^2, \quad (2.27)$$

где (E_i, \mathbf{p}_i) , (E_s, \mathbf{p}_s) , (E_1, \mathbf{k}_1) и (E_2, \mathbf{k}_2) — энергии и импульсы налетающего (быстрого), рассеянного (быстрого) и обоих выбитых медленных электронов соответственно; $\mathbf{Q} = \mathbf{p}_i - \mathbf{p}_s$ — переданный импульс; $\Phi_0(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновая функция основного состояния атома гелия; $\Psi^{(-)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$ — волновая функция конечного состояния.

Волновая функция конечного состояния $\Psi^{(-)}$ получена описанным выше способом. Мы ограничились в расчетах максимальным значением полного орбитального момента $L_{\max} = 2$ и парциальными орбитальными моментами $l, \lambda \leq 5$. Параметры a, b и κ функции «разделения» (2.1) полагались равными: $a = 3, b = 20, \kappa = 2,1$. В разложении потенциала по каждой из координат Якоби использовалось $N = 20$ лагерровских базисных функций, т. е.

$$V_{n\nu, n'\nu'}^{L(l\lambda)(l'\lambda')} \neq 0 \text{ при } n, \nu, n', \nu' \leq N. \quad (2.28)$$

Результаты расчета 5DCS $\sigma^{(5)}$ представлены на рис. 8 (сплошная линия). Для сравнения мы привели результаты, полученные в рамках FBA с использованием 3С-модели [101] (пунктирная линия). Угол вылета θ_1 одного из

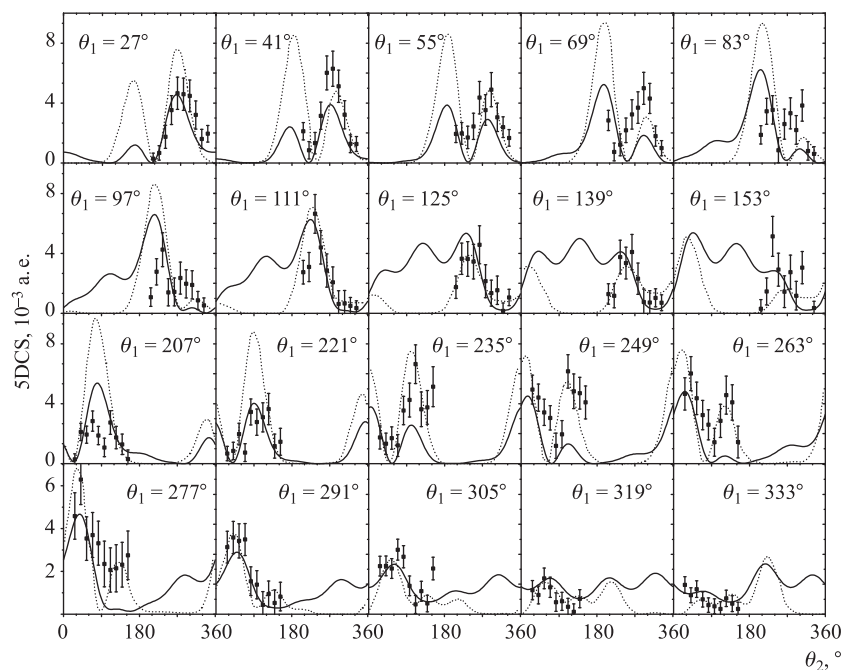


Рис. 8. Пятикратное дифференциальное сечение 5DCS реакции $\text{He}(e, 3e)\text{He}^{++}$ двукратной ионизации атома гелия быстрым электроном. Энергия рассеянного электрона $E_s = 5500$ эВ. Энергии выбитых медленных электронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ. Угол рассеяния быстрого электрона $\theta_s = 0,45^\circ$. θ_1 и θ_2 обозначают углы вылета выбитых электронов относительно направления налетающего быстрого электрона. При этом θ_1 фиксирован, а угол θ_2 меняется в пределах от 0 до 360° . Векторы скорости всех электронов лежат в одной плоскости. Экспериментальные данные взяты из [97]. Сплошная линия — наши результаты; пунктирная — результаты расчетов [101] с ЗС-функцией

двух выбитых электронов фиксирован, тогда как значение θ_2 второго электрона меняется. Энергия рассеянного (быстрого) электрона $E_s = 5500$ эВ, угол его рассеяния $\theta_s = 0,45^\circ$, а также энергии выбитых медленных электронов $E_1 = E_2 = 10$ эВ фиксированы в эксперименте. Углы рассеяния и вылета медленных электронов отсчитываются от направления налетающего электрона против часовой стрелки (рис. 9).

Сравнение теории и эксперимента показывает, что обе волновые функции, описывающие движение двух асимптотически свободных электронов в поле ядра, как в J -матричном подходе, так и модельная ЗС-функция с пра-

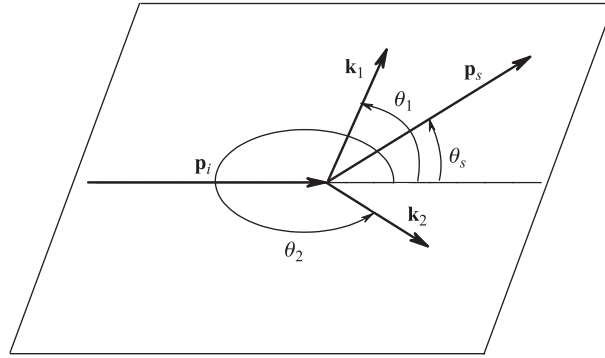


Рис. 9. Схематическая диаграмма процесса двойной ионизации

вильной глобальной асимптотикой не обеспечивают в полной мере описание 5DCS. Попробуем в этом разобраться.

2.5. Проблемы и их обсуждение. Мы рассмотрели несколько версий алгебраического подхода к решению многочастичного УШ с кулоновским взаимодействием частиц. Здесь путем подбора соответствующего углового и радиального базисов дифференциальное (интегральное) уравнение сводится к матричному, которое решается после ограничения матриц, что приводит к конечной системе линейных алгебраических уравнений для коэффициентов разложения волновой функции по выбранному многомерному базису. Эта система неоднородная, и неоднородность определяется собственной функцией гамильтониана H_0 , который выбран «свободным» для данной физической задачи. Эта функция и должна задавать граничные условия задачи рассеяния. Тогда «взаимодействие» V не влияет на граничные условия, и алгебраическая версия в ее «обрезанном» виде должна работать, поскольку матрица потенциала с высокой точностью должна удовлетворять условию (см. (2.28)) $V_{n\nu, n'\nu'}^{L(l\lambda)(l'\lambda')} = 0$ при $n, \nu, n', \nu' > N$ для достаточно больших значений N . Глобальная координатная асимптотика волновой функции двух асимптотически свободных электронов в поле ядра хорошо известна [2, 3, 107, 108]. Ее корректное поведение при больших взаимных расстояниях между компонентами в нашем случае принимает вид

$$\Psi_1^{(\pm)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2; \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)|_{r_1, r_2, r_{12} \rightarrow \infty} \sim e^{i(\mathbf{r}_1 \mathbf{k}_1 + \mathbf{r}_2 \mathbf{k}_2 + W^\pm)} \quad (2.29)$$

с фазой

$$W^\pm = \mp \frac{Z}{k_1} \ln(k_1 r_1 \pm \mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1) \mp \frac{Z}{k_2} \ln(k_2 r_2 \pm \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2) \pm \frac{1}{2k_{12}} \ln(k_{12} r_{12} \pm \mathbf{k}_{12} \mathbf{r}_{12}). \quad (2.30)$$

В (2.29) и (2.30) $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2$, $\mathbf{k}_{12} = (1/2)(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2)$ и $Z = 2$ для атома гелия.

Допустим, что $k_1 \gg k_2$ и $r_1 \gg r_2$. В этом случае

$$W^\pm \sim \mp \frac{Z-1}{k_1} \ln(k_1 r_1 \pm \mathbf{k}_1 \mathbf{r}_1) \mp \frac{Z}{k_2} \ln(k_2 r_2 \pm \mathbf{k}_2 \mathbf{r}_2). \quad (2.31)$$

Именно такое асимптотическое поведение свободного члена обеспечивает уравнение (2.5). Физически условия, приводящие к асимптотике (2.31), означают, что медленный испущенный электрон находится во время столкновения близко от ядра и «видит» его полный заряд Z , тогда как быстрый испущенный электрон быстро улетает от ядра и преимущественно «видит» экранированный заряд $Z - 1$. Это очевидный эффект учета электронных корреляций в случае двукратной ионизации. В случае же однократной ионизации асимптотическое условие близости одного электрона к ядру и удаленности другого выполняется автоматически, поскольку в этом случае в качестве свободного члена интегрального уравнения (2.5) выступает произведение кулоновской волны на волновую функцию связанной пары иона He^+ .

Очевидно, в общем случае свободный член уравнения (2.5) не обеспечивает корректных граничных условий волновой функции двух асимптотически свободных электронов в поле ядра. Это значит (см. обзор [92]), что интегральный член данного уравнения расходится при выполнении условия дисперсии $2E = k_1^2 + k_2^2$. Действительно, потенциал V короткодействующий только в области Ω_1 конфигурационного пространства, во всех остальных областях он имеет дальнодействующую кулоновскую асимптотику. Ограничивая матрицу этого потенциала в (2.8) величиной N в пространстве чисел заполнения, мы как бы обрезаем его в конфигурационном пространстве, вводя радиус обрезания $R \sim N$ [85].

Недавно в ряде публикаций в ведущих научных журналах «состоялись очередные дебаты» на предмет свободной асимптотики волновой функции континуума на обрезанном кулоновском потенциале при $R \rightarrow \infty$ в случае двух заряженных частиц [109–112], хотя, казалось бы, этот вопрос давно решен (см., например, [113, 114]). Мы не будем вдаваться в детали этого обсуждения (работа [109] содержала ошибки), нам важно здесь показать, что проблема устранения расходимостей интегральных членов уравнения ЛШ путем обрезания кулоновского потенциала и дальнейших практических вычислений даже в случае двух заряженных частиц до сих пор дискутируется. А что говорить о большем числе частиц?

В качестве теста мы произвели расчет матричного элемента

$$T = \int d^3 r \varphi^{(-)*}(\mathbf{p}, \mathbf{r}; Z) e^{i\mathbf{Q}\mathbf{r}} \varphi_0(r), \quad (2.32)$$

с $p = 0,6$, $Q = 0,2$. Кулоновская волна записывается в виде (1.11) с $Z = 2$. Основное состояние нашего водородоподобного атома есть обычная экспонента

$$\varphi_0(r) = \sqrt{\frac{8}{\pi}} e^{-2r}, \quad \int d^3r (\varphi_0(r))^2 = 1. \quad (2.33)$$

На рис. 10 представлены расчеты $\text{Re} T$, $\text{Im} T$ и $|T|$. Здесь θ — плоский угол между векторами \mathbf{Q} и \mathbf{p} . Сплошная линия представляет результат аналитического расчета интеграла (2.32), штриховой и пунктирной линиями представлены расчеты в рамках обсуждаемой алгебраической схемы. В данной тестовой модели свободный член двухчастичного уравнения ЛШ представлен плоской волной, а функция Грина — свободная функция Грина. Разложение парциального интегрального уравнения производится по лагерровскому базису (количество радиальных базисных функций указано в подписи к рисунку). Число парциальных волн $l_{\max} = 5$. Мы видим чрезвычайно боль-

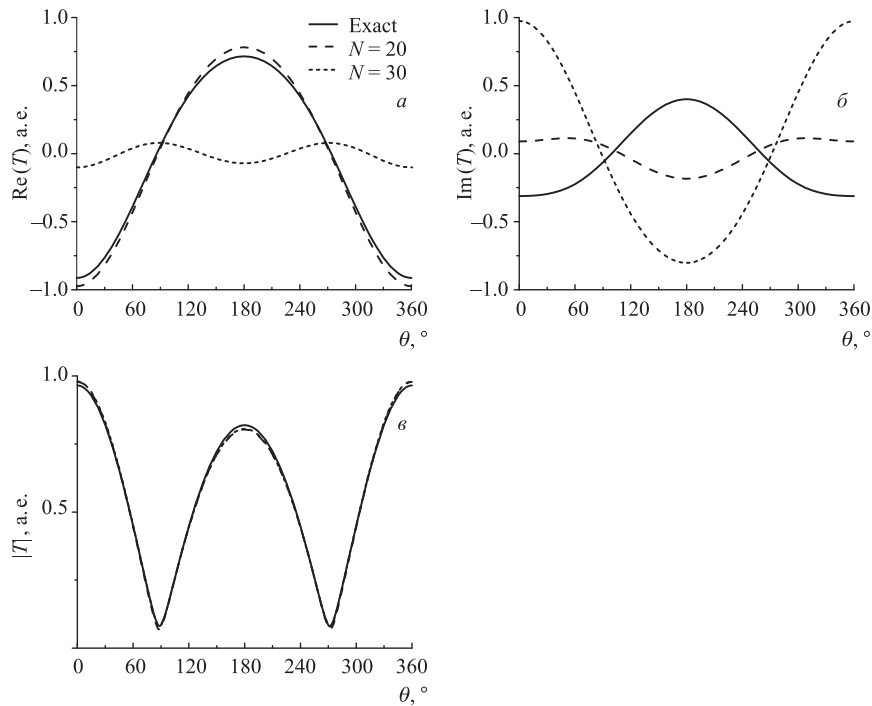


Рис. 10. Зависимости от плоского угла θ вещественной (а), мнимой (б) частей и модуля (в) двухчастичной амплитуды T из (2.32): сплошная линия — точные аналитические результаты, штриховая — результаты расчетов при $N = 20$, $l_{\max} = 5$, пунктирная — результаты расчетов при $N = 30$, $l_{\max} = 5$

шой разброс результатов для $\text{Re } T$ и $\text{Im } T$ и достаточно хорошее совпадение для модулей амплитуд $|T|$. Это означает, что $T_{\text{ex}} = e^{i\chi(N)}T_N$ с растущей функцией $\chi(N)$, что, собственно, и ожидалось. Но двухчастичный случай достаточно прост для подобного рода сравнений. Нам неизвестен точный вид трехчастичной функции, и мы не можем привести какие-либо математически твердые аргументы, что приближенная (при конечном N) функция мало отличается от неизвестной точной функции при достаточно большом значении N , или хотя бы приближенная и точная амплитуды связаны фазовым множителем (попытки в этом направлении, однако, делаются [115]). Это свойственно амплитудам только при рассмотрении уравнения ЛШ вне энергетической поверхности [92], и то там появляется не только фазовый множитель.

