

Матричные элементы парных проекторов для трехчастичной системы в гауссовом базисе

В. Т. Ворончев,^{1,*} В. Н. Померанцев^{1,†}

¹Московский 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 05.05.2026; подписана в печать 23.05.2026)

Получены аналитические формулы для матричных элементов операторов типа парных проекторов, в частности Паули-проекторов, для трехчастичной системы при использовании многомерного гауссова базиса, в том числе симметризованного. Даны формулы для перекрытия трехчастичных базисных функций с заданной функцией пары частиц. Рассмотрен также метод проектирования двухчастичных центральных потенциалов в трехчастичной системе на определенное орбитальное состояние. Результаты могут быть использованы в вариационных расчетах трехчастичных систем в ядерной, атомной и молекулярной физике.

PACS: 21.60.-n, 21.45.-v. УДК: 539.142, 539.1.01.

Ключевые слова: система трех частиц, парные проекторы, гауссов базис.

DOI: [10.55959/MSU0579-9392.81.2640203](https://doi.org/10.55959/MSU0579-9392.81.2640203)

ВВЕДЕНИЕ

В кластерной модели ядра важнейшую роль играет требование полной антисимметризации волновой функции по перестановкам всех составляющих ядро нуклонов, что приводит на практике к чрезвычайно громоздкой вычислительной процедуре [1]. Однако было показано [2], что для компактных кластеров (подобных α -частице) требование полной антисимметризации с хорошей точностью может быть заменено на требование ортогональности полной волновой функции ядра к функциям запрещенных принципом Паули состояний.

Такой подход активно разрабатывался в НИИЯФ МГУ, начиная с середины 70 гг. прошлого столетия [2–6]. В частности, было показано, что для выполнения процедуры ортогонализации в двухчастичных системах (например, $N - \alpha$ и $\alpha - \alpha$) удобно использовать метод ортогонализирующих псевдопотенциалов (ОПП) [3]. Суть этого метода заключается в замене в гамильтониане $H = H_0 + \sum_i V_i$ парных потенциалов взаимодействий V_i между двумя частицами псевдопотенциалами $\tilde{V}_i = V_i + \lambda_i \Gamma_i$, где ядро проекционного оператора Γ_i строится из функций запрещенных (занятых) состояний φ_i в i -ой парной подсистеме. Было установлено [5], что при достаточно больших константах λ_i решение соответствующего уравнения Шредингера $\tilde{H}\Psi = E\Psi$ с взаимодействием $\tilde{V}_i$ оказывается практически ортогональным к функциям φ_i : примесь запрещенных принципом Паули состояний в найденных волновых функциях не превышает доли процента [7].

Метод ОПП широко используется в ядерной физике при исследованиях структуры легких и гало-ядер для исключения запрещенных состояний, особенно в рамках кластерных моделей — например, в вариационных расчетах трехчастичных систем $2N + \alpha$ и $N + 2\alpha$ [7–13], а также для исключения ложных состояний при расчетах связанных состояний d и ^3H в рамках эффективной теории поля [14]. Начиная с конца 90-х, метод ОПП интенсивно используется в атомной физике в расчетах связанных состояний [15], в том числе позитрон-атомных, а также электрон-атомного [16] и позитрон-атомного [17] рассеяния.

Использованная в расчетах [7–9] и во многих других работах вариационная процедура является модификацией вариационного метода на основе гауссова базиса [18, 19], в которой нелинейные параметры базисных функций выбираются на специально подобранной Чебышевской сетке, что обеспечивает полноту базиса и быструю сходимость. Важным преимуществом гауссовского базиса в расчетах систем нескольких частиц является возможность получения всех необходимых матричных элементов гамильтониана в удобном аналитическом виде.

В недавно опубликованной статье [20] подробно описана техника расчета матричных элементов трехчастичного гамильтониана в гауссовском базисе. Данная работа является продолжением [20] и посвящена описанию операции проектирования волновых функций и потенциалов в трехчастичных системах. Если функция φ_i нормирована на единицу, то оператор $\Gamma_i = |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ является проекционным. В частности, если φ_i — волновая функция запрещенного состояния, то такой оператор является Паули-проектором. Однако техника вычисления матричных элементов от оператора такого вида (оператора ранга 1 в пространстве i -ой подсистемы)

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

† E-mail: pomeran@nucl-th.sinp.msu.ru

не зависит от смысла функции φ_i и ее нормировки и необходима, например, при расчетах с гамильтонианом дибарионной модели ядерных сил [21]. Далее мы будем для краткости называть такие операторы парными проекторами.

Техника расчетов матричных элементов парных проекторов в гауссовском базисе (простом и симметризованном) рассматривается в разделах 1 и 2. В разделе 3 рассчитывается перекрытие трехчастичных базисных функций с парной функций. Методика проектирования центральных двухчастичных потенциалов рассматривается в разделе 4.

1. ПРОЕКТИРОВАНИЕ В ГАУССОВОМ БАЗИСЕ: КООРДИНАТЫ $\hat{X}_1$

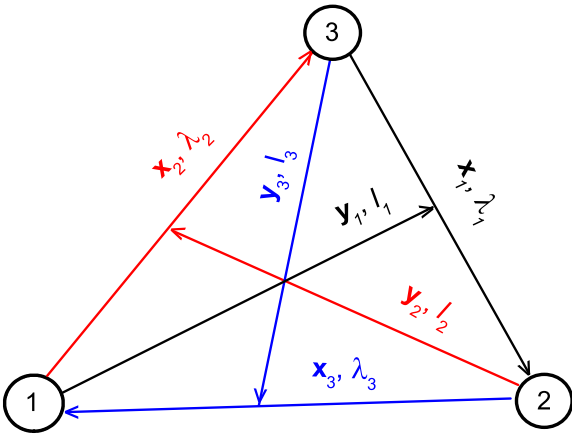


Рис. 1. Наборы координат Якоби в трехчастичной системе

Как и в работе [20], будем описывать систему из трех частиц (1+2+3) с помощью нормированных координат Якоби, показанных на рисунке. Здесь вектор $\mathbf{x}_q$ направлен по прямой, соединяющей частицы k и p , а вектор $\mathbf{y}_q$ описывает движение частицы q относительно центра масс пары (k, p) . Разные наборы координат Якоби

$$\hat{X}_q = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_q \\ \mathbf{y}_q \end{pmatrix}, \quad \hat{X}_k = \begin{pmatrix} \mathbf{x}_k \\ \mathbf{y}_k \end{pmatrix} \quad (1)$$

связаны линейным преобразованием $\hat{X}_q = (qk)\hat{X}_k$, где матрица (qk) имеет вид

$$(qk) = \begin{pmatrix} -\xi_{qk} & -v_{qk} \\ v_{qk} & -\xi_{qk} \end{pmatrix}, \quad (2)$$

$$\xi_{qk} = \xi_{kq} = \left[\frac{m_q m_k}{(m_q + m_p)(m_k + m_p)} \right]^{1/2}, \quad (3)$$

$$v_{qk} = -v_{kq} = \left[\frac{m_p(m_q + m_k + m_p)}{(m_q + m_p)(m_k + m_p)} \right]^{1/2}. \quad (4)$$

Данные формулы понимаются в смысле циклической перестановки (qkp) .

Рассмотрим набор координат $\hat{X}_1$ и разложим полную волновую функцию системы Ψ^{JM_J} с угловым моментом J и проекцией M_J в ряд по базисным функциям $\varphi_{\tilde{\gamma}j}$ (детали см. в [20])

$$\Psi^{JM_J}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) = \sum_{LS} \sum_{\lambda l S_{23}} \sum_{j=1}^N C_{\lambda l j} \varphi_{\tilde{\gamma}j}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1). \quad (5)$$

Здесь L и S — полные орбитальный и спиновый моменты, λ и l — угловые моменты, сопряженные координатам $\mathbf{x}_1$ и $\mathbf{y}_1$, соответственно, и S_{23} — спин пары (2,3). Базисные функции $\varphi_{\tilde{\gamma}j}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1)$ ($\tilde{\gamma} \equiv \gamma, L, S_{23}, S, J, M_J; \gamma \equiv \lambda, l$) определяются равенством:

$$\varphi_{\tilde{\gamma}j}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) = N_j x_1^\lambda y_1^l \exp\{-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{l j} y_1^2\} \times \mathcal{F}_{\gamma S_{23} LS}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1), \quad (6)$$

где N_j — нормировочный коэффициент и $\mathcal{F}_{\lambda l S_{23} LS}^{JM_J}$ — спин-угловая функция системы. В уравнениях (5) и (6) параметры $C_{\lambda l j}$ и $\alpha_{\lambda j}(\beta_{l j})$ являются линейными и нелинейными коэффициентами разложения, соответственно.

