ФИЗИКА АТОМНОГО ЯДРА И ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

# Метод расчета матричных элементов трехчастичного гамильтониана на гауссовом базисе

В. Т. Ворончев[1, *]

[1] *Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Научно-исследовательский институт ядерной физики имени Д. В. Скобельцына Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2*

(Поступила в редакцию 05.12.2025; подписана в печать 15.12.2025)

Подробно изложен метод нахождения матричных элементов гамильтониана системы из трех частиц на многомерном гауссовом базисе для использования в задачах ядерной и атомной физики, а также ядерной астрофизики. Рассмотрены как центральные, так и нецентральные (спин-орбитальные и тензорные) взаимодействия между частицам. Показано, что разработанная методика позволяет свести вычисление матричных элементов к относительно простым аналитическим формулам, призванным обеспечить высокую точность численного расчета собственных значений гамильтониана.

PACS: 21.60.-n, 21.45.-v. УДК: 539.142, 539.1.01.
Ключевые слова: система трех частиц, гамильтониан, матричные элементы.

DOI: 10.55959/MSU0579-9392.81.2610201

## ВВЕДЕНИЕ

Знание сечений и скоростей реакций с легкими ядрами [1–3] играет определяющую роль в решении ряда фундаментальных задач физики и астрофизики, например в разработке истинной картины ядерного превращения вещества в горячих астрофизических объектах, таких как ранняя Вселенная [4, 5] или недра звезд [6, 7]. Использование надежных волновых функций легких ядер в расчетах сечений астрофизических реакций является необходимым условием для понимания механизмов ядерных процессов, контролирующих синтез элементов в таких средах. Известно, что многие легкие ядра могут быть описаны в рамках модели систем из 3 (или 4) частиц и поэтому неудивительно, что методы решения малочастичного уравнения Шредингера составляют важный раздел физики квантовых систем. Особую роль здесь играют подходы с использованием вариационных процедур.

Одним из таких подходов является предложенный в [8, 9] вариационный метод, основанный на разложении волновой функции системы в ряд по неминимальному неортогональному гауссовому базису. Это разложение является конечномерным аналогом генераторного преобразования (интегрального преобразования Гаусса–Лапласа) функции двух переменных, а сам базис представляет собой масштабное расширение многомерного осцилляторного базиса. Он является полным в том смысле, что широкий класс квадратично интегрируемых функций может быть разложен по такому базису [10, 11]. В работах [12–14], относящихся к атомной и молекулярной физике, были изучены свойства гауссова базиса и доказаны теоремы о его полноте. Благодаря большому количеству вариационных параметров (особенно нелинейных), данный базис является очень гибким и позволяет описать много типов корреляций, в частности короткодействующие и кластерные. Подобный вариационный подход был использован в НИИЯФ МГУ для выполнения большого цикла работ по изучению структуры и свойств ядер с $A = 6, 9$ в рамках трехчастичных моделей, а также для описания $3N$-систем (см., например, [15–21]).

Практическое удобство работы с гауссовым базисом заключается в возможности развития эффективных и относительно простых методик для расчета матричных элементов (МЭ) трехчастичного гамильтониана. Немаловажным обстоятельством здесь является то, что эти МЭ удается получить в аналитическом виде, удобном для последующих численных вычислений. Подробное изложение такой методики и является основной целью данной работы.

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

## 1. БАЗИСНЫЕ ФУНКЦИИ

Рассмотрим систему из трех частиц $(1 + 2 + 3)$ с массами $m_1$, $m_2$, $m_3$ и лабораторными координатами $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}_3$. Выделяя движение общего центра масс, будем описывать систему с помощью нормированных координат Якоби (см. рисунок)

$$\mathbf{x}_i = \tau_{jk}^{-1}(\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_k) = \tau_{jk}^{-1}\mathbf{r}_{jk}, \qquad (1)$$

$$\mathbf{y}_i = \tau_{jki}^{-1}\left(\frac{m_j\mathbf{r}_j + m_k\mathbf{r}_k}{m_j + m_k} - \mathbf{r}_i\right) = \tau_{jki}^{-1}\boldsymbol{\rho}_{(jk)i}. \qquad (2)$$

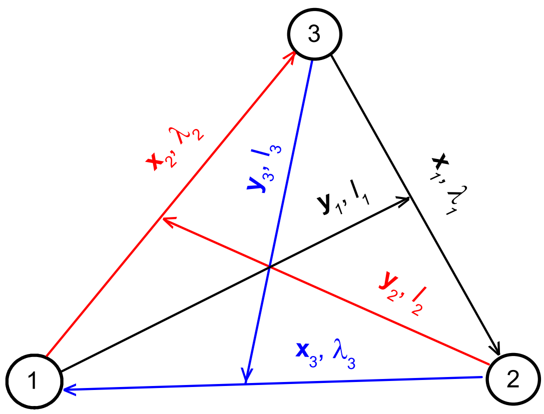


Рисунок. Наборы координат Якоби в трехчастичной системе

Здесь

$$\tau_{jk}^{-1} = \left\{ \frac{2m_j m_k}{\hbar^2(m_j + m_k)} \right\}^{1/2}, \tag{3}$$
$$\tau_{jki}^{-1} = \left\{ \frac{2m_i(m_j + m_k)}{\hbar^2(m_i + m_j + m_k)} \right\}^{1/2},$$

а индексы $(ijk)$ равны $(123)$ или их циклической перестановке. Вектор $\mathbf{x}_i$ направлен по прямой, соединяющей частицы $j$ и $k$, а вектор $\mathbf{y}_i$ описывает движение частицы $i$ относительно центра масс пары $(jk)$. Различные наборы координат Якоби

$$\hat{\mathrm{X}}_l = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_l \\ \mathbf{y}_l \end{pmatrix}, \quad (l = i, j, k) \tag{4}$$

связаны друг с другом линейным преобразованием $\hat{\mathrm{X}}_i = (ij)\hat{\mathrm{X}}_j$, где матрица преобразования равна

$$(ij) = \begin{pmatrix} -\xi_{ij} & -v_{ij} \\ v_{ij} & -\xi_{ij} \end{pmatrix}, \tag{5}$$

$$\xi_{ij} = \xi_{ji} = \left[ \frac{m_i m_j}{(m_i + m_k)(m_j + m_k)} \right]^{1/2}, \tag{6}$$

$$v_{ij} = -v_{ji} = \left[ \frac{m_k(m_i + m_j + m_k)}{(m_i + m_k)(m_j + m_k)} \right]^{1/2}. \tag{7}$$

Данные формулы понимаются в смысле циклической перестановки $(ijk)$. Якобиан такого преобразования $J(\hat{\mathrm{X}}_i \to \hat{\mathrm{X}}_j) = \xi_i^2 + v_i^2 = 1$.

Волновую функцию системы с полным угловым моментом $J$ и проекцией $M_J$ разложим в ряд

$$\Psi^{JM_J}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1; \boldsymbol{\xi}) = \\ = \sum_{LS} \sum_{\lambda l S_{23}} \varPhi_{\lambda l}(x_1, y_1) \mathcal{F}^{JM_J}_{\lambda l S_{23} LS}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1; \boldsymbol{\xi}), \tag{8}$$

где $L$ и $S$ — полные орбитальный и спиновый моменты, а угловые моменты $\lambda$ и $l$ (удовлетворяющие равенству $\boldsymbol{\lambda} + \mathbf{l} = \mathbf{L}$) сопряжены координатам $\mathrm{x}_1$ и $\mathrm{y}_1$ соответственно. Набор $\boldsymbol{\xi} = \{\boldsymbol{\xi}_k\}$ $(k = 1, 2, 3)$ дает совокупность внутренних координат $k$-го кластера. Спин-угловая функция $\mathcal{F}^{JM_J}_{\lambda l S_{23} LS}$ разделяется на угловую $\mathbb{Y}^{LM_L}_{\lambda l}$ и спиновую $\chi^{SM_S}_{S_{23}}$ части

$$\mathcal{F}^{JM_J}_{\lambda l S_{23} LS}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1; \boldsymbol{\xi}) = \\ = \sum_{M_L M_S} \langle L M_L S M_S | J M_J \rangle \mathbb{Y}^{LM_L}_{\lambda l}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1) \mathcal{X}^{SM_S}_{S_{23}}(\boldsymbol{\xi}), \tag{9}$$

где $\mathbb{Y}^{LM_L}_{\lambda l}$ является тензором обычного типа

$$\mathbb{Y}^{LM_L}_{\lambda l}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1) = \sum_{m\mu} \langle \lambda \mu l m | L M_L \rangle Y_{\lambda\mu}(\hat{\mathbf{x}}_1) Y_{lm}(\hat{\mathbf{y}}_1), \tag{10}$$

а спинор $\mathcal{X}^{SM_S}_{S_{23}}$ конкретизируется в соответствии со спиновым составом системы.