Исследование нашего случая в указанном направлении, т. е. поведения 5DCS ($e, 3e$)-реакции при увеличении числа N , выявляет две особенности. Первое, сходимость результатов при увеличении числа N не очень удовлетворительная, наблюдаются резкие (до трех раз) изменения сечения в отдельных угловых областях даже при небольшом изменении N (это показано в [146]). В силу конструктивных особенностей использованного в обсуждаемом эксперименте спектрометра, углы второго медленного испущенного электрона противоположны фиксированному углу первого испущенного электрона ($\theta_2 \sim \pi + \theta_1$) [76,97]. В этих областях наблюдается некоторое совпадение теории с экспериментом и при $N = 20$. Однако, второе, вычисления показывают, что при $\theta_1 = \theta_2$ сечение увеличивается с ростом N , тогда как здесь оно должно быть равно нулю. Это явный недостаток теоретической схемы с ограничением потенциала.

Следует отметить, что метод ССС, рассмотренный в п. 2.2, будучи применен к ($e, 3e$)-реакциям, имеет тот же принципиальный недостаток, хотя его авторы нигде об этом не упоминают. Там схема еще более примитивна, чем разобранный в п. 2.1, и второй из испущенных электронов вообще не имеет асимптотики континуума и описывается конечной суммой псевдостояний.

Из итогов обсуждения следует, что и ССС, и варианты метода J -матрицы, где волновые функции обоих испущенных электронов имеют вполне кулоновскую асимптотику, не могут претендовать на математически безупречное описание волновой функции двух асимптотически свободных электронов в поле ядра. При этом данные методы, видимо, вполне пригодны для описания реакций однократной ионизации атома или молекулы достаточно быстрым электроном (см. комментарий по этому поводу в конце п. 2.2). Определенное несовпадение теории и эксперимента при $E_e = 5$ эВ, наблюдаемое на рис. 5, объясняется, с одной стороны, недостаточностью количества радиальных штурмовских функций в данной околопороговой области, а с другой, необходимостью более аккуратной процедуры конволюции теории к эксперименту [116]. Иными словами, свободный член многочастичного уравнения

ЛШ должен хотя бы глобально воспроизводить трехчастичную кулоновскую асимптотику, а оставшийся потенциал «взаимодействия» быть короткодействующим во всех основных асимптотических областях. Такая возможность предоставляется, если рассматривать трехчастичное УШ в параболических координатах, и краткое изложение этого метода приведено в следующем разделе.

3. ПАРАБОЛИЧЕСКИЕ КООРДИНАТЫ

Одним из самых известных приближений волновой функции трех асимптотически свободных заряженных частиц является так называемая ЗС-функция $\Psi_{ЗС}$ [78, 99, 100, 117] (иногда ее называют функцией Браунера–Бригса–Клара (ВВК), которые впервые ввели ее в практику численных расчетов [78]). $\Psi_{ЗС}$ представляется в виде произведения трех парных кулоновских функций, зависящих от относительных координат в каждой паре и сопряженных с ними импульсов. Эта функция удовлетворяет корректным асимптотическим условиям (2.29) в области Ω_0 , где все три частицы далеки друг от друга. Вместе с тем ЗС-функция не способна корректно передать поведение системы в области промежуточных расстояний между частицами, а также когда одна из частиц удалена от остальных двух. Несмотря на известные недостатки и ограниченную область применимости ЗС-модели, она продолжает с успехом использоваться в качестве волновой функции конечного состояния в расчетах сечения реакций двукратной ионизации атома гелия электронным ударом и γ -квантом [101–103, 118, 119]. Удивительным представляется достигаемое при этом согласие результатов расчета с экспериментом [76], причем как по форме, так и по абсолютным значениям. Исследования роли начального и конечного состояний системы в описании $(\gamma, 2e)$ - и $(e, 3e)$ -столкновений позволили авторам [106] заключить, что процессы рассеяния не могут служить надежным тестом качества аппроксимации функций, а полученное ранее согласие расчетов $(e, 3e)$ -реакции с экспериментальными данными является случайным.

ЗС-волновая функция строится путем исключения всех смешанных производных в трехчастичном гамильтониане, записанном в обобщенных параболических координатах [117]. В последнее время было предложено большое количество усовершенствований ЗС-модели, в которых тем или иным (приближенным) способом учитывается недиагональная часть [120] оператора кинетической энергии. В большинстве подходов сохраняется форма исходной волновой функции в виде произведения трех двухчастичных кулоновских волн. При этом вводятся эффективные заряды, зависящие от координат или скоростей частиц (см., например, [121–125]). Тем самым учитывается динамическое экранирование зарядов. Кроме того, для описания волновой

функции кулоновской системы трех тел в области Ω_α , где расстояние между частицами β и γ много меньше дистанции, разделяющей их центр масс и частицу α , авторы [126] (см. также [127] и цитируемую в ней литературу) вводят модифицированные относительные импульсы частиц.

Кроме того, было предпринято несколько попыток выйти за рамки ЗС-модели. Так, автор [128] предложил представлять трехчастичную кулоновскую волновую функцию асимптотически свободных частиц во «внутренней» области (где потенциальная энергия преобладает над кинетической) в виде линейной комбинации волновых функций ЗС-модели с различными относительными импульсами частиц. В [129–132] была предложена и развита так называемая Φ_2 -модель. В рамках данного подхода приближенная аналитическая волновая функция системы выражается через гипергеометрическую функцию с двумя аргументами. Используя представление волновой функции Φ_2 -модели в виде разложения по степеням координат, авторы [129–131] показывают, что ЗС-волновая функция является первым членом такого разложения. Авторы [131] также указывают на возможность получения трехчастичной кулоновской волновой функции асимптотически свободных частиц путем решения уравнений фаддеевского типа с использованием резольвенты, соответствующей асимптотическому кулоновскому волновому оператору, и с учетом неортогональной части оператора кинетической энергии в качестве компонент потенциала возмущения.

Здесь предлагается способ [133, 134] численного расчета волновой функции асимптотически свободного движения трех заряженных частиц в рамках дискретного подхода, в основе которого лежат идеи метода J -матрицы. В данной версии J -матричного формализма волновая функция системы раскладывается в бесконечный ряд по шестимерным L^2 базисным функциям. В результате исходное уравнение Шредингера преобразуется в дискретный аналог уравнения типа ЛШ. Очевидно, что для корректного учета асимптотики искомой волновой функции требуются выражения для элементов матрицы шестимерной кулоновской функции Грина. Искомая матрица резольвенты является формально обратной матрице асимптотического кулоновского волнового оператора. Заметим, что матрица функции Грина не может быть получена путем численного обращения бесконечной дальнедействующей части волнового оператора. Таким образом, следует искать аналитические выражения для матричных элементов резольвенты асимптотического трехчастичного кулоновского волнового оператора.

3.1. Формулировка проблемы. Рассмотрим уравнение Шредингера для кулоновской системы трех частиц с массами m_1, m_2, m_3 и зарядами Z_1, Z_2, Z_3 соответственно, записанное несколько в более общем виде, чем (1.1):

$$\left[-\frac{1}{2\mu_{12}}\Delta_{\mathbf{R}} - \frac{1}{2\mu_3}\Delta_{\mathbf{r}} + \frac{Z_1Z_2}{r_{12}} + \frac{Z_2Z_3}{r_{23}} + \frac{Z_1Z_3}{r_{13}} \right] \Psi = E\Psi. \quad (3.1)$$

Здесь \mathbf{R} и \mathbf{r} — векторы Якоби:

$$\mathbf{R} = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2, \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}_3 - \frac{m_1 \mathbf{r}_1 + m_2 \mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}, \quad (3.2)$$

$\mathbf{r}_{ls} = \mathbf{r}_l - \mathbf{r}_s$ — относительные векторы, $r_{ls} = |\mathbf{r}_{ls}|$. Приведенные массы задаются выражениями

$$\mu_{12} = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}, \quad \mu_3 = \frac{(m_1 + m_2) m_3}{m_1 + m_2 + m_3}. \quad (3.3)$$

Собственная энергия E записывается в виде $E = \frac{1}{2\mu_{12}} \mathbf{K}^2 + \frac{1}{2\mu_3} \mathbf{k}^2$. Использование представления

$$\Psi = e^{i(\mathbf{K} \cdot \mathbf{R} + \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})} \bar{\Psi} \quad (3.4)$$

приводит к исключению энергии из исходного уравнения. В результате для $\bar{\Psi}$ получаем

$$\left[-\frac{1}{2\mu_{12}} \Delta_{\mathbf{R}} - \frac{1}{2\mu_3} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{i}{\mu_{12}} \mathbf{K} \cdot \nabla_{\mathbf{R}} - \frac{i}{\mu_3} \mathbf{k} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} + \frac{Z_1 Z_2}{r_{12}} + \frac{Z_2 Z_3}{r_{23}} + \frac{Z_1 Z_3}{r_{13}} \right] \bar{\Psi} = 0. \quad (3.5)$$

Обозначим через D оператор в квадратных скобках в (3.5). В дальнейшем этот оператор записывается в параболических координатах, предложенных Кларом [117],

$$\begin{aligned} \xi_1 &= r_{23} + \hat{\mathbf{k}}_{23} \cdot \mathbf{r}_{23}, & \eta_1 &= r_{23} - \hat{\mathbf{k}}_{23} \cdot \mathbf{r}_{23}, \\ \xi_2 &= r_{13} + \hat{\mathbf{k}}_{13} \cdot \mathbf{r}_{13}, & \eta_2 &= r_{13} - \hat{\mathbf{k}}_{13} \cdot \mathbf{r}_{13}, \\ \xi_3 &= r_{12} + \hat{\mathbf{k}}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12}, & \eta_3 &= r_{12} - \hat{\mathbf{k}}_{12} \cdot \mathbf{r}_{12}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

где $\mathbf{k}_{ls} = \frac{\mathbf{k}_l m_s - \mathbf{k}_s m_l}{m_l + m_s}$ — относительный импульс частиц l и s ; $\hat{\mathbf{k}}_{ls}$ — единичный вектор: $\hat{\mathbf{k}}_{ls} = \frac{\mathbf{k}_{ls}}{k_{ls}}$, $k_{ls} = |\mathbf{k}_{ls}|$. Таким образом, D представляется в виде суммы двух слагаемых

$$D = D_0 + D_1, \quad (3.7)$$

где D_0 задается симметричным по координатам выражением

$$D_0 = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{\mu_{ls}(\xi_j + \eta_j)} [\hat{h}_{\xi_j} + \hat{h}_{\eta_j} + 2k_{ls} t_{ls}], \quad (3.8)$$

при этом $j \neq l$, s и $l < s$. Здесь $t_{ls} = \frac{Z_l Z_s \mu_{ls}}{k_{ls}}$, $\mu_{ls} = \frac{m_l m_s}{m_l + m_s}$; одномерные операторы \hat{h}_{ξ_j} и \hat{h}_{η_j} определены следующим образом:

$$\begin{aligned}\hat{h}_{\xi_j} &= -2 \left(\frac{\partial}{\partial \xi_j} \xi_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} + ik_{ls} \xi_j \frac{\partial}{\partial \xi_j} \right), \\ \hat{h}_{\eta_j} &= -2 \left(\frac{\partial}{\partial \eta_j} \eta_j \frac{\partial}{\partial \eta_j} - ik_{ls} \eta_j \frac{\partial}{\partial \eta_j} \right).\end{aligned}\quad (3.9)$$

D_0 является главным членом, задающим волновую функцию асимптотически свободного движения трех заряженных частиц, которая удовлетворяет правильным граничным условиям в пределе, когда все частицы достаточно удалены друг от друга [117].

Оператор D_1 , который содержит все смешанные производные второго порядка $\frac{\partial^2}{\partial \xi_j \partial \xi_l}$, $\frac{\partial^2}{\partial \eta_j \partial \eta_l}$, $j \neq l$, а также $\frac{\partial^2}{\partial \xi_j \partial \eta_l}$ (см., например, [135]), рассматривается как малое возмущение, не влияющее на асимптотическое поведение волновой функции [117].