Обратимся теперь к матричным элементам парциальных проекторов $\Gamma_q \equiv \Gamma_{kp}$, заданных в наборе координат Якоби $\hat{X}_q$ и действующих в подсистемах (k, p) . Проектор на f -орбитальное состояние ($f = 0, 1, 2, \dots$) пары частиц (k, p) имеет вид (здесь мы рассматриваем случай, когда проектор не зависит от спина пары):

$$\Gamma_q(f) = |\varphi_f(\mathbf{x}_q)\rangle \langle \varphi_f(\mathbf{x}'_q)| \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q). \quad (7)$$

Здесь φ_f — некоторая функция, зависящая от относительной координаты пары частиц (k, p) . В случае Паули-проектора — это запрещенная волновая функция пары. Представим φ_f в виде разложения по нормированным гауссовским функциям:

$$\varphi_f(\mathbf{x}_q) = \frac{1}{(2f+1)^{1/2}} \times \sum_{m=1}^{N_f} \sum_{n_f=-f}^f D_m n_m x_q^f \exp\left(-\frac{1}{2} \eta_m^2 x_q^2\right) Y_{f m_f}(\hat{\mathbf{x}}_q), \quad (8)$$

где нормировочный коэффициент n_m равен:

$$n_m = \left(\frac{2^{f+2} \eta_m^{2f+3}}{\pi^{1/2} (2f+1)!!} \right)^{1/2}. \quad (9)$$

Вычислим матричные элементы парциальных проекторов (7) на базисе (6). Сначала рассмотрим подсистему частиц (2,3). Матричный элемент проектора $\Gamma_1(f)$ равен:

$$\Gamma_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) = \langle \varphi_{\tilde{\gamma}'i} | \Gamma_1(f) | \varphi_{\tilde{\gamma}j} \rangle = \sum_{mn} D_m D_n^{(mn)} \Gamma_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f), \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned}
{}^{(mn)}\Gamma_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) &= \frac{N_i N_j n_m n_n}{(2f+1)} \sum_{m_f} \int x_1^{\lambda'} y_1^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{23} L' S'}^{JM_J^*}(\hat{\mathbf{x}}_1, \hat{\mathbf{y}}_1) \exp(-\alpha_{\lambda' i} x_1^2 - \beta_{l' i} y_1^2) \times \\
&\times Y_{f m_f}(\hat{\mathbf{x}}_1) x_1^f \exp(-\frac{1}{2} \eta_m^2 x_1^2) \delta(\mathbf{y}_1 - \mathbf{y}'_1) Y_{f m_f}^*(\hat{\mathbf{x}}'_1) x_1'^f \exp(-\frac{1}{2} \eta_n^2 x_1'^2) \times \\
&\times x_1'^{\lambda} y_1'^l \mathcal{F}_{\gamma S_{23} L S}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}'_1, \hat{\mathbf{y}}'_1) \exp(-\alpha_{\lambda j} x_1'^2 - \beta_{l j} y_1'^2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{y}_1 d\mathbf{x}'_1 d\mathbf{y}'_1. \quad (11)
\end{aligned}$$

После снятия интегрирования по $\mathbf{y}'_1$ за счет действия δ -функции, расчет интеграла (11) не представляет труда. Приводим ниже окончательное выражение для ${}^{(mn)}\Gamma_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f)$:

$$\begin{aligned}
{}^{(mn)}\Gamma_{1ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) &= 2^{\lambda+l+3} \frac{P_{ij}(\lambda, \lambda, l, l)}{(2\lambda+1)B_{ij}^{ll}(3)} \times \\
&\times \left(\frac{\eta_m \eta_n}{\tilde{\alpha}_{im} \tilde{\alpha}_{jn}} \right)^{(2\lambda+3)/2} \delta_{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}} \delta_{f\lambda}, \quad (12)
\end{aligned}$$

где введены обозначения:

$$\tilde{\alpha}_{im} = \alpha_{\lambda' i} + \frac{1}{2} \eta_m^2, \quad \tilde{\alpha}_{jn} = \alpha_{\lambda j} + \frac{1}{2} \eta_n^2, \quad (13) \quad \text{где}$$

$$\begin{aligned}
{}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(0) &= N_i N_j n_m n_n \int \left\{ x_1^{\lambda'} y_1^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{23} L' S'}^{JM_J^*} \right\} \exp(-\alpha_{\lambda' i} x_1^2 - \beta_{l' i} y_1^2) \times \\
&\times Y_{00}(\hat{\mathbf{x}}_q) \exp(-\frac{1}{2} \eta_m^2 x_q^2) \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q) Y_{00}^*(\hat{\mathbf{x}}'_q) \exp(-\frac{1}{2} \eta_n^2 x_q'^2) \times \\
&\times \left\{ x_1'^{\lambda} y_1'^l \mathcal{F}_{\gamma S_{23} L S}^{JM_J} \right\} \exp(-\alpha_{\lambda j} x_1'^2 - \beta_{l j} y_1'^2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{y}_1 d\mathbf{x}'_1 d\mathbf{y}'_1. \quad (15)
\end{aligned}$$

Перевязывая базисные волновые функции на набор координат Якоби $\hat{X}_q$ и $\hat{X}'_q$ (метод перевязки описан в [20]), получаем

$$\begin{aligned}
{}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(0) &= \frac{N_i N_j n_m n_n}{4\pi} \int \left\{ x_1^{\lambda'} y_1^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{23} L' S'}^{JM_J^*} \right\}_{(1q)}^{(\mathbf{x}_q \mathbf{y}_q)} \exp(-\tilde{\mu}_{(1q)im}^{\gamma'} x_q^2 - \nu_{(1q)i}^{\gamma'} y_q^2 - \rho_{(1q)i}^{\gamma'} (\mathbf{x}_q \mathbf{y}_q)) \times \\
&\times \left\{ x_1'^{\lambda} y_1'^l \mathcal{F}_{\gamma S_{23} L S}^{JM_J} \right\}_{(1q)}^{(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}'_q)} \exp(-\tilde{\mu}_{(1q)jn}^{\gamma} x_q'^2 - \nu_{(1q)j}^{\gamma} y_q'^2 - \rho_{(1q)j}^{\gamma} (\mathbf{x}'_q \mathbf{y}'_q)) \times \\
&\times \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q) d\mathbf{x}_q d\mathbf{y}_q d\mathbf{x}'_q d\mathbf{y}'_q, \quad (16)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
\tilde{\mu}_{qim}^{\gamma'} &\equiv \tilde{\mu}_{(1q)im}^{\gamma'} = \mu_{qi}^{\gamma'} + \frac{1}{2} \eta_m^2, \\
\tilde{\mu}_{qjn}^{\gamma} &\equiv \mu_{(1q)jn}^{\gamma} = \mu_{qj}^{\gamma} + \frac{1}{2} \eta_n^2,
\end{aligned} \quad (17)$$

а параметры

$$\mu_{qj}^{\gamma} \equiv \mu_{(1q)j}^{\gamma}, \quad \nu_{qj}^{\gamma} \equiv \nu_{(1q)j}^{\gamma}, \quad \rho_{qj}^{\gamma} \equiv \rho_{(1q)j}^{\gamma} \quad (18)$$

приведены в [20] (формулы (21) и (22)). Здесь (и ниже в тексте) индексы при фигурных скобках означают вид перевязки базисной функции. В данном

а параметры P_{ij} и B_{ij}^{ll} даны в [20] (формулы (16) и (17)).

Вычислим теперь матричные элементы проекторов $\Gamma_q(f)$ с $q = 2$ и 3 , действующих в парах частиц (1,3) и (1,2), соответственно. Прежде всего рассмотрим проектирование на s -орбитальное состояние ($f = 0$). Аналогично (10) имеем

$$\begin{aligned}
\Gamma_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(0) &= \langle \varphi_{\tilde{\gamma}' i} | \Gamma_q(0) | \varphi_{\tilde{\gamma} j} \rangle = \\
&= \sum_{mn} D_m D_n {}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(0), \quad (14)
\end{aligned}$$

случае, речь идет о перевязке $\hat{X}_1 \rightarrow \hat{X}_q$ и $\hat{X}_1 \rightarrow \hat{X}'_q$ матрицей поворота (1q).

Проведем теперь диагонализацию квадратичных форм в показателях экспонент с помощью замены переменных $(\mathbf{x}_q, \mathbf{y}_q) \rightarrow (\mathbf{x}, \mathbf{y}_q)$ и $(\mathbf{x}'_q, \mathbf{y}'_q) \rightarrow (\mathbf{x}', \mathbf{y}'_q)$, используя матрицы преобразования $\tilde{P}_{im}$ и $\tilde{P}_{jn}$:

$$\tilde{P}_{im} = \begin{pmatrix} 1 & -\rho_{qi}^{\gamma'}/2\tilde{\mu}_{qim}^{\gamma'} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \tilde{P}_{jn} = \begin{pmatrix} 1 & -\rho_{qj}^{\gamma}/2\tilde{\mu}_{qjn}^{\gamma} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Как видно, преобразования (19) не затрагивают вектора $\mathbf{y}_q$ и $\mathbf{y}'_q$ и, следовательно, не действуют на дельта-функцию $\delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q)$ в уравнении (16). Интегрируя по $\mathbf{y}'_q$, находим

$$\begin{aligned}
{}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(0) &= \frac{N_i N_j n_m n_n}{4\pi} \int \left\{ x_1^{\lambda'} y_1^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{23} L' S'}^{JM_J^*} \right\}_{\tilde{Q}_{im}}^{(\mathbf{x} \mathbf{y}_q)} \left\{ x_1'^{\lambda} y_1'^l \mathcal{F}_{\gamma S_{23} L S}^{JM_J} \right\}_{\tilde{Q}_{jn}}^{(\mathbf{x}' \mathbf{y}'_q)} \\
&\times \exp(-\tilde{\mu}_{qim}^{\gamma'} x^2 - \tilde{\mu}_{qjn}^{\gamma} x'^2 - \tilde{\omega}_{qijmn}^{\gamma' \gamma} y_q^2) d\mathbf{x}' d\mathbf{x} d\mathbf{y}_q, \quad (20)
\end{aligned}$$