Радиальная часть $\varPhi_{\lambda l}$ в (8) разлагается в ряд по многомерным гауссовым функциям

$$\varPhi_{\lambda l}(x_1, y_1) = \sum_{j=1}^{N} C_{\lambda l j} N_j x_1^{\lambda} y_1^{l} \exp\{-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{lj} y_1^2\}, \tag{11}$$

где нормировочный коэффициент $N_j$ равен

$$N_j = 2^{\lambda + l + 3} \left( \frac{2\alpha_{\lambda j}^{\lambda + 3/2} \beta_{lj}^{l + 3/2}}{\pi [\lambda]!! [l]!!} \right)^{1/2}. \tag{12}$$

Здесь (и ниже в данной работе) введено обозначение $[k] \equiv (2k + 1)$. Базисные функции $\varphi_{\tilde{\gamma} j}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1; \boldsymbol{\xi})$ $(\tilde{\gamma} \equiv \gamma, L, S_{23}, S, J, M_J; \gamma \equiv \lambda, l)$, образующие базис нашего подпространства, определяются равенством

$$\varphi_{\tilde{\gamma} j}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1; \boldsymbol{\xi}) = \\ = N_j x_1^{\lambda} y_1^{l} \exp\{-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{lj} y_1^2\} \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma S_{23} LS}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1; \boldsymbol{\xi}). \tag{13}$$

Эти функции удовлетворяют условию ортонормированности

$$\langle \varphi_{\tilde{\gamma}' i} | \varphi_{\tilde{\gamma} j} \rangle = I^{\gamma' \gamma}_{ij} \delta_{\tilde{\gamma}' \tilde{\gamma}}, \tag{14}$$

где интеграл перекрывания $I^{\gamma' \gamma}_{ij}$ $(\tilde{\gamma}' \equiv \equiv \gamma', L', S'_{23}, S', J, M_J;\ \gamma' \equiv \lambda', l')$ равен

$$I^{\tilde{\gamma}' \tilde{\gamma}}_{ij} = 2^{\lambda + l + 3} \frac{P_{ij}(\lambda, \lambda, l, l)}{A^{\lambda\lambda}_{ij}(3) B^{ll}_{ij}(3)}. \tag{15}$$

В этом выражении

$$P_{ij}(\lambda', \lambda, l', l) = \alpha_{\lambda' i}^{\frac{2\lambda' + 3}{4}} \alpha_{\lambda j}^{\frac{2\lambda + 3}{4}} \beta_{l' i}^{\frac{2l' + 3}{4}} \beta_{lj}^{\frac{2l + 3}{4}}, \tag{16}$$

$$A^{\lambda' \lambda}_{ij}(t) = \left( \alpha^{\lambda' \lambda}_{ij} \right)^{\frac{\lambda' + \lambda + t}{2}}, \quad B^{l' l}_{ij}(t) = \left( \beta^{l' l}_{ij} \right)^{\frac{l' + l + t}{2}}, \tag{17}$$

$$\alpha_{ij}^{\lambda'\lambda} = \alpha_{\lambda' i} + \alpha_{\lambda j}, \qquad \beta_{ij}^{l'l} = \beta_{l' i} + \beta_{lj}. \tag{18}$$

Функция $\varphi_{\tilde{\gamma}j}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1; \boldsymbol{\xi})$ допускает алгебраическую перевязку от исходного набора 1 к другому набору $q = 2, 3$ координат Якоби в соответствии с формулами для преобразования гауссоиды $\exp\{-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{lj} y_1^2\}$ и шаровой функции $x_1^\lambda y_1^l \mathbb{Y}_{\lambda l}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1)$.

Поскольку координаты частиц в разных наборах связаны соотношением

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_1 &= (1q)_{11}\mathbf{x}_q + (1q)_{12}\mathbf{y}_q, \\ \mathbf{y}_1 &= (1q)_{21}\mathbf{x}_q + (1q)_{22}\mathbf{y}_q, \end{aligned} \tag{19}$$

получаем

$$\begin{aligned} &\exp\{-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{lj} y_1^2\} = \\ &\quad = \exp\{-\mu_{qj}^\gamma x_q^2 - \nu_{qj}^\gamma y_q^2 - \rho_{qj}^\gamma (\mathbf{x}_q \mathbf{y}_q)\}, \end{aligned} \tag{20}$$

$$\begin{aligned} \mu_{qj}^\gamma &= \alpha_{\lambda j}(1q)_{11}^2 + \beta_{lj}(1q)_{21}^2, \\ \nu_{qj}^\gamma &= \alpha_{\lambda j}(1q)_{12}^2 + \beta_{lj}(1q)_{22}^2, \end{aligned} \tag{21}$$

$$\rho_{qj}^\gamma = 2[\alpha_{\lambda j}(1q)_{11}(1q)_{12} + \beta_{lj}(1q)_{21}(1q)_{22}]. \tag{22}$$

Для преобразования шаровой функции $x_1^\lambda y_1^l \mathbb{Y}_{\lambda l}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1)$ воспользуемся равенством

$$|\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2|^l Y_{lm}(\widehat{\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2}) = \sum_{l_1 + l_2 = l} r_1^{l_1} r_2^{l_2} \left[\frac{4\pi [l]![l]}{[l_1]![l_2]!}\right]^{1/2} \times \sum_{m_1 m_2} (-1)^{l+m} Y_{l_1 m_1}(\hat{\mathbf{r}}_1) Y_{l_2 m_2}(\hat{\mathbf{r}}_2) \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}. \tag{23}$$

Пусть матрица $R$ осуществляет преобразование $\hat{\mathrm{X}}_1 = R\hat{\mathrm{X}}_R$. Используя (10) и (23), имеем

$$\begin{aligned} x_1^\lambda y_1^l \mathbb{Y}_{\lambda l}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1) = \sum_{m\mu} \sum_{\lambda_1 + \lambda_2 = \lambda} \sum_{l_1 + l_2 = l} \sum_{\mu_1 \mu_2} \sum_{m_1 m_2} x_R^{\lambda_1 + l_1} y_R^{\lambda_2 + l_2} R_{11}^{\lambda_1} R_{12}^{\lambda_2} R_{21}^{l_1} R_{22}^{l_2} \times \\ \times 4\pi \left(\frac{[\lambda]![l]![\lambda][l][L]}{[\lambda_1]![\lambda_2]![l_1]![l_2]!}\right)^{1/2} \begin{pmatrix} \lambda & l & L \\ \mu & m & -M_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \\ \mu_1 & \mu_2 & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \times \\ \times Y_{\lambda_1 \mu_1}(\hat{\mathbf{x}}_R) Y_{l_1 m_1}(\hat{\mathbf{x}}_R) Y_{\lambda_2 \mu_2}(\hat{\mathbf{y}}_R) Y_{l_2 m_2}(\hat{\mathbf{y}}_R). \end{aligned} \tag{24}$$

Поскольку для сферических функций справедливо равенство

$$Y_{j_1 m_1}(\Omega) Y_{j_2 m_2}(\Omega) = \sum_{jm} (-1)^m \left(\frac{[j_1][j_2][j]}{4\pi}\right)^{1/2} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} Y_{j-m}(\Omega), \tag{25}$$

выражение (24) принимает вид

$$x_1^\lambda y_1^l \mathbb{Y}_{\lambda l}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1) = \sum_{\lambda_1 + \lambda_2 = \lambda} \sum_{l_1 + l_2 = l} \sum_{j_1 j_2} \sum_{\mathcal{L} M_\mathcal{L}} x_R^{\lambda_1 + l_1} y_R^{\lambda_2 + l_2} A_{\lambda l j_1 j_2}^{L\mathcal{L}\lambda_1 l_1 R} \mathbb{Y}_{j_1 j_2}^{\mathcal{L} M_\mathcal{L}}(\hat{\mathbf{x}}_R, \hat{\mathbf{y}}_R). \tag{26}$$

Здесь

$$A_{\lambda l j_1 j_2}^{L\mathcal{L}\lambda_1 l_1 R} = (-1)^{j_1 - j_2} R_{11}^{\lambda_1} R_{12}^{\lambda_2} R_{21}^{l_1} R_{22}^{l_2} \begin{pmatrix} \lambda_1 & l_1 & j_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l_2 & j_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} K_{\lambda l j_1 j_2}^{\lambda_1 l_1} A(\Omega), \tag{27}$$

$$K_{\lambda l j_1 j_2}^{\lambda_1 l_1} = \left(\frac{[\lambda]![l]![\lambda][l][\lambda_1][l_1][\lambda_2][l_2][j_1][j_2]}{[\lambda_1]![l_1]![\lambda_2]![l_2]!}\right)^{1/2}, \tag{28}$$

$$\begin{aligned} A(\Omega) = ([L][\mathcal{L}])^{1/2} \sum_{\mu_1 \mu_2 \mu m_1 m_2 m M_1 M_2} (-1)^{M_\mathcal{L} - M_1 - M_2} \begin{pmatrix} \lambda & l & L \\ \mu & m & -M_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \\ \mu_1 & \mu_2 & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} \times \\ \times \begin{pmatrix} \lambda_1 & l_1 & j_1 \\ \mu_1 & m_1 & -M_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l_2 & j_2 \\ \mu_2 & m_2 & -M_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & \mathcal{L} \\ M_1 & M_2 & -M_\mathcal{L} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{29}$$

Свертывая $3j$-символы в $9j$-символы Вигнера [22] и используя свойство ортогональности, получаем

$$A(\Omega) = (-1)^{\lambda + l + j_1 + j_2} \begin{Bmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \\ l_1 & l_2 & l \\ j_1 & j_2 & L \end{Bmatrix} \delta_{L\mathcal{L}} \delta_{M_L M_\mathcal{L}}. \tag{30}$$