Если пренебречь D_1 в уравнении (3.5), то получим приближенное уравнение

$$D_0 \bar{\Psi} = 0, \quad (3.10)$$

которое является сепарабельным с бесконечным числом решений [117]:

$$\bar{\Psi} = \prod_{j=1}^3 f_j(\xi_j, \eta_j). \quad (3.11)$$

В свою очередь, каждая из функций $f_j(\xi_j, \eta_j)$ является решением уравнения

$$\frac{1}{\mu_{ls}(\xi_j + \eta_j)} [\hat{h}_{\xi_j} + \hat{h}_{\eta_j} + 2k_{ls} t_{ls}] f_j(\xi_j, \eta_j) = -C_j f_j(\xi_j, \eta_j), \quad (3.12)$$

где константы разделения C_j подчиняются условию

$$C_1 + C_2 + C_3 = 0. \quad (3.13)$$

Решение f_j представляется в виде произведения $f_j(\xi_j, \eta_j) = u_j(\xi_j) v_j(\eta_j)$, где функции $u_j(\xi_j)$ и $v_j(\eta_j)$ удовлетворяют уравнениям

$$\begin{aligned}[\hat{h}_{\xi_j} + 2k_{ls} A_j + \mu_{ls} C_j \xi_j] u_j(\xi_j) &= 0, \\ [\hat{h}_{\eta_j} + 2k_{ls} B_j + \mu_{ls} C_j \eta_j] v_j(\eta_j) &= 0\end{aligned}\quad (3.14)$$

при условии

$$A_j + B_j = t_{ls}. \quad (3.15)$$

Общее решение (3.14) может быть получено путем преобразования уравнения для вырожденной гипергеометрической функции (см., например, [135, 136]). Таким образом, общее решение (3.10) выражается через произведение шести функций Куммера (волновая функция Ψ_{6C} так называемой 6C-модели [135]). Выбирая определенным образом значения констант разделения A_j, B_j, C_j , можно получить решения с определенным асимптотическим поведением. Например, полагая $C_j = B_j = 0$ и $A_j = t_{ls}$, получаем волновую функцию 3C-модели с асимптотикой в виде расходящихся волн [117]:

$$\Psi_{3C}^+ = \prod_{j=1}^3 {}_1F_1(it_{ls}, 1; -ik_{ls}\xi_j). \quad (3.16)$$

Как показано в [125], Ψ_{3C} корректно описывает асимптотику решения уравнения (3.5) только в ограниченной области координатного пространства, поскольку

$$D_1 \Psi_{3C} \sim O\left(\frac{1}{r_{ij}^2}\right), \quad (3.17)$$

когда расстояния между всеми частицами стремятся к бесконечности. Таким образом, Ψ_{3C} приемлема в качестве приближения волновой функции кулоновской системы трех тел в асимптотической области Ω_0 [137]. Ниже представлен способ вычисления полной волновой функции асимптотически свободного движения трех заряженных частиц в параболических координатах, предложенный в [133, 134].

3.2. Дискретный аналог уравнения Липпмана–Швингера. Полная волновая функция асимптотически свободного движения трех заряженных частиц $\bar{\Psi}$ удовлетворяет шестимерному дифференциальному уравнению

$$[D_0 + D_1] \bar{\Psi} = 0. \quad (3.18)$$

Умножая (3.18) на $\prod_{j=1}^3 \mu_{ls}(\xi_j + \eta_j)$, получим [133, 134]

$$[\hat{h} + \hat{V}] \bar{\Psi} = 0, \quad (3.19)$$

где

$$\begin{aligned} \hat{h} = \prod_{j=1}^3 \mu_{ls}(\xi_j + \eta_j) D_0 = & \mu_{13}(\xi_2 + \eta_2) \mu_{12}(\xi_3 + \eta_3) \hat{h}_1 + \\ & + \mu_{23}(\xi_1 + \eta_1) \mu_{12}(\xi_3 + \eta_3) \hat{h}_2 + \mu_{23}(\xi_1 + \eta_1) \mu_{13}(\xi_2 + \eta_2) \hat{h}_3, \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$\hat{h}_j = \hat{h}_{\xi_j} + \hat{h}_{\eta_j} + 2k_{ls}t_{ls} \quad (3.21)$$

и

$$\widehat{V} = \prod_{j=1}^3 \mu_{ls}(\xi_j + \eta_j) D_1. \quad (3.22)$$

В свою очередь, уравнение (3.19) с учетом граничных условий

$$\overline{\Psi} \rightarrow \Psi_{3C} \quad \text{или} \quad \overline{\Psi} \rightarrow \Psi_{6C} \quad (3.23)$$

можно преобразовать в уравнение ЛШ:

$$\overline{\Psi} = \Psi_{3C} - \widehat{\mathfrak{G}} \widehat{V} \overline{\Psi} \quad \text{или} \quad \overline{\Psi} = \Psi_{6C} - \widehat{\mathfrak{G}} \widehat{V} \overline{\Psi}, \quad (3.24)$$

где $\widehat{\mathfrak{G}}$ — резольвента оператора \widehat{h} (3.20). В [133, 134] предложено искать численное решение уравнения (3.24) в терминах базисов параболических штурмовских L^2 -функций [138]:

$$|\mathfrak{N}\rangle = \prod_{j=1}^3 \phi_{n_j m_j}(\xi_j, \eta_j), \quad (3.25)$$

$$\phi_{n_j m_j}(\xi_j, \eta_j) = \psi_{n_j}(\xi_j) \psi_{m_j}(\eta_j), \quad (3.26)$$

$$\psi_n(x) = \sqrt{2b} e^{-bx} L_n(2bx), \quad (3.27)$$

где b — параметр базиса (свой для каждой пары $\{\xi_j, \eta_j\}$, $j = 1, 2, 3$). Таким образом, искомая волновая функция $\overline{\Psi}$ представляется в виде разложения

$$\overline{\Psi} = \sum_{\mathfrak{N}} a_{\mathfrak{N}} |\mathfrak{N}\rangle. \quad (3.28)$$

Проецируя далее (3.24) на функции $|\mathfrak{N}\rangle$, получаем бесконечную систему уравнений относительно коэффициентов разложения $a_{\mathfrak{N}}$:

$$\underline{a} = \underline{a}^{(0)} - \underline{\mathfrak{G}} \underline{V} \underline{a}. \quad (3.29)$$

Здесь $\underline{\mathfrak{G}}$ и \underline{V} — матрицы с элементами $\langle \mathfrak{N} | \widehat{\mathfrak{G}} | \mathfrak{N}' \rangle$ и $\langle \mathfrak{N} | \widehat{V} | \mathfrak{N}' \rangle$ соответственно; \underline{a} — вектор с компонентами $a_{\mathfrak{N}}$; $a_{\mathfrak{N}}^{(0)} = \langle \mathfrak{N} | \Psi_{3C} \rangle$ или $a_{\mathfrak{N}}^{(0)} = \langle \mathfrak{N} | \Psi_{6C} \rangle$.

Проблема вычисления матричных элементов $\langle \mathfrak{N} | \widehat{V} | \mathfrak{N}' \rangle$ оператора \widehat{V} (который содержит громоздкие алгебраические функции параболических координат) выходит за рамки нашего обсуждения. Здесь достаточно будет констатировать, что короткодействующий оператор \widehat{V} можно аппроксимировать матрицей \underline{V} конечного ранга в базисе квадратично-интегрируемых функций. Нашей целью является получение матричных элементов резольвенты дальнего действующего оператора \widehat{h} (3.20). В качестве первого шага в этом направлении рассмотрим резольвенту \widehat{G}_j двумерного оператора

$$\widehat{h}_j + \mu_{ls} C_j(\xi_j + \eta_j) \quad (3.30)$$

в представлении базисных функций (3.26).

3.3. Матрица одномерной и двумерной кулоновской функции Грина.
Рассмотрим систему уравнений

$$[\hat{h}_\xi + 2kt + \mu C\xi]u(\xi) = 0, \quad (3.31)$$

$$[\hat{h}_\eta + 2k(t_0 - t) + \mu C\eta]v(\eta) = 0. \quad (3.32)$$

Регулярные решения уравнений (3.31) и (3.32) выражаются через вырожденные гипергеометрические функции (см., например, [135, 136]):

$$u(\xi) = \exp\left[\frac{i}{2}(\gamma - k)\xi\right] {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + i\tau, 1, -i\gamma\xi\right) \quad (3.33)$$

и

$$\begin{aligned} v(\eta) &= e^{-\frac{i}{2}(\gamma - k)\eta} {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + i(\tau - \tau_0), 1, i\gamma\eta\right) = \\ &= \exp\left[\frac{i}{2}(\gamma + k)\eta\right] {}_1F_1\left(\frac{1}{2} + i(\tau_0 - \tau), 1, -i\gamma\eta\right), \end{aligned} \quad (3.34)$$

где

$$\mu C = \frac{k^2}{2} - \frac{\gamma^2}{2}, \quad \tau = \frac{k}{\gamma} \left(t + \frac{i}{2}\right), \quad \tau_0 = \frac{k}{\gamma} t_0. \quad (3.35)$$

Одномерные функции Грина. Выражение для резольвенты $G(\xi, \xi')$ одномерного оператора $[\hat{h}_\xi + 2kt + \mu C\xi]$:

$$[\hat{h}_\xi + 2kt + \mu C\xi] G(\xi, \xi') = \delta(\xi - \xi'), \quad (3.36)$$

содержит линейно независимые решения уравнения (3.31). Сингулярные в нуле решения уравнения (3.31) пропорциональны второму решению уравнения Куммера [139]:

$$w_1^{(\pm)}(\xi) = \exp\left[\frac{i}{2}(\pm\gamma - k)\xi\right] U\left(\frac{1}{2} \pm i\tau, 1; \mp i\gamma\xi\right). \quad (3.37)$$

Используя выражения для вронскианов функций Куммера [139], легко убедиться в том, что искомая функция Грина, которая удовлетворяет условию

$$-2\xi \frac{\partial}{\partial \xi} G(\xi, \xi') \Big|_{\xi=\xi'-0}^{\xi=\xi'+0} = 1, \quad (3.38)$$

может быть представлена в виде

$$G^{(\pm)}(\xi, \xi') = \frac{\Gamma(1/2 \pm i\tau)}{2} \begin{cases} u(\xi) w_1^{(\pm)}(\xi') e^{ik\xi'}, & \xi < \xi', \\ w_1^{(\pm)}(\xi) u(\xi') e^{ik\xi'}, & \xi > \xi'. \end{cases} \quad (3.39)$$

Знак «+» («-») в (3.39) выбран по аналогии с выражением для соответствующей двухчастичной кулоновской функции Грина [140].

В свою очередь, для резольвенты оператора $[\hat{h}_\eta + 2k(t_0 - t) + \mu C\eta]$ получаем

$$G^{(\pm)}(\eta, \eta') = \frac{\Gamma(1/2 \pm i(\tau_0 - \tau))}{2} \begin{cases} v(\eta) w_2^{(\pm)}(\eta') e^{-ik\eta'}, & \eta < \eta', \\ w_2^{(\pm)}(\eta) v(\eta') e^{-ik\eta'}, & \eta > \eta', \end{cases} \quad (3.40)$$

где

$$w_2^{(\pm)}(\eta) = \exp\left[\frac{i}{2}(\pm\gamma + k)\eta\right] U\left(\frac{1}{2} \pm i(\tau_0 - \tau), 1; \mp i\gamma\eta\right) \quad (3.41)$$

— второе решение уравнения (3.32). Выражения (3.39) и (3.40) могут быть записаны в виде произведений функций Уиттекера (см., например, [141]):

$$G^{(\pm)}(\xi, \xi') = \frac{\Gamma(1/2 \pm i\tau)}{2i\gamma} (\xi \xi')^{-1/2} \mathcal{M}_{\mp i\tau, 0}(\mp i\gamma \xi_{<}) \times \\ \times \mathcal{W}_{\mp i\tau, 0}(\mp i\gamma \xi_{>}) \exp\left[\frac{i}{2}k(\xi' - \xi)\right] \quad (3.42)$$

и

$$G^{(\pm)}(\eta, \eta') = \frac{\Gamma(1/2 \pm i(\tau_0 - \tau))}{2i\gamma} (\eta \eta')^{-1/2} \mathcal{M}_{\mp i(\tau_0 - \tau), 0}(\mp i\gamma \eta_{<}) \times \\ \times \mathcal{W}_{\mp i(\tau_0 - \tau), 0}(\mp i\gamma \eta_{>}) \exp\left[\frac{i}{2}k(\eta - \eta')\right]. \quad (3.43)$$

Двумерные функции Грина. В [134] показано, что резольвента двумерного оператора

$$[\hat{h}_\xi + 2kt + \mu C\xi] + [\hat{h}_\eta + 2k(t_0 - t) + \mu C\eta] = [\hat{h}_\xi + \hat{h}_\eta + \mu C(\xi + \eta) + 2kt_0]$$

может быть представлена в виде интеграла-свертки по параметру τ :

$$G^{(\pm)}(t_0, \mathcal{E}; \xi, \eta, \xi', \eta') = \pm \frac{\gamma}{i\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau G^{(\pm)}(\xi, \xi') G^{(\pm)}(\eta, \eta'). \quad (3.44)$$

Здесь использовано обозначение $\mathcal{E} = \gamma^2/2$. Воспользуемся интегральным представлением для произведения функций Уиттекера [142] в выра-