где матрицы

$$\tilde{Q}_{im} = (1q)\tilde{P}_{im}, \quad \tilde{Q}_{jn} = (1q)\tilde{P}_{jn} \quad (21)$$

и

$$\tilde{\omega}_{qijmn}^{\gamma'\gamma} = \nu_{qij}^{\gamma'\gamma} - (\rho_{qi}^{\gamma'})^2/4\tilde{\mu}_{qim}^{\gamma'} - (\rho_{qj}^{\gamma})^2/4\tilde{\mu}_{qjn}^{\gamma}, \quad \nu_{qij}^{\gamma'\gamma} = \nu_{qi}^{\gamma'} + \nu_{qj}^{\gamma}. \quad (22)$$

Расписав в соответствии с формулой (31) в [20] преобразование функций, стоящих в фигурных скобках в уравнении (20), приведем матричный элемент проектора к виду

$${}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}(0) = \frac{N_i N_j n_m n_n}{4\pi} \sum_{L_1=0}^{\lambda} \sum_{L_2=0}^l \sum_{L_3=0}^{\lambda'} \sum_{L_4=0}^{l'} \sum_{j_1 j_2 j_3 j_4} A_{\lambda' l' j_3 j_4}^{L' L_3 L_4 \tilde{Q}_{im}} A_{\lambda l j_1 j_2}^{L L_1 L_2 \tilde{Q}_{jn}} J_R J_{\Omega}, \quad (23)$$

где радиальный J_R и угловой J_{Ω} интегралы равны:

$$J_R = \int_0^{\infty} x'^{L_1+L_2+2} x^{L_3+L_4+2} y_q^{\lambda'+l'+\lambda+l-(L_1+L_2+L_3+L_4)+2} \times \\ \times \exp(\tilde{\mu}_{qjn}^{\gamma} x'^2 - \tilde{\mu}_{qim}^{\gamma'} x^2 - \tilde{\omega}_{qijmn}^{\gamma'\gamma} y_q^2) dx' dx dy_q, \quad (24)$$

$$J_{\Omega} = \int \mathcal{F}_{j_3 j_4 S'_{23} L' S'}^{JM_J^*}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{j_1 j_2 S_{23} L S}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}_q) d\hat{\mathbf{x}} d\hat{\mathbf{x}} d\hat{\mathbf{y}}_q. \quad (25)$$

Коэффициенты преобразования $A_{abcd}^{\mathcal{L}_1 \mathcal{L}_2 \mathcal{L}_3 R}$ можно найти в [20] (формула (32)). После расчета J_R и J_{Ω} находим окончательное выражение для матричных элементов s -орбитального проектора ${}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}(0)$:

$${}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}(0) = 2^{\frac{\lambda'+\lambda+l'+l}{2}+3} (\eta_m \eta_n)^{3/2} \frac{P_{ij}(\lambda', \lambda, l', l)}{E^{1/2}} \sum_{L_1=0}^{\lambda} \sum_{L_2=0}^l \sum_{L_3=0}^{\lambda'} \sum_{L_4=0}^{l'} A_{\lambda' l' 0 L'}^{L' L_3 L_4 \tilde{Q}_{im}} A_{\lambda l 0 L}^{L L_1 L_2 \tilde{Q}_{jn}} \times \\ \times \frac{(a+1)!!(b+1)!!(c+1)!!}{((\tilde{\mu}_{qim}^{\gamma'})^{\frac{a+3}{2}} (\tilde{\mu}_{qjn}^{\gamma})^{\frac{b+3}{2}} (\tilde{\omega}_{qijmn}^{\gamma'\gamma})^{\frac{c+3}{2}})} \delta_{S'_{23} S_{23}} \delta_{S' S} \delta_{L' L}. \quad (26)$$

Здесь $a = L_3 + L_4$, $b = L_1 + L_2$, $c = \lambda' + l' + \lambda + l - (a + b)$, а величина $E = [\lambda']!![l]!![l']!![l]!!$, где $[k] \equiv 2k + 1$.

Вычисление матричных элементов в случае проектирования на состояния с произвольным значением момента f проводится в целом по описанной выше схеме. Дополнительные сложности в расчете связаны с присутствием шаровой функции $x_q^f Y_{fm_f}(\hat{\mathbf{x}}_q)$ в функции $\varphi_f(\mathbf{x}_q)$ (8). Опуская подробности вычисления матричных элементов ${}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}(f)$, приведем сразу окончательный результат

$${}^{(mn)}\Gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}(f) = 2^{\frac{\lambda'+\lambda+l'+l}{2}+3} (\eta_m \eta_n)^{\frac{2f+3}{2}} \frac{P_{ij}(\lambda', \lambda, l', l)}{(2f+1)!! E^{1/2}} \sum_{L_1 L_2 L_3} \sum_{L_5 L_7 L_8} \sum_{j_1 j_2 j_4} \sum_{j_5 j_6 j_8} \sum_j (-1)^{j_2+j_6+j} \times \\ \times A_{\lambda' l' j_1 j_2}^{L' L_1 L_2 \tilde{Q}_{im}} A_{f 0 j_1 j_4}^{f L_3 0 \tilde{P}_{im}} A_{f 0 j_5 j_6}^{f L_5 0 \tilde{P}_{jn}} A_{\lambda l j_5 j_8}^{L L_7 L_8 \tilde{Q}_{jn}} ([j_2][j_4][j_6][j_8])^{1/2} \times \frac{(A+1)!!(B+1)!!(C+1)!!}{((\tilde{\mu}_{qim}^{\gamma'})^{\frac{A+3}{2}} (\tilde{\mu}_{qjn}^{\gamma})^{\frac{B+3}{2}} (\tilde{\omega}_{qijmn}^{\gamma'\gamma})^{\frac{C+3}{2}})} \times \\ \times \langle j_2 0 j_4 0 | j_0 \rangle \langle j_6 0 j_8 0 | j_0 \rangle \left\{ \begin{matrix} j & f & L \\ j_1 & j_2 & j_4 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j & L & f \\ j_5 & j_6 & j_8 \end{matrix} \right\} \delta_{S'_{23} S_{23}} \delta_{S' S} \delta_{L' L}, \quad (27)$$

где $A = L_1 + L_2 + L_3$, $B = L_5 + L_7 + L_8$ и $C = \lambda' + l' + \lambda + l + 2f - (A + B)$. Отметим, что для s -орбитального проектирования ($f = 0$) выражение (27) упрощается и сводится к уравнению (26).

2. ПРОЕКТИРОВАНИЕ В СИММЕТРИЗОВАННОМ БАЗИСЕ

В разделе 1 мы описали процедуру проектирования в том случае, когда базисные волновые функции заданы в одном из трех возможных наборов координат Якоби $\hat{X}_q$ ($q = 1$). Однако,

в случае трех тождественных частиц для вариационных расчетов целесообразно использовать симметризованный гауссовский базис, включающий базисные функции во всех трех наборах координат, что обеспечивает намного более быструю сходимость [21, 22].

Поэтому обобщим задачу и будем считать, что базисные функции могут быть в любом из трех наборов координат $\hat{X}_q$, $\hat{X}_k$ и $\hat{X}_p$, а также введем зависимость проектора от спина пары частиц.

Рассмотрим процедуру проектирования волновой функции на состояние пары (k, p) с угловым моментом f , спином S_0 и полным моментом j ($\mathbf{j} = \mathbf{f} + \mathbf{S}_0$). Определим проектор, заданный в наборе координат $\hat{X}_q$, выражением

$$\Gamma_q(fS_0j) = \frac{1}{2j+1} \times \sum_{m_j=-j}^j |\varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}_q)\rangle \langle \varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}'_q)| \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q). \quad (28)$$

Здесь функция $\varphi_{fS_0}^{jm_j}$ пары (k, p) представляется в виде разложения

$$\varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}_q) = \sum_{m=1}^{N_f} D_m n_m x_q^f \exp\left(-\frac{1}{2}\eta_m^2 x_q^2\right) F_{fS_0}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}_q), \quad (29)$$

где $F_{fS_0}^{jm_j}$ — спин-угловая функция.

Вычислим матричные элементы проектора Γ_q для базисных волновых функций (6) $|\zeta\rangle \equiv \varphi_{\gamma j}(\mathbf{x}_\zeta, \mathbf{y}_\zeta)$ в различных наборах $\hat{X}_\zeta$ ($\zeta = q, k, p$).