Собирая выражения (26)-(30) вместе и обозначая $L_1 \equiv \lambda_1, L_2 \equiv l_2$, приходим к следующей формуле для преобразования шаровой функции:

$$x_1^\lambda y_1^l \mathbb{Y}_{\lambda l}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1) = \sum_{L_1=0}^{\lambda} \sum_{L_2=0}^{l} \sum_{j_1 j_2} x_R^{L_1+L_2} y_R^{\lambda+l-(L_1+L_2)} A_{\lambda l j_1 j_2}^{LL_1L_2R} \mathbb{Y}_{j_1 j_2}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_R, \hat{\mathbf{y}}_R), \tag{31}$$

$$A_{\lambda l j_1 j_2}^{LL_1L_2R} = (-1)^{\lambda+l} R_{11}^{L_1} R_{12}^{\lambda-L_1} R_{21}^{L_2} R_{22}^{l-L_2} K_{\lambda l j_1 j_2}^{L_1L_2} \begin{pmatrix} L_1 & L_2 & j_1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda-L_1 & l-L_2 & j_2 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{Bmatrix} L_1 & \lambda-L_1 & \lambda \\ L_2 & l-L_2 & l \\ j_1 & j_2 & L \end{Bmatrix}, \tag{32}$$

$$K_{\lambda l j_1 j_2}^{L_1L_2} = \left( \frac{[\lambda]![l]![\lambda][l][L_1][L_2][\lambda-L_1][l-L_2][j_1][j_2]}{[L_1]![L_2]![\lambda-L_1]![l-L_2]!} \right)^{1/2}. \tag{33}$$

Выражение (32) можно свести к более удобному для численных расчетов виду

$$A_{\lambda l j_1 j_2}^{LL_1L_2R} = R_{\lambda l}^{L_1L_2} \left( \frac{[\lambda][l]\{\lambda l L\}}{\{L_1L_2j_1\}\{(\lambda-L_1)(l-L_2)j_2\}[L]} \right)^{1/2} \langle L_1 0 L_2 0 | j_1 0\rangle \times$$
$$\times \langle (\lambda-L_1)0(l-L_2)0|j_2 0\rangle \, \langle j_1(L_1-L_2) j_2(\lambda-L_1-l+L_2)|L(\lambda-l)\rangle, \tag{34}$$

$$\{l_1l_2l_3\} = (l_1+l_2+l_3+1)!(l_1+l_2-l_3)! \tag{35}$$

$$R_{\lambda l}^{L_1L_2} = R_{11}^{L_1} R_{12}^{\lambda-L_1} R_{21}^{L_2} R_{22}^{l-L_2}. \tag{36}$$

Таким образом, базисная функция $\varphi_{\tilde{\gamma}j}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1; \boldsymbol{\xi})$ допускает алгебраическую перевязку к другому набору координат Якоби в соответствии с формулами (20) и (31).

## 2. МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ГАМИЛЬТОНИАНА

### 2.1. Кинетическая энергия

Рассмотрим, какой вид приобретает оператор кинетической энергии системы в координатах Якоби. Произведем переход от лабораторных координат $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3)$ к координатам $(\mathbf{R}, \mathbf{r}_{jk}, \boldsymbol{\rho}_{(jk)i})$, где вектор $\mathbf{R} = (m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2 + m_3\mathbf{r}_3)/(m_1+m_2+m_3)$ дает положение центра масс системы. Тогда оператор кинетической энергии $\mathcal{H}_0$

$$\mathcal{H}_0 = -\sum_{i=1}^{3} \frac{\hbar^2}{2m_i} \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}\right)^2 \tag{37}$$

преобразуется к виду

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2M}\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}}\right)^2 - \frac{\hbar^2}{2\mu_{jk}}\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_{jk}}\right)^2 - $$
$$- \frac{\hbar^2}{2\mu_{(jk)i}}\left(\frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\rho}_{(jk)i}}\right)^2, \tag{38}$$

где $M = m_1+m_2+m_3$, а $\mu_{jk}$ и $\mu_{(jk)i}$ — приведенные массы пар $(jk)$ и $(i(jk))$ соответственно. Выделяя движение центра масс и учитывая (2), получаем

$$H_0 = -\left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}_i}\right)^2 - \left(\frac{\partial}{\partial \mathbf{y}_i}\right)^2 \equiv H_0(\mathbf{x}_i) + H_0(\mathbf{y}_i),$$
$$i = 1, 2, 3. \tag{39}$$

В сферической системе координат оператор $H_0$ для $i = 1$ приобретает вид

$$H_0(\mathbf{x}_1) = -\frac{1}{x_1^2}\frac{\partial}{\partial x_1}\left(x_1^2 \frac{\partial}{\partial x_1}\right) + \frac{\boldsymbol{\lambda}^2}{x_1^2}, \tag{40}$$

$$H_0(\mathbf{y}_1) = -\frac{1}{y_1^2}\frac{\partial}{\partial y_1}\left(y_1^2 \frac{\partial}{\partial y_1}\right) + \frac{\mathbf{l}^2}{y_1^2}. \tag{41}$$

Найдем теперь действие оператора $H_0(\mathbf{x}_1)$ на базисную функцию (13). Учитывая, что $\boldsymbol{\lambda}^2|\mathcal{F}_{\gamma S_{23}LS}^{JM_J}\rangle = \lambda(\lambda+1)\mathcal{F}_{\gamma S_{23}LS}^{JM_J}$, получаем

$$H_0(\mathbf{x}_1)|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = 2\alpha_{\lambda j} N_j y_1^l \exp\{-\alpha_{\lambda j}x_1^2 - \beta_{lj}y_1^2\} \times$$
$$\times \left[(2\lambda+3)x_1^\lambda - 2\alpha_{\lambda j}x_1^{\lambda+2}\right] \mathcal{F}_{\gamma S_{23}LS}^{JM_J} \tag{42}$$

или

$$H_0(\mathbf{x}_1)|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = 2\alpha_{\lambda j}(2\lambda+3-2\alpha_{\lambda j}x_1^2)\varphi_{\tilde{\gamma}j}. \tag{43}$$

Аналогично

$$H_0(\mathbf{y}_1)|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = 2\beta_{lj}(2l+3-2\beta_{lj}y_1^2)\varphi_{\tilde{\gamma}j}. \tag{44}$$

Следовательно, действие $H_0$ на базисную функцию $\varphi_{\tilde{\gamma}j}$ имеет вид

$$H_0|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = 2\left[(2\lambda+3)\alpha_{\lambda j} + (2l+3)\beta_{lj} - 2(\alpha_{\lambda j}^2 x_1^2 + \beta_{lj}^2 y_1^2)\right]\varphi_{\tilde{\gamma}j} \tag{45}$$

и, соответственно, МЭ для оператора кинетической энергии равен

$$H_{0ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|H_0|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = 2\left[(2\lambda+3)\alpha_{\lambda j} + (2l+3)\beta_{lj}\right]\langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle - 4\langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|(\alpha_{\lambda j}^2 x_1^2 + \beta_{lj}^2 y_1^2)\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle. \tag{46}$$

Используя формулу для интеграла перекрывания базисных функций $\langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle$ (14) и вычисляя второе слагаемое в выражении (46), получаем

$$H_{0ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = 2^{\lambda+l+4}\frac{P_{ij}(\lambda,\lambda,l,l)}{A_{ij}^{\lambda\lambda}(5)B_{ij}^{ll}(5)}\left[(2\lambda+3)\alpha_{\lambda i}\alpha_{\lambda j}\beta_{lij} + (2l+3)\beta_{li}\beta_{lj}\alpha_{\lambda ij}\right]\delta_{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}, \tag{47}$$

где $\alpha_{\lambda ij} = \alpha_{ij}^{\lambda\lambda}$ и $\beta_{lij} = \beta_{ij}^{ll}$, а остальные обозначения приведены в (16)–(18).

### 2.2. Центральные силы

В координатах Якоби центральные потенциалы парных взаимодействий частиц равны

$$V_{\text{central}} = V_1(\tau_{23}\mathbf{x}_1) + V_2(\tau_{31}\mathbf{x}_2) + V_3(\tau_{12}\mathbf{x}_3). \tag{48}$$

Рассмотрим потенциалы с четно-нечетным расщеплением взаимодействия вида

$$V_q(\mathbf{r}) = V_q^{(1)}(\mathbf{r}) + P_M(\mathbf{r})V_q^{(2)}(\mathbf{r}), \tag{49}$$

где $P_M(\mathbf{r})$ — оператор Майорана и $q$=1, 2, 3. Начнем с расчета МЭ для потенциала взаимодействия частиц 2 и 3 (см. рис. 1). Учитывая, что

$$P_M|\mathcal{F}_{\gamma S_{23}LS}^{JM_J}\rangle = (-1)^\lambda \mathcal{F}_{\gamma S_{23}LS}^{JM_J}, \tag{50}$$

получаем следующее выражение для МЭ $V_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}$ при $q=1$:

$$V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|V_1(\tau_{23}\mathbf{x}_1|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = 2^{2\lambda+l+5}\frac{P_{ij}(\lambda,\lambda,l,l)}{\sqrt{\pi}[\lambda]!!B_{ij}^{ll}(3)}\left[V_1^{(1)[2\lambda+2]}(\alpha_{\lambda ij}) + (-1)^\lambda V_1^{(2)[2\lambda+2]}(\alpha_{\lambda ij})\right]\delta_{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}, \tag{51}$$

где момент потенциала $V_1^{[n]}$

$$V^{[n]}(t) = \int_0^\infty x^n V(r) e^{-tx^2}\,dx. \tag{52}$$

МЭ для потенциалов взаимодействий частиц 1 и 3 ($q$=2), 1 и 2 ($q$=3) равен

$$V_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|V_q^{(1)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle + \langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|P_M V_q^{(2)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle \qquad (pq) = (32),(23). \tag{53}$$