жениях (3.42), (3.43):

$$G^{(\pm)}(\xi, \xi') = \frac{1}{2} \exp \left[\frac{i}{2} k(\xi' - \xi) \right] \int_0^\infty dz \exp \left[\pm i \frac{\gamma}{2} (\xi + \xi') \operatorname{ch}(z) \right] \times \\ \times \left[\operatorname{cth} \left(\frac{z}{2} \right) \right]^{\mp 2i\tau} I_0 \left(\mp i \gamma \sqrt{\xi \xi'} \operatorname{sh}(z) \right), \quad (3.45)$$

$$G^{(\pm)}(\eta, \eta') = \frac{1}{2} \exp \left[\frac{i}{2} k(\eta - \eta') \right] \int_0^\infty dz \exp \left[\pm i \frac{\gamma}{2} (\eta + \eta') \operatorname{ch}(z) \right] \times \\ \times \left[\operatorname{cth} \left(\frac{z}{2} \right) \right]^{\mp 2i(\tau_0 - \tau)} I_0 \left(\mp i \gamma \sqrt{\eta \eta'} \operatorname{sh}(z) \right), \quad (3.46)$$

где $I_0(z)$ — модифицированная функция Бесселя. Тогда в результате подстановки (3.45), (3.46) в (3.44) и интегрирования по τ получаем для двумерной функции Грина

$$G^{(\pm)}(t_0, \mathcal{E}; \xi, \eta, \xi', \eta') = \mp \frac{i\gamma}{4} \exp \left[\frac{i}{2} k(\xi' - \xi + \eta - \eta') \right] \times \\ \times \int_0^\infty dz \operatorname{sh}(z) \left[\operatorname{cth} \left(\frac{z}{2} \right) \right]^{\mp 2i\tau_0} \exp \left[\pm i \frac{\gamma}{2} (\xi + \xi' + \eta + \eta') \operatorname{ch}(z) \right] \times \\ \times I_0 \left(\mp i \gamma \sqrt{\xi \xi'} \operatorname{sh}(z) \right) I_0 \left(\mp i \gamma \sqrt{\eta \eta'} \operatorname{sh}(z) \right). \quad (3.47)$$

Матрица двумерной функции Грина. В нашем подходе используется представление двумерной функции Грина (3.47) в виде матрицы \mathbf{G} , которая формально является обратной к бесконечной матрице $[\mathbf{h} + \mu C \mathbf{Q}]$ оператора (3.30):

$$[\mathbf{h} + \mu C \mathbf{Q}] \mathbf{G}(t_0, \mathcal{E}) = \mathbf{I}. \quad (3.48)$$

Здесь

$$\mathbf{h} = \mathbf{h}_\xi \otimes \mathbf{I}_\eta + \mathbf{I}_\xi \otimes \mathbf{h}_\eta + 2kt_0 \mathbf{I}, \quad (3.49)$$

$$\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_\xi \otimes \mathbf{I}_\eta + \mathbf{I}_\xi \otimes \mathbf{Q}_\eta \quad (3.50)$$

— матрицы операторов \hat{h} (3.21) и $(\xi + \eta)$ в базисе (3.26) соответственно; $\mathbf{I} = \mathbf{I}_\xi \otimes \mathbf{I}_\eta$ — матрица единичного оператора; $\mathbf{I}_\xi, \mathbf{I}_\eta$ — единичные матрицы; \mathbf{Q}_ξ и \mathbf{Q}_η — матрицы операторов ξ и η в базисе (3.27).

Вычисление матричных элементов

$$G_{n, m; n', m'}^{(\pm)}(t_0, \mathcal{E}) = \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty \int_0^\infty d\xi d\eta d\xi' d\eta' \langle \phi_{nm} | \xi, \eta \rangle \times \\ \times \langle \xi, \eta | G^{(\pm)}(t_0, \mathcal{E}) | \xi', \eta' \rangle \langle \xi', \eta' | \phi_{n'm'} \rangle \quad (3.51)$$

на базисных функциях (3.26) может быть организовано с использованием рекуррентных соотношений (3.48), поскольку матрицы \mathbf{h} и \mathbf{Q} — разреженные. Действительно, каждая из матриц \mathbf{h}_ξ , \mathbf{h}_η , \mathbf{Q}_ξ и \mathbf{Q}_η трехдиагональна с отличными от нуля элементами:

$$h_{n, n}^\xi = b + ik + 2bn, \quad h_{n, n-1}^\xi = (b - ik)n, \quad h_{n, n+1}^\xi = (b + ik)(n + 1), \quad (3.52)$$

$$h_{n, n}^\eta = b - ik + 2bn, \quad h_{n, n-1}^\eta = (b + ik)n, \quad h_{n, n+1}^\eta = (b - ik)(n + 1), \quad (3.53)$$

$$Q_{n, n'}^\xi = Q_{n, n'}^\eta = \begin{cases} -\frac{n}{2b}, & n' = n - 1, \\ \frac{2n + 1}{2b}, & n' = n, \\ -\frac{n + 1}{2b}, & n' = n + 1. \end{cases} \quad (3.54)$$

Более того, из (3.49) и (3.50) следует, что у ненулевых матричных элементов $h_{n, m; n', m'}$ и $Q_{n, m; n', m'}$ индексы удовлетворяют соотношениям: $n = n'$, $m = m'$, $m' \pm 1$ либо $m = m'$, $n = n'$, $n' \pm 1$. В качестве начальных условий в схеме расчета используются значения матричных элементов $G_{0, 0; n, m}^{(\pm)}$, аналитический вид которых может быть получен непосредственно из (3.51) методом [42, 143, 144] (см. также [145], где дан иной способ вывода). Подставляя, например, $G^{(+)}$ в виде (3.47) и выражения (3.27) для базисных функций в (3.51), получаем

$$G_{0, 0; n, m}^{(+)}(t_0, \mathcal{E}) = -\frac{i\gamma}{b^2} \int_0^\infty dz \operatorname{sh}(z) \left[\operatorname{cth}\left(\frac{z}{2}\right) \right]^{-2i\tau_0} B_1(z) B_2(z), \quad (3.55)$$

где

$$B_1(z) = \int_0^\infty dx' e^{-x'(1+p \operatorname{ch}(z)+q)} L_n(2x') \times \\ \times \int_0^\infty dx e^{-x(1+p \operatorname{ch}(z)-q)} I_0\left(2p\sqrt{xx'} \operatorname{sh}(z)\right), \quad (3.56)$$

$$B_2(z) = \int_0^\infty dy' e^{-y'(1+p \operatorname{ch}(z)-q)} L_m(2y') \times \\ \times \int_0^\infty dy e^{-y(1+p \operatorname{ch}(z)+q)} I_0\left(2p\sqrt{yy'} \operatorname{sh}(z)\right). \quad (3.57)$$

Здесь использованы обозначения: $x = b\xi$, $x' = b\xi'$, $y = b\eta$, $y' = b\eta'$, $p = -i\gamma/2b$ и $q = -ik/2b$. С помощью формулы [142]

$$\int_0^\infty dx x^{\mu-1/2} e^{-\alpha x} I_{2\nu}(2\beta\sqrt{x}) = \\ = \frac{\Gamma((1/2) + \mu + \nu)}{\Gamma(1 + 2\nu)} \frac{e^{\beta^2/2\alpha}}{\beta\alpha^\mu} \mathcal{M}_{-\mu, \nu}\left(\frac{\beta^2}{\alpha}\right) \quad (3.58)$$

проинтегрируем в выражениях (3.56) и (3.57) по x и y соответственно. В результате получаем для B_1 и B_2 :

$$B_1 = \frac{1}{1 + p \operatorname{ch}(z) - q} \times \\ \times \int_0^\infty dx' \exp\left[-x' \left(1 + p \operatorname{ch}(z) + q - \frac{p^2 \operatorname{sh}^2(z)}{1 + p \operatorname{ch}(z) - q}\right)\right] L_n(2x'), \quad (3.59)$$

$$B_2 = \frac{1}{1 + p \operatorname{ch}(z) + q} \times \\ \times \int_0^\infty dy' \exp\left[-y' \left(1 + p \operatorname{ch}(z) - q - \frac{p^2 \operatorname{sh}^2(z)}{1 + p \operatorname{ch}(z) + q}\right)\right] L_m(2y'). \quad (3.60)$$

Для вычисления интегралов (3.59) и (3.60) воспользуемся формулой [142]

$$\int_0^\infty dx x^{\gamma-1} e^{-sx} L_n^\mu(bx) = \\ = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(n + \mu + 1)}{\Gamma(n + 1)\Gamma(\mu + 1)} s^{-\gamma} {}_2F_1\left(-n, \gamma; 1 + \mu; \frac{b}{s}\right). \quad (3.61)$$

Заметим, что наш случай соответствует значениям параметров $\gamma = 1$, $\mu = 0$, так что правая часть (3.61) сводится к

$$\frac{1}{s} \left(1 - \frac{b}{s}\right)^n.$$

Таким образом, B_1 и B_2 принимают вид

$$B_1 = \frac{(-1)^n}{1 + 2p \operatorname{ch}(z) + p^2 - q^2} \left(\frac{1 - p^2 + q^2 - 2q}{1 + 2p \operatorname{ch}(z) + p^2 - q^2} \right)^n, \quad (3.62)$$

$$B_2 = \frac{(-1)^m}{1 + 2p \operatorname{ch}(z) + p^2 - q^2} \left(\frac{1 - p^2 + q^2 + 2q}{1 + 2p \operatorname{ch}(z) + p^2 - q^2} \right)^m. \quad (3.63)$$

Обозначим $t = \operatorname{th}^2(z/2)$ и преобразуем знаменатель в (3.62), (3.63):

$$1 + 2p \operatorname{ch}(z) + p^2 - q^2 = (1 - t)^{-1}(1 + p^2 - q^2 + 2p) \times \\ \times \left(1 - \frac{1 + p^2 - q^2 - 2p}{1 + p^2 - q^2 + 2p} t \right). \quad (3.64)$$

Далее, используя соотношения

$$1 + p^2 - q^2 + 2p = \frac{1}{4b^2} [2b - i(\gamma + k)][2b - i(\gamma - k)], \\ 1 + p^2 - q^2 - 2p = \frac{1}{4b^2} [2b + i(\gamma + k)][2b + i(\gamma - k)], \\ 1 - p^2 + q^2 + 2q = \frac{1}{4b^2} [2b - i(\gamma + k)][2b + i(\gamma - k)], \\ 1 - p^2 + q^2 - 2q = \frac{1}{4b^2} [2b + i(\gamma + k)][2b - i(\gamma - k)], \quad (3.65)$$

получим выражения

$$\frac{1 + p^2 - q^2 - 2p}{1 + p^2 - q^2 + 2p} = \frac{\theta}{\lambda} = \zeta^{-1}, \quad \frac{1 - p^2 + q^2 - 2q}{1 + p^2 - q^2 + 2p} = \lambda^{-1}, \\ \frac{1 - p^2 + q^2 + 2q}{1 + p^2 - q^2 + 2p} = \theta, \quad (3.66)$$

где использованы обозначения, введенные в [134]:

$$\theta = \frac{2b + i(\gamma - k)}{2b - i(\gamma - k)}, \quad \lambda = \frac{2b - i(\gamma + k)}{2b + i(\gamma + k)}, \quad \zeta = \frac{\lambda}{\theta}. \quad (3.67)$$

Кроме того, заметим, что

$$\frac{1}{1 + p^2 - q^2 + 2p} = \frac{1}{4p} \left(\frac{\zeta - 1}{\zeta} \right) = \frac{ib}{2\gamma} \left(\frac{\zeta - 1}{\zeta} \right). \quad (3.68)$$

Соотношения (3.64)–(3.68) позволяют записать произведение (3.62) и (3.63) в виде

$$B_1 B_2 = -\frac{b^2}{4\gamma^2} \left(\frac{\zeta-1}{\zeta}\right)^2 \times (-1)^{n+m} \frac{\theta^m}{\lambda^n} (1-t)^{n+m+2} (1-\zeta^{-1}t)^{-(n+m+2)}. \quad (3.69)$$

Подставим (3.69) в выражение (3.55) и путем замены $t = \text{th}^2(z/2)$ переменной интегрирования преобразуем его к виду

$$G_{0,0;n,m}^{(+)}(t_0, \mathcal{E}) = \frac{i}{2\gamma} \left(\frac{\zeta-1}{\zeta}\right)^2 (-1)^{n+m} \frac{\theta^m}{\lambda^n} \int_0^1 dt t^{i\tau_0} \times (1-t)^{n+m} (1-\zeta^{-1}t)^{-(n+m+2)} = \frac{i}{2\gamma} \left(\frac{\zeta-1}{\zeta}\right)^2 (-1)^{n+m} \frac{\theta^m}{\lambda^n} \times \frac{\Gamma(1+i\tau_0)\Gamma(n+m+1)}{\Gamma(n+m+2+i\tau_0)} {}_2F_1(n+m+2, 1+i\tau_0; n+m+2+i\tau_0; \zeta^{-1}). \quad (3.70)$$

После линейного преобразования гипергеометрической функции в (3.70) приходим к выражению

$$G_{0,0;n,m}^{(+)}(t_0, \mathcal{E}) = \frac{i}{2\gamma} (-1)^{n+m} \left(\frac{\zeta-1}{\zeta}\right) \frac{\theta^m}{\lambda^n} \frac{\Gamma(n+m+1)\Gamma(1+i\tau_0)}{\Gamma(n+m+2+i\tau_0)} \times {}_2F_1(n+m+1, i\tau_0; n+m+2+i\tau_0; \zeta^{-1}). \quad (3.71)$$

Начальные условия (3.71) в сочетании со свойствами симметрии [145]

$$G_{0,0;n,m}^{(+)} = (\theta\lambda)^{m-n} G_{n,m;0,0}^{(+)} = (\theta\lambda)^{-n} G_{n,0;0,m}^{(+)} = (\theta\lambda)^m G_{0,m;n,0}^{(+)} \quad (3.72)$$

$$G_{n,0;n',m'}^{(+)} = (\theta\lambda)^{n-n'+m'} G_{n',m';n,0}^{(+)} \quad (3.73)$$

позволяют вычислять элементы $G_{n,m;n',m'}^{(+)}$ матрицы $\mathbf{G}^{(+)}$ с помощью рекуррентных соотношений (3.48).

