

УЛЬТРАХОЛОДНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ В СИСТЕМЕ ТРЕХ АТОМОВ ГЕЛИЯ

Е. А. Колганова^{а,б}, А. К. Мотовилов^а, В. Зандхас^б

^а Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

^б Физический институт Боннского университета, Бонн, Германия

ВВЕДЕНИЕ	396
ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА ДЛЯ СИСТЕМЫ ТРЕХ ЧАСТИЦ С ТВЕРДЫМ КОРОМ	405
ПАРЦИАЛЬНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА ДЛЯ ТРЕХ ТОЖДЕСТВЕННЫХ БОЗОНОВ С ТВЕРДЫМ КОРОМ	414
ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПО ЭНЕРГИЯМ СВЯЗИ ТРИМЕРА ${}^4\text{He}_3$	420
ФАЗЫ И ДЛИНА РАССЕЯНИЯ АТОМА ${}^4\text{He}$ НА ДИМЕРЕ ${}^4\text{He}_2$	425
О ЕФИМОВСКОЙ ПРИРОДЕ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ ТРИМЕРА ${}^4\text{He}_3$	435
СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ И РАССЕЯНИЕ В СИСТЕМЕ ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$	440
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	449

УЛЬТРАХОЛОДНЫЕ СТОЛКНОВЕНИЯ В СИСТЕМЕ ТРЕХ АТОМОВ ГЕЛИЯ

Е. А. Колганова^{а,б}, А. К. Мотовилов^а, В. Зандхас^б

^а Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

^б Физический институт Боннского университета, Бонн, Германия

Дается описание дифференциальных уравнений Фаддеева для системы трех частиц с твердым кором. Проводится обзор численных результатов по энергиям связи тримеров ${}^4\text{He}_3$ и ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ и ультрахолодным столкновениям атомов ${}^{3,4}\text{He}$ с димером ${}^4\text{He}_2$, полученных на основании этих уравнений. Результаты, установленные с помощью дифференциальных уравнений Фаддеева для модели твердого кора, сравниваются с аналогичными результатами, полученными при использовании других методов.

We describe the Faddeev differential equations for a system of three particles with hard-core interactions. Then we review the numerical results obtained with these equations on binding energies of the ${}^4\text{He}_3$ and ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ trimers as well as the ones on ultracold collisions of the ${}^{3,4}\text{He}$ atoms with the ${}^4\text{He}_2$ dimers. The hard-core Faddeev results are compared with analogous results obtained within different approaches.

PACS: 21.45.-v, 31.15.-p, 34.50.-s

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение трехатомных систем, состоящих из атомов гелия, представляет значительный интерес для различных областей физической химии и молекулярной физики. Так, исследования димера и тримера ${}^4\text{He}$ являются важным шагом на пути к пониманию свойств капель жидкого гелия, сверхтекучести в пленках ${}^4\text{He}$ и т. д. (см., например, [1, 2]). Большой интерес к кластерам, состоящим из небольшого числа атомов ${}^4\text{He}$, порождается также непрекращающимся бумом в исследованиях бозе-эйнштейновской конденсации ультрахолодных газов (см., например, [3, 4]).

Напомним, что гелий как элемент представлен только двумя стабильными изотопами — ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$. При этом атомы ${}^4\text{He}$ являются бозонами, а атомы ${}^3\text{He}$ — фермионами. Ультрахолодные многоатомные системы ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$ обладают совершенно различными свойствами. При температурах, достижимых при использовании современной техники лазерного охлаждения,

гелий ${}^3\text{He}$ ведет себя как обычная жидкость. В то же время жидкий гелий ${}^4\text{He}$ переходит в макроскопически упорядоченное состояние, обладающее свойством сверхтекучести [5]. Малая масса атомов гелия, а также тот факт, что притягивающая компонента во взаимодействии между ними является относительно слабой, приводят к тому, что при нормальном атмосферном давлении гелий остается жидким даже при температуре, равной абсолютному нулю [6].

Как известно, слабое ван-дер-ваальсовское притяжение между нейтральными атомами и молекулами возникает благодаря взаимодействию между постоянными и/или наведенными электрическими моментами (дипольными, квадрупольными и т. д.). Впервые на это было указано в начале 1920-х гг., т. е. еще до создания квантовой механики, в пионерских работах Дебая [7] и Кеэзома [8,9]. В 1924 г. Джонс [10] установил, что для ограниченности второго вириального коэффициента требуется, чтобы силы взаимодействия между молекулами разреженного газа убывали на больших расстояниях r между ними не медленнее, чем r^{-4} , и в качестве простейшей модели для таких взаимодействий предложил потенциал вида

$$V(r) = -\frac{\lambda_m}{r^m} + \frac{\lambda_n}{r^n}, \quad \lambda_m, \lambda_n \geq 0, \quad (1.1)$$

с целыми $m, n \geq 3$. В дальнейшем модель (1.1) приобрела большую известность и нашла многочисленные применения под названием потенциала Леннарда-Джонса*. При этом в форме $(m - n)$ или (m, n) часто указывалось на то, какие степени m и n вовлечены в представление (1.1). Обсуждение потенциала Леннарда-Джонса и результаты его сравнения с другими ранними моделями атом-атомных и межмолекулярных сил можно найти в замечательном обзоре [11]. Сравнение потенциала Леннарда-Джонса (6–12) с современными атом-атомными потенциалами для гелия проводится в [12].

Все фундаментальные вопросы по поводу природы межатомных и межмолекулярных сил были разрешены вскоре после создания квантовой механики и выяснения электронного строения атома. Наряду с кулоновским взаимодействием между электронами и ядрами свойства этих сил определяются тем фактом, что электроны являются частицами со спином $1/2$ и подчиняются статистике Ферми. Главной целью теории атом-атомных взаимодействий является отделение электронных степеней свободы и построение тех или иных эффективных потенциалов, позволяющих описывать силы, действующие между атомами, только в терминах расстояний между их ядрами. В общем случае эффективные потенциалы могут содержать зависимость также от спиновых

*После женитьбы на К.Леннард в 1925 г. Дж.Джонс присоединил к своей фамилии фамилию жены.

и орбитальных переменных (см., например, [13, разд. II.D]). Обычно при рассмотрении атом-атомных столкновений при низких энергиях оказывается достаточным ограничиваться приближением Борна–Оппенгеймера [14, 15]. В сущности, в современных *ab initio* расчетах атом-атомных потенциалов под величиной $V(r)$ потенциала V в точке r понимается разность между полной энергией основного состояния системы двух взаимодействующих атомов при удалении их ядер на расстояние r друг от друга и суммой полных энергий основных состояний тех же атомов (см., например, [16, 17]). Основным условием непосредственной применимости таких потенциалов является адиабатичность движения ядер по отношению к электронам: скорости ядер должны быть много меньше скоростей электронов. Обсуждение величины и роли различных поправок к приближению Борна–Оппенгеймера можно найти, например, в уже упоминавшейся работе [13].

Первый приближенный квантово-механический расчет взаимодействия между двумя атомами на больших расстояниях был выполнен в 1927 г. Вангом [18]. Собственно, уже в этой работе было показано, что потенциал притяжения атомов водорода друг к другу должен убывать обратно пропорционально шестой степени расстояния r между их ядрами. Первые квантово-механические результаты по ван-дер-ваальсовскому взаимодействию между атомами гелия относятся к 1928 г., когда Слэтер произвел оценку этого взаимодействия в статье [19]. Важную роль в обосновании того факта, что в старшем порядке потенциал дисперсионных сил, действующих между атомами благородных газов, убывает как r^{-6} , сыграли работы Лондона [20] и Лондона и Айзеншница [21]. Эти работы, а также работа Слэтера и Кирквуда [22] инициировали огромное количество последующих расчетов атом-атомных потенциальных кривых. Среди ранних потенциалов, описывающих взаимодействие между атомами гелия, наиболее удачным считается вариант потенциала Леннарда-Джонса (6–12), предложенный в 1938 г. де Буром и Майкелсом [23]. Этот потенциал хорошо воспроизводил известные в то время экспериментальные значения вторых вириальных коэффициентов. По мере накопления и повышения качества экспериментального материала усовершенствованные потенциальные кривые должны были воспроизводить, наряду со вторыми вириальными коэффициентами, и иные экспериментальные данные, доступные на момент построения того или иного потенциала. К таким данным могли относиться сечения рассеяния в пучках, транспортные характеристики газов, в частности, их вязкость и теплопроводность, а также результаты по ядерной магнитной релаксации (в случае газа ^3He). В последние 20–30 лет совершенствованию межатомных потенциалов содействовало очень быстрое расширение вычислительных возможностей.