2.1. Матричные элементы $\langle q|\Gamma_q|q\rangle$

Здесь базисные функции и проектор заданы в одном и том же наборе координат Якоби $\hat{X}_q$. В этом случае имеем

$$\Gamma_{(qqq)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) = \langle q|\Gamma_q(f)|q\rangle = \sum_{mn} D_m D_n^{(mn)} \Gamma_{(qqq)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f), \quad (30)$$

где

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(qqq)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) &= \frac{N_i N_j n_m n_n}{(2j+1)} \sum_{m_j} \int x_q^{\lambda'} y_q^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S_{pk} L' S'}^{JM_J^*}(\hat{\mathbf{x}}_q, \hat{\mathbf{y}}_q) \exp(-\alpha_{\lambda' i} x_q^2 - \beta_{l' i} y_q^2) \times \\ &\times F_{fS_0}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}_q) x_q^f \exp\left(-\frac{1}{2}\eta_m^2 x_q^2\right) F_{fS_0}^{jm_j^*}(\hat{\mathbf{x}}'_q) x_q'^f \exp\left(-\frac{1}{2}\eta_n^2 x_q'^2\right) \times \\ &\times x_q'^\lambda y_q^l \mathcal{F}_{\gamma S_{pk} L S}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}'_q, \hat{\mathbf{y}}_q) \exp(-\alpha_{\lambda j} x_q'^2 - \beta_{l j} y_q^2) d\mathbf{x}_q d\mathbf{y}_q d\mathbf{x}'_q. \end{aligned} \quad (31)$$

Отметим, что в выражении (31) уже выполнено интегрирование по $\mathbf{y}'_q$. Используя далее преобразование спин-угловой функции

$$\begin{aligned} \mathcal{F}_{\gamma S_{pk} L S}^{JM_J} &\equiv |(\lambda) L, (s_q S_{pk}) S; JM_J\rangle = \sum_{\mathcal{J}=l\pm\frac{1}{2}} \sum_{\mathcal{J}_\lambda=|\lambda-S_{pk}|}^{\lambda+S_{pk}} |(ls_q)\mathcal{J}, (\lambda S_{pk})\mathcal{J}_\lambda; JM_J\rangle \times \\ &\times (-1)^{\lambda+l+L} ([L][S][\mathcal{J}][\mathcal{J}_\lambda])^{1/2} \left\{ \begin{matrix} l & \frac{1}{2} & \mathcal{J} \\ \lambda & S_{pk} & \mathcal{J}_\lambda \\ L & S & J \end{matrix} \right\}, \end{aligned} \quad (32)$$

получаем следующее выражение для матричного элемента

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{qqqij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) &= \sum_{\mathcal{J}=l\pm\frac{1}{2}} 2^{\lambda+l+3} \frac{P_{ij}(\lambda\lambda ll)}{B_{ij}^l(3)} \left(\frac{\eta_m \eta_n}{\tilde{\alpha}_{im} \tilde{\alpha}_{jn}} \right)^{\frac{2\lambda+3}{2}} (-1)^{L+L'} \times \\ &\times [\mathcal{J}] ([L'] [L] [S'] [S])^{1/2} \left\{ \begin{matrix} l & \frac{1}{2} & \mathcal{J} \\ \lambda & S_0 & j \\ L' & S' & J \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l & \frac{1}{2} & \mathcal{J} \\ \lambda & S_0 & j \\ L & S & J \end{matrix} \right\} \delta_{l' l} \delta_{\lambda' \lambda} \delta_{S_0 S_{pk}} \delta_{S_0 S'_{pk}} \delta_{\lambda f}. \end{aligned} \quad (33)$$

2.2. Матричные элементы $\langle q|\Gamma_q|k\rangle$

Рассмотрим случай, при котором одна из базисных функций задается в другом наборе координат Якоби $\hat{X}_k$.

$$\Gamma_{(qqk)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) = \langle q|\Gamma_q(f)|k\rangle = \sum_{mn} D_m D_n^{(mn)} \Gamma_{(qqk)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f). \quad (34)$$

По аналогии с (16) запишем

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(qqk)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) &= \frac{N_i N_j n_m n_n}{2j+1} \sum_{m_j} \int x_q^{\lambda'} y_q^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S_{pk} L' S'}^{JM_J^*} \exp(-\alpha_{\lambda' i} x_q^2 - \beta_{l' i} y_q^2) \\ &\quad \times F_{f S_0}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}_q) x_q^f \exp(-\frac{1}{2} \eta_m^2 x_q^2) \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q) F_{f S_0}^{jm_j^*}(\hat{\mathbf{x}}'_q) x_q'^f \\ &\quad \times \left\{ x_k^{\lambda'} y_k^{l'} \mathcal{F}_{\gamma S_{qp} LS}^{JM_J} \right\}_{(kq)}^{(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}'_q)} \exp(-\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} x_q'^2 - \nu_{(kq)j}^{\gamma} y_q'^2 - \rho_{(kq)j}^{\gamma}(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}'_q)) d\mathbf{x}_q d\mathbf{y}_q d\mathbf{x}'_q d\mathbf{y}'_q, \end{aligned} \quad (35)$$

где

$$\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} = \mu_{(kq)j}^{\gamma} + \frac{1}{2} \eta_n^2. \quad (36)$$

Для удобства будем использовать следующее представление для шаровой функции:

$$x_q'^f F_{f S_0}^{jm_j^*}(\hat{\mathbf{x}}'_q) = \sqrt{4\pi} x_q'^f y_q'^0 \mathcal{F}_{(f0)S_0 f}^{jm_j^*}(\hat{\mathbf{x}}'_q, \hat{\mathbf{y}}'_q). \quad (37)$$

Производя диагонализацию квадратичной формы в (35) с помощью преобразования $(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}'_q) \rightarrow (\mathbf{x}' \mathbf{y}'_q)$ матрицей $\tilde{P}_{jn}$,

$$\tilde{P}_{jn} = \begin{pmatrix} 1 & -\rho_{(kq)j}^{\gamma}/2\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (38)$$

и интегрируя по $\mathbf{y}'_q$, находим

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(qqk)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) &= \frac{N_i N_j n_m n_n}{2j+1} \sum_{m_j} \int x_q^{\lambda'} y_q^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S_{pk} L' S'}^{JM_J^*} F_{f S_0}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}_q) x_q^f \sqrt{4\pi} \left\{ x_q'^f y_q'^0 \mathcal{F}_{(f0)S_0 f}^{jm_j^*} \right\}_{\tilde{P}_{jn}}^{(\mathbf{x}' \mathbf{y}_q)} \\ &\quad \times \left\{ x_k^{\lambda'} y_k^{l'} \mathcal{F}_{\gamma S_{qp} LS}^{JM_J} \right\}_{\tilde{Q}_{jn}}^{(\mathbf{x}' \mathbf{y}_q)} \exp(-\tilde{\alpha}_{im} x_q'^2 - \tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} x_q'^2 - \tilde{\omega}_{(kq)ijn}^{\gamma} y_q'^2) d\mathbf{x}_q d\mathbf{y}_q d\mathbf{x}'. \end{aligned} \quad (39)$$

Здесь

$$\tilde{\alpha}_{im} = \alpha_{\lambda' i} + \frac{1}{2} \eta_m^2, \quad \tilde{\omega}_{(kq)ijn}^{\gamma} = \beta_{l' i} + \nu_{(kq)j}^{\gamma} - (\rho_{(kq)j}^{\gamma})^2 / 4\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma}, \quad \tilde{Q}_{jn} = (kq) \tilde{P}_{jn}. \quad (40)$$

После интегрирования по угловой переменной $\hat{\mathbf{x}}_q$ с учетом преобразования (32), получаем

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(qqk)ij}^{\tilde{\gamma}'\tilde{\gamma}}(f) &= \frac{N_i N_j n_m n_n}{2j+1} \sqrt{4\pi} \sum_{m_j} \sum_{j'=l'+\frac{1}{2}} \sum_{m_{j'}} \sum_{L_1=0}^f \sum_{j_1 j_2} \sum_{L_3=0}^{\lambda} \sum_{L_4=0}^l \sum_{j_3 j_4} (-1)^{\lambda'+l'+L'} \times \\ &\quad \times ([L'] [S'] [j'] [j])^{\frac{1}{2}} \begin{Bmatrix} l' & \frac{1}{2} & j' \\ \lambda' & S_0 & j \\ L' & S' & J \end{Bmatrix} \langle j' m_{j'} j m_j | JM_J \rangle A_{f0j_1 j_2}^{f L_1 0 \tilde{P}_{jn}} A_{\lambda j_3 j_4}^{L L_3 L_4 \tilde{Q}_{jn}} \delta_{S_{pk} S_0} \delta_{\lambda' f} \times R \Omega, \end{aligned} \quad (41)$$

где радиальный R и спин-угловой Ω интегралы равны:

$$\begin{aligned} R &= \int_0^\infty x_q^{\lambda'+f+2} \exp(-\tilde{\alpha}_{im} x_q'^2) dx_q \int_0^\infty x_q'^{L_1+L_3+L_4+2} \exp(-\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} x_q'^2) dx' \times \\ &\quad \times \int_0^\infty y_q^{l'+f+\lambda+l-(L_1+L_3+L_4)+2} \exp(-\tilde{\omega}_{(kq)ijn}^{\gamma} y_q'^2) dy_q, \end{aligned} \quad (42)$$

$$\Omega = \int \mathcal{F}_{l' s'_q}^{j' m_{j'}^*}(\hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_1 j_2) S_0 f}^{j m_j^*}(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_3 j_4) S_{qp} L S}^{J M_J}(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}_q) d\hat{\mathbf{x}}' \hat{\mathbf{y}}_q. \quad (43)$$

Вычисление радиального интеграла дает

$$R = \frac{\Gamma\left(\frac{t_1+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{t_2+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{t_3+1}{2}\right)}{8 r_1^{\frac{t_1+1}{2}} r_2^{\frac{t_2+1}{2}} r_3^{\frac{t_3+1}{2}}}, \quad (44)$$