В [134] также установлено, что соотношение полноты решений системы уравнений (3.31), (3.32) может быть представлено в виде результата для интеграла от матрицы $\mathbf{G}^{(+)}$ двумерной функции Грина:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\mathcal{C}_0} d\mathcal{E} \mathbf{G}^{(+)}(t_0, \mathcal{E}) = \mathbf{Q}^{-1}. \quad (3.74)$$

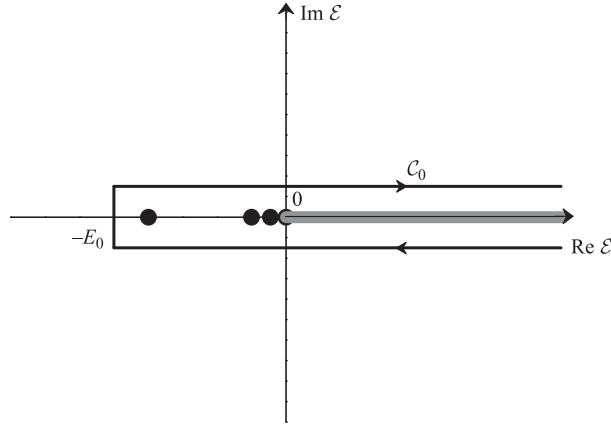


Рис. 11. Контур интегрирования на физическом листе. Серой линией обозначен разрез вдоль положительной вещественной полуоси. Полюсы подынтегрального выражения в (3.74) в точках $\mathcal{E}^{(l)} = -(kt)^2/2l^2$, $l = 1, 2, \dots$, для $t < 0$ на отрицательной вещественной полуоси изображены темными кружками

Контур C_0 приходит из бесконечности ($\text{Re}(\mathcal{E}) = \infty$) по нижнему берегу разреза вдоль положительной полуоси, обходит нижайшее $\mathcal{E}^{(1)} = -(kt_0)^2/2$ из связанных состояний $\mathcal{E}^{(l)} = -(kt_0)^2/2l^2$ в случае $t_0 < 0$ (или начало координат, если $t_0 > 0$), и затем по верхнему берегу разреза уходит на бесконечность $\mathcal{E} = \infty$ (рис. 11). Соотношение (3.74) использовано в [145] для получения выражения для резольвенты \mathfrak{G} шестимерного волнового оператора \hat{h} (3.20).

3.4. Матрица шестимерной кулоновской функции Грина. В области Ω_0 оператор D_0 в (3.7) есть сумма трех независимых операторов (см. (3.8)), каждый из которых записан в паре своих переменных (ξ_j, η_j) . Следовательно, шестимерная резольвента \mathfrak{G} может быть выражена через свертку трех двумерных функций Грина G_1, G_2, G_3 (см., например, [3]), описанных выше. Такое представление предполагает интегрирование вдоль контуров $C^{(1)}$ и $C^{(2)}$, которые охватывают спектры двух из трех двумерных волновых операторов, а именно: в [134] показано, что матрица $\underline{\mathfrak{G}}$, которая является формально обратной матрице шестимерного оператора \hat{h} (3.20)

$$\underline{h} = \mu_{13}\mu_{12}\mathbf{h}_1 \otimes \mathbf{Q}_2 \otimes \mathbf{Q}_3 + \mu_{23}\mu_{12}\mathbf{Q}_1 \otimes \mathbf{h}_2 \otimes \mathbf{Q}_3 + \mu_{23}\mu_{13}\mathbf{Q}_1 \otimes \mathbf{Q}_2 \otimes \mathbf{h}_3, \quad (3.75)$$

может быть представлена в виде интеграла-свертки

$$\underline{\mathfrak{G}}^{(\pm)} = \frac{\aleph}{(2\pi i)^2} \int_{C^{(1)}} \int_{C^{(2)}} \frac{d\mathcal{E}_1}{\mu_{23}} \frac{d\mathcal{E}_2}{\mu_{13}} \mathbf{G}^{(\pm)}(t_{23}; \mathcal{E}_1) \otimes \mathbf{G}^{(\pm)}(t_{13}; \mathcal{E}_2) \otimes \mathbf{G}^{(\pm)}(t_{12}; \mathcal{E}_3). \quad (3.76)$$

Здесь величина \mathcal{E}_3 связана с $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ соотношением

$$\mathcal{E}_3 = \frac{k_{12}^2}{2} + \frac{\mu_{12}}{\mu_{23}} \left(\frac{k_{23}^2}{2} - \mathcal{E}_1 \right) + \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \left(\frac{k_{13}^2}{2} - \mathcal{E}_2 \right), \quad (3.77)$$

которое следует из определения «энергий» \mathcal{E}_j

$$\mu_{ls} C_j = \frac{k_{ls}^2}{2} - \mathcal{E}_j \quad (3.78)$$

и ограничения (3.13) на параметры разделения C_j .

Контуры интегрирования $\mathcal{C}^{(1,2)}$ на комплексных плоскостях $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ в случае $\mathfrak{G}^{(+)}$ подобны контуру \mathcal{C}_0 (см. [3]). Однако использование представления (3.76) в практических расчетах затруднено из-за присутствия разреза на плоскости \mathcal{E}_3 вдоль вещественной положительной полуоси (проведенного для однозначного определения функции G_3). Действительно, контурам $\mathcal{C}^{(1)}, \mathcal{C}^{(2)}$ соответствует полубесконечная полоса (заштрихованная область на рис. 12) с разрезом от точки $E_{30} = \frac{k_{12}^2}{2} + \frac{\mu_{12}}{\mu_{23}} \left(\frac{k_{23}^2}{2} + E_{10} \right) + \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} \left(\frac{k_{13}^2}{2} + E_{20} \right) > 0$ к началу координат. Таким образом, в процессе интегрирования по $\mathcal{E}_1, \mathcal{E}_2$ в (3.76) траектория соответствующей точки на \mathcal{E}_3 -плоскости (определяемая уравнением (3.77)) может пересечь этот разрез и переместиться с одного листа энергий (например, физического $0 \leq \arg(\mathcal{E}_3) < 2\pi$) на другой (нефизический $-2\pi \leq \arg(\mathcal{E}_3) < 0$). Проследить за всеми этими пересечениями (и тем самым однозначно определить аргумент \mathcal{E}_3 в подынтегральном выражении (3.76)) в ходе численного интегрирования не представляется возможным.

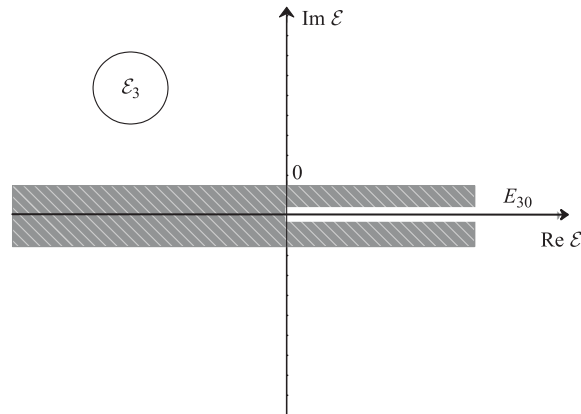


Рис. 12. Область интегрирования на комплексной плоскости \mathcal{E}_3 , отвечающая контурному интегралу (3.76)

С другой стороны, вычисление двойного интеграла (3.76) существенно упрощается, если в качестве путей $C^{(1)}$ и $C^{(2)}$ выбрать параллельные прямые. Действительно, в этом случае область интегрирования на плоскости \mathcal{E}_3 вырождается в прямую линию (параллельную $C^{(1)}$ и $C^{(2)}$) и аргумент энергии \mathcal{E}_3 однозначно определяется по знаку ее мнимой части.

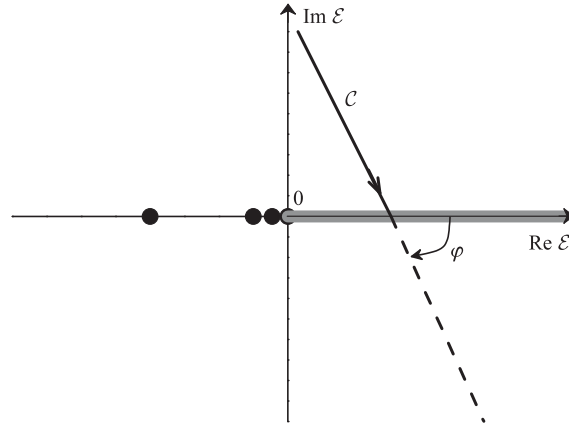


Рис. 13. Контур интегрирования C . Сплошной линией изображена часть C , которая остается на физическом листе. Продолжение контура на нефизическом листе изображено штриховой линией

В [145] показано, что прямолинейные контуры $C^{(1)}$, $C^{(2)}$ (и соответствующая им траектория на плоскости \mathcal{E}_3) должны пересекать положительную вещественную полуось. Этому требованию удовлетворяет контур C , изображенный на рис. 13. Контур C -типа отвечает следующая параметризация энергий в интеграле (3.76) [145]:

$$\mathcal{E}_1 = \frac{k_{23}^2}{2} + E_1 e^{i\varphi}, \quad \mathcal{E}_2 = \frac{k_{13}^2}{2} + E_2 e^{i\varphi}, \quad (3.79)$$

где E_1, E_2 — вещественные, $-\pi < \varphi < 0$. Таким образом, значения искомым матричных элементов функции Грина получают в результате вычисления двойного интеграла

$$\begin{aligned} \left[\underline{\mathcal{G}}^{(+)} \right]_{\mathfrak{N}, \mathfrak{N}'} = & \frac{e^{2i\varphi}}{(2\pi i)^2} \frac{1}{\mu_{23} \mu_{13}} \iint_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 G_{n_1 m_1; n'_1 m'_1}^{(+)} \left(t_{23}; \frac{k_{23}^2}{2} + E_1 e^{i\varphi} \right) \times \\ & \times G_{n_2 m_2; n'_2 m'_2}^{(+)} \left(t_{13}; \frac{k_{13}^2}{2} + E_2 e^{i\varphi} \right) G_{n_3 m_3; n'_3 m'_3}^{(+)}(t_{12}; \mathcal{E}_3), \quad (3.80) \end{aligned}$$

где

$$\mathcal{E}_3 = \frac{k_{12}^2}{2} - \left(\frac{\mu_{12}}{\mu_{23}} E_1 + \frac{\mu_{12}}{\mu_{13}} E_2 \right) e^{i\varphi}. \quad (3.81)$$

При этом подразумевается, что $|\arg(\mathcal{E}_3)| < \pi$.

3.5. Обсуждение результатов разд. 3. Полученное представление в штурмовском базисе резольвенты асимптотического трехчастичного волнового оператора используется в дискретном аналоге (3.29) уравнения ЛШ (3.24) относительно волновой функции состояния непрерывного спектра системы трех асимптотически свободных заряженных частиц. Заметим, что неоднородность Ψ_{6C} в (3.24) в общем случае записывается в виде произведения

$$\Psi_{6C} = \prod_{j=1}^3 u(\xi_j) v(\eta_j). \quad (3.82)$$

Таким образом, неоднородность $\underline{a}^{(0)}$ в уравнении (3.29) выражается через коэффициенты разложения решений u, v (3.33), (3.34) по базисным функциям (3.27) [134]:

$$u(\xi) = \frac{2\sqrt{2b}}{2b - i(\gamma - k)} \left(\frac{2b - i(\gamma - k)}{2b + i(\gamma + k)} \right)^{i\tau + (1/2)} \sum_{n=0}^{\infty} \theta^n p_n(\tau; \zeta) \psi_n(\xi), \quad (3.83)$$

$$v(\eta) = \frac{2\sqrt{2b}}{2b - i(\gamma + k)} \left(\frac{2b - i(\gamma + k)}{2b + i(\gamma - k)} \right)^{i(\tau_0 - \tau) + (1/2)} \times \\ \times \sum_{n=0}^{\infty} \lambda^{-n} p_n(\tau_0 - \tau; \zeta) \psi_n(\eta), \quad (3.84)$$

где

$$p_n(\tau; \zeta) = \frac{(-1)^n \Gamma(n + 1/2 - i\tau)}{n! \Gamma(1/2 - i\tau)} \times \\ \times {}_2F_1 \left(-n, \frac{1}{2} + i\tau; -n + \frac{1}{2} + i\tau; \zeta \right). \quad (3.85)$$