Отметим, что при проведении чисто теоретических *ab initio* расчетов потенциальных кривых их авторы, как правило, ограничиваются предъявлением

значений потенциала в табличном виде (см., например, [24–26]). Результатом подгонки параметров того или иного феноменологического или полуфеноменологического потенциала оказывается достаточно простое аналитическое представление (см., например, [27–29]). Весьма детальное изложение истории фитирования феноменологических и полуфеноменологических потенциальных кривых, а также теоретических расчетов потенциала взаимодействия между атомами гелия может быть найдено в [24, 30–32]. В настоящее время наиболее адекватными считаются полуфеноменологические потенциалы, построенные Азизом с сотрудниками [27, 30, 33, 34], в частности, потенциал LM2M2 из [34], а также чисто теоретический потенциал ТТУ — Танга, Тоенниса и Йиу [35]. Следует подчеркнуть, что последний был построен на основании теории возмущений. Потенциал ТТУ не содержит ни одного подгоночного параметра и описывается относительно простым аналитическим выражением. Значительный интерес представляет также теоретический потенциал Короны с сотрудниками [16], отфитированный с использованием функциональной зависимости Танга–Тоенниса из [32]. *Ab initio* потенциалы Янцена и Азиза из [30] получены путем модификации потенциала [16], вводящей запаздывание в диполь-дипольный дисперсионный член с r^{-6} и порождающей в итоге нестандартное асимптотическое убывание типа r^{-7} для результирующих взаимодействий.

Вопрос о существовании связанного состояния двух атомов ${}^4\text{He}$ многие годы оставался открытым. Некоторые потенциальные модели [27, 36, 37] предсказывали существование такого состояния, тогда как другие [28, 38] — нет. Однако практически все более или менее реалистические потенциалы приводили к очень большой длине атом-атомного рассеяния порядка 90–100 Å или даже больше (см. [31, табл. I]). Последнее обстоятельство позволяло предположить, что система трех атомов ${}^4\text{He}$ может обладать хотя бы одним связанным состоянием ефимовского типа [39, 40]. Впервые это предположение было высказано и обосновано в [41]. Почти все реалистические He–He-потенциалы, построенные в конце 1970-х гг. и позднее, уже поддерживали димер ${}^4\text{He}_2$, хотя значения его энергии могли различаться в десятки раз [24, 27, 42]. Потенциалы Азиза с сотрудниками [30, 33, 34] и Танга, Тоенниса и Йиу [35] предсказывают существование димера ${}^4\text{He}_2$ с энергией порядка 1,3–1,7 мК.

Димер ${}^4\text{He}_2$ был открыт в независимых экспериментах [43] и [44]. Наряду с димером в эксперименте [44] было установлено существование тримера ${}^4\text{He}_3$. Первая экспериментальная оценка размера молекулы ${}^4\text{He}_2$ была получена в [45]. Согласно этой оценке среднее расстояние между ядрами ${}^4\text{He}$ в димере ${}^4\text{He}_2$ составляет (62 ± 10) Å. Несколькими годами позже длина связи димера ${}^4\text{He}_2$ была измерена еще раз в [46]. Согласно [46] эта длина равна (52 ± 4) Å. Оценки [45] и [46] указывают на то, что ${}^4\text{He}_2$ является самой протяженной среди известных двухатомных молекул (разумеется, речь идет

об основных состояниях). Результаты измерения [46] позволили дать также оценки атом-атомной длины рассеяния (104_{-18}^{+8} Å) и энергии связи димера ($1,1_{-0,2}^{+0,3}$ мК).

Поскольку энергия димера столь мала, следует ожидать, что тример ${}^4\text{He}_3$ действительно обладает теоретически предсказанным состоянием ефимовского типа (см. [41, 47–49]). Именно это свойство отличает атомы ${}^4\text{He}$ от атомов других инертных газов и делает кластеры ${}^4\text{He}$ особенно интересным объектом исследований. Ввиду возможного проявления эффекта Ефимова [50] тример ${}^4\text{He}_3$ представляет несомненный интерес и для специалистов по ядерной физике. В 2000 г. было высказано интересное предположение [51] о возможности экспериментального обнаружения ефимовского состояния у тримера ${}^4\text{He}_3$ при рассеянии пучка ультрахолодных кластеров ${}^4\text{He}$ на дифракционной решетке с достаточно малым шагом (порядка 100 нм или меньше). Практическая реализация [52] этого предложения пока не привела к явному успеху, и на данный момент (середина 2007 г.) надежные экспериментальные свидетельства существования возбужденного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$ все еще отсутствуют. В эксперименте [52], однако, была впервые дана оценка размеров основного состояния молекулы ${}^4\text{He}_3$.

Наличие реалистических эффективных межатомных потенциалов позволяет свести исследование системы трех атомов гелия (включающей девять частиц — три атомных ядра и шесть электронов) к изучению системы, состоящей всего лишь из трех точечных бесструктурных частиц. Такое описание должно быть удовлетворительным, по крайней мере, при достаточно низких энергиях движения атомов. Сведение задачи трех атомов гелия к задаче трех бесструктурных частиц подразумевает также, что к ее решению могут быть привлечены хорошо развитые методы общей теории систем нескольких частиц [53], использование которых не требует никаких дальнейших физических приближений. Более того, в такой постановке задача трех атомов ${}^4\text{He}$ может рассматриваться как пример практически идеальной квантовой задачи трех тел, поскольку атомы ${}^4\text{He}$ являются тождественными нейтральными бозонами с нулевым спином, и тем самым ее анализ не отягощается ни отделением спин-изоспиновых переменных, ни учетом кулоновского взаимодействия. Несмотря на всю свою «идеальность», тример гелия ${}^4\text{He}$ относится к тем трехчастичным системам, которые наиболее трудны для конкретного численного исследования. Во-первых, это связано с малостью энергии связи димера ε_d , означающей, что при поиске возбужденного состояния и решении задач рассеяния необходимо включать в рассмотрение весьма протяженные области конфигурационного пространства с характерным размером в сотни или даже тысячи ангстрем. Во-вторых, присутствие очень сильной отталкивательной компоненты в эффективном потенциале взаимодействия между атомами гелия порождает большие погрешности при стандартной аппрокси-

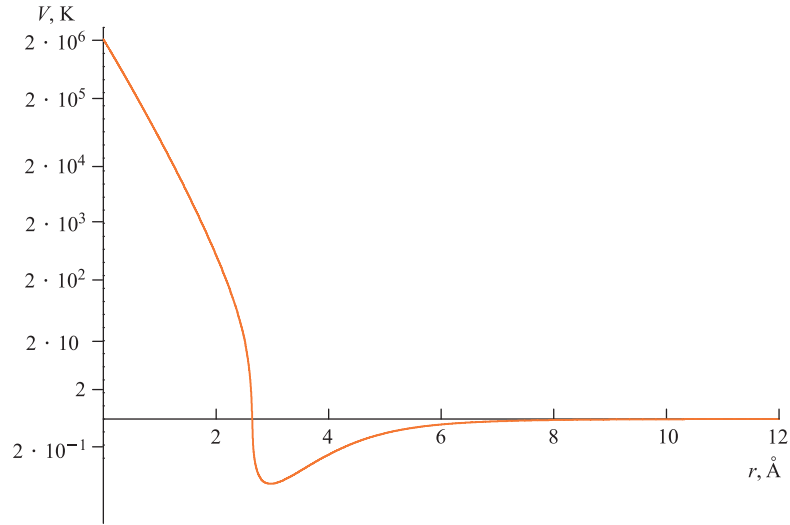


Рис. 1. Зависимость значений V межатомного He–He-потенциала LM2M2 [34] от расстояния r между атомами

мации трехатомного гамильтониана на малых расстояниях между атомами. В качестве иллюстрации поведения эффективных потенциалов на малых расстояниях между атомами гелия мы приводим на рис. 1 график зависимости от расстояния для одного из наиболее популярных реалистических межатомных He–He-взаимодействий — потенциала LM2M2 из [34]. Следуя [24], при отображении значений V этого потенциала мы используем масштабирующую функцию $f(V) = \text{sign}(V) \ln(1 + |V|)$.