Рассмотрим первое слагаемое в (53). Снимая интегрирование по внутренним координатам кластеров и учитывая ортонормированность спиновых функций, получаем

$$V_{qij}^{(1)\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle\varphi_{\tilde{\gamma}'i}|V_q^{(1)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)|\varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = \delta_{S_{23}'S_{23}}\delta_{S'S}N_iN_j\sum_{M_LM_S}\langle L'M_LSM_S|JM_J\rangle\langle LM_LSM_S|JM_J\rangle\, I(V_q^{(1)}), \tag{54}$$

где интеграл $I(V_q^{(1)})$ равен

$$I(V_q^{(1)}) = \int\left\{x_1^{\lambda'}y_1^{l'}\mathbb{Y}_{\gamma'}^{L'M_L^*}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}\exp(-\alpha_{\lambda' i}x_1^2 - \beta_{l'i}y_1^2)\,V_q^{(1)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)\times$$
$$\times\left\{x_1^{\lambda}y_1^{l}\mathbb{Y}_{\gamma}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}\exp(-\alpha_{\lambda j}x_1^2 - \beta_{lj}y_1^2)\,d\mathbf{x}_1\,d\mathbf{y}_1. \tag{55}$$

Произведем замену переменных $(\mathbf{x}_1,\mathbf{y}_1)\to(\mathbf{x}_q,\mathbf{y}_q)$, соответствующую перевязке базисной функции на набор координат Якоби $\hat{\mathrm{X}}_q$. Тогда, в соответствии с выражениями (20)–(22), формула (55) принимает вид

$$I(V_q^{(1)}) = \int\exp(-\mu_{qij}^{\gamma'\gamma}x_q^2 - \nu_{qij}^{\gamma'\gamma}y_q^2 - \rho_{qij}^{\gamma'\gamma}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q))\left\{x_1^{\lambda'}y_1^{l'}\mathbb{Y}_{\gamma'}^{L'M_L^*}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}_{(1q)}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)}\times$$
$$\times V_q^{(1)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)\left\{x_1^{\lambda}y_1^{l}\mathbb{Y}_{\gamma}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}_{(1q)}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)}d\mathbf{x}_q\,d\mathbf{y}_q, \tag{56}$$

$$\mu_{qij}^{\gamma'\gamma} = \mu_{qi}^{\gamma'} + \mu_{qj}^{\gamma}, \quad \nu_{qij}^{\gamma'\gamma} = \nu_{qi}^{\gamma'} + \nu_{qj}^{\gamma}, \quad \rho_{qij}^{\gamma'\gamma} = \rho_{qi}^{\gamma'} + \rho_{qj}^{\gamma}. \tag{57}$$

Индексы при фигурных скобках указывают на перевязку шаровой функции к новому набору координат Якоби матрицей $(1q)$. Для расчета $I(V_q^{(1)})$ произведем диагонализацию квадратичной формы в показателе экспоненты $-\mu_{qij}^{\gamma'\gamma}x_q^2 - \nu_{qij}^{\gamma'\gamma}y_q^2 - \rho_{qij}^{\gamma'\gamma}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)$. С этой целью совершим замену переменных $(\mathbf{x}_q, \mathbf{y}_q) \to (\mathbf{x}_q, \mathbf{y})$ матрицей преобразования $P$

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ a_{qij}^{\gamma'\gamma} & 1 \end{pmatrix}, \qquad a_{qij}^{\gamma'\gamma} = -\rho_{qij}^{\gamma'\gamma}/2\nu_{qij}^{\gamma'\gamma}, \qquad \det P = 1. \tag{58}$$

Тогда квадратичная форма сводится к виду

$$-\mu_{qij}^{\gamma'\gamma}x_q^2 - \nu_{qij}^{\gamma'\gamma}y_q^2 - \rho_{qij}^{\gamma'\gamma}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q) = -\omega_{qij}^{\gamma'\gamma}x_q^2 - \nu_{qij}^{\gamma'\gamma}y^2, \tag{59}$$

$$\omega_{qij}^{\gamma'\gamma} = \mu_{qij}^{\gamma'\gamma} - \left(\rho_{qij}^{\gamma'\gamma}\right)^2/4\nu_{qij}^{\gamma'\gamma}, \tag{60}$$

а интеграл $I(V_q^{(1)})$ становится равным

$$I(V_q^{(1)}) = \int \exp(-\omega_{qij}^{\gamma'\gamma}x_q^2 - \nu_{qij}^{\gamma'\gamma}y^2)\left\{x_1^{\lambda'}y_1^{l'}\mathbb{Y}_{\gamma'}^{L'M_L^*}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}_{(1q)P}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y})} \times$$
$$\times V_q^{(1)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)\left\{x_1^{\lambda}y_1^{l}\mathbb{Y}_{\gamma}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}_{(1q)P}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y})} d\mathbf{x}_q\, d\mathbf{y}. \tag{61}$$

Здесь шаровые функции преобразованы матрицей поворота $Q = (1q)P$ с элементами

$$Q = \begin{pmatrix} -\xi_{1q} - \upsilon_{1q}a_{qij}^{\gamma'\gamma} & -\upsilon_{1q} \\ \upsilon_{1q} - \xi_{1q}a_{qij}^{\gamma'\gamma} & -\xi_{1q} \end{pmatrix}, \qquad \det Q = 1. \tag{62}$$

Расписав перевязку шаровых функций на основе преобразования (31), получаем

$$I(V_q^{(1)}) = \sum_{L_1=0}^{\lambda}\sum_{L_2=0}^{l}\sum_{L_3=0}^{\lambda'}\sum_{L_4=0}^{l'}\sum_{j_1j_2j_3j_4} A_{\gamma' j_3j_4}^{L'L_3L_4Q}A_{\gamma j_1j_2}^{LL_1L_2Q} \times$$
$$\times \int_0^\infty x_q^{L_1+L_2+L_3+L_4+2}V_q^{(1)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)\exp(-\omega_{qij}^{\gamma'\gamma}x_q^2)\,dx_q \int_0^\infty y^{\lambda'+l'+\lambda+l-(L_1+L_2+L_3+L_4)+2}\exp(-\nu_{qij}^{\gamma'\gamma}y^2)\,dy \times$$
$$\times \int \mathbb{Y}_{j_3j_4}^{L'M_L^*}(\hat{\mathbf{x}}_q,\hat{\mathbf{y}})\mathbb{Y}_{j_1j_2}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_q,\hat{\mathbf{y}})\,d\hat{\mathbf{x}}_q\,\hat{\mathbf{y}}. \tag{63}$$

Учитывая свойство ортонормированности сферических функций и коэффициентов Клебша–Гордана, приходим к следующему окончательному результату:

$$V_{qij}^{(1)\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \frac{P_{ij}(\lambda',\lambda,l',l)}{(\pi E)^{1/2}}\sum_{L_1L_2L_3L_4j_1j_2} 2^{\frac{n+m}{2}+5}(m-n+1)!!\left(\nu_{qij}^{\gamma'\gamma}\right)^{\frac{n-m-3}{2}} \times$$
$$\times A_{\gamma' j_1j_2}^{L'L_3L_4Q}A_{\gamma j_1j_2}^{LL_1L_2Q}\,V_q^{(1)[n+2]}(\omega_{qij}^{\gamma'\gamma})\,\delta_{S'_{23}S_{23}}\delta_{S'S}\delta_{L'L}, \tag{64}$$

где $n = L_1 + L_2 + L_3 + L_4$, $m = \lambda' + \lambda + l' + l$ и $E = [\lambda']!![\lambda]!![l']!![l]!!$

Расчет второго слагаемого в (53) проводится по описанной выше схеме. После перевязки базисных функций на набор координат $\hat{\mathrm{X}}_q$ интеграл $I(P_MV_q^{(2)})$ по полной аналогии с $I(V_q^{(1)})$ приобретает вид

$$I(P_MV_q^{(2)}) = \int \exp(-\mu_{qij}^{\gamma'\gamma}x_q^2 - \nu_{qij}^{\gamma'\gamma}y_q^2 - \rho_{qi}^{\gamma'}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q))\left\{x_1^{\lambda'}y_1^{l'}\mathbb{Y}_{\gamma'}^{L'M_L^*}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}_{(1q)}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)} \times$$
$$\times V_q^{(2)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)P_M(\mathbf{x}_q)\left[\exp(-\rho_{qj}^{\gamma}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q))\left\{x_1^{\lambda}y_1^{l}\mathbb{Y}_{\gamma}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}_{(1q)}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)}\right] d\mathbf{x}_q\, d\mathbf{y}_q. \tag{65}$$

Учитывая, что действие оператора $P_M(\mathbf{r})$ на некоторую функцию $f(\mathbf{r})$ сводится к замене аргумента $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$, $P_M f(\mathbf{r}) = f(-\mathbf{r})$, имеем

$$P_M(\mathbf{x}_q)\left[\exp(-\rho^{\gamma}_{qj}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q))\left\{x_1^{\lambda}y_1^{l}\mathbb{Y}_{\gamma}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)}_{(1q)}\right] = \\ = \left[\exp(\rho^{\gamma}_{qj}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q))\left\{x_1^{\lambda}y_1^{l}\mathbb{Y}_{\gamma}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}^{(-\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)}_{(1q)}\right] = \\ = \left[\exp(\rho^{\gamma}_{qj}(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q))\left\{x_1^{\lambda}y_1^{l}\mathbb{Y}_{\gamma}^{LM_L}(\hat{\mathbf{x}}_1,\hat{\mathbf{y}}_1)\right\}^{(\mathbf{x}_q\mathbf{y}_q)}_{(1q)M}\right], \quad (66)$$