Общее выражение для недиагональной части оператора кинетической энергии D_1 , которое рассматривается как возмущение, приведено в [117]. В частном случае системы, состоящей из двух электронов, движущихся в кулоновском поле ядра, масса которого m_3 полагается бесконечной, и, следовательно, $\mathbf{k}_{12} = (1/2)(\mathbf{k}_{13} - \mathbf{k}_{23})$, $\mu_{13} = \mu_{23} = 1$, $\mu_{12} = 1/2$, оператор

возмущения (3.22) принимает вид

$$\begin{aligned} \widehat{V} = & \frac{1}{2}(\xi_1 + \eta_1)(\xi_2 + \eta_2)(\xi_3 + \eta_3) \times \\ & \times \left\{ (\hat{\mathbf{r}}_{23} + \hat{\mathbf{k}}_{23}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} + \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \xi_3} + (\hat{\mathbf{r}}_{23} + \hat{\mathbf{k}}_{23}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} - \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \xi_1 \partial \eta_3} + \right. \\ & + (\hat{\mathbf{r}}_{23} - \hat{\mathbf{k}}_{23}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} + \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \eta_1 \partial \xi_3} + (\hat{\mathbf{r}}_{23} - \hat{\mathbf{k}}_{23}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} - \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \eta_1 \partial \eta_3} - \\ & - (\hat{\mathbf{r}}_{13} + \hat{\mathbf{k}}_{13}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} + \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \xi_2 \partial \xi_3} - (\hat{\mathbf{r}}_{13} + \hat{\mathbf{k}}_{13}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} - \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \xi_2 \partial \eta_3} - \\ & \left. - (\hat{\mathbf{r}}_{13} - \hat{\mathbf{k}}_{13}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} + \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \eta_2 \partial \xi_3} - (\hat{\mathbf{r}}_{13} - \hat{\mathbf{k}}_{13}) \cdot (\hat{\mathbf{r}}_{12} - \hat{\mathbf{k}}_{12}) \frac{\partial^2}{\partial \eta_2 \partial \eta_3} \right\}. \quad (3.86) \end{aligned}$$

Заметим, что в выражение (3.86) для \widehat{V} входят скалярные произведения $\hat{\mathbf{r}}_{ij} \cdot \hat{\mathbf{k}}_{ls}$, где $\{ij\} \neq \{ls\}$. Таким образом, в общем случае для вычисления матрицы \underline{V} требуется выполнить обращение преобразований (3.6), что является неоднозначной процедурой. Заметим также, что вычисление элементов матрицы оператора \widehat{V} предполагает интегрирование по $\xi_j, \eta_j, j = 1, 2, 3$. При этом переменные ξ_j, η_j считаются независимыми и, следовательно, величины $1/2(\xi_1 + \eta_1), 1/2(\xi_2 + \eta_2), 1/2(\xi_3 + \eta_3)$, которые определяют соответственно r_{23}, r_{13}, r_{12} , принимают произвольные (положительные) значения. Таким образом, в ходе интегрирования происходит нарушение правила треугольника $|r_{13} - r_{23}| \leq r_{12} \leq r_{13} + r_{23}$. Преобразование, обратное (3.6), в общем случае дает комплексные декартовы координаты, и, следовательно, процедура вычисления матрицы \underline{V} должна включать правило «аналитического продолжения» величин r_{23}, r_{13}, r_{12} в комплексную область. В случае, когда импульсы $\mathbf{k}_{13}, \mathbf{k}_{23}, \mathbf{k}_{12}$ параллельны, обращение выражений (3.6) относительно декартовых координат не вызывает затруднений, и элементы матрицы \underline{V} вычисляются аналитически. Таким образом, этот простой пример может служить хорошим тестом эффективности предлагаемой численной схемы. Критическим пунктом здесь является вопрос сходимости процедуры в зависимости от числа базисных функций (3.25), используемых для описания возмущения (3.86).

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В представленном обзоре была рассмотрена одна из разновидностей метода сильной связи каналов, а именно метод J -матрицы, в применении к расчетам процессов с тремя заряженными частицами. Метод основан на разложении трехчастичной кулоновской волновой функции в ряд по полному

базису радиальных лаггеровских квадратично-интегрируемых функций и шаровых сферических функций, что в целом ряде случаев позволяет свести дифференциальное уравнение Шредингера, или аналогичное ему интегральное уравнение Липпмана–Швингера, к бесконечной системе алгебраических уравнений для определения коэффициентов разложения. Эту систему приходится ограничивать.

Показано, что такая схема в применении к кулоновским задачам таит в себе целый ряд «подводных камней». Для волновой функции с одной асимптотически свободной заряженной частицей в континууме удается (не математически строго, путем численного эксперимента) продемонстрировать сходимость и устойчивость результатов численного решения уравнения ЛШ при увеличении размера базиса.

Однако это не так в случае асимптотически свободного движения трех заряженных частиц. Уже в изначальной формулировке уравнения ЛШ закладывается не адекватная полной задаче асимптотика свободного члена, что ведет к расходимости его интегрального члена. Замена бесконечной системы алгебраических уравнений обрезанной не обеспечивает сходимости и устойчивости результатов. В связи с этим решение уравнения ЛШ с привлечением схемы псевдосостояний еще более запутывает ситуацию с точки зрения математической строгости.

Решение вопроса достигается переформулировкой проблемы в параболических координатах. Здесь удается в свободном члене интегрального уравнения ЛШ учесть основную кулоновскую асимптотику всей задачи и добиться компактности ядра интегрального члена. При этом удается построить удобный базис квадратично-интегрируемых функций, сохраняющий удобный трехдиагональный вид функции Грина и позволяющий провести контурное интегрирование в интегральном члене. К сожалению, сам короткодействующий потенциал получается чрезвычайно громоздким. Определенные упрощения его вида допускаются только в определенных кинематических областях изменения импульсов электронов.

Авторы выражают благодарность Б. Пиро (B. Piraux), В. Шаблову, В. Серову, В. Дербову, А. Гусеву, С. Яковлеву, К. Кузакову, К. Даль Каппелло (C. Dal Carrello) за полезные обсуждения и высказанные замечания. Работа выполнена при поддержке РФФИ (грант № 11-01-00523).

ПРИЛОЖЕНИЕ

Парциальный парный кулоновский гамильтониан

$$h^l = -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} - \frac{Z}{r} \quad (\text{П.1})$$

имеет следующие собственные функции связанных состояний ($Z > 0$):

$$\varphi_l^{(j)}(r) = (2\kappa_j r)^{l+1} e^{-\kappa_j r} \frac{\sqrt{Z(j+1)_{2l+1}}}{(j+l+1)(2l+1)!} {}_1F_1(-j; 2l+2; 2\kappa_j r), \quad (\text{П.2})$$

и состояний непрерывного спектра

$$\begin{aligned} \varphi_l(k, r) = \frac{1}{2} (2kr)^{l+1} e^{-\pi t/2} e^{ikr} \frac{|\Gamma(l+1+it)|}{(2l+1)!} \times \\ \times {}_1F_1(l+1+it; 2l+2; -2ikr), \quad (\text{П.3}) \end{aligned}$$

где $\kappa_j = Z/(j+l+1)$ и $t = -Z/k$. Функции (П.2) и (П.3) могут быть разложены по лагеровским базисным функциям (1.4), в которых, однако, для записи базиса (2.7) выбран глобальный параметр базиса u вместо парциального ξ_l . Соответствующие коэффициенты разложения $\mathcal{S}_{nl}^{(j)}$ и $\mathcal{S}_{nl}(k)$ задаются выражениями [24, 85]

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{nl}^{(j)} = (-1)^n \left(\frac{4u\kappa_j}{(u+\kappa_j)^2} \right)^{l+1} \left(\frac{u-\kappa_j}{u+\kappa_j} \right)^{n+j} \frac{\sqrt{Z(j+1)_{2l+1}(n+1)_{2l+1}}}{(j+l+1)(2l+1)!} \times \\ \times {}_2F_1 \left(-n, -j; 2l+2; 1 - \left(\frac{u+\kappa_j}{u-\kappa_j} \right)^2 \right) \quad (\text{П.4}) \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{nl}(k) = \frac{1}{2} \sqrt{(n+1)_{2l+1}} (2 \sin \zeta)^{l+1} e^{-\pi t/2} \xi^{-it} \frac{|\Gamma(l+1+it)|}{(2l+1)!} \times \\ \times (-\xi)^n {}_2F_1(-n, l+1+it; 2l+2; 1-\xi^{-2}), \quad (\text{П.5}) \end{aligned}$$

где обозначено $\xi = e^{i\zeta} = (iu-k)/(iu+k)$.

Функции $\mathcal{S}_{nl}^{(j)}$, $\mathcal{S}_{nl}(k)$ являются «регулярными» решениями [24] трехчленного рекуррентного соотношения, которое является дискретным аналогом уравнения Шредингера

$$\mathcal{J}_{n,n-1}^l(k)d_{n-1} + \mathcal{J}_{n,n}^l(k)d_n + \mathcal{J}_{n,n+1}^l(k)d_{n+1} = 0 \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (\text{П.6})$$

с начальным условием

$$\mathcal{J}_{0,0}^l(k)d_0 + \mathcal{J}_{0,1}^l(k)d_1 = 0. \quad (\text{П.7})$$

В (П.6) $\mathcal{J}_{n,n'}^l(k)$ — элементы симметричной трехдиагональной матрицы оператора $(h^l - k^2/2)$ (т. е. J -матрицы), рассчитанной в базисе ϕ_n^l :

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{nn}^l(k) &= \frac{u^2 - k^2}{2u}(n + l + 1) - Z, \\ \mathcal{J}_{nn-1}^l(k) &= \frac{u^2 + k^2}{4u} \sqrt{n(n + 2l + 1)}, \\ \mathcal{J}_{nn+1}^l(k) &= \frac{u^2 + k^2}{4u} \sqrt{(n + 1)(n + 2l + 2)}. \end{aligned} \quad (\text{П.8})$$

Коэффициенты $\mathcal{S}_{nl}^{(j)}$, $\mathcal{S}_{nl}(k)$ удовлетворяют условиям нормировки

$$\begin{aligned} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \mathcal{S}_{nl}^{(j)} Q_{n,n'}^l \mathcal{S}_{n'l}^{(j')} &= \delta_{j,j'}, \\ \frac{2}{\pi} \sum_{n,n'=0}^{\infty} \mathcal{S}_{nl}(k) Q_{n,n'}^l \mathcal{S}_{n'l}(k') &= \delta(k - k'), \end{aligned} \quad (\text{П.9})$$

где $Q_{nn'}^l$ — элементы трехдиагональной матрицы перекрытия базисных функций:

$$Q_{nn'}^l = \int_0^{\infty} \phi_n^l(r) \phi_{n'}^l(r) dr, \quad (\text{П.10})$$

$$\begin{aligned} Q_{nn-1}^l &= -\frac{1}{2u} \sqrt{n(n + 2l + 1)}, \\ Q_{nn+1}^l &= -\frac{1}{2u} \sqrt{(n + 1)(n + 2l + 2)}, \\ Q_{nn}^l &= \frac{1}{u}(n + l + 1). \end{aligned} \quad (\text{П.11})$$

Соответствующее условие полноты состояний дискретного и непрерывного спектров имеет вид

$$\sum_{n''} \left[\frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} dk Q_{n,n''}^l \mathcal{S}_{n''l}(k) \mathcal{S}_{n'l}(k) + \sum_{j=0}^{\infty} Q_{n,n''}^l \mathcal{S}_{n''l}^{(j)} \mathcal{S}_{n'l}^{(j)} \right] = \delta_{nn'}. \quad (\text{П.12})$$

Второе решение трехчленного рекуррентного соотношения (П.6) может быть представлено в виде [24, 85]

$$C_{nl}^{(\pm)}(k) = -\sqrt{n!(n+2l+1)!} \frac{e^{\pi t/2} \xi^{it}}{(2 \sin \zeta)^l} \frac{\Gamma(l+1 \pm it)}{|\Gamma(l+1 \pm it)|} \times \\ \times \frac{(-\xi)^{\pm(n+1)}}{\Gamma(n+l+2 \pm it)} {}_2F_1(-l \pm it, n+1; n+l+2 \pm it; \xi^{\pm 2}). \quad (\text{П.13})$$

Функция $C_{nl}^{(+)}(k)$ ($C_{nl}^{(-)}(k)$) определена в верхней $\text{Im}(k) > 0$ (нижней $\text{Im}(k) < 0$) полуплоскости комплексной плоскости k . Аналитическое продолжение в нижнюю (верхнюю) полуплоскость k может быть выполнено с помощью следующего соотношения [85]:

$$C_{nl}^{(+)}(k) = C_{nl}^{(-)}(k) + 2i\mathcal{S}_{nl}(k) \quad (C_{nl}^{(-)}(k) = C_{nl}^{(+)}(k) - 2i\mathcal{S}_{nl}(k)). \quad (\text{П.14})$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жигунов В. П., Захарьев Б. Н. Методы сильной связи каналов в квантовой теории рассеяния. М.: Атомиздат, 1974. 223 с.
2. Петеркоп Р. К. Теория ионизации атомов электронным ударом. Рига: Зинатне, 1975. 191 с.;
Peterkop R. K. Theory of Ionization of Atoms. Colorado Associated Univ. Press, 1977.
3. Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985. 400 с.
4. Квицинский А. А. и др. Квантовая задача N тел в конфигурационном пространстве // ЭЧАЯ. 1986. Т. 17. С. 267–317.
5. Квицинский А. А., Кострыкин В. В., Меркурьев С. П. Квантовая теория рассеяния для систем трех частиц с фиксированным полным орбитальным моментом // ЭЧАЯ. 1990. Т. 21. С. 1301–1359.
6. Rotenberg M. Application of Sturmian Functions to the Schroedinger Three-Body Problem: Elastic $e^+ - \text{H}$ Scattering // Ann. Phys. 1962. V. 19. P. 262–278.
7. Rotenberg M. Theory and Application of Sturmian Functions // Adv. At. Mol. Phys. 1970. V. 6. P. 233–268.
8. Христенко С. В. Штурмовские разложения функций Грина для простейших систем // ТМФ. 1975. Т. 22. С. 31–45.
9. Yamani H. A., Reinhardt W. P. L^2 Discretization of the Continuum: Radial Kinetic Energy and Coulomb Hamiltonian // Phys. Rev. A. 1975. V. 11. P. 1144–1156.
10. Broad J. T. Gauss Quadrature Generated by Diagonalization of H in Finite L^2 Bases // Phys. Rev. A. 1978. V. 18. P. 1012–1027.