На протяжении последних тридцати лет было проведено множество теоретических расчетов системы ${}^4\text{He}_3$ с различными реалистическими атомными потенциалами. При этом наряду с традиционными для физической химии вариационными подходами (см., например, [6, 54–58]) применялись методы, основанные на использовании гиперсферических адиабатических разложений [59, 60], а также подходы, предусматривающие прямое решение уравнений Фаддеева как в интегральной [47, 61], так и в дифференциальной форме [62–66]. Хотя количество работ, посвященных теоретическому исследованию системы трех атомов гелия, велико, значительная часть опубликованных результатов относится только к энергии основного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$. В особенности это касается работ, выполненных до середины 1990-х гг. Ввиду трудностей, упомянутых выше, возбужденные состояния тримера ${}^4\text{He}_3$ изучались лишь в сравнительно небольшом числе работ. Относительно недавний обзор результатов по энергиям связи системы

${}^4\text{He}_3$ содержится в статье [63]. Существенная часть этого обзора воспроизводится ниже в разд. 4. Уже упоминавшийся эксперимент [52] с рассеянием пучков ультрахолодных кластеров ${}^4\text{He}$ на дифракционных решетках показал, что длина атом-атомной связи в основном состоянии тримера ${}^4\text{He}_3$ составляет $(11_{-5}^{+4}) \text{ \AA}$, что вполне согласуется с результатами расчетов энергии основного состояния, выполненных во второй половине 1990-х — начале 2000-х гг. с использованием реалистических межатомных потенциалов (см. табл. 2). В частности, потенциалы LM2M2 [34] и ТТУ [35] дают для этой энергии величину около 126 мК. При этом энергия возбужденного состояния составляет всего лишь 2,28 мК (см. табл. 3). Оба связанных состояния относятся к случаю, когда полный угловой момент L трехатомной системы ${}^4\text{He}_3$ равен нулю. При $L \geq 1$ связанных состояний не обнаружено [67, 68].

Что касается процессов рассеяния в системе трех атомов ${}^4\text{He}$, то расчеты этих процессов на основе реалистических атом-атомных потенциалов являются даже более редкими, чем расчеты возбужденного состояния. Оценки некоторых характеристик рассеяния атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ при нулевой энергии и длины ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния были сделаны в [55, 61]. Расчеты фаз упругого ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния были впервые проведены в работах [62, 63, 69], причем как выше, так и ниже порога развала системы на три атома. При этом в [62] проводились также расчеты амплитуд развала. Позднее расчет ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -фаз ниже порога развала был осуществлен в [70]. Недавняя работа [71] содержит результаты расчета ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -фаз для значений полной энергии, находящихся в ближайшей окрестности двухчастичного порога ε_d . Наиболее надежные на данный момент теоретические результаты по длине ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния можно найти в [70–72]. В случае потенциалов LM2M2 [34] и ТТУ [35] вычисленные значения этой величины находятся в интервале между 115 и 116 \AA . Отметим, что при проведении расчетов характеристик системы ${}^4\text{He}_3$ в работах [62, 63, 69–71] отправной точкой являлись дифференциальные уравнения Фаддеева в координатном пространстве [73].

Мы уже коснулись основных проблем, делающих расчеты возбужденных состояний и рассеяния в системе трех атомов ${}^4\text{He}$ особенно трудными. Первая из этих проблем — обеспечение выхода на асимптотику волновой функции рассеяния — может быть решена лишь путем выбора сеток с достаточно большим радиусом обрезания по пространственным переменным. При этом нужно гарантировать и достаточно высокую плотность распределения узлов. В свою очередь, выбор больших сеток неизбежно подразумевает использование для вычислений наиболее мощных и современных компьютеров, организация доступа к которым представляет собой, как правило, не слишком простую задачу. Одним из способов решения второй проблемы, связанной с присутствием очень сильной отталкивательной компоненты в межатомном взаимодействии на малых расстояниях, является аппроксимация этой компоненты «потенциалом» твердого тела. Такая аппроксимация дает возможность

при исследовании системы ${}^4\text{He}_3$ использовать математически строгий метод решения задачи нескольких тел в модели граничных условий, развитый в [74–77] на основании аппарата дифференциальных уравнений Фаддеева–Якубовского. Важным практическим преимуществом данного метода, радикально уменьшающим вычислительные погрешности, является необходимость аппроксимировать внутри областей кора лишь оператор Лапласа, а не сумму лапласиана и гигантской отталкивающей составляющей потенциала He–He-взаимодействия. В [62, 63, 69] указанный подход был успешно применен как при расчетах рассеяния, так и при вычислении энергий основного и возбужденного состояний тримера гелия. В работе Лазаускаса и Карбонеля [71] подход, основанный на методе [76, 77], применяется для расчета связанных состояний и характеристик рассеяния не только в трехатомной системе ${}^4\text{He}_3$, но и в четырехатомной системе ${}^4\text{He}_4$. При численном исследовании свойств системы ${}^4\text{He}_3$ в [64, 65, 70] для преодоления проблемы сильного отталкивания между атомами гелия на малых расстояниях используется специальный трюк, достаточно прозрачно описанный в [65]. Этот трюк состоит во введении в промежуточные матричные уравнения некоторого вспомогательного потенциального члена, сохраняющего физический спектр исходной задачи, но гасящего эффект твердого кора и ускоряющего сходимость используемого в [64, 65, 70] итерационного алгоритма, основанного на схеме Арнольди.

Поскольку атом ${}^3\text{He}$ имеет ровно такое же электронное строение, что и атом ${}^4\text{He}$, межатомные ${}^3\text{He}$ – ${}^3\text{He}$ - и ${}^3\text{He}$ – ${}^4\text{He}$ -взаимодействия не отличаются от взаимодействия между атомами ${}^4\text{He}$. Ввиду того, что масса атома ${}^3\text{He}$ на четверть меньше массы атома ${}^4\text{He}$, реалистические He–He-потенциалы не поддерживают связанных состояний ни у какой из двухатомных систем ${}^3\text{He}$ – ${}^3\text{He}$ и ${}^3\text{He}$ – ${}^4\text{He}$ [59, 60]. В эксперименте отсутствие связанного состояния у системы ${}^3\text{He}$ – ${}^4\text{He}$ было установлено еще в [43]. Как показывает расчет [78], связанное состояние этой системы не существовало бы, даже если бы масса ${}^3\text{He}$ составляла 94 % массы атома ${}^4\text{He}$. Таким образом, обе системы ${}^3\text{He}$ – ${}^3\text{He}$ и ${}^3\text{He}$ – ${}^4\text{He}$ оказываются весьма далекими от образования связанного состояния или даже окологорогового резонанса. По этой причине ни от одной из трехатомных систем — ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$, ${}^3\text{He}_2{}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}_3$ — не следует ожидать проявлений эффекта Ефимова (в отличие от уже обсуждавшегося выше тримера ${}^4\text{He}_3$). Согласно предсказаниям [59, 60] системы ${}^3\text{He}_2{}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}_3$ не имеют связанных состояний вообще, а система ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ обладает только одним таким состоянием. Более поздние расчеты [78–81] указывают на то, что в случае потенциалов LM2M2 и ТТУ энергия связанного состояния ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ составляет около 14 мК. Результаты расчета фаз и длины рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$, проведенного с использованием потенциала ТТУ [35], были впервые опубликованы в [80]. К расчету [80] вскоре добавился расчет [78, 82] длины ${}^3\text{He}$ – ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния в случае потенциала LM2M2 [34].

В статье [81] длины ${}^3\text{He}\text{-}{}^4\text{He}_2$ -рассеяния представлены уже для пяти различных реалистических межатомных взаимодействий. В случае потенциалов ТТУ и LM2M2 вычисленные в [78, 80, 81] значения этой длины находятся в интервале между 19,4 и 21,2 Å. Тем самым длина рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ оказывается почти в пять раз меньшей, чем аналогичная длина для атома ${}^4\text{He}$. Отметим, что расчеты [78, 80, 82] основывались на использовании двумерных парциальных интегродифференциальных уравнений Фаддеева для потенциалов с твердым кором [62, 77], а численные результаты [81] получены на основании трехмерных дифференциальных уравнений Фаддеева в представлении полного углового момента [83]. Надо сказать, что численные расчеты несимметричной системы ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ в известном смысле существенно проще, нежели расчеты системы ${}^4\text{He}_3$, поскольку выход на асимптотику компонент Фаддеева происходит при гораздо меньших значениях гиперрадиуса.