где матрица $M$ преобразования координат Якоби $(-\mathbf{x}_q, \mathbf{y}_q) \to (\mathbf{x}_q, \mathbf{y}_q)$ равна

$$M = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (67)$$

Используя выражения (66) и (64), получаем

$$\left(P_M V^{(2)}_{qij}\right)^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \frac{P_{ij}(\lambda',\lambda,l',l)}{(\pi E)^{1/2}} \sum_{L_1L_2L_3L_4j_1j_2} 2^{\frac{n+m}{2}+5}(m-n+1)!!\left(\nu^{\gamma'\gamma}_{qij}\right)^{\frac{n-m-3}{2}} \times \\ \times A^{L'L_3L_4\hat{Q}}_{\gamma'j_1j_2} A^{LL_1L_2\hat{Q}_M}_{\gamma j_1j_2}\, V^{(2)[n+2]}_q(\hat{\omega}^{\gamma'\gamma}_{qij})\,\delta_{S'_{23}S_{23}}\delta_{S'S}\delta_{L'L}, \quad (68)$$

где введены обозначения

$$\hat{Q} = (1q)\hat{P}, \qquad \hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \hat{a}^{\gamma'\gamma}_{qij} & 1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{Q} = \begin{pmatrix} -\xi_{1q} - v_{1q}\hat{a}^{\gamma'\gamma}_{qij} & -v_{1q} \\ v_{1q} - \xi_{1q}\hat{a}^{\gamma'\gamma}_{qij} & -\xi_{1q} \end{pmatrix}, \quad (69)$$

$$\hat{Q}_M = (1q)M\hat{P} = \begin{pmatrix} \xi_{1q} - v_{1q}\hat{a}^{\gamma'\gamma}_{qij} & -v_{1q} \\ -v_{1q} - \xi_{1q}\hat{a}^{\gamma'\gamma}_{qij} & -\xi_{1q} \end{pmatrix}, \quad (70)$$

$$\hat{a}^{\gamma'\gamma}_{qij} = -\hat{\rho}^{\gamma'\gamma}_{qij}/2\nu^{\gamma'\gamma}_{qij}, \qquad \hat{\omega}^{\gamma'\gamma}_{qij} = \mu^{\gamma'\gamma}_{qij} - \left(\hat{\rho}^{\gamma'\gamma}_{qij}\right)^2/4\nu^{\gamma'\gamma}_{qij}, \qquad \hat{\rho}^{\gamma'\gamma}_{qij} = \rho^{\gamma'}_{qi} - \rho^{\gamma}_{qj}. \quad (71)$$

Поэтому для МЭ потенциала $V^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}_{qij}$ (53) с $q$=2, 3 окончательно имеем

$$V^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}_{qij} = \frac{P_{ij}(\lambda',\lambda,l',l)}{(\pi E)^{1/2}} \sum_{L_1L_2L_3L_4j_1j_2} 2^{\frac{n+m}{2}+5}(m-n+1)!!\left(\nu^{\gamma'\gamma}_{qij}\right)^{\frac{n-m-3}{2}} \times \\ \times \left[A^{L'L_3L_4Q}_{\gamma'j_1j_2} A^{LL_1L_2Q}_{\gamma j_1j_2}\, V^{(1)[n+2]}_q(\omega^{\gamma'\gamma}_{qij}) + A^{L'L_3L_4\hat{Q}}_{\gamma'j_1j_2} A^{LL_1L_2\hat{Q}_M}_{\gamma j_1j_2}\, V^{(2)[n+2]}_q(\hat{\omega}^{\gamma'\gamma}_{qij})\right] \times \\ \times\, \delta_{S'_{23}S_{23}}\delta_{S'S}\delta_{L'L}. \quad (72)$$

### 2.3. Спин-орбитальные и тензорные силы

МЭ потенциалов нецентральных взаимодействий рассмотрим для как смешанной бозон-фермионной системы, так и системы, состоящей из трех фермионов.

#### *2.3.1. Система из одного бозона и двух фермионов (1B2F) со спинами $s_1 = 0, s_2 = s_3 = 1/2$.*

В такой системе возможны спин-орбитальные взаимодействия между любыми парами частиц. Рассмотрим сначала подсистему фермионов (2,3). Здесь потенциал спин-орбитальных сил с четно-нечетным расщеплением взаимодействия имеет вид

$${}^{sl}V_1(\mathbf{r};\mathbf{S}_{23}\boldsymbol{\lambda}) = (\mathbf{S}_{23}\boldsymbol{\lambda})\left[{}^{sl}\mathcal{V}^{(1)}_1(\mathbf{r}) + P_M(\mathbf{r})\,{}^{sl}\mathcal{V}^{(2)}_1(\mathbf{r})\right], \quad (73)$$

где $\mathbf{S}_{23}$ — оператор спина пары частиц (2,3) и, соответственно, полный спин $\mathbf{S} = \mathbf{S}_{23}$. МЭ спин-орбитальных сил (73) с учетом действия (50) факторизуется на спин-угловую и радиальную части

$$
{}^{sl}V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle \varphi_{\tilde{\gamma}'i} | {}^{sl}V_1(\tau_{23}\mathbf{x}_1; \mathbf{S}\boldsymbol{\lambda}) | \varphi_{\tilde{\gamma}j} \rangle = N_i N_j \langle \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma' S'_{23} L' S'} | \mathbf{S}\boldsymbol{\lambda} | \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma S_{23} LS} \rangle \int_0^\infty x_1^{\lambda'+\lambda} y_1^{l'+l} \exp(-\alpha_{ij}^{\lambda'\lambda} x_1^2 - \beta_{ij}^{l'l} y_1^2) \times
$$
$$
\times \left[ {}^{sl}\mathcal{V}_1^{(1)}(\tau_{23}\mathbf{x}_1) + (-1)^\lambda\, {}^{sl}\mathcal{V}_1^{(2)}(\tau_{23}\mathbf{x}_1) \right] x_1^2 y_1^2 \, dx_1 \, dy_1. \quad (74)
$$

Учитывая структуру спин-угловой функции (9)–(10), запишем $\mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma S_{23} LS}$ в виде

$$
\mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma S_{23} LS} = |(\lambda l)L, S; JM_J\rangle \quad (75)
$$

и преобразуем ее, выделяя полный угловой момент $\vec{\mathcal{J}} = \boldsymbol{\lambda} + \mathbf{S}$ пары (2,3)

$$
|(\lambda l)L, S; JM_J\rangle = \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-S|}^{\lambda+S} |l, (\lambda S)\mathcal{J}; JM_J\rangle (-1)^{L+S+J} \sqrt{[L][\mathcal{J}]} \begin{Bmatrix} l & \lambda & L \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix}, \quad (76)
$$

где

$$
|l, (\lambda S)\mathcal{J}; JM_J\rangle = \sum_{mm_\mathcal{J}} \langle lm\mathcal{J}m_\mathcal{J} | JM_J\rangle Y_{lm}(\hat{\mathbf{y}}_1) \mathcal{Y}^{\mathcal{J}m_\mathcal{J}}_{\lambda S}(\hat{\mathbf{x}}_1; \boldsymbol{\xi}_2, \boldsymbol{\xi}_3) \chi_1^B(\boldsymbol{\xi}_1). \quad (77)
$$

Здесь $\mathcal{Y}^{\mathcal{J}m_\mathcal{J}}_{\lambda S}$ — спин-угловая функция пары фермионов (2,3), а $\chi_1^B$ — внутренняя волновая функция бозона 1. Функция $\mathcal{Y}^{\mathcal{J}m_\mathcal{J}}_{\lambda S}$ является собственной функцией оператора $(\mathbf{S}\boldsymbol{\lambda})$:

$$
\mathbf{S}\boldsymbol{\lambda} | \mathcal{Y}^{\mathcal{J}m_\mathcal{J}}_{\lambda S} \rangle = \frac{1}{2} (\mathcal{J}(\mathcal{J}+1) - \lambda(\lambda+1) - S(S+1)) \mathcal{Y}^{\mathcal{J}m_\mathcal{J}}_{\lambda S}. \quad (78)
$$

Учитывая (75)–(78), для угловой части МЭ (74) получаем

$$
\langle \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma' S'_{23} L' S'} | \mathbf{S}\boldsymbol{\lambda} | \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma S_{23} LS} \rangle = (-1)^{L'+L} \frac{\sqrt{[L'][L]}}{2} \times
$$
$$
\times \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-S|}^{\lambda+S} [\mathcal{J}] (\mathcal{J}(\mathcal{J}+1) - \lambda(\lambda+1) - S(S+1)) \begin{Bmatrix} l & \lambda & L' \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & \lambda & L \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix} \delta_{\gamma'\gamma} \delta_{S'S}. \quad (79)
$$

После вычисления радиального интеграла в (74) МЭ ${}^{sl}V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}$ сводится к виду

$$
{}^{sl}V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = I_R^{sl} I_\Omega^{sl} \, \delta_{\gamma'\gamma} \delta_{S'S}, \quad (80)
$$

где

$$
I_R^{sl} = (-1)^{L'+L}\, 2^{2\lambda+l+4} \frac{P_{ij}(\lambda,\lambda,l,l)}{B_{ij}^{ll}(3)[\lambda]!!} \left( \frac{[L'][L]}{\pi} \right)^{1/2} \left[ {}^{sl}\mathcal{V}_1^{(1)[2\lambda+2]}(\alpha_{\lambda ij}) + (-1)^\lambda\, {}^{sl}\mathcal{V}_1^{(2)[2\lambda+2]}(\alpha_{\lambda ij}) \right], \quad (81)
$$

$$
I_\Omega^{sl} = \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-S|}^{\lambda+S} [\mathcal{J}] (\mathcal{J}(\mathcal{J}+1) - \lambda(\lambda+1) - S(S+1)) \begin{Bmatrix} l & \lambda & L' \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & \lambda & L \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix}. \quad (82)
$$

Обратимся теперь к тензорным взаимодействиям. Оператор тензорных сил в подсистеме из двух фермионов со спинами 1/2 имеет вид

$$
{}^tV_q(\mathbf{r}; \mathbf{S}_{kp}) = {}^t\mathcal{V}(\mathbf{r}) \hat{S}_{kp}, \quad (83)
$$

где тензорный оператор $\hat{S}_{kp}$ равен

$$
\hat{S}_{kp} = \frac{3(\boldsymbol{\sigma}_k \mathbf{r})(\boldsymbol{\sigma}_p \mathbf{r})}{r^2} - (\boldsymbol{\sigma}_k \boldsymbol{\sigma}_p) = 2 \left( 3 \frac{(\mathbf{S}_{kp}\mathbf{r})^2}{r^2} - \mathbf{S}_{kp}^2 \right). \quad (84)
$$

Здесь $\mathbf{S}_{kp}$ — оператор спина пары частиц $(k, p)$ и $\boldsymbol{\sigma}$ — матрица Паули.