11. Reinhardt W. P. L^2 Discretization of Atomic and Molecular Electronic Continua: Moment, Quadrature and *J*-Matrix Techniques // *Comp. Phys. Commun.* 1979. V. 17. P. 1–21.
12. Broad J. T. Weyl's Theory in an L^2 -Basis Gauss Quadrature of the Spectral Density // *Phys. Rev. A.* 1982. V. 26. P. 3078–3092.
13. Kaufmann K., Baumeister W., Jungen M. Universal Gaussian Basis Sets for an Optimum Representation of Rydberg and Continuum Wavefunctions // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1989. V. 22. P. 2223–2240.
14. Hermann M. R., Langhoff P. W. Explicit Hilbert Space Representations of Schrödinger States: Definitions and Properties of Stieltjes–Tchebycheff Orbitals // *J. Math. Phys.* 1983. V. 24. P. 541–547.
15. Rescigno T. N., McCurdy C. W., McKoy V. Discrete Basis Set Approach to Nonspherical Scattering // *Chem. Phys. Lett.* 1974. V. 27. P. 401–404.
16. Rescigno T. N., McCurdy C. W., McKoy V. Discrete Basis Set Approach to Nonspherical Scattering. II // *Phys. Rev. A.* 1974. V. 10. P. 2240–2245.
17. Rescigno T. N., McCurdy C. W., McKoy V. Low-Energy e^- – H_2 Elastic Cross Sections using Discrete Basis Functions // *Phys. Rev. A.* 1975. V. 11. P. 825–829.
18. Fliflet A. W., McKoy V. Discrete-Basis-Set Method for Electron–Molecule Continuum Wave Functions // *Phys. Rev. A.* 1978. V. 18. P. 2107–2114.
19. Watson D. K. et al. Schwinger Variational Principle for Electron–Molecule Scattering: Application to Electron–Hydrogen Scattering // *Phys. Rev. A.* 1980. V. 21. P. 738–744.
20. McCurdy C. W., Rescigno T. N. Complex-Basis-Function Calculations of Resolvent Matrix Elements: Molecular Photoionization // *Phys. Rev. A.* 1980. V. 21. P. 1499–1505.
21. Зубарев А. Л. Вариационный принцип Швингера // ЭЧАЯ. 1978. Т. 9. С. 453–489.
22. Зубарев А. Л. Вариационный принцип Швингера в квантовой механике. М.: Энергоатомиздат, 1981. 145 с.
23. Heller E. J., Yamani H. A. New L^2 Approach to Quantum Scattering: Theory // *Phys. Rev. A.* 1974. V. 9. P. 1201–1208.
24. Yamani H. A., Fishman L. *J*-Matrix Method: Extension to Arbitrary Angular Momentum and to Coulomb Scattering // *J. Math. Phys.* 1975. V. 16. P. 410–420.
25. The *J*-Matrix Method: Developments and Applications / Eds. Alhaidari A. D. et al. Springer Science + Business Media B. V., 2008. 356 p.
26. Lane A. M., Thomas A. M. *R*-Matrix Theory of Nuclear Reactions // *Rev. Mod. Phys.* 1958. V. 30. P. 257–353.
27. Lane A. M., Robson D. Optimization of Nuclear Resonance Reaction Calculations // *Phys. Rev.* 1969. V. 178. P. 1715–1724.
28. Yamani H. A. The Equivalence of the Feshbah and *J*-Matrix Methods // *J. Math. Phys.* 1982. V. 23. P. 83–86.

29. *Feshbah H.* Unified Theory of Nuclear Reactions // *Ann. Phys.* 1958. V. 5. P. 357–390.
30. *Yamani H. A., Alhaidari A. D., Abdelmonem M. S.* *J*-Matrix Method of Scattering in Any L^2 Basis // *Phys. Rev. A.* 2001. V. 64. P. 042703–042711.
31. *Vachau H. et al.* Application of B-Splines in Atomic and Molecular Physics // *Rep. Prog. Phys.* 2001. V. 64. P. 1815–1942.
32. *Пупышев В. В.* Методы сплайн-функций в проблеме нескольких тел // *ЭЧАЯ.* 2004. Т. 35, вып. 2. С. 257–347.
33. *Gareev F. A., Gizzatkulov M. Ch., Révai J.* A New Method for Solving the Two-Center Problem with Realistic Potentials // *Nucl. Phys. A.* 1977. V. 286. P. 512–522.
34. *Truhlik E.* Lippmann–Schwinger Equation in the Harmonic-Oscillator Basis for the Trinucleon Bound-State Problem // *Nucl. Phys. A.* 1978. V. 296. P. 134–140.
35. *Gareev F. A. et al.* A New Method for Calculation of Eigenstates for a System of a Core and Two Valence Nucleons // *Phys. Scripta.* 1979. V. 19. P. 509–515.
36. *Gyarmati B., Kruppa A. T., Révai J.* A Rigorous Foundation of an Easy-to-Apply Approximation Method for Bound State Problems // *Nucl. Phys. A.* 1979. V. 326. P. 119–128.
37. *Gyarmati B. et al.* Single-Particle Resonant States in Deformed Potentials // *Nucl. Phys. A.* 1984. V. 417. P. 393–404.
38. *Kruppa A. T., Papp Z.* Resonant or Bound State Solution of the Schrödinger Equation in Deformed or Spherical Potential // *Comp. Phys. Commun.* 1985. V. 36. P. 59–78.
39. *Révai J., Sotona M., Žofka J.* Note on the Use of Harmonic-Oscillator Wavefunctions in Scattering Calculations // *J. Phys. G: Nucl. Part. Phys.* 1985. V. 11. P. 745–749.
40. *Pal K. F.* Orthogonality Condition Model for Bound and Resonant States with a Separable Expansion of the Potential // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1985. V. 18. P. 1665–1674.
41. *Филиппов Г. Ф., Лашко Ю. А.* Структура легких ядер с избытком нейтронов и ядерные реакции с их участием // *ЭЧАЯ.* 2005. Т. 36. С. 1373–1424.
42. *Papp Z.* Bound and Resonant States in Coulomb-Like Potentials // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1987. V. 20. P. 153–162.
43. *Papp Z.* Potential Separable Expansion Approach to Scattering on Coulomb-Like Potentials // *Phys. Rev. C.* 1988. V. 38. P. 2457–2460.
44. *Papp Z.* Use of Coulomb–Sturmian Functions in Calculating Scattering Quantities in Coulomb-Like Potentials // *Phys. Rev. A.* 1992. V. 46. P. 4437–4439.
45. *Papp Z.* Calculating Bound and Resonant States in Local and Nonlocal Coulomb-Like Potentials // *Comp. Phys. Commun.* 1992. V. 70. P. 426–434.
46. *Papp Z.* Calculating Scattering States in Local and Nonlocal Coulomb-Like Potentials // *Ibid.* P. 435–439.
47. *Darai J. et al.* Variational Separable Expansion Scheme for Two-Body Coulomb-Scattering Problems // *Phys. Rev. C.* 2001. V. 63. P. 057001–057003.

48. Papp Z., Plessas W. Coulomb–Sturmian Separable Expansion Approach: Three-Body Faddeev Calculations for Coulomb-Like Interactions // *Phys. Rev. C*. 1996. V. 54. P. 50–56.
49. Papp Z. *et al.* Resonant-State Solution of the Faddeev–Mercuriev Integral Equations for Three-Body Systems with Coulomb Potentials // *Phys. Rev. A*. 2002. V. 65. P. 032725–032729.
50. Papp Z. *et al.* Accumulation of Three-Body Resonances above Two-Body Thresholds // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 94. P. 143201–143204.
51. Papp Z., Mezei J. Zs. Efimov Resonances in Atomic Three-Body Systems // *Phys. Rev. A*. 2006. V. 73. P. 030701(R)–030703(R).
52. Papp Z. Three-Potential Formalism for the Three-Body Coulomb Scattering Problem // *Phys. Rev. C*. 1997. V. 55. P. 1080–1087.
53. Papp Z. *et al.* Three-Potential Formalism for the Three-Body Scattering Problem with Attractive Coulomb Interactions // *Phys. Rev. A*. 2001. V. 63. P. 062721–062731.
54. Konya B., Levai G., Papp Z. Continued Fraction Representation of the Coulomb Green’s Operator and Unified Description of Bound, Resonant and Scattering States // *Phys. Rev. C*. 2000. V. 61. P. 034302–034308.
55. Demir F., Hlousek Z. T., Papp Z. Coulomb–Sturmian Matrix Elements of the Coulomb Green’s Operator // *Phys. Rev. A*. 2006. V. 74. P. 014701–014704.
56. Yamani H. A. The *J*-Matrix Reproducing Kernel: Numerical Weights at the Harris Energy Eigenvalues // *J. Math. Phys.* 1984. V. 25. P. 317–322.
57. Heller E. J., Yamani H. A. *J*-Matrix Method: Application to *S*-Wave Electron–Hydrogen Scattering // *Phys. Rev. A*. 1974. V. 9. P. 1209–1214.
58. Broad J. T., Reinhardt W. P. *J*-Matrix Method: Multichannel Scattering and Photoionization // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1976. V. 9. P. 1491–1502.
59. Broad J. T., Reinhardt W. P. One- and Two-Electron Photoejection from H^- : A Multichannel *J*-Matrix Calculation // *Phys. Rev. A*. 1976. V. 14. P. 2159–2173.
60. Bray I., Stelbovics A. T. Explicit Demonstration of the Convergence of the Close-Coupling Method for a Coulomb Three-Body Problem // *Phys. Rev. Lett.* 1992. V. 69. P. 53–56.
61. Yamani H. A., Abdelmonem M. S. A Simple Method to Extract Resonance Information from the Harris Energy Eigenvalues and Eigenvectors // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1993. V. 26. P. L1183–L1187.
62. Yamani H. A., Abdelmonem M. S. Resonance Information from the Analytically Continued *S*-Matrix // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1994. V. 27. P. 5345–5355.
63. Yamani H. A., Abdelmonem M. S. Characterization of Resonances Using an Exact Model *S*-Matrix // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1995. V. 28. P. 2709–2715.
64. Yamani H. A., Abdelmonem M. S. The Complex-Scaling Method Using a Complete L^2 -Basis // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1996. V. 29. P. 6991–6998.

65. *Nasser I. et al.* The Rotating Morse Potential Model for Diatomic Molecules in the Tridiagonal J -Matrix Representation: I. Bound States // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2007. V. 40. P. 4245–4257.
66. *Nasser I. et al.* The Rotating Morse Potential Model for Diatomic Molecules in the J -Matrix Representation: II. The S -Matrix Approach // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2008. V. 41. P. 215001–215006.
67. *Стотланд Л. Я., Смирнов Ю. Ф., Широков А. М.* Полюса S -матрицы в дискретном представлении теории рассеяния // *Изв. АН СССР. Сер. физ.* 1990. Т. 54. С. 897–906.
68. *Heller E. J.* Theory of J -Matrix Green's Functions with Applications to Atomic Polarizability and Phase-Shift Error Bounds // *Phys. Rev. A.* 1975. V. 12. P. 1222–1231.
69. *Silvestre-Brac B., Ginoux C., Ayant Y.* Free Green's Function in a Harmonic Oscillator Basis // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1989. V. 22. P. 2288–2290.
70. *Yamani H. A., Abdelmonem M. S.* Multi-Channel Green's Functions in Complete L^2 Bases // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1997. V. 30. P. 1633–1650.
71. *Laulan S., Bachau H.* One- and Two-Photon Double Ionization of Beryllium with Ultrashort Ultraviolet Laser Fields // *Phys. Rev. A.* 2004. V. 69. P. 033408–033414.
72. *Foutouo E. et al.* Theory of Multiphoton Single and Double Ionization of Two-Electron Atomic Systems Driven by Short-Wavelength Electric Fields: An *ab initio* Treatment // *Phys. Rev. A.* 2006. V. 74. P. 063409–063430.
73. *Kadyrov A. S. et al.* Surface-Integral Formulation of Scattering Theory // *Ann. Phys.* 2009. V. 324. P. 1516–1546.
74. *Shablov V. L., Bilyk V. A., Popov Yu. V.* Status of the Convergent Close-Coupling Method within the Framework of the Rigorous Coulomb Scattering Theory // *Phys. Rev. A.* 2002. V. 65. P. 042719–042722.
75. *Bray I. et al.* Electrons and Photons Colliding with Atoms: Development and Application of the Convergent Close-Coupling Method // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 2002. V. 35. P. R117–R146.
76. *Lahmat-Bennani A. et al.* Origin of Dips and Peaks in the Absolute Fully Resolved Cross Sections for the Electron–Impact Double Ionization of He // *Phys. Rev. A.* 1999. V. 59. P. 3548–3555.
77. *Кныр В. А., Насыров В. В., Попов Ю. В.* Метод J -матрицы в применении к описанию (e, Ze)-реакции на атоме гелия // *ЖЭТФ.* 2001. Т. 119. С. 906–912.
78. *Brauner M., Briggs J. S., Klar H.* Triply-Differential Cross Sections for Ionization of Hydrogen Atoms by Electrons and Positrons // *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* 1989. V. 22. P. 2265–2287.
79. *Кныр В. А., Стотланд Л. Я.* Проблема трех тел и метод J -матрицы // *ЯФ.* 1992. Т. 55. С. 2908–2914.
80. *Кныр В. А., Стотланд Л. Я.* О возможности решения задачи трех тел методом J -матрицы // *ЯФ.* 1996. Т. 59. С. 607–615.