В настоящем обзоре мы совсем не касаемся результатов по рекомбинационным процессам в системе трех атомов гелия, хотя они очень важны. Рекомбинация является одним из основных факторов [84–87], уменьшающих значения экспериментально достижимых плотностей бозе-конденсатов и, более того, разрушающих бозе-конденсаты. Здесь мы ограничиваемся лишь тем, что даем ссылки [88–92] на ряд работ, посвященных, в числе прочего, определению и расчетам коэффициента рекомбинации в системе трех атомов ${}^4\text{He}$.

Опишем структуру статьи. Разд. 2 и 3 посвящены формулированию краевых задач для дифференциальных уравнений Фаддеева в случае потенциалов с твердым кором. При этом в разд. 2 рассматривается система трех бесспиновых различимых частиц, тогда как в разд. 3 частицы считаются тождественными бозонами с нулевым спином. В числе прочего в разд. 3 формулируются парциальные двумерные интегродифференциальные уравнения Фаддеева, удобные для проведения численных расчетов. Разд. 4 содержит сводку численных результатов по связанным состояниям тримера ${}^4\text{He}_3$. Здесь же описывается сеточная аппроксимация парциальных уравнений Фаддеева. Разд. 5 содержит описание и обсуждение результатов по фазам и длинам упругого рассеяния атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$. В разд. 6 рассматриваются доводы в пользу утверждения о том, что возбужденное состояние тримера ${}^4\text{He}_3$ имеет ефимовскую природу. В заключительном разд. 7 дается обзор результатов по энергии связи несимметричной системы ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$. Кроме того, в этом разделе приводятся все известные на данный момент результаты по фазам и длине рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$. Наконец, в приложении описываются несколько реалистических межатомных He–He-потенциалов, широко использующихся при проведении численных расчетов системы трех атомов гелия.

Условимся о некоторых обозначениях, используемых на протяжении всей работы. В предположении, что $\mathbf{p} \in \mathbb{R}^3$, через $\hat{\mathbf{p}}$ обычно обозначается единичный вектор в направлении \mathbf{p} , $\hat{\mathbf{p}} = \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$. Аналогично, если $P \in \mathbb{R}^6$, то соответ-

ствующий единичный вектор обозначается через \hat{P} , $\hat{P} = P/|P|$. Обозначение S^{n-1} используется для единичной сферы в \mathbb{R}^n . Скалярное произведение векторов \mathbf{p} и \mathbf{x} из \mathbb{R}^3 обозначается через $\mathbf{p} \cdot \mathbf{x}$. Всюду под $\sqrt{z - \lambda}$, $z \in \mathbb{C}$, $\lambda \in \mathbb{R}$, будет пониматься главная ветвь функции $(z - \lambda)^{1/2}$.

2. ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА ДЛЯ СИСТЕМЫ ТРЕХ ЧАСТИЦ С ТВЕРДЫМ КОРОМ

Одним из эффективных методов исследования конкретных трехчастичных систем является вычислительный алгоритм [73] (см. также [53, 93]), основанный на использовании дифференциальных уравнений Фаддеева. Этот метод позволяет относительно легко вычислять волновые функции рассеяния и соответствующие амплитуды для процессов $2 \rightarrow 2, 3$. Распространение [94, 95] дифференциальной формулировки задачи рассеяния $2 \rightarrow 2, 3$ в область комплексных энергий дает также возможность вычисления резонансов (см. [48, 96, 97]).

Напомним, что впервые дифференциальные уравнения Фаддеева в своей простейшей парциальной версии появились в работе Нойеса и Фидельдея [98]. Детальное исследование полной версии дифференциальных уравнений Фаддеева для случая обычных быстро убывающих потенциалов было проведено в статье Меркурьева, Жиню и Лаверна [73]. В числе прочего в [73] сформулированы и обоснованы краевые задачи для этих уравнений, имеющие непосредственный физический смысл и представляющие интерес с точки зрения трехчастичного рассеяния. После выхода работы [73] прошло уже более тридцати лет. В течение всего этого периода популярность дифференциальных уравнений Фаддеева лишь нарастала. В настоящее время эти уравнения рассматриваются как наиболее эффективный и удобный инструмент для проведения численных расчетов рассеяния в различных конкретных трехчастичных системах. Материал по дифференциальным уравнениям Фаддеева для случая обычных потенциалов занимает важное место в известной монографии [53], включая обобщения на трехчастичные системы с кулоновскими взаимодействиями, а также на системы с произвольным числом частиц (дифференциальные уравнения Якубовского [99, 100]).

В настоящей работе для описания взаимодействий между частицами наряду с обычными потенциалами мы будем использовать модель граничных условий (см., например, [101]), а точнее, ее вариант, известный как модель твердых сфер. Сингулярные взаимодействия, порождаемые этой моделью, обычно называют потенциалами с твердым кором. Модель твердого кора нередко оказывается весьма удачным приближением для взаимодействия между частицами на малых расстояниях. Именно так обстоит дело в случае реалистических атом-атомных потенциалов [27, 33–35], имеющих чрезвычайно

мощную отталкивательную компоненту. Именно поэтому сначала мы приводим факты и утверждения, касающиеся дифференциальных уравнений Фаддеева для системы трех частиц с твердым кором. Отметим, что фредгольмовы интегральные уравнения фаддеевского типа для системы трех тел в модели граничных условий, а также дифференциальные уравнения Фаддеева для этой модели были найдены в работах [74, 75] (см. также статью [77] и обзор [93]). Обобщение на случай задачи N тел — в форме дифференциальных уравнений Якубовского для модели граничных условий — дано в статье [76]. Детальный анализ задачи рассеяния для системы трех тел в модели граничных условий и обоснование соответствующих краевых задач для дифференциальных уравнений Фаддеева были представлены в [102]. При кратком изложении всех этих результатов мы будем в существенном следовать работе [62].

Мы начинаем с описания используемых обозначений. Векторы из \mathbb{R}^3 будут обозначаться полужирным курсивом, тогда как обычный курсив резервируется для длин векторов. Положение системы трех частиц в конфигурационном пространстве будет характеризоваться парами приведенных относительных векторов (координат Якоби) [53] $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$, $\alpha = 1, 2, 3$, выражающихся через радиус-векторы частиц $\mathbf{r}_\alpha \in \mathbb{R}^3$ и их массы m_α по формулам

$$\begin{aligned}\mathbf{x}_\alpha &= \left(\frac{2m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right)^{1/2} (\mathbf{r}_\beta - \mathbf{r}_\gamma), \\ \mathbf{y}_\alpha &= \left(\frac{2m_\alpha(m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma} \right)^{1/2} \left(\mathbf{r}_\alpha - \frac{m_\beta \mathbf{r}_\beta + m_\gamma \mathbf{r}_\gamma}{m_\beta + m_\gamma} \right),\end{aligned}\tag{2.1}$$

где α, β и γ образуют циклическую перестановку индексов 1, 2, 3. Движение центра масс будет считаться уже отделенным.

Векторы Якоби $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$ задают шестимерные векторы $X \equiv (\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) \in \mathbb{R}^6$. Координаты $\mathbf{x}_\beta, \mathbf{y}_\beta$, отвечающие при $\beta \neq \alpha$ тому же вектору X , что и пара $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$, получаются из $\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha$ преобразованием поворота

$$\begin{pmatrix} \mathbf{x}_\beta \\ \mathbf{y}_\beta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c_{\beta\alpha} & s_{\beta\alpha} \\ -s_{\beta\alpha} & c_{\beta\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{x}_\alpha \\ \mathbf{y}_\alpha \end{pmatrix},$$

где коэффициенты $c_{\beta\alpha}, s_{\beta\alpha}$ даются формулами (см., например, [53])

$$c_{\beta\alpha} = - \left(\frac{m_\alpha m_\beta}{(m_\alpha + m_\gamma)(m_\beta + m_\gamma)} \right)^{1/2}, \tag{2.2}$$

$$s_{\beta\alpha} = (-1)^{\beta-\alpha} \operatorname{sign}(\alpha - \beta) (1 - c_{\beta\alpha}^2)^{1/2}. \tag{2.3}$$

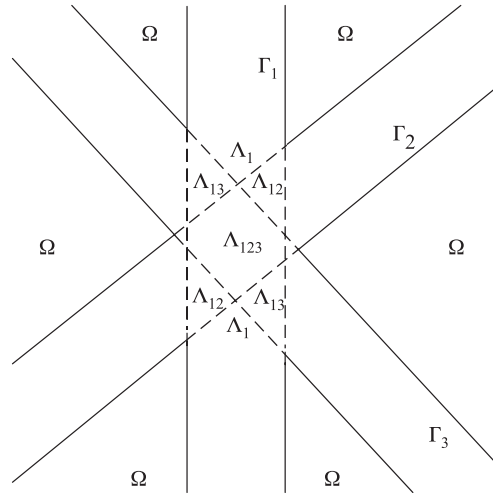


Рис. 2. Конфигурационное пространство (область Ω) системы трех одномерных частиц с парным взаимодействием, включающим твердый кор

Тем самым эти коэффициенты зависят лишь от масс частиц, причем

$$-1 < c_{\beta\alpha} < 0, \quad s_{\beta\alpha}^2 = 1 - c_{\beta\alpha}^2, \quad (2.4)$$

$$c_{\beta\alpha} = c_{\alpha\beta} \quad \text{и} \quad s_{\beta\alpha} = -s_{\alpha\beta}, \quad \beta \neq \alpha.$$

Для частиц с одинаковыми массами $c_{\beta\alpha} = -1/2$, а $s_{\beta\alpha} = (-1)^{\beta-\alpha} \text{sign}(\alpha - \beta) \sqrt{3}/2$.