Рассмотрим МЭ тензорных сил в паре (2,3) ($q = 1$; $k, p = 2, 3$). Выделяя спин-угловую и радиальную части, запишем

$$
\begin{aligned}
{}^{t}V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} &= \langle \varphi_{\tilde{\gamma}'i} | {}^{t}V_1(\tau_{23}\mathbf{x}_1;\mathbf{S}) | \varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = \\
&= N_i N_j \langle \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma' S'_{23} L' S'} | \hat{S}_{23} | \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma S_{23} L S}\rangle \int_0^\infty x_1^{\lambda'+\lambda} y_1^{l'+l} \exp(-\alpha_{ij}^{\lambda'\lambda} x_1^2 - \beta_{ij}^{l'l} y_1^2)\times \\
&\qquad\qquad \times\, {}^{t}\mathcal{V}_1(\tau_{23}\mathbf{x}_1) x_1^2 y_1^2\, dx_1\, dy_1. \qquad (85)
\end{aligned}
$$

Использование равенства (76) дает

$$
\begin{aligned}
\langle \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma' S'_{23} L' S'} | \hat{S}_{23} | \mathcal{F}^{JM_J}_{\gamma S_{23} L S}\rangle &= (-1)^{L'+S'+L+S}\sqrt{[L'][L]} \sum_{\mathcal{J}'=|\lambda'-S'|}^{\lambda'+S'} \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-S|}^{\lambda+S} \sqrt{[\mathcal{J}'][\mathcal{J}]} \begin{Bmatrix} l' & \lambda' & L' \\ S' & J & \mathcal{J}' \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & \lambda & L \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix} \times \\
&\times \langle l', (\lambda' S')\mathcal{J}'; JM_J | \hat{S}_{23} | l, (\lambda S)\mathcal{J}; JM_J\rangle. \qquad (86)
\end{aligned}
$$

Действуя оператором $\hat{S}_{23}$ на спин-угловую функцию $\mathcal{Y}^{\mathcal{J}m_{\mathcal{J}}}_{\lambda S}$ пары (2,3), находим

$$
\langle l', (\lambda' S')\mathcal{J}'; JM_J | \hat{S}_{23} | l, (\lambda S)\mathcal{J}; JM_J\rangle = T^{\mathcal{J}}_{\lambda'\lambda}\, \delta_{l'l}\, \delta_{\mathcal{J}'\mathcal{J}}\, \delta_{S'S}\, \delta_{1S}, \qquad (87)
$$

где значения $T^{\mathcal{J}}_{\lambda'\lambda}$ для разных комбинаций орбитальных моментов равны

$$
T^{\mathcal{J}}_{\lambda'\lambda} = \begin{cases} 2, & \text{если } \lambda = \mathcal{J};\ \lambda' = \lambda; \\ -2(\mathcal{J}+2)/[\mathcal{J}], & \text{если } \lambda = \mathcal{J}+1;\ \lambda' = \lambda; \\ -2(\mathcal{J}-1)/[\mathcal{J}], & \text{если } \lambda = \mathcal{J}-1;\ \lambda' = \lambda; \\ 6\sqrt{\mathcal{J}(\mathcal{J}+1)}/[\mathcal{J}], & \text{если } \lambda = \mathcal{J}\pm 1;\ \lambda' = \lambda \mp 2; \\ 0, & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases} \qquad (88)
$$

После вычисления радиальной части (85) приходим к окончательному виду ${}^{t}V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}$:

$$
{}^{t}V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = I_R^t I_\Omega^t\, \delta_{l'l}\, \delta_{S'S}\, \delta_{1S}, \qquad (89)
$$

где

$$
I_R^t = (-1)^{L'+L}\, 2^{\lambda'+\lambda+l+S} \frac{P_{ij}(\lambda',\lambda,l,l)}{B_{ij}^{ll}(3)} \sqrt{\frac{[L'][L]}{\pi[\lambda']!![\lambda]!!}}\, {}^{t}\mathcal{V}_1^{[\lambda'+\lambda+2]}(\alpha_{ij}^{\lambda'\lambda}), \qquad (90)
$$

$$
I_\Omega^t = \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-S|}^{\lambda+S} [\mathcal{J}] \begin{Bmatrix} l & \lambda' & L' \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & \lambda & L \\ S & J & \mathcal{J} \end{Bmatrix} T^{\mathcal{J}}_{\lambda'\lambda}. \qquad (91)
$$

*2.3.2. Система из трех фермионов (3F) со спинами $s_1 = s_2 = s_3 = 1/2$.*

Здесь возможны как спин-орбитальные, так и тензорные взаимодействия между любыми парами частиц. Поскольку 3F- и 1B2F-системы отличаются спиновым состоянием одной частицы, метод расчета МЭ соответствующих сил в парных подсистемах одинаков, а сами МЭ имеют сходный вид.

Так, вычисление МЭ спин-орбитальных (73) и тензорных (83) сил в подсистемах (2,3) отличается от рассмотренных выше случаев лишь преобразованием спин-угловой функции (76). Наличие спинов у всех трех частиц приводит к необходимости перевязки не только орбитальных моментов, но и спинов

$$
|(\lambda l)L, S; JM_J\rangle \;=\; \sum_{\mathcal{J}_1=|l-S_1|}^{l+S_1} \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-S_{23}|}^{\lambda+S_{23}} |(l s_1)\mathcal{J}_1, (\lambda S_{23})\mathcal{J}; JM_J\rangle (-1)^{\lambda+l+L} \sqrt{[L][S][\mathcal{J}_1][\mathcal{J}]} \begin{Bmatrix} l & s_1 & \mathcal{J}_1 \\ \lambda & S_{23} & \mathcal{J} \\ L & S & J \end{Bmatrix}, \qquad (92)
$$

где $s_1 = 1/2$, а спин $S_{23}$ пары (2,3) равен 1 в случае существования нетривиальных значений МЭ спин-орбитальных и тензорных сил. На основании приведенных выше результатов можно показать, что

$$
{}^{sl}V_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle \varphi_{\tilde{\gamma}'i} | {}^{sl}V_1(\tau_{23}\mathbf{x}_1; \mathbf{S}_{23}\boldsymbol{\lambda}) | \varphi_{\tilde{\gamma}j}\rangle = \sqrt{[S'][S]}\, I_R^{sl} J_\Omega^{sl}\, \delta_{\gamma'\gamma}\, \delta_{S'_{23}S_{23}}, \qquad (93)
$$

где

$$J_{\Omega}^{sl} = \sum_{\mathcal{J}_1=|l-\frac{1}{2}|}^{l+\frac{1}{2}} \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-1|}^{\lambda+1} (\mathcal{J}(\mathcal{J}+1) - \lambda(\lambda+1) - S_{23}(S_{23}+1))[\mathcal{J}_1][\mathcal{J}] \begin{Bmatrix} l & \frac{1}{2} & \mathcal{J}_1 \\ \lambda & 1 & \mathcal{J} \\ L' & S' & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & \frac{1}{2} & \mathcal{J}_1 \\ \lambda & 1 & \mathcal{J} \\ L & S & J \end{Bmatrix}, \quad (94)$$

а $I_R^{sl}$ дается формулой (81). В свою очередь,

$${}^tV_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle \varphi_{\tilde{\gamma}'i} | {}^tV_1(\tau_{23}\mathbf{x}_1; \mathbf{S}_{23}) | \varphi_{\tilde{\gamma}j} \rangle = \sqrt{[S'][S]} I_R^t J_{\Omega}^t \, \delta_{l'l} \, \delta_{S'_{23}S_{23}} \, \delta_{1S_{23}}, \quad (95)$$

где

$$J_{\Omega}^t = \sum_{\mathcal{J}_1=|l-\frac{1}{2}|}^{l+\frac{1}{2}} \sum_{\mathcal{J}=|\lambda-1|}^{\lambda+1} [\mathcal{J}_1][\mathcal{J}] \begin{Bmatrix} l & \frac{1}{2} & \mathcal{J}_1 \\ \lambda' & 1 & \mathcal{J} \\ L' & S' & J \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} l & \frac{1}{2} & \mathcal{J}_1 \\ \lambda & 1 & \mathcal{J} \\ L & S & J \end{Bmatrix} T_{\lambda'\lambda}^{\mathcal{J}}, \quad (96)$$

а $T_{\lambda'\lambda}^{\mathcal{J}}$ и $I_R^t$ описываются выражениями (88) и (90) соответственно.