81. Зайцев С. А., Кныр В. А., Попов Ю. В. Решение уравнений Фаддеева–Меркурьева в *J*-матричном подходе: применение к кулоновским задачам // ЯФ. 2006. Т. 69. С. 276–283.
82. Зайцев С. А., Кныр В. А., Попов Ю. В. Описание непрерывного спектра трехчастичной кулоновской системы в *J*-матричном подходе // ЯФ. 2007. Т. 70. С. 706–713.
83. Zaytsev S. A. et al. Application of the *J*-Matrix Method to Faddeev–Mercuriev Equations for $(e, 2e)$ Reactions: Beyond Pseudostates // Phys. Rev. A. 2007. V. 76. P. 022718–022728.
84. Zaytsev S. A. et al. A New Theoretical Approach for $(e, 2e)$ and $(e, 3e)$ Processes // J. Phys: Conf. Ser. 2008. V. 141. P. 012008–012013.
85. Broad J. T. Calculation of Two-Photon Processes in Hydrogen with an L^2 Basis // Phys. Rev. A. 1985. V. 31. P. 1494–1514.
86. Shakeshaft R. Integral Representation of the Coulomb Green Function Derived from the Sturmian Expansion // Phys. Rev. A. 2004. V. 70. P. 042704–042712.
87. Зайцев С. А. Дис. ... д-ра физ.-мат. наук. Тихоокеанск. гос. ун-т. Хабаровск, 2009.
88. Bray I., Stelbovics A. T. Convergent Close-Coupling Calculations of Electron–Hydrogen Scattering // Phys. Rev. A. 1992. V. 46. P. 6995–7011.
89. Bray I., Fursa D. V. Calculation of Ionization within the Close-Coupling Formalism // Phys. Rev. A. 1996. V. 54. P. 2991–3004.
90. Bray I. Close-Coupling Approach to Coulomb Three-Body Problems // Phys. Rev. Lett. 2002. V. 89. P. 273201–273204.
91. Bray I. Convergent Close-Coupling Method for the Calculation of Electron Scattering on Hydrogen Target // Phys. Rev. A. 1994. V. 49. P. 1066–1082.
92. Шаблов В. Л. и др. Борновский ряд в теории ионизации атома электронным ударом // ЭЧАЯ. 2010. Т. 41. С. 607–650.
93. Bray I., Stelbovics A. T. Comment on «Status of the Convergent Close-Coupling Method within the Framework of the Rigorous Coulomb Scattering Theory» // Phys. Rev. A. 2002. V. 66. P. 036701–036702.
94. Ehrhardt H. et al. Differential Cross Sections of Direct Single Electron Impact Ionization // Z. Phys. D. 1986. V. 1. P. 3–32.
95. Dupré C. et al. $(e, 2e)$ Triple Differential Cross Sections for the Simultaneous Ionization and Excitation of Helium // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. V. 25. P. 259–276.
96. Kheifets A. S. et al. Theoretical Triple Differential Cross Section of the Helium Atom Ionization with Excitation to the $n = 2$ Ion State // Phys. Rev. A. 1994. V. 50. P. 4700–4706.
97. Kheifets A. et al. A Comparative Experimental and Theoretical Investigation of the Electron–Impact Double Ionization of He in the keV Regime // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1999. V. 32. P. 5047–5065.

98. *Berakdar J.* Incremental Approach to Strongly Correlated Many-Body Finite Systems // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 4036–4039.
99. *Belkic Dz.* A Quantum Theory of Ionisation in Fast Collisions between Ions and Atomic Systems // *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 1978. V. 11. P. 3529–3552.
100. *Garibotti C. R., Miraglia J. E.* Ionization and Electron Capture to the Continuum in the H^+ -Hydrogen-Atom Collision // *Phys. Rev. A.* 1980. V. 21. P. 572–580.
101. *Jones S., Madison D. H.* Role of the Ground State in Electron–Atom Double Ionization // *Phys. Rev. Lett.* 2003. V. 91. P. 073201–073204.
102. *Ancarani L. U., Montagnese T., Dal Cappello C.* Role of the Helium Ground State in $(e, 3e)$ Processes // *Phys. Rev. A.* 2004. V. 70. P. 012711–012720.
103. *Chuluunbaatar O. et al.* Role of the Cusp Conditions in Electron–Helium Double Ionization // *Phys. Rev. A.* 2006. V. 74. P. 014703–014706.
104. *Ancarani L. U., Gasaneo G.* Double-Bound Equivalent of the Three-Body Coulomb Double-Continuum Wave Function // *Phys. Rev. A.* 2007. V. 75. P. 032706–032718.
105. *Gasaneo G., Ancarani L. U.* Use of Double-Bound Three-Body Coulomb Distorted-Wave-Like Basis Set for Two-Electron Wave Function // *Phys. Rev. A.* 2008. V. 77. P. 012705–012717.
106. *Ancarani L. U. et al.* Interplay of Initial and Final States for $(e, 3e)$ and $(\gamma, 2e)$ Processes on Helium // *Phys. Rev. A.* 2008. V. 77. P. 062712–062723.
107. *Dollard J. D.* Asymptotic Convergence and the Coulomb Interaction // *J. Math. Phys.* 1964. V. 5. P. 729–738.
108. *Merkuriev S. P.* On the Three-Body Coulomb Scattering Problem // *Ann. Phys.* 1980. V. 130. P. 395–426.
109. *Glöckle W. et al.* Exact Three-Dimensional Wave Function and the On-Shell t Matrix for the Sharply Cut-Off Coulomb Potential: Failure of the Standard Renormalization Factor // *Phys. Rev. C.* 2009. V. 79. P. 044003–044013.
110. *Kouzakov K. A., Popov Yu. V., Shablov V. L.* Comment on «Exact Three-Dimensional Wave Function and the On-Shell t Matrix for the Sharply Cut-Off Coulomb Potential: Failure of the Standard Renormalization Factor» // *Phys. Rev. C.* 2010. V. 81. P. 019801–019802.
111. *Deltuva A., Fonseca A. C., Sauer P. U.* Comment on «Exact Three-Dimensional Wave Function and the On-Shell t Matrix for the Sharply Cut-Off Coulomb Potential: Failure of the Standard Renormalization Factor» // *Ibid.* P. 019802–019803.
112. *Yakovlev S. L. et al.* The Impact of Sharp Screening on the Coulomb Scattering Problem in Three Dimensions // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2010. V. 43. P. 245302–245312.
113. *Taylor J. R.* A New Rigorous Approach to Coulomb Scattering // *Nuovo Cim. B.* 1974. V. 23. P. 313–334.
114. *Semon M. D., Taylor J. R.* Scattering by Potentials with Coulomb Tails // *Nuovo Cim. A.* 1975. V. 26. P. 48–58.

115. Яковлев С.Л., Панин З. Кулоновская трехчастичная задача рассеяния в представлении дискретного базиса в гильбертовом пространстве // ТМФ. 2010. Т. 163. С. 314–327.
116. Ngoko Djiokap J. M. et al. Electron-Impact Ionization-Excitation of Helium in the Quasi-Photon Regime // Phys. Rev. A. 2010. V. 81. P. 042712–042719.
117. Klar H. Asymptotic Separability of Three-Body Continuum Wave Functions for Coulomb Systems // Z. Phys. D: At. Mol. Clusters. 1990. V. 16. P. 231–236.
118. Teng Zhong-jian, Shakeshaft R. Double Ionization of Helium by a Single High-Energy Photon // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. R3487–R3490.
119. Kornberg M. A., Miraglia J. E. Double Photionization of Helium: Use of a Correlated Two-Electron Continuum Wave Function // Ibid. V. 48. P. 3714–3719.
120. Crothers D. S. F., McCann J. F. Ionization of Atoms by Ion Impact // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1983. V. 16. P. 3229–3242.
121. Jetzke S., Zeremba J., Faisal F. H. M. Electron Impact Ionization of Atomic Hydrogen // Z. Phys. D: At. Mol. Clusters. 1989. V. 11. P. 63–69.
122. Jetzke S., Faisal F. H. M. Coulomb Correlations in Electron and Positron Impact Ionization of Hydrogen at Intermediate and Higher Energies // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1992. V. 25. P. 1543–1558.
123. Berakdar J., Briggs J. S. Three-Body Coulomb Continuum Problem // Phys. Rev. Lett. 1994. V. 72. P. 3799–3802.
124. Berakdar J., Briggs J. S. Interference Effects in $(e, 2e)$ -Differential Cross Sections in Doubly Symmetric Geometry // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1994. V. 27. P. 4271–4280.
125. Berakdar J. Approximate Analytic Solution of the Quantum-Mechanical Three-Body Coulomb Continuum Problem // Phys. Rev. A. 1996. V. 53. P. 2314–2326.
126. Alt E. O., Mukhamedzhanov A. M. Asymptotic Solution of the Schrödinger Equation for Three Charged Particles // Phys. Rev. A. 1993. V. 47. P. 2004–2022.
127. Mukhamedzhanov A. M., Kadyrov A. S., Pirlepesov F. Leading Asymptotic Terms of the Three-Body Coulomb Scattering Wave Function // Phys. Rev. A. 2006. V. 73. P. 0127013–0127023.
128. Berakdar J. Energy-Exchange Effects in Few-Particle Coulomb Scattering // Phys. Rev. Lett. 1997. V. 78. P. 2712–2715.
129. Gasaneo G. et al. Correlated Continuum Wave Functions for Three Particles with Coulomb Interactions // Phys. Rev. A. 1997. V. 55. P. 2809–2820.
130. Gasaneo G. et al. Multivariable Hypergeometric Solutions for Three Charged Particles // J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 1997. V. 30. P. L265–L271.
131. Macri P. et al. Approximate Analytical Solution for Two Electrons in the Continuum // Phys. Rev. A. 1997. V. 55. P. 3518–3525.
132. Gasaneo G., Colavecchia F. D., Garibotti C. R. Multivariable Hypergeometric Functions for Ion-Atom Collisions // Nucl. Instr. Meth. B. 1999. V. 154. P. 32–40.

133. *Zaytsev S.A.* One- and Two-Dimensional Coulomb Green's Function Matrices in Parabolic Sturmian Basis // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2008. V. 41. P. 265204–265215.
134. *Zaytsev S.A.* The Parabolic Sturmian-Function Basis Representation of the Six-Dimensional Coulomb Green's Function // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2009. V. 42. P. 015202–015217.
135. *Colavecchia F.D., Gasaneo G., Garibotti C.R.* Separable Wave Equation for Three Coulomb Interacting Particles // *Phys. Rev. A.* 1998. V. 57. P. 1018–1024.
136. *Бейтмен Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. М.: Наука, 1973. Т. 1. 296 с.
137. *Rosenberg L.* Variational Methods in Charged-Particle Collision Theory // *Phys. Rev. D.* 1973. V. 8. P. 1833–1843.
138. *Ojha P.C.* The Jacobi-Matrix Method in Parabolic Coordinates: Expansion of Coulomb Functions in Parabolic Sturmians // *J. Math. Phys.* 1987. V. 28. P. 392–396.
139. Справочник по специальным функциям / Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М.: Наука, 1979. 832 с.
140. *Ньютон Р.* Теория рассеяния волн и частиц. М.: Мир, 1969. 607 с.
141. *Hostler L.C.* Coulomb Green's Function in f -Dimensional Space // *J. Math. Phys.* 1970. V. 11. P. 2966–2970.
142. *Градиштейн И. С., Рыжик И. М.* Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Наука, 1971. 1108 с.
143. *Зон Б. А., Манаков Н. Л., Рапопорт Л. П.* Двухфотонные связанно-связанные переходы в кулоновском поле // *ЖЭТФ.* 1968. Т. 55. С. 924–930.
144. *Swainson R.A., Drake G.W.* A Unified Treatment of Non-Relativistic and Relativistic Hydrogen Atom II: Green Functions // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1991. V. 24. P. 95–120.
145. *Zaytsev S.A.* Representation of the Three-Body Coulomb Green's Function in Parabolic Coordinates: Paths of Integration // *J. Phys. A: Math. Theor.* 2010. V. 43. P. 385208–385225.
146. *Silenou Mengoue M. et al.* Electron-Impact Double Ionization of He by Applying the Jacobi Matrix Approach to the Faddeev–Mercuriev Equations // *Phys. Rev. A.* 2011. V. 83. P. 052708-1-11.