где $\Gamma(z)$ — гамма-функция и

$$t_1 = \lambda' + f + 2, \quad t_2 = L_1 + L_3 + L_4 + 2, \quad t_3 = l' + f + \lambda + l - t_2 + 4, \quad (45)$$

$$r_1 = \tilde{\alpha}_{im}, \quad r_2 = \tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma}, \quad r_3 = \tilde{\omega}_{(kq)ijn}^{\gamma}. \quad (46)$$

Соответственно, для спин-углового интеграла Ω можно получить

$$\begin{aligned} \Omega = & \delta_{j_1 j_3} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} (-1)^{j_1+j_2+f+S_{qp}} ([j_2][f][l'][S_{qp}][S_0])^{1/2} \langle l' 0 j_2 0 | j_4 0 \rangle \left\{ \begin{matrix} L & f & l' \\ j_2 & j_4 & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_{qp} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_0 \end{matrix} \right\} \times \\ & \times \sum_{m' m'_{s_q}} \sum_{m_f m_{S_0}} \sum_{M_L M_S} \langle l' m' \frac{1}{2} m'_{s_q} | j' m_{j'} \rangle \langle f m_f S_0 m_{S_0} | j m_j \rangle \times \\ & \times \langle l' m' f m_f | L M_L \rangle \langle \frac{1}{2} m'_{s_q} S_0 m_{S_0} | S M_S \rangle \langle L M_L S M_S | J M_J \rangle. \end{aligned} \quad (47)$$

Таким образом, матричный элемент (35) приводится к виду

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(qqk)ij}^{\tilde{\gamma}' \tilde{\gamma}}(f) = & \frac{N_i N_j n_m n_n}{2j+1} \sqrt{4\pi} \sum_{j'=l' \pm \frac{1}{2}} \sum_{L_1=0}^f \sum_{L_3=0}^{\lambda} \sum_{L_4=0}^l \sum_{j_1 j_2 j_4} (-1)^{\lambda'+L'+j_1+j_4+f+S_{qp}} \times \\ & \times ([l'][L'][S'][j'][j][j_2][f][S_{qp}][S_0])^{\frac{1}{2}} \left\{ \begin{matrix} L & f & l' \\ j_2 & j_4 & j_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_{qp} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} l' & \frac{1}{2} & j' \\ \lambda' & S_0 & j \\ L' & S' & J \end{matrix} \right\} \times \\ & \times \langle l' 0 j_2 0 | j_4 0 \rangle A_{f 0 j_1 j_2}^{f L_1 0 \tilde{P}_{j'n}} A_{\lambda l j_3 j_4}^{L L_3 L_4 \tilde{Q}_{j'n}} R_{\Omega M} \delta_{S'_{pk} S_0} \delta_{\lambda' f}, \end{aligned} \quad (48)$$

где

$$\begin{aligned} \Omega_M = & \sum \langle j' m_{j'} j m_j | J M_J \rangle \langle l' m' \frac{1}{2} m'_{s_q} | j' m_{j'} \rangle \langle f m_f S_0 m_{S_0} | j m_j \rangle \\ & \times \langle l' m' f m_f | L M_L \rangle \langle \frac{1}{2} m'_{s_q} S_0 m_{S_0} | S M_S \rangle \langle L M_L S M_S | J M_J \rangle. \end{aligned} \quad (49)$$

В (49) суммирование проводится по всем магнитным проекциям, за исключением M_J . Легко заменить, что в (48) $j_1 = L_1$ и $j_2 = f - L_1$.

2.3. Матричные элементы $\langle p | \Gamma_q | k \rangle$

Обратимся теперь к наиболее общему случаю: базисные функции и проектор заданы в разных наборах координат Якоби $\hat{\mathbf{X}}_q$, $\hat{\mathbf{X}}_k$ и $\hat{\mathbf{X}}_p$.

$$\Gamma_{(pqk)ij}^{\tilde{\gamma}' \tilde{\gamma}}(f) = \langle p | \Gamma_q(f) | k \rangle = \sum_{mn} D_m D_n {}^{(mn)}\Gamma_{(pqk)ij}^{\tilde{\gamma}' \tilde{\gamma}}(f). \quad (50)$$

По аналогии с (16) представим ${}^{(mn)}\Gamma_{(pqk)ij}^{\tilde{\gamma}' \tilde{\gamma}}$ в виде

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(pqk)ij}^{\tilde{\gamma}' \tilde{\gamma}}(f) = & \frac{N_i N_j n_m n_n}{2j+1} \sum_{m_j} \int \left\{ x_p^{\lambda'} y_p^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{kq} L' S'}^{J M_J^*} \right\}_{(pq)}^{(\mathbf{x}_q \mathbf{y}_q)} \\ & \times \exp(-\tilde{\mu}_{(pq)im}^{\gamma'} x_q^2 - \nu_{(pq)i}^{\gamma'} y_q^2 - \rho_{(pq)i}^{\gamma'}(\mathbf{x}_q \mathbf{y}_q)) F_{f S_0}^{j m_j}(\hat{\mathbf{x}}_q) x_q^f \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q) F_{f S_0}^{j m_j^*}(\hat{\mathbf{x}}'_q) x_q'^f \\ & \times \left\{ x_k^{\lambda} y_k^l \mathcal{F}_{\gamma S_{qp} L S}^{J M_J} \right\}_{(kq)}^{(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}'_q)} \exp(-\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} x_q'^2 - \nu_{(kq)j}^{\gamma} y_q'^2 - \rho_{(kq)j}^{\gamma}(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}'_q)) d\mathbf{x}_q d\mathbf{y}_q d\mathbf{x}'_q d\mathbf{y}'_q, \end{aligned} \quad (51)$$

где

$$\tilde{\mu}_{(pq)im}^{\gamma'} = \mu_{(pq)i}^{\gamma'} + \frac{1}{2}\eta_m^2, \quad \tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} = \mu_{(kq)j}^{\gamma} + \frac{1}{2}\eta_n^2. \quad (52)$$

Преобразуя этот интеграл с использованием матриц (19) и с учетом представления (37) для функций $F_{fS_0}^{jm_j*}(\hat{\mathbf{x}}'_q)x_q'^f$ и $F_{fS_0}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}_q)x_q^f$, получаем аналог формулы (20)

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(pqk)ij}^{\gamma'\gamma}(f) = & 4\pi \frac{N_i N_j n_m n_n}{2j+1} \sum_{m_j} \int \left\{ x_p^{\lambda'} y_p^{l'} \mathcal{F}_{\gamma' S'_{kq} L' S'}^{JM_J^*} \right\}_{\tilde{Q}_{pim}}^{(\mathbf{x}' \mathbf{y}_q)} \left\{ x'_k{}^{\lambda} y'_k{}^l \mathcal{F}_{\gamma S_{qp} LS}^{JM_J} \right\}_{\tilde{Q}_{kqn}}^{(\mathbf{x}' \mathbf{y}_q)} \\ & \times \exp(-\tilde{\mu}_{(pq)im}^{\gamma'} x^2 - \tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} x'^2 - \tilde{\omega}_{qimn}^{\gamma'\gamma} y_q^2) \\ & \times \left\{ x_q^f y_q^0 \mathcal{F}_{(f0)S_0 f}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}_q, \hat{\mathbf{y}}_q) \right\}_{\tilde{P}_{im}}^{(\mathbf{x}' \mathbf{y}_q)} \left\{ x'_q{}^f y'_q{}^0 \mathcal{F}_{(f0)S_0 f}^{jm_j*}(\hat{\mathbf{x}}'_q, \hat{\mathbf{y}}'_q) \right\}_{\tilde{P}_{jn}}^{(\mathbf{x}' \mathbf{y}_q)} d\mathbf{x}' d\mathbf{x} d\mathbf{y}_q, \quad (53) \end{aligned}$$

где матрицы преобразования $\tilde{Q}_{pim} = (pq)\tilde{P}_{im}$ и $\tilde{Q}_{kqn} = (kq)\tilde{P}_{jn}$, а величина $\tilde{\omega}_{qimn}^{\gamma'\gamma} = \nu_{(pq)i}^{\gamma'} + \nu_{(kq)j}^{\gamma} - (\rho_{(pq)i}^{\gamma'})^2/4\tilde{\mu}_{(pq)im}^{\gamma'} - (\rho_{(kq)j}^{\gamma})^2/4\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma}$. Используя далее правила поворота [20] для шаровых функций в фигурных скобках, приводим уравнение (53) к виду

$$\begin{aligned} {}^{(mn)}\Gamma_{(pqk)ij}^{\gamma'\gamma}(f) = & 4\pi \frac{N_i N_j n_m n_n}{2j+1} \sum_{m_j} \sum_{L_1=0}^f \sum_{j_1 j_2}^{\lambda} \sum_{L_3=0}^{\lambda} \sum_{L_4=0}^l \sum_{j_3 j_4}^l \sum_{L_5=0}^f \sum_{j_5 j_6}^{\lambda'} \sum_{L_7=0}^{l'} \sum_{L_8=0}^{l'} \sum_{j_7 j_8}^{l'} \\ & \times A_{f0j_1 j_2}^{fL_1 0 \tilde{P}_{jn}} A_{\lambda l j_3 j_4}^{LL_3 L_4 \tilde{Q}_{jn}} A_{f0j_5 j_6}^{fL_5 0 \tilde{P}_{im}} A_{\lambda' l' j_7 j_8}^{L' L_7 L_8 \tilde{Q}_{im}} \times \bar{R} \bar{\Omega}, \quad (54) \end{aligned}$$