Конфигурационное пространство Ω системы трех частиц с твердым кором представляет собой часть пространства \mathbb{R}^6 , внешнюю ($|\mathbf{x}_\alpha| > c_\alpha$) по отношению ко всем трем гиперцилиндрам Γ_α , $\Gamma_\alpha = \{X \in \mathbb{R}^6 : X = (\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha), |\mathbf{x}_\alpha| = c_\alpha\}$, $\alpha = 1, 2, 3$, где $c_\alpha, c_\alpha > 0$, обозначает величину $|\mathbf{x}_\alpha|$ при контакте коров (т.е. «абсолютно твердых шарообразных сердцевин») частиц, относящихся к паре α . Подразумевается, что номер пары совпадает с номером дополнительной частицы. Для удобства читателя на рис. 2, заимствованном из [62], представлен двумерный аналог конфигурационного пространства Ω , отвечающий системе трех частиц, движущихся вдоль одной и той же прямой. Трехмерный образ этого пространства для случая частиц с равными массами дается на рис. 3, также заимствованном из [62]. На данном рисунке используются координаты $x_\alpha = |\mathbf{x}_\alpha|$, $y_\alpha = |\mathbf{y}_\alpha|$ и $\eta_\alpha = \hat{\mathbf{x}}_\alpha \cdot \hat{\mathbf{y}}_\alpha$. Цилиндры Γ_1 , Γ_2 и Γ_3 представлены на нем плоскостью $x_1 = c$ и поверхностями

$$\frac{1}{4}x_1^2 + \frac{3}{4}y_1^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}x_1y_1\eta_1 = c^2 \quad \text{и} \quad \frac{1}{4}x_1^2 + \frac{3}{4}y_1^2 + \frac{\sqrt{3}}{2}x_1y_1\eta_1 = c^2$$

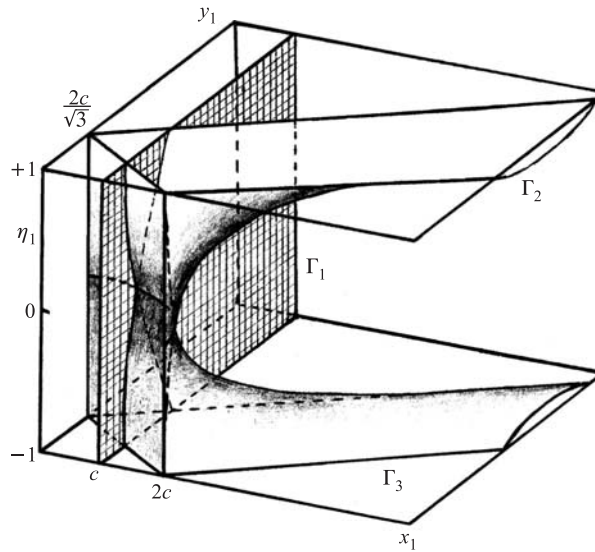


Рис. 3. Трехмерный образ конфигурационного пространства системы трех частиц с равными массами

соответственно. Область Ω — часть множества $x_1 > c$, $y_1 > 0$, $-1 \leq \eta_1 \leq 1$, ограниченного Γ_2 и Γ_3 . С геометрической точки зрения этот образ конфигурационного пространства, представленный на рис. 3, является вполне точным, поскольку опущены только координаты (например, углы Эйлера), описывающие вращение плоскости, в которой находятся частицы. Следует, однако, отметить, что переход от координат Якоби к переменным x_α , y_α и η_α не является конформным. В случае произвольных (возможно, неравных) масс частиц величина угла между поверхностями Γ_β и Γ_γ , $\beta \neq \gamma$, в точках, принадлежащих пересечению $\Gamma_\beta \cap \Gamma_\gamma$, пробегает интервал между $\pi/2 - \phi_{\beta\gamma}$ и $\pi/2 + \phi_{\beta\gamma}$, $\phi_{\beta\gamma} = \arcsin |c_{\beta\gamma}|$, и никогда не принимает значения 0 или π (поскольку в случае, когда частицы имеют конечные массы, всегда выполнено $|c_{\beta\gamma}| < 1$).

Гамильтониан системы трех бесспиновых частиц с твердым кором задается в $L_2(\Omega)$ выражением

$$Hf(X) = \left(-\Delta_X + \sum_{\alpha=1}^3 V_\alpha \right) f(X) \quad (2.5)$$

на множестве функций $f(X)$, $f \in W_2^2(\Omega)$, удовлетворяющих нулевым условиям Дирихле

$$f|_{\partial\Omega} = 0 \quad (2.6)$$

на границе $\partial\Omega$ области Ω . Мы используем здесь систему единиц с $\hbar = 1$. Поэтому лапласиан $-\Delta_X$ в \mathbb{R}^6 представляет собой оператор кинетической энергии частиц. Потенциалы V_α , $\alpha = 1, 2, 3$, считаются парными. Последнее означает, что каждый из операторов V_α действует на функцию f в выражении (2.5) лишь по соответствующей переменной \mathbf{x}_α , $|\mathbf{x}_\alpha| > c_\alpha$. Мы предполагаем, что эти парные потенциалы являются ограниченными самосопряженными (эрмитовыми) операторами. Их парциальные компоненты в разложении по собственным функциям парного углового момента являются операторами умножения на гладкие вещественнозначные функции переменной x_α , которые достаточно быстро убывают при $x_\alpha \rightarrow \infty$. Гамильтониан H с такими потенциалами самосопряжен, и его спектр заведомо является вещественным. Для чисто локальных потенциалов будем полагать, что

$$|V_\alpha(\mathbf{x}_\alpha)| \leq C_\alpha(1 + x_\alpha)^{-3-\varepsilon}, \quad x_\alpha \geq c_\alpha, \quad (2.7)$$

где константы $C_\alpha > 0$ и $\varepsilon > 0$. Такие же условия обычно предполагаются выполненными и для частных производных от $V_\alpha(\mathbf{x}_\alpha)$. Реалистические межатомные He–He-потенциалы обычно подчиняются указанным условиям убывания и гладкости.

Связанные состояния. Предположим, что система трех частиц, описываемая гамильтонианом H , обладает хотя бы одним связанным состоянием. Обозначим через E энергию этого состояния и через Ψ — волновую функцию, $H\Psi = E\Psi$. Будем полагать, что точка E , $E < 0$, расположена ниже порога непрерывного спектра H . Функция $\Psi(X)$ определена лишь при $X \in \Omega$. Из формулы Грина (см., например, [103]) следует, что эта функция удовлетворяет уравнению Липпмана–Швингера

$$\begin{aligned} \Psi(X) = & - \int_{\partial\Omega} d\sigma_S G_0(X, S; E) \frac{\partial}{\partial n_S} \Psi(S) - \\ & - \sum_{\alpha=1}^3 \int_{\Omega} dX' G_0(X, X'; E) (V_\alpha \Psi)(X'), \end{aligned} \quad (2.8)$$

где через $G_0(X, X'; z)$ обозначена свободная функция Грина системы трех частиц, т. е. ядро резольвенты

$$G_0(z) = (-\Delta_X - z)^{-1}$$

оператора Лапласа $-\Delta_X$ в $L_2(\mathbb{R}^6)$. Напомним, что функция $G_0(X, X'; z)$ выражается явно через функцию Ханкеля первого рода $H_2^{(1)}$ (см., например, [104]):

$$G_0(X, X'; z) = \frac{iz}{16\pi^2} \frac{H_2^{(1)}(\sqrt{z}|X - X'|)}{|X - X'|^2}.$$

Через n_S в (2.8) обозначается направленная в Ω нормаль к поверхности $\partial\Omega$ и через $d\sigma_S$ — мера (пятимерная площадь) на поверхности $\partial\Omega$.