МЭ тензорных сил (83) в подсистемах (1,2) или (1,3) равны

$$ {}^tV_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = \langle \varphi_{\tilde{\gamma}'i} | {}^tV_q(\tau_{1p}\mathbf{x}_q; \mathbf{S}_{1p}) | \varphi_{\tilde{\gamma}j} \rangle = N_i N_j \int \left\{ x_1^{\lambda'} y_1^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{23} L' S'}^{JM_J} \right\} \exp(-\alpha_{\lambda' i} x_1^2 - \beta_{l' i} y_1^2) \, {}^t\mathcal{V}_q(\tau_{1p}\mathbf{x}_q) \times \\ \times \hat{S}_{1p} \left\{ x_1^{\lambda} y_1^{l} \mathcal{F}_{\gamma S_{23} L S}^{JM_J} \right\} \exp(-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{lj} y_1^2) \, d\mathbf{x}_1 \, d\mathbf{y}_1 \, d\boldsymbol{\xi}, \quad (97)$$

где $(p, q) = (2, 3)$ или $(3, 2)$. Для расчета ${}^tV_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}$ воспользуемся описанным выше методом «вращения–диагонализации» базисной функции. Очевидно тензорный оператор $\hat{S}_{1p}$ не затрагивает функцию $\exp(-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{lj} y_1^2)$, преобразованную к виду $\exp\{-\mu_{qj}^{\gamma} x_q^2 - \nu_{qj}^{\gamma} y_q^2 - \rho_{qj}^{\gamma}(\mathbf{x}_q \mathbf{y}_q)\}$ после перевязки базисных функций матрицей $\hat{\mathrm{X}}_1 = (1q)\hat{\mathrm{X}}_q$. Кроме этого, последующая диагонализация квадратичной формы (59) матрицей $P$ (58) не влияет на тензорный оператор, поскольку при таком преобразовании $(\mathbf{x}_q, \mathbf{y}_q) \to (\mathbf{x}_q, \mathbf{y})$ вектор $\mathbf{x}_q$ сохраняется. Поэтому после результирующего преобразования $Q = (1q)P$ аналогично (61) имеем:

$$ {}^tV_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = N_i N_j \int \exp(-\omega_{qij}^{\gamma'\gamma} x_q^2 - \nu_{qij}^{\gamma'\gamma} y^2) \left\{ x_1^{\lambda'} y_1^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{23} L' S'}^{JM_J} \right\}_Q^{(\mathbf{x}_q \mathbf{y})} {}^t\mathcal{V}_q(\tau_{1p}\mathbf{x}_q) \times \\ \times \hat{S}_{1p} \left\{ x_1^{\lambda} y_1^{l} \mathcal{F}_{\gamma S_{23} L S}^{JM_J} \right\}_Q^{(\mathbf{x}_q \mathbf{y})} d\mathbf{x}_q \, d\mathbf{y} \, d\boldsymbol{\xi}. \quad (98)$$

Поскольку спиновые функции не затрагиваются преобразованием $Q$, стоящие в фигурных скобках (98) шаровые функции изменяются точно в соответствии с законом преобразования (31). Соответственно аналогично (63) выражение (98) сводится к виду

$$ {}^tV_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} = N_i N_j \sum_{L_1=0}^{\lambda} \sum_{L_2=0}^{l} \sum_{L_3=0}^{\lambda'} \sum_{L_4=0}^{l'} \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} A_{\gamma' j_3 j_4}^{L' L_3 L_4 Q} A_{\gamma j_1 j_2}^{L L_1 L_2 Q} \times \\ \times \int_0^{\infty} x_q^{L_1+L_2+L_3+L_4+2} \, {}^t\mathcal{V}_q(\tau_{1p}\mathbf{x}_q) \exp(-\omega_{qij}^{\gamma'\gamma} x_q^2) \, dx_q \int_0^{\infty} y^{\lambda'+l'+\lambda+l-(L_1+L_2+L_3+L_4)+2} \exp(-\nu_{qij}^{\gamma'\gamma} y^2) \, dy \times \\ \times \langle \mathcal{F}_{j_3 j_4 S'_{23} L' S'}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}_q, \hat{\mathbf{y}}; \boldsymbol{\xi}) | \hat{S}_{1p} | \mathcal{F}_{j_1 j_2 S_{23} L S}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}_q, \hat{\mathbf{y}}; \boldsymbol{\xi}) \rangle, \quad (99)$$

причем радиальные части выражений (63) и (99) с точностью до радиальных потенциалов $V_q^{(1)}(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)$ и ${}^t\mathcal{V}_q(\tau_{1p}\mathbf{x}_q)$ одинаковы. Теперь задача сводится к расчету МЭ $\langle \mathcal{F}_{j_3 j_4 S'_{23} L' S'}^{JM_J} | \hat{S}_{1p} | \mathcal{F}_{j_1 j_2 S_{23} L S}^{JM_J} \rangle$. Учитывая схему сложения моментов, запишем $\mathcal{F}_{j_1 j_2 S_{23} L S}^{JM_J}$ в виде

$$\mathcal{F}_{j_1 j_2 S_{23} L S}^{JM_J} = |(j_1 j_2)L, (s_1 S_{23})S; JM_J\rangle. \quad (100)$$

При этом спиновая часть функции (100)

$$\mathcal{X}_{S_{23}}^{SM_S}(\boldsymbol{\xi}) = |s_1, (s_2 s_3)S_{23}; SM_S\rangle, \quad (101)$$

где $s_i = 1/2$ — спин $i$-го фермиона ($i = 1, 2, 3$). Для расчета МЭ тензорных сил в подсистеме (1,3) преобразуем $\mathcal{X}_{S_{23}}^{SM_S}$ следующим образом:

$$|s_1, (s_2 s_3)S_{23}; SM_S\rangle = \sum_{S_{13}} |(s_1 s_3)S_{13}, s_2; SM_S\rangle (-1)^{s_1+s_2+s_3+S_{23}+S+1} \sqrt{[S_{13}][S_{23}]} \begin{Bmatrix} s_1 & s_3 & S_{13} \\ s_2 & S & S_{23} \end{Bmatrix}. \quad (102)$$

Поскольку тензорные силы отличны от нуля лишь в триплетном спиновом состоянии парной подсистемы ($S_{13}=1$), формула (102) принимает вид

$$|s_1,(s_2s_3)S_{23};SM_S\rangle = |(s_1s_3)S_{13},s_2;SM_S\rangle\,(-1)^{S_{23}+S+\frac12}\sqrt{3[S_{23}]}\begin{Bmatrix}\frac12 & \frac12 & 1\\ \frac12 & S & S_{23}\end{Bmatrix}. \qquad (103)$$

Для вычисления МЭ потенциала в подсистеме (1,2) производим перевязку $|s_1,(s_2s_3)S_{23};SM_S\rangle \to$ $\to |(s_1s_2)S_{12},s_3;SM_S\rangle$. Соответствующий результат будет отличаться от численной части выражения (103) фазой $(-1)^{1+S_{23}}$, связанной с симметрией спиновой функции $\mathcal{X}^{S_{23}m_{23}}$ по отношению к перестановкам частиц. Учитывая это обстоятельство, а также соотношение (103), преобразуем функцию (100) к виду с выделением полного углового момента $\mathcal{J}_1$ пары (1,2) или (1,3):

$$\begin{aligned}|(j_1j_2)L,(s_1S_{23})S;JM_J\rangle &= |(j_1j_2)L,(S_{1p}s_q)S;JM_J\rangle\times\,(-1)^{S_{23}+S+\frac12+(1+S_{23})\delta_{3q}}\sqrt{3[S_{23}]}\begin{Bmatrix}\frac12 & \frac12 & 1\\ \frac12 & S & S_{23}\end{Bmatrix}=\\ &=\sum_{\mathcal{J}_1=|j_1-1|}^{j_1+1}\ \sum_{\mathcal{J}_2=|j_2-\frac12|}^{j_2+\frac12}|(j_1S_{1p})\mathcal{J}_1,(j_2s_q)\mathcal{J}_2;JM_J\rangle(-1)^{S_{23}+S+\frac12+(1+S_{23})\delta_{3q}}\times\\ &\times\sqrt{3[S_{23}][S][L][\mathcal{J}_1][\mathcal{J}_2]}\begin{Bmatrix}\frac12 & \frac12 & 1\\ \frac12 & S & S_{23}\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}j_1 & 1 & \mathcal{J}_1\\ j_2 & \frac12 & \mathcal{J}_2\\ L & S & J\end{Bmatrix},\end{aligned} \qquad (104)$$

где $(p,q)$=(2,3) или (3,2). Следовательно,

$$\begin{aligned}&\langle\mathcal{F}^{JM_J}_{j_3j_4S'_{23}L'S'}|\hat S_{1p}|\mathcal{F}^{JM_J}_{j_1j_2S_{23}LS}\rangle=\\ &=(-1)^{1+S'+S+(S'_{23}+S_{23})\delta_{2q}}\,3\sqrt{[S'_{23}][S_{23}][S'][S][L'][L]}\begin{Bmatrix}\frac12 & \frac12 & 1\\ \frac12 & S' & S'_{23}\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\frac12 & \frac12 & 1\\ \frac12 & S & S_{23}\end{Bmatrix}\times\\ &\times\sum_{\mathcal{J}_1\mathcal{J}_2\mathcal{J}_3\mathcal{J}_4}\sqrt{[\mathcal{J}_1][\mathcal{J}_2][\mathcal{J}_3][\mathcal{J}_4]}\begin{Bmatrix}j_3 & 1 & \mathcal{J}_3\\ j_4 & \frac12 & \mathcal{J}_4\\ L' & S' & J\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}j_1 & 1 & \mathcal{J}_1\\ j_2 & \frac12 & \mathcal{J}_2\\ L & S & J\end{Bmatrix}\times\\ &\times\langle(j_3S'_{1p})\mathcal{J}_3,(j_4s'_q)\mathcal{J}_4;JM_J|\hat S_{1p}|(j_1S_{1p})\mathcal{J}_1,(j_2s_q)\mathcal{J}_2;JM_J\rangle.\end{aligned} \qquad (105)$$