где $\bar{R}$ и $\bar{\Omega}$ — радиальный и спин-угловой интегралы:

$$\begin{aligned} \bar{R} = & \int_0^\infty x^{L_5+L_7+L_8+2} \exp(-\tilde{\mu}_{(pq)im}^{\gamma'} x^2) dx \int_0^\infty x'^{L_1+L_3+L_4+2} \exp(-\tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma} x'^2) dx' \\ & \times \int_0^\infty y_q^{\lambda'+l'+\lambda+l-(L_1+L_3+L_4+L_5+L_7+L_8)+2f+2} \exp(-\tilde{\omega}_{qimn}^{\gamma'\gamma} y_q^2) dy_q, \quad (55) \end{aligned}$$

$$\bar{\Omega} = \int \mathcal{F}_{(j_1 j_2)S_0 f}^{jm_j*}(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_3 j_4)S_{qp} LS}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_5 j_6)S_0 f}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_7 j_8)S'_{kq} L' S'}^{JM_J^*}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}_q) d\hat{\mathbf{x}}' d\hat{\mathbf{x}} d\hat{\mathbf{y}}_q. \quad (56)$$

Интеграл (55) равен:

$$\bar{R} = \frac{\Gamma\left(\frac{k_1+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{k_2+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{k_3+1}{2}\right)}{8\rho_1^{\frac{k_1+1}{2}} \rho_2^{\frac{k_2+1}{2}} \rho_3^{\frac{k_3+1}{2}}}, \quad (57)$$

где

$$k_1 = L_5 + L_7 + L_8 + 2, \quad k_2 = L_1 + L_3 + L_4 + 2, \quad k_3 = \lambda' + l' + \lambda + l - (k_1 + k_2) + 2f + 6, \quad (58)$$

$$\rho_1 = \tilde{\mu}_{(pq)im}^{\gamma'}, \quad \rho_2 = \tilde{\mu}_{(kq)jn}^{\gamma}, \quad \rho_3 = \tilde{\omega}_{qimn}^{\gamma'\gamma}. \quad (59)$$

Вычислим спин-угловой интеграл (56). Интегрируя по угловой переменной $\hat{\mathbf{x}}'$, получаем

$$\bar{\Omega} = \int I_\Omega(\hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_5 j_6)S_0 f}^{jm_j}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_7 j_8)S'_{kq} L' S'}^{JM_J^*}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}_q) d\hat{\mathbf{x}} d\hat{\mathbf{y}}_q, \quad (60)$$

где

$$I_\Omega(\hat{\mathbf{y}}_q) = \int \mathcal{F}_{(j_1 j_2)S_0 f}^{jm_j*}(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{(j_3 j_4)S_{qp} LS}^{JM_J}(\hat{\mathbf{x}}', \hat{\mathbf{y}}_q) d\hat{\mathbf{x}}'. \quad (61)$$

Расчет I_Ω дает

$$\begin{aligned} I_\Omega(\hat{\mathbf{y}}_q) = & \sum_{g_1=|j_1-S_0|}^{j_1+S_0} \sum_{g_4=j_4 \pm \frac{1}{2}} \sum_{m_2 \mu_1 \mu_4} (-1)^{j+f+j_1+j_4+S_0+S_{qp}+L} [g_1]([f][L][S][S_{qp}][S_0][g_4])^{1/2} \times \\ & \times \left\{ \begin{matrix} j_2 & j_1 & f \\ S_0 & j & g_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_{qp} \\ \frac{1}{2} & S & S_0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_4 & \frac{1}{2} & g_4 \\ j_1 & S_0 & g_1 \\ L & S & J \end{matrix} \right\} \langle j_2 m_2 g_1 \mu_1 | j m_j \rangle \langle g_4 \mu_4 g_1 \mu_1 | J M_J \rangle \\ & \times Y_{j_2 m_2}^*(\hat{\mathbf{y}}_q) \mathcal{F}_{j_4 S_q}^{g_4 \mu_4}(\hat{\mathbf{y}}_q) \delta_{j_1 j_3}. \quad (62) \end{aligned}$$

Подставляя (62) в (60) и интегрируя по $\hat{\mathbf{x}}$ и $\hat{\mathbf{y}}_q$, получаем

$$\bar{\Omega} = \delta_{j_1 j_3} \delta_{j_5 j_7} \sum_{g_1 g_4} \sum_{g=|j_2-j_4|}^{j_2+j_4} \frac{1}{4\pi} (-1)^{j+j_1+j_4+j_5+j_6+S_{qp}+L} [S_0][g_1][f]([L][S][S_{qp}][S'_{kp}][g_4][j_2][j_4][j_6])^{1/2} \times \\ \times \langle j_2 0 j_4 0 | g 0 \rangle \langle g 0 j_6 0 | j_8 0 \rangle \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S'_{kp} \\ \frac{1}{2} & S' & S_0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_{qp} \\ \frac{1}{2} & S & S_0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_2 & j_1 & f \\ S_0 & j & g_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} L' & f & g \\ j_6 & j_8 & j_5 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_4 & \frac{1}{2} & g_4 \\ j_1 & S_0 & g_1 \\ L & S & J \end{matrix} \right\} \bar{\Omega}_M, \quad (63)$$

где

$$\bar{\Omega}_M = \sum (-1)^{m_2} \langle j_2 m_2 g_1 \mu_1 | j m_j \rangle \langle g_4 \mu_4 g_1 \mu_1 | J M_J \rangle \langle j_2 - m_2 j_4 m_4 | g \mu \rangle \langle j_4 m_4 \frac{1}{2} m_{s_q} | g_4 \mu_4 \rangle \times \\ \times \langle f m_f S_0 m_{S_0} | j m_j \rangle \langle g \mu f m_f | L' M'_L \rangle \langle \frac{1}{2} m_{s_q} S_0 m_{S_0} | S' M'_S \rangle \langle L' M'_L S' M'_S | J M_J \rangle. \quad (64)$$

Здесь суммирование проводится по всем магнитным проекциям, за исключением M_J . После ряда преобразований (64) можно свести к виду

$$\bar{\Omega}_M = (-1)^{j+j_4+S_0+L'} [j]([g][g_4][L']([S'])^{1/2} \sum_{j=|j_2-f|}^{j_2+f} [f] \left\{ \begin{matrix} j_2 & f & j \\ L' & j_4 & g \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_2 & j & f \\ S_0 & j & g_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_4 & \frac{1}{2} & g_4 \\ L' & S' & J \end{matrix} \right\}. \quad (65)$$

Таким образом, матричный элемент проектора $\langle p | \Gamma_q | k \rangle$ дается совокупностью формул (54), (57), (63) и (65). Можно заметить, что в этих выражениях $j_1 = L_1$, $j_2 = f - L_1$, $j_5 = L_5$ и $j_6 = f - L_5$.

2.4. Перекрывание волновых функций

В завершение раздела 2 рассмотрим дополнительную величину, определяющую проекцию базисной функции $|\zeta\rangle \equiv \varphi_{\tilde{j}j}(\mathbf{x}_\zeta, \mathbf{y}_\zeta)$ на функцию $\varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}_q)$ (29), а именно их перекрывание $I_{q\zeta} = \langle \varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}_q) | \zeta \rangle$. Такие интегралы перекрывания необходимы, например, для расчета матричных элементов эффективно-го гамильтониана в дибарионной модели ядерных сил [21]. Рассчитаем $I_{q\zeta}$ для трех возможных наборов координат $\hat{\mathbf{X}}_\zeta$.

(1) $\zeta = q$

$$I_{qq} = \langle \varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}_q) | q \rangle = \sum_{n=1}^{N_f} D_n I_{qq}^{(n)}, \quad (66)$$

где

$$I_{qq}^{(n)} = N_j n_n \int F_{fS_0}^{jm_j*}(\hat{\mathbf{x}}_q) x_q^f \exp\left(-\frac{1}{2} \eta_n^2 x_q^2\right) x_q^\lambda y_q^l \mathcal{F}_{\gamma S_{pk} L S}^{J M_J}(\hat{\mathbf{x}}_q, \hat{\mathbf{y}}_q) \exp(-\alpha_{\lambda j} x_q^2 - \beta_{lj} y_q^2) d\mathbf{x}_q. \quad (67)$$

Опуская детали вычислений (67), приведем окончательный результат

$$I_{qq}^{(n)} = \delta_{\lambda f} \delta_{S_0 S_{pk}} N_j n_n (-1)^{\lambda+l+L} \frac{[\lambda]!! \sqrt{\pi [L][S][j][j]}}{2^{\lambda+2} \tilde{\alpha}_{jn}^{(2\lambda+3)/2}} y_q^l \exp(-\beta_{lj} y_q^2) \Omega(\hat{\mathbf{y}}_q), \quad (68)$$

$$\Omega(\hat{\mathbf{y}}_q) = \sum_{j m_j} \langle j m_j j m_j | J M_J \rangle \left\{ \begin{matrix} l & \frac{1}{2} & j \\ \lambda & S_{pk} & j \\ L & S & J \end{matrix} \right\} \mathcal{F}_{l s_q}^{j m_j}(\hat{\mathbf{y}}_q). \quad (69)$$

(2) $\zeta = k$

$$I_{qk} = \langle \varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}_q) | k \rangle = \sum_{n=1}^{N_f} D_n I_{qk}^{(n)}. \quad (70)$$