Поскольку в отличие от $\Psi(X)$ ядро $G_0(X, X', E)$ задано при всех $X \in \mathbb{R}^6$, $X \neq X'$, правая часть равенства (2.8) определена не только при $X \in \Omega$, но и при $X \in \mathbb{R}^6 \setminus \bar{\Omega}$. При этом из формулы Грина следует, что

$$\begin{aligned} & - \int_{\partial\Omega} d\sigma_S G_0(X, S; E) \frac{\partial}{\partial n_S} \Psi(S) - \\ & - \sum_{\alpha=1}^3 \int_{\Omega} dX' G_0(X, X'; E) (V_\alpha \Psi)(X') = 0, \quad (2.9) \\ & X \in \mathbb{R}^6 \setminus \bar{\Omega}. \end{aligned}$$

Компоненты Фаддеева функции Ψ вводятся формулами (см. [76, 77, 93])

$$\begin{aligned} F_\alpha(X) = & - \int_{\Gamma_\alpha \cap \partial\Omega} d\sigma_S G_0(X, S; E) \frac{\partial}{\partial n_S} \Psi(S) - \\ & - \int_{\Omega} dX' G_0(X, X'; E) (V_\alpha \Psi)(X'). \quad (2.10) \end{aligned}$$

Функции $F_\alpha(X)$, определяемые равенствами (2.10), мы будем рассматривать при всех $X \in \mathbb{R}^6$ как вне, так и внутри поверхности $\partial\Omega$. Непосредственно из (2.8) и (2.9) вытекает, что

$$\sum_{\alpha=1}^3 F_\alpha(X) = \begin{cases} \Psi(X), & X \in \Omega, \\ 0, & X \in \mathbb{R}^6 \setminus \bar{\Omega}. \end{cases} \quad (2.11)$$

Поверхностный интеграл вида

$$\int_{\Gamma_\alpha} d\sigma_S G_0(X, S; z) \mu_\alpha(S), \quad z \in \mathbb{C}, \quad (2.12)$$

присутствующий в (2.10), представляет собой потенциал простого слоя [103], сосредоточенного с плотностью μ_α на цилиндре Γ_α . В данном случае

$$\mu_\alpha(S) = \begin{cases} \frac{\partial}{\partial n_S} \Psi(S), & \text{если } S \in \Gamma_\alpha \cap \partial\Omega, \\ 0, & \text{если } S \in \Gamma_\alpha \setminus \partial\Omega. \end{cases}$$

Из результатов работ [74, 75] следует, что каждая из плотностей $\mu_\alpha(S)$ является непрерывной функцией переменной $S \in \Gamma_\alpha$ всюду за исключением множества, по которому соответствующий цилиндр Γ_α пересекается с двумя другими цилиндрами Γ_β , $\beta \neq \alpha$. Следовательно, потенциал простого слоя (2.12) при переходе аргумента X через поверхность Γ_α вне упомянутого множества изменяется непрерывно [103]. Если $X \notin \Gamma_\alpha$, то функция (2.12) является бесконечно дифференцируемой и, более того,

$$(-\Delta_X - z) \int_{\Gamma_\alpha} d\sigma_S G_0(X, S; z) \mu_\alpha(S) = 0.$$

Поэтому, действуя на обе части равенства (2.10) выражением $-\Delta_X - E$ и принимая во внимание (2.11), мы приходим к следующей системе дифференциальных уравнений для компонент $F_\alpha(X)$:

$$(-\Delta_X + V_\alpha - E)F_\alpha(X) = -V_\alpha \sum_{\beta \neq \alpha} F_\beta(X), \quad |\mathbf{x}_\alpha| > c_\alpha, \quad (2.13a)$$

$$(-\Delta_X - E)F_\alpha(X) = 0, \quad |\mathbf{x}_\alpha| < c_\alpha, \quad (2.13b)$$

$$\alpha = 1, 2, 3.$$

Согласно (2.11) сумма функций $F_\alpha(X)$ должна обращаться в нуль не только на поверхности $\partial\Omega$, но и внутри нее:

$$\sum_{\beta=1}^3 F_\beta(X) \equiv 0, \quad X \in \mathbb{R}^6 \setminus \Omega. \quad (2.14)$$

Вместо очень жестких условий (2.14), в точности соответствующих модели твердого тела в задаче трех частиц, достаточно рассматривать гораздо более слабые условия [74, 77]

$$\sum_{\beta=1}^3 F_\beta(X) \Big|_{|\mathbf{x}_\alpha|=c_\alpha} = 0, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (2.15)$$

требующие от суммы компонент $F_\alpha(X)$ обращения в нуль лишь на цилиндрах Γ_α . Понятно, что для задачи на связанные состояния должны выполняться также условия

$$F_\alpha \in L_2(\mathbb{R}^6), \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (2.16)$$

Как и в ситуации [53], когда имеются лишь взаимодействия, описываемые обычными потенциалами, асимптотическое поведение $F_\alpha(X)$ ($|X| \rightarrow \infty$) имеет экспоненциальный характер, форма которого довольно сложна.

Уравнения (2.13), (2.15) и (2.16) описывают задачу на связанные состояния для трех частиц, взаимодействующих посредством потенциалов с твердым кором, и являются естественным обобщением стандартных дифференциальных уравнений Фаддеева [53].

Численные преимущества подхода, основанного на решении задачи (2.13), (2.15), (2.16), видны непосредственно из структуры уравнений (2.13): после замены потенциала с сильным отталкиванием на малых расстояниях моделью твердого кора вместо суммы лапласиана и огромного потенциального члена внутри области кора оказывается нужным аппроксимировать только сам лапласиан $-\Delta_X$. Это обстоятельство приводит к значительному уменьшению численных ошибок.

Рассеяние. Пусть $\Psi^{[\beta,\xi]\pm}(X, \mathbf{p}_\beta)$ — трехчастичная волновая функция, соответствующая процессу $2 \rightarrow 2, 3$, где в начальном состоянии связана парная подсистема β в состоянии $\psi_{\beta,\xi}(\mathbf{x}_\beta)$ с энергией $\varepsilon_{\beta,\xi}$, $\varepsilon_{\beta,\xi} < 0$, а дополнительная частица асимптотически свободна и имеет относительный импульс \mathbf{p}_β , $\mathbf{p}_\beta \in \mathbb{R}^3$. Через ξ мы обозначили совокупность всех остальных квантовых чисел, определяющих состояние двухчастичной подсистемы β . Компоненты Фаддеева [77, 93] $F_\alpha(X) \equiv F_\alpha^{[\beta,\xi]\pm}(X, \mathbf{p}_\beta)$ волновой функции рассеяния $\Psi^{[\beta,\xi]\pm}(X, \mathbf{p}_\beta)$,

$$\Psi^{[\beta,\xi]\pm}(X) = \sum_{\alpha=1}^3 F_\alpha^{[\beta,\xi]\pm}(X),$$

в модели с твердым кором удовлетворяют тем же дифференциальным уравнениям (2.13) и граничным условиям (2.15), что и в задаче на связанные состояния. Эти компоненты можно записать в виде

$$F_\alpha^{[\beta,\xi]\pm}(X, \mathbf{p}_\beta) = \delta_{\alpha\beta} \chi_{\beta,\xi}(X, \mathbf{p}_\beta) + \sum_{\xi'} \psi_{\alpha,\xi'}(\mathbf{x}_\alpha) U_{\alpha,\xi'}^{[\beta,\xi]\pm}(\mathbf{y}_\alpha, \mathbf{p}_\beta) + U_{\alpha,0}^{[\beta,\xi]\pm}(X, \mathbf{p}_\beta), \quad (2.17)$$

где

$$\chi_{\beta,\xi}(X, \mathbf{p}_\beta) = \psi_{\beta,\xi}(\mathbf{x}_\beta) \exp(i\mathbf{p}_\beta \cdot \mathbf{y}_\beta) \quad (2.18)$$

— падающая волна, составленная из волновой функции связанного состояния $\psi_{\beta,\xi}$ пары β и плоской волны, описывающей свободное движение дополнительной частицы.