Действуя тензорным оператором $\hat S_{1p}$ на спин-угловую функцию $\mathcal{Y}^{\mathcal{J}_1m_{\mathcal{J}_1}}_{j_1S_{1p}}$ парной подсистемы $(1,p)$, имеем

$$\langle(j_3S'_{1p})\mathcal{J}_3,(j_4s'_q)\mathcal{J}_4;JM_J|\hat S_{1p}|(j_1S_{1p})\mathcal{J}_1,(j_2s_q)\mathcal{J}_2;JM_J\rangle = T^{\mathcal{J}_1}_{j_3j_1}\,\delta_{S'_{1p}S_{1p}}\,\delta_{1S_{1p}}\,\delta_{\mathcal{J}_3\mathcal{J}_1}\,\delta_{j_4j_2}\,\delta_{s'_qs_q}\,\delta_{\mathcal{J}_4\mathcal{J}_2}, \qquad (106)$$

где $T^{\mathcal{J}_1}_{j_3j_1}$ дается равенством (88) с заменой $\lambda'\to j_3$, $\lambda\to j_1$, $\mathcal{J}\to\mathcal{J}_1$. Наконец, подставляя выражение (106) в (99) и вычисляя радиальную часть (99), находим МЭ тензорных сил в подсистемах (1,2) и (1,3)

$$\begin{aligned}{}^tV^{\tilde\gamma'\tilde\gamma}_{qij} &= (-1)^{1+S'+S+(S'_{23}+S_{23})\delta_{2q}}\,3P_{ij}(\lambda',\lambda,l',l)\times\\ &\times\left(\frac{[S'_{23}][S_{23}][S'][S][L'][L]}{\pi E}\right)^{1/2}\begin{Bmatrix}\frac12 & \frac12 & 1\\ \frac12 & S' & S'_{23}\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}\frac12 & \frac12 & 1\\ \frac12 & S & S_{23}\end{Bmatrix}\times\\ &\times\sum_{L_1L_2L_3L_4}\ \sum_{j_1j_2j_3}A^{L'L_3L_4Q}_{\gamma'j_3j_2}A^{LL_1L_2Q}_{\gamma j_1j_2}K^t_\Omega\left(\nu^{\gamma'\gamma}_{qij}\right)^{\frac{n-m-3}{2}}2^{\frac{n+m}{2}+5}(m-n+1)!!\,{}^t\mathcal{V}^{[n+2]}_q(\omega^{\gamma'\gamma}_{qij}),\end{aligned} \qquad (107)$$

где $m=\lambda'+l'+\lambda+l$, $n=L_1+L_2+L_3+L_4$, а $K^t_\Omega$ дается выражением

$$K^t_\Omega=\sum_{\mathcal{J}_1=|j_1-1|}^{j_1+1}\ \sum_{\mathcal{J}_2=|j_2-\frac12|}^{j_2+\frac12}[\mathcal{J}_1][\mathcal{J}_2]\begin{Bmatrix}j_3 & 1 & \mathcal{J}_1\\ j_2 & \frac12 & \mathcal{J}_2\\ L' & S' & J\end{Bmatrix}\begin{Bmatrix}j_1 & 1 & \mathcal{J}_1\\ j_2 & \frac12 & \mathcal{J}_2\\ L & S & J\end{Bmatrix}T^{\mathcal{J}_1}_{j_3j_1}. \qquad (108)$$

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе подробно представлена методика расчета МЭ гамильтониана системы их трех частиц на гауссовом базисе с учетом центральных, спин-орбитальных и тензорных взаимодействий между парами частицам.

Важно отметить, что данная методика позволяет свести МЭ к аналитическим формулам, что приводит к следствиям, далеко выходящим за рамки простого удобства. Дело в том, что при вычислениях на рассматриваемом базисе генераторного типа матрица гамильтониана является, строго говоря, плохо обусловленной. Это означает, что небольшие погрешности в значениях МЭ могут повлечь за собой существенное изменение собственных значений. Поэтому если МЭ не выражаются в аналитическом виде, а должны находиться путем численного интегрирования, то для каждого класса потенциалов необходима специальная численная техника вычисления многомерных интегралов, обеспечивающая высокую точность расчета МЭ. Однако в данном случае эта точность определяется только разрядной сеткой компьютера и малыми погрешностями округления. Это позволяет добиться высокой устойчивости вычислений собственных значений гамильтониана даже с матрицами большой размерности.

Автор благодарит В.Н. Померанцева за полезные обсуждения.


[1] *Adelberger E.G., Austin S.M., Bahcall J.N.* et al. // Rev. Mod. Phys. **70**. 1265 (1998).

[2] *Angulo C., Arnould M., Rayet M.* et al. // Nucl. Phys. A. **656**. 3 (1999).

[3] *Iliadis C., Longland R., Champagne A.E.* et al. // Nucl. Phys. A. **841**. 31 (2010).

[4] *Wagoner R.V., Fowler W.A., Hoyle, F.* // Astrophys. J. **148**. 3 (1967).

[5] *Workman R.L., Burkert V.D., Crede V.* et al. (*Particle Data Group*) // Prog. Theor. Exp. Phys. **2022**. 083C01 (2022).

[6] *Зельдович Я.Б., Новиков И.Д.* // Теория тяготения и эволюция звезд. М.: Наука, 1971.

[7] *Clayton D.D.* // Introduction to the Principles of Stellar Evolution and Nucleosynthesis. Chicago, IL: Univ. Chicago Press, 1968.

[8] *Кукулин В.И., Краснопольский В.М.* // ЯФ. **22**, 6. 1110 (1975) (*Kukulin V.I., Krasnopolsky V.M.* // Sov. J. Nucl. Phys. **22**, 6. 1110 (1975)).

[9] *Kukulin V.I., Krasnopolsky V.M.* // J. Phys. G: Nucl. Phys. **3**. 795 (1977).

[10] *Качмаж С., Штейнгауз Г.* // Теория ортогональных рядов. М.: Физматгиз, 1958.

[11] *Алексидзе М.А.* // Решение граничных задач методом разложения по неортогональным функциям. М.: Наука, 1978.

[12] *Arickx F., Broeckhove J., Deumens E., Van Leuven P.* // J. Comput. Phys. **39**. 272 (1981).

[13] *Klahn B., Bingel W.A.* // Theoret. Chim. Acta. **44**. 9 (1977).

[14] *Klahn B., Bingel W.A.* // Theoret. Chim. Acta. **44**. 27 (1977).

[15] *Kukulin V.I., Voronchev V.T., Kaipov T.D., Eramzhyan R.A.* // Nucl. Phys. A. **517**. 221 (1990).

[16] *Ворончев В.Т., Кукулин В.И., Померанцев В.Н.* и др. // ЯФ. **57**, 11. 1964 (1994) (*Voronchev V.T, Kukulin V.I., Pomerantsev V.N.* et al. // Phys. At. Nucl. **57**, 11. 1890 (1994)).

[17] *Kukulin V.I, Pomerantsev V.N., Razikov Kh.D.* et al. // Nucl. Phys. A. **586**. 151 (1995).

[18] *Kakenov M., Kukulin V.I., Pomerantsev V.N., Bayakhmetov O.* // Eur. Phys. J. A. **56**. 266 (2020).

[19] *Pomerantsev V.N., Rubtsova O.A., Kulikov V.A.* // Phys. Rev. C. **109**. 014002 (2024).

[20] *Rubtsova O.A., Pomerantsev V.N., Platonova M.N.* // Int. J. Mod. Phys. E.**33**. 2441030 (2024).

[21] *Pomerantsev V.N., Kukulin V.I., Voronchev V.T., Faessler A.* // ЯФ. **68**, 9. 1511 (2005) (*Pomerantsev V.N., Kukulin V.I., Voronchev V.T., Faessler A.* // Phys. At. Nucl. **68**, 9. 1453 (2005)).

[22] *Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* // Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.


# Method for Calculating Matrix Elements of a Three-Body Hamiltonian in a Gaussian Basis


**V. T. Voronchev**

*Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University*
*Moscow 119991, Russia*
*E-mail: voronchev@srd.sinp.msu.ru*


A method for determining the matrix elements of a three-body Hamiltonian on a multidimensional Gaussian basis for use in nuclear and atomic physics as well as nuclear astrophysics is discussed in detail. Cental as well as non-cental (spin-orbit and tensor) interactions between particles are considered. It is shown that the proposed method makes it possible to reduce the matrix elements to fairly simple analytical expressions capable of providing high accuracy in determining the Hamiltonian eigenvalues.


PACS: 21.60.-n, 21.45.-v.
*Keywords*: three-body system, Hamiltonian, matrix elements.
*Received 05 December 2025.*
English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2026. **81**, No. 1. Pp. .



**Сведения об авторе**
Ворончев Виктор Тихонович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-58-68, e-mail: voronchev@srd.sinp.msu.ru.