Функция $I_{qk}^{(n)}$ сводится к виду

$$I_{qk}^{(n)} = N_j n_n \int \left\{ 4\pi x_q^f y_q^0 \mathcal{F}_{(f0)S_0 f}^{jm_j*} \right\}_{\tilde{P}_{jn}}^{(\mathbf{x} \mathbf{y}_q)} \left\{ x_k^\lambda y_k^l \mathcal{F}_{\gamma S_{pk} L S}^{J M_J} \right\}_{\tilde{Q}_{jn}}^{(\mathbf{x} \mathbf{y}_q)} \exp(-\tilde{\mu}_{(kq)jn}^\gamma x^2 - \tilde{\omega}_{(kq)jn} y_q^2) d\mathbf{x}, \quad (71)$$

где

$$\tilde{\omega}_{(kq)jn} = \nu_{(kq)j}^\gamma - (\rho_{(kq)j}^\gamma)^2 / 4\tilde{\mu}_{(kq)jn}^\gamma, \quad \tilde{Q}_{jn} = (kq)\tilde{P}_{jn}. \quad (72)$$

Вычисление интеграла (71) дает

$$\begin{aligned} I_{qk}^{(n)} = & N_j n_n \sum_{L_1=0}^f \sum_{L_3=0}^\lambda \sum_{L_4=0}^l \sum_{j_4} A_{f0L_1(f-L_1)}^{fL_10\tilde{P}_{jn}} A_{\lambda l L_1 j_4}^{LL_3L_4\tilde{Q}_{jn}} \frac{\Gamma\left(\frac{L_1+L_3+L_4+3}{2}\right)}{2(\tilde{\mu}_{(kq)jn}^\gamma)^{\left(\frac{L_1+L_3+L_4+3}{2}\right)}} \times \\ & \times y_q^{f+\lambda+l-(L_1+L_3+L_4)} \exp(-\tilde{\omega}_{(kq)jn} y_q^2) \sum_{g_1=|L_1-S_0|}^{L_1+S_0} \sum_{g_4=j_4 \pm \frac{1}{2}}^{f-L_1+j_4} \sum_{g=|f-L_1-j_4|}^{f-L_1+j_4} \sum_{\bar{j}=g \pm \frac{1}{2}} \phi \times \\ & \times [g_1][g_4] \sqrt{[f][L][S][S_{qp}][S_0][j][f-L_1][j_4][\bar{j}]} \Upsilon, \quad (73) \end{aligned}$$

где ϕ — фазовый множитель:

$$\phi = (-1)^{j+g_1+\frac{1}{2}+S_0+S_{qp}+L-J} \quad (74)$$

и

$$\begin{aligned} \Upsilon = & \langle (f-L_1)0j_40|g0 \rangle \left\{ \begin{matrix} (f-L_1) & L_1 & f \\ S_0 & j & g_1 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \bar{j} & (f-L_1) & g_4 \\ j_4 & \frac{1}{2} & g \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & \bar{j} & j \\ (f-L_1) & g_1 & g_4 \end{matrix} \right\} \times \\ & \times \left\{ \begin{matrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & S_{qp} \\ \frac{1}{2} & S & S_0 \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} j_4 & \frac{1}{2} & g_4 \\ L_1 & S_0 & g_1 \\ L & S & J \end{matrix} \right\} \sum_{m_{\bar{j}}} \langle \bar{j} m_{\bar{j}} j m_j | J M_J \rangle F_{gs_q}^{\bar{j} m_{\bar{j}}}(\hat{\mathbf{y}}_q). \quad (75) \end{aligned}$$

$$(3) \quad \zeta = p$$

$$I_{qp} = \langle \varphi_{fS_0}^{jm_j}(\mathbf{x}_q) | p \rangle = \sum_{n=1}^{N_f} D_n I_{qp}^{(n)}. \quad (76)$$

Можно показать, что функция $I_{qp}^{(n)}$ сводится к выражению для $I_{qk}^{(n)}$ (73) с заменой индекса k на p и фазы ϕ на ϕ' :

$$\phi' = (-1)^{j+g_1+\frac{1}{2}+f+\lambda+L_4-L_1-L_3+L-J}. \quad (77)$$

3. ПРОЕКТИРОВАНИЕ ПОТЕНЦИАЛА

В этом разделе рассмотрим процедуру проектирования центрального потенциала парного взаимодействия частиц на определенную орбитальную волну в паре. Дело в том, что при использовании базиса (6) в наборе координат $\hat{X}_1$ орбитальные моменты, сопряженные координатам частиц в наборах $\hat{X}_2$ и $\hat{X}_3$, не определены, и учет орбитальной зависимости центрального взаимодействия в подсистемах (1,2) и (1,3) должен производиться с помощью операции проектирования.

Будем использовать следующее представление для двухчастичного потенциала, спроектированного на f -орбитальную волну и действующего в трехчастичной системе:

$$\hat{V}_f = \int \sum_{m_f=-f}^f Y_{fm_f}(\hat{\mathbf{x}}_q) \frac{\delta(x_q - x'_q)}{(x'_q)^2} V(\mathbf{r}'_{1p}) Y_{fm_f}^*(\hat{\mathbf{x}}'_q) \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q) d\mathbf{x}'_q d\mathbf{y}'_q, \quad (78)$$

где $(p, q) = (3, 2)$ или $(2, 3)$, а $V(\mathbf{r}'_{1p}) = V(\tau_{1p} x'_q)$ — потенциал взаимодействия в подсистеме $(1, p)$ (массовый коэффициент τ_{1p} дается выражением (3) в [20]). При вычислении матричного элемента потенциала (78) ограничимся случаем s -волновой базисной функции $\varphi_{\gamma j}^s$ (6) ($\lambda = l = L = 0$), которая в ряде случаев играет роль основной компоненты в полной волновой функции. При таком условии матричный элемент потенциала равен:

$$\hat{V}_{fij}^{\gamma' \gamma}(s) = \langle \varphi_{\gamma' i}^s | \hat{V}_f | \varphi_{\gamma j}^s \rangle = N_i N_j \sum_{m_f} I_{m_f}(\hat{V}_f) \delta_{S'_{23} S_{23}} \delta_{S' S}, \quad (79)$$

где

$$I_{m_f}(\hat{V}_f) = \int \frac{1}{(4\pi)^2} \exp(-\alpha_{\lambda'i} x_1^2 - \beta_{l'i} y_1^2) Y_{fm_f}(\hat{\mathbf{x}}_q) \frac{\delta(x_q - x'_q)}{(x'_q)^2} V(\tau_{1p} x'_q) \times \\ \times Y_{fm_f}^*(\hat{\mathbf{x}}'_q) \delta(\mathbf{y}_q - \mathbf{y}'_q) \exp(-\alpha_{\lambda j} x_1^2 - \beta_{l j} y_1^2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{y}_1 d\mathbf{x}'_q d\mathbf{y}'_q. \quad (80)$$

Производя перевязку базисных функций к другому набору координат Якоби $(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) \rightarrow (\mathbf{x}_q, \mathbf{y}_q)$, $(\mathbf{x}'_1, \mathbf{y}'_1) \rightarrow (\mathbf{x}'_q, \mathbf{y}'_q)$ и интегрируя по $\mathbf{y}'_q$, находим

$$I_{m_f}(\hat{V}_f) = \frac{1}{(4\pi)^2} \int \exp(-\mu_{qi}' x_q^2 - \nu_{qij}' y_q^2 - \rho_{qi}'(\mathbf{x}_q \mathbf{y}_q)) \times \exp(-\mu_{qj}' x_q'^2 - \rho_{qj}'(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}_q)) \times \\ \times Y_{fm_f}(\hat{\mathbf{x}}_q) Y_{fm_f}^*(\hat{\mathbf{x}}'_q) \frac{\delta(x_q - x'_q)}{(x'_q)^2} V(\tau_{1p} x'_q) d\mathbf{x}_q d\mathbf{y}_q d\mathbf{x}'_q. \quad (81)$$

Диагонализация квадратичной формы, стоящей в показателе первой экспоненты, с помощью замены переменных $(\mathbf{x}_q, \mathbf{y}_q) \rightarrow (\mathbf{x}_q, \mathbf{y})$ матрицей P_1 дает

$$I_{m_f}(\hat{V}_f) = \frac{1}{(4\pi)^2} \int \exp(-\mu_{qj}' x_q'^2 - \nu_{qij}' y^2 - \rho_{qj}'(\mathbf{x}'_q \mathbf{y})) \times \exp(-\varepsilon_{qij}' x_q^2 - \gamma_{qij}'(\mathbf{x}'_q \mathbf{x}_q)) \times \\ \times Y_{fm_f}(\hat{\mathbf{x}}_q) Y_{fm_f}^*(\hat{\mathbf{x}}'_q) \frac{\delta(x_q - x'_q)}{(x'_q)^2} V(\tau_{1p} x'_q) d\mathbf{x}_q d\mathbf{y} d\mathbf{x}'_q. \quad (82)$$