В случае, когда потенциалы $V_\alpha(\mathbf{x})$ являются гладкими функциями, убывающими вместе с частными производными при $\mathbf{x} \rightarrow \infty$ не медленнее, чем

$|\mathbf{x}|^{-3-\varepsilon}$, $\varepsilon > 0$, факторы $U_{\alpha,\xi'}^{[\beta,\xi]\pm}$ и $U_{\alpha,0}^{[\beta,\xi]\pm}$ в (2.17) имеют такое же асимптотическое поведение [102], что и в обычной потенциальной модели [53]. А именно,

$$U_{\alpha,\xi'}^{[\beta,\xi]\pm}(\mathbf{y}_\alpha, \mathbf{p}_\beta) \underset{y_\alpha \rightarrow \infty}{=} \frac{e^{\pm i\sqrt{E-\varepsilon_{\alpha,\xi'}}|\mathbf{y}_\alpha|}}{|\mathbf{y}_\alpha|} \left[a_{\alpha,\xi'}^{[\beta,\xi]\pm}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha, \mathbf{p}_\beta) + o(|\mathbf{y}_\alpha|^{-1/2}) \right], \quad (2.19)$$

$$U_{\alpha,0}^{[\beta,\xi]\pm}(X, p_\beta) \underset{X \rightarrow \infty}{=} \frac{e^{\pm i\sqrt{E}|X|}}{|X|^{5/2}} \left[A_\alpha^{[\beta,\xi]\pm}(\hat{X}, \mathbf{p}_\beta) + o(|X|^{-1/2}) \right], \quad (2.20)$$

где $E = \varepsilon_{\beta,\xi} + p_\beta^2$ — полная энергия системы. Для $E > \varepsilon_{\alpha,\xi'}$ функция $a_{\alpha,\xi'}^{[\beta,\xi]\pm}(\hat{\mathbf{y}}_\alpha, \mathbf{p}_\beta)$ представляет амплитуду упругого рассеяния ($\alpha = \beta$, $\xi' = \xi$) или процесса перестройки ($\alpha \neq \beta$ или $\xi' \neq \xi$). Функции $A_\alpha^{[\beta,\xi]\pm}(\hat{X}, \mathbf{p}_\beta)$ при $E > 0$ в сумме дают полную амплитуду $\mathcal{A}^{[\beta,\xi]\pm}(\hat{X}, \mathbf{p}_\beta)$ развала системы на три асимптотически свободные частицы:

$$\mathcal{A}^{[\beta,\xi]\pm}(\hat{X}, \mathbf{p}_\beta) = \sum_{\alpha=1}^3 A_\alpha^{[\beta,\xi]\pm}(\hat{X}, \mathbf{p}_\beta).$$

Следует подчеркнуть, что каждая двухчастичная собственная функция $\psi_{\alpha,\xi}(\mathbf{x}_\alpha)$ полагается равной нулю внутри соответствующей парной области координат, т. е. $\psi_{\alpha,\xi}(\mathbf{x}_\alpha) \equiv 0$ при $|\mathbf{x}_\alpha| \leq c_\alpha$.

Подробный анализ описанной краевой задачи, включая формулировку и обоснование асимптотических граничных условий для состояний рассеяния, а также анализ других краевых задач можно найти в [102] (см. также [93]). Здесь мы коротко остановимся лишь на обсуждении дискретного спектра краевой задачи (2.13), (2.15), поскольку по сравнению со спектром исходного гамильтониана (2.5), (2.6) этот спектр приобретает дополнительную составляющую, отвечающую совокупности задач Дирихле для областей, возникающих при пересечении цилиндров Γ_α .

Сначала введем обозначения для этих областей. Пусть Λ_{123} — область, лежащая внутри всех трех цилиндров Γ_α , $\alpha = 1, 2, 3$, и пусть $\partial\Lambda_{123}$ — граница этой области (см. рис. 2 и 3). Под $\Lambda_{\alpha\beta}$ будем понимать часть области, ограниченной цилиндрами Γ_α и Γ_β , $\beta \neq \alpha$, внешнюю по отношению к Λ_{123} . Обозначение Λ_α будем использовать для области, лежащей внутри цилиндра Γ_α , но расположенной вне двух остальных цилиндров Γ_β , $\beta \neq \alpha$. Наконец, через $\partial\Lambda_{\alpha\beta}$ и $\partial\Lambda_\alpha$ обозначим границы областей $\Lambda_{\alpha\beta}$ и Λ_α соответственно.

Как показано в [102], дискретный спектр краевой задачи (2.13), (2.15), (2.16) включает не только дискретный спектр $\sigma_d(H)$ исходного гамильтониана H , но и добавочное множество σ_d^{aux} , состоящее из собственных значений соответствующих однородных внутренних задач Дирихле для областей Λ_{123} ,

$\Lambda_{\alpha\beta}$ и Λ_α , $\alpha, \beta = 1, 2, 3$, $\beta \neq \alpha$. А именно, в σ_d^{aux} входят дискретные спектры операторов, задаваемых на $W_2^2(\Lambda_{\alpha\beta\gamma})$, $W_2^2(\Lambda_\alpha)$ и $W_2^2(\Lambda_{\alpha\beta})$ выражением (2.5) и краевыми условиями $f|_{\partial\Lambda_{\alpha\beta\gamma}} = 0$, $f|_{\partial\Lambda_\alpha} = 0$ и $f|_{\partial\Lambda_{\alpha\beta}} = 0$ соответственно. При этом в (2.5) следует считать, что $(V_\alpha f)(\mathbf{x}_\alpha) \equiv 0$ при $x_\alpha < c_\alpha$. Критерием отбора решений спектральной задачи (2.13), (2.15) и (2.16), отвечающих только спектру гамильтониана H , служит условие тождественного обращения полной волновой функции в нуль внутри каждого из всех трех цилиндров Γ_α :

$$\Psi(X) = \sum_{\beta=1}^3 F_\beta(X) \equiv 0 \quad \text{при } x_\alpha < c_\alpha, \quad \alpha = 1, 2, 3.$$

Следует, однако, отметить, что нижняя граница $\inf \sigma_d^{\text{aux}}$ совокупного спектра упомянутых дополнительных внутренних задач лежит заведомо выше нижней границы спектра H . Кроме того, при достаточно малых c_α значение $\inf \sigma_d^{\text{aux}}$ положительно и ведет себя как $1/c^2$, где $c = \max_\alpha c_\alpha$.

Элементы множества σ_d^{aux} представляют собой те точки, в которых решение краевой задачи (2.13), (2.15), (2.17)–(2.20) не является единственным [102]. Однако «духовый» спектр σ_d^{aux} дискретен, и на практике совпадение энергии рассеяния E с одной из точек множества σ_d^{aux} следует рассматривать как исключительный случай. Более того, имеется простой способ избежать таких совпадений путем сдвига множества σ_d^{aux} . Такой сдвиг может быть устроен, например, в результате замены нулевых значений потенциалов V_α внутри областей кора подходящими положительными константами. Важно, что эта замена никак не влияет на значения полной волновой функции $\Psi(X) = \sum_\alpha F_\alpha(X)$ в физической области, т. е. при $X \in \Omega$.

3. ПАРЦИАЛЬНЫЕ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНЫЕ УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА ДЛЯ ТРЕХ ТОЖДЕСТВЕННЫХ БОЗОНОВ С ТВЕРДЫМ КОРОМ

Предположим теперь, что рассматриваемые частицы являются тождественными бозонами с нулевым спином, взаимодействующими посредством центрального потенциала V , т. е. $V_\alpha(\mathbf{x}_\alpha) = V(x_\alpha)$, $\alpha = 1, 2, 3$. В этом случае полная волновая функция должна быть инвариантной относительно перестановки частиц в каждой паре α , т. е. $P_\alpha \Psi = \Psi$, $\alpha = 1, 2, 3$, где P_α — оператор перестановки. Это означает, что $\Psi(-\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \Psi(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha)$, $\alpha = 1, 2, 3$. Но тогда из определения компонент Фаддеева (2.10) следует, что

$$P_\alpha F_\alpha = F_\alpha, \quad (3.1)$$

т. е.

$$F_\alpha(-\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = F_\alpha(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha). \quad (3.2)$$

Кроме того, ввиду тождественности бозонов мы можем считать, что

$$F_\beta = P^+ F_\alpha, \quad F_\gamma = P^- F_\alpha, \quad (3.3)$$

где P^\pm — операторы циклической перестановки частиц, действие которых задается соотношениями

$$P^+(123) = (312), \quad P^-(123) = (231). \quad (3.4)$$

Условия (3.3) означают, что полную волновую функцию $\Psi(X)$ можно записать как

$$\Psi = (I + P^+ + P^-)F_\alpha, \quad (3.5)$$

где I — тождественный оператор. При этом уравнения Фаддеева (2.13) и граничные условия (2.15) переписываются в виде

$$(-\Delta_X + V_\alpha - E)F_\alpha(X) = -V_\alpha(P^+ + P^-)F_\alpha(X), \quad x_\alpha > c_\alpha, \quad (3.6)$$

$$(-\Delta_X - E)F_\alpha(X) = 0, \quad x_\alpha < c_\alpha, \quad (3.7)$$

и

$$F_\alpha(X) = -(P^+ + P^-)F_\alpha(X), \quad x_\alpha = c_\alpha, \quad (3.8)$$

где $c_1 = c_2 = c_3 = c$ и, скажем, $\alpha = 1$. Далее мы будем опускать индекс α и вместо F_α писать просто F .