Проводя далее диагонализацию квадратичной формы $-(\mu_{qj}' x_q'^2 + \nu_{qij}' y^2 + \rho_{qj}'(\mathbf{x}'_q \mathbf{y}))$ с помощью преобразования $(\mathbf{x}'_q, \mathbf{y}) \rightarrow (\mathbf{x}'_q, \mathbf{y}')$ матрицей P_2 , получаем

$$I_{m_f}(\hat{V}_f) = \frac{1}{(4\pi)^2} \int \exp(-\nu_{qij}' y'^2) d\mathbf{y}' \int \exp(-\varepsilon_{qij}' x_q^2 - \varepsilon_{qji}' x_q'^2 - \gamma_{qij}'(\mathbf{x}'_q \mathbf{x}_q)) \times \\ \times Y_{fm_f}(\hat{\mathbf{x}}_q) Y_{fm_f}^*(\hat{\mathbf{x}}'_q) \frac{\delta(x_q - x'_q)}{(x'_q)^2} V(\tau_{1p} x'_q) d\mathbf{x}_q d\mathbf{x}'_q. \quad (83)$$

В выражениях (82) и (83) применены следующие обозначения:

$$\gamma_{qij}' = -\rho_{qi}' \rho_{qj}' / 2\nu_{qij}', \quad \varepsilon_{qij}' = \mu_{qi}' - (\rho_{qi}')^2 / 4\nu_{qij}', \quad (84)$$

$$P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ b_{ij} & 1 \end{pmatrix}, \quad P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ b_{ji} & 1 \end{pmatrix}, \quad (85)$$

$$b_{ij} = -\rho_{qi}' / 2\nu_{qij}', \quad b_{ji} = -\rho_{qj}' / 2\nu_{qij}'. \quad (86)$$

Воспользуемся разложением

$$\exp(-a\mathbf{x}\mathbf{y}) = 4\pi \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-\text{sgn } a)^l \left(\frac{\pi}{2|a|xy} \right)^{1/2} I_{l+1/2}(|a|xy) Y_{lm}(\hat{\mathbf{x}}) Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{y}}), \quad (87)$$

где $I_{l+1/2}$ — модифицированная функция Бесселя. Преобразуя $\exp(-\gamma_{qij}'(\mathbf{x}'_q \mathbf{x}_q))$ в (83) согласно (87) и интегрируя по $\mathbf{y}'$ и x'_q , находим

$$I_{m_f}(\hat{V}_f) = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{\pi}{\nu_{qij}'} \right)^{3/2} \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l (-\text{sgn } \gamma_{qij}')^l \left(\frac{\pi}{2|\gamma_{qij}'|} \right)^{1/2} \times \\ \times \int_0^{\infty} \exp(-\Omega_{qij}' x_q^2) x_q I_{l+1/2}(|\gamma_{qij}'| x_q^2) V(\tau_{1p} x_q) dx_q \times \\ \times \int Y_{fm_f}^*(\hat{\mathbf{x}}'_q) Y_{lm}(\hat{\mathbf{x}}'_q) d\hat{\mathbf{x}}'_q \int Y_{lm}^*(\hat{\mathbf{x}}_q) Y_{fm_f}(\hat{\mathbf{x}}_q) d\hat{\mathbf{x}}_q \quad (88)$$

где $\Omega_{qij}^{\gamma'\gamma} = \varepsilon_{qij}^{\gamma'\gamma} + \varepsilon_{qji}^{\gamma'\gamma} = \omega_{qij}^{\gamma'\gamma} - \gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}$. Подставляя теперь (88) в (79) и учитывая свойство ортонормированности сферических функций, получаем следующий результат:

$$\hat{V}_{fij}^{\gamma'\gamma}(s) = \delta_{S'_{23}S_{23}} \delta_{S'S} (2f+1) \frac{32P_{ij}(0,0,0,0)}{(2|\gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}|)^{1/2}(\nu_{qij}^{\gamma'\gamma})^{3/2}} (-\text{sgn } \gamma_{qij}^{\gamma'\gamma})^f \times R, \quad (89)$$

где радиальный интеграл R равен:

$$R = \int_0^\infty x \exp(-\Omega_{qij}^{\gamma'\gamma} x^2) I_{f+1/2}(|\gamma_{qij}^{\gamma'\gamma}| x^2) V(\tau_{1p} x) dx. \quad (90)$$

Поскольку в проведенном выше расчете были использованы s -волновые базисные функции, в формулах (89) и (90) $\gamma' = \gamma = 0$ и $L = 0$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе найдены матричные элементы парных проекторов, действующих в трехчастичной системе, в случае использования несимметризованного и симметризованного гауссова базиса. Кроме этого, рассчитаны перекрывания трехчастичных базисных функций с заданными двухчастичными функциями, а также описан метод проектирования двухчастичного центрального потенциала на состояние с определенным значением орбитального момента.

Полученные здесь формулы вместе с результатами работы [20] являются основой для создания компьютерных программ, предназначенных для вариационных расчетов трехчастичных систем с ядерным и кулоновским взаимодействиями. Причем относительно простая аналитическая структура найденных матричных элементов гамильтониана создает предпосылки для устойчивой работы таких программ на персональных компьютерах даже в случае матриц большой размерности.

Исследование выполнено в рамках государственного задания МГУ имени М.В. Ломоносова.

-
- [1] Wildermuth K., Tang Y.C. // A Unified Theory of the Nucleus, Academic Press Inc., 1977.
 - [2] Saito S. // Prog. Theor. Phys. **41**, 705 (1969).
 - [3] Краснопольский В.М., Кукулин В.И. // ЯФ. **20**, 5, 883 (1974). (Kukulin V.I., Krasnopolsky V.M. // Sov. J. Nucl. Phys. **20**, 5, 470 (1975)).
 - [4] Kukulin V.I., Neudatchin V.G., Smirnov Yu.F. // Nucl. Phys. A **245**, 429 (1975).
 - [5] Kukulin V.I., Pomerantsev V.N. // Ann. Phys.(N.Y.) **111**, 330 (1978).
 - [6] Кукулин В.И., Померанцев В.Н. // ЯФ. **27**, 6, 1668 (1978) // (Kukulin V.I., Pomerantsev V. N. // Sov. J. Nucl. Phys. **27**, 6, 875 (1978)).
 - [7] Kukulin V.I., Krasnopolsky V.M., Voronchev V.T., Sazonov P.B. // Nucl. Phys. A **417**, 128 (1984).
 - [8] 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)).
 - [9] Kukulin V.I., Pomerantsev V.N., Razikov Kh.D. et al. // Nucl. Phys. A **586**, 151 (1995).
 - [10] Pinilla E.C., Leidemann W., Orlandini G., Descouvemont P. // Phys. Rev. C **112**, 024003 (2025).
 - [11] Lazauskas R., Hiyama E., Carbonell J. // Phys. Rev. Lett. **130**, 102501 (2023).
 - [12] Hlophe L., Lei Jin, Elster Ch. et al. // Phys. Rev. C **96**, 064003 (2017).
 - [13] Capitani Y., Filandri E., Ji C. et al. // Phys. Rev. C **112**, 064005 (2025).
 - [14] Thim O., Ekström A., Forssén C. // Phys. Rev. C **112**, 064008 (2025).
 - [15] Mitroy J., Ryzhikh G.G. // Comput. Phys. Comm. **123**, 103 (1999).
 - [16] Ivanov I.A., Bromley M.W.J., Mitroy J. // Comput. Phys. Comm. **152**, 9 (2003).
 - [17] Wilde R.S., Fabrikant I.I. // Phys. Rev. A. **98**, 042703 (2018).
 - [18] 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)).
 - [19] Kukulin V.I., Krasnopolsky V.M. // J. Phys. G: Nucl. Phys. **3**, 795 (1977).
 - [20] Ворончев В.Т. // ВМУ. Сер. 3. Физ. Астрон. **81**, 1, 2610201 (2026). (Voronchev V.T. // Moscow Univ. Phys. Bull. **81**, 1, 62 (2026)).
 - [21] Pomerantsev V.N., Kukulin V.I., Voronchev V.T., Faessler A. // ЯФ. **68**, 9, 1511 (2005). // Phys. At. Nucl. **68**, 9, 1453 (2005).
 - [22] Турсунов Э.М., Разиков Х.Д., Кукулин В.И. и др. // ЯФ. **57**, 12, 2125 (1994) (Tursunov E.M., Razikov K.D., Kukulin V.I. et al. // Phys. At. Nucl. **57**, 12, 2075 (1994)).

Matrix Elements of Pair Projectors for a Three-Body System in a Gaussian basis

V. T. Voronchev^a, V. N. Pomerantsev^b

¹*Skobeltsyn Institute of Nuclear Physics, Lomonosov Moscow State University. Moscow 119991, Russia*

E-mail: ^avoronchev@srd.sinp.msu.ru, ^bpomeran@nucl-th.sinp.msu.ru

Analytical formulae have been obtained for matrix elements of operators of the pair-projector type, in particular Pauli projectors, for a three-body system when using a multidimensional Gaussian basis, including a symmetrised one. Expressions for the overlap of three-body basis functions with a given function of a pair of particles are presented. A method for projecting central two-body potentials in a three-body system onto a definite orbital state is also considered. The results can be used in variational calculations of three-body systems in nuclear, atomic, and molecular physics.

PACS: 21.60.-n, 21.45.-v.

Keywords: three-body system, pair projectors, Gaussian basis.

Received 05 May 2026.

English version: *Moscow University Physics Bulletin*. 2026. **81**, No. 3. Pp. .

Сведения об авторах

1. Ворончев Виктор Тихонович — доктор физ.-мат. наук, вед. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-58-68, e-mail: voronchev@srd.sinp.msu.ru.
2. Померанцев Владимир Назарович — кандидат физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-55-86, e-mail: pomeran@nucl-th.sinp.msu.ru.