Тождественность бозонов приводит также к модификации асимптотических граничных условий. Рассмотрим, в частности, процесс рассеяния $2 \rightarrow 2, 3$ с асимптотическим начальным состоянием, в котором два бозона связаны в состояние ψ_ξ , а третий бозон свободен, что означает, что падающая волна имеет вид

$$\chi_\xi(X, \mathbf{p}) = \psi_\xi(\mathbf{x}) \exp(i\mathbf{p} \cdot \mathbf{y}). \quad (3.9)$$

Поскольку бозоны тождественны, эта падающая волна должна присутствовать во всех трех фаддеевских компонентах, из которых полная волновая функция рассеяния $\Psi(X) \equiv \Psi^{\xi\pm}(X, \mathbf{p})$ строится по формуле (3.5), где $F(X) \equiv F^{\xi\pm}(X, \mathbf{p})$. Следовательно, в целом компоненты Фаддеева $F^{\xi\pm}$ должны иметь вид

$$F^{\xi\pm}(X, \mathbf{p}) = \chi_\xi(X, \mathbf{p}) + \sum_{\xi'} \psi_{\xi'}(\mathbf{x}) U_{\xi'}^{\xi\pm}(\mathbf{y}, \mathbf{p}) + U_0^{\xi\pm}(X, \mathbf{p}), \quad (3.10)$$

где члены $U_{\xi'}^{\xi\pm}$ и $U_0^{\xi\pm}$ обладают асимптотикой, аналогичной (2.19) и (2.20).

Поскольку мы будем рассматривать только волновые функции $\Psi^{\xi+}$, индекс «+» в обозначениях Ψ и F будет опускаться.

Подобно уравнениям (2.13) и (2.15) уравнения (3.6)–(3.8) шестимерны. Для понижения их размерности можно воспользоваться разложением по стандартному бисферическому базису, состоящему из функций

$$\mathcal{Y}_{\lambda\lambda}(\hat{x}, \hat{y}) = \sum_{m+\mu=M} \langle \text{Im } \lambda\mu | LM \rangle Y_l^m(\hat{x}) Y_\lambda^\mu(\hat{y}), \quad (3.11)$$

где L — полный орбитальный момент системы; $Y_l^m(\hat{x})$ и $Y_\lambda^\mu(\hat{y})$ — сферические гармоники и $\langle \text{Im } \lambda\mu | LM \rangle$ — коэффициенты Клебша–Гордана.

Потенциал V , будучи центральным, диагонален в базисе (3.11) и имеет одни и те же диагональные элементы во всех парциальных волнах. Поскольку оператор полного углового момента \mathbf{L} и его проекция \mathbf{L}_z коммутируют с лапласианом $-\Delta_X$ и суммой $I + P^+ + P^-$, исследование краевых задач (3.6)–(3.8) сводится к их анализу в подпространствах, соответствующих фиксированным значениям момента L и его проекции M .

В нашем дальнейшем изложении мы ограничимся рассмотрением случая, когда $L = 0$. Соответствующие формулы для общего случая $L \neq 0$, причем при наличии многих связанных состояний у парных подсистем, приведены в [62, разд. 3]. Кроме того, мы будем считать, что

$$\begin{aligned} &\text{двухчастичная подсистема обладает только одним связанным} \\ &\text{состоянием, причем оно отвечает нулевому значению} \\ &\text{парного углового момента, имеет энергию } \varepsilon_d < 0 \\ &\text{и описывается волновой функцией } \psi_d(x). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Будем принимать при этом, что волновая функция $\psi_d(x)$ обращается в нуль внутри области кора, т. е. $\psi_d(x) \equiv 0$ при $x \leq c$.

Итак, будем считать, что компонента Фаддеева $F(X)$ является элементом подпространства нулевого полного углового момента. Заметим, что если $L = 0$, то в выражении (3.11) мы имеем $M = 0$ и непременно $\lambda = l$. С учетом результатов [73] (см. также [53, 93]) разложение функции F по бисферическим гармоникам $\mathcal{Y}_{l0}(\hat{x}, \hat{y})$

$$F(X) = \sum_l \frac{F_l(x, y)}{x y} \mathcal{Y}_{l0}(\hat{x}, \hat{y}), \quad x = |\mathbf{x}| \text{ и } y = |\mathbf{y}|, \quad (3.13)$$

позволяет свести уравнения (3.6), (3.7) к следующей системе парциальных уравнений:

$$(H_l - E)F_l(x, y) = \begin{cases} -V(x)\Psi_l(x, y), & x > c, \\ 0, & x < c, \end{cases} \quad (3.14)$$

где

$$H_l = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + l(l+1) \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} \right). \quad (3.15)$$

Парциальная компонента $\Psi_l(x, y)$ полной волновой функции (3.5) связана с парциальными компонентами Фаддеева $F_l(x, y)$ соотношением

$$\Psi_l(x, y) = F_l(x, y) + 2 \sum_{l'} \int_{-1}^{+1} d\eta h_{ll'}(x, y, \eta) F_{l'}(x', y'), \quad (3.16)$$

где

$$x' = \sqrt{\frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}xy\eta}, \quad (3.17)$$

$$y' = \sqrt{\frac{3}{4}x^2 + \frac{1}{4}y^2 + \frac{\sqrt{3}}{2}xy\eta} \quad (3.18)$$

с $\eta = \hat{\mathbf{x}} \cdot \hat{\mathbf{y}}$. Ядра $h_{ll'}(x, x', \eta) \equiv h_{(1;l)(2;l')}(x, x', \eta)$ представляют собой частный случай (отвечающий равным массам частиц и нулевому значению полного углового момента) более общих угловых функций

$$\begin{aligned} & h_{(\alpha;l)(\beta;l')}(x, y, \eta) = \\ & = \frac{xy}{x_{\beta\alpha}(\eta)y_{\beta\alpha}(\eta)} (-1)^{l+l} \frac{(2\lambda+1)(2l+1)}{2} [(2\lambda)!(2l)!(2\lambda'+1)(2l'+1)]^{1/2} \times \\ & \times \sum_{k=0}^{k_{\max}} (-1)^k (2k+1) P_k(\eta) \sum_{\substack{\lambda_1+\lambda_2=\lambda, \\ l_1+l_2=l}} \frac{y^{\lambda_1+l_1} x^{\lambda_2+l_2}}{[y_{\beta\alpha}(\eta)]^\lambda [x_{\beta\alpha}(\eta)]^l} (-1)^{\lambda_1} c_{\beta\alpha}^{\lambda_1+l_2} s_{\beta\alpha}^{\lambda_2+l_1} \times \\ & \times [(2\lambda_1)!(2l_1)!(2\lambda_2)!(2l_2)!]^{-1/2} \sum_{\lambda''l''} (2\lambda''+1)(2l''+1) \times \\ & \times \begin{pmatrix} \lambda_1 & l_1 & \lambda'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_2 & l_2 & l'' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & \lambda'' & \lambda' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k & l'' & l' \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \times \\ & \times \left\{ \begin{matrix} l' & \lambda' & L \\ \lambda'' & l'' & k \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda \\ l_1 & l_2 & l \\ \lambda'' & l'' & L \end{matrix} \right\}, \quad k_{\max} = \frac{l+\lambda+l'+\lambda'}{2}, \quad (3.19) \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}x_{\beta\alpha}(\eta) &= \sqrt{c_{\beta\alpha}^2 x^2 + 2c_{\beta\alpha}s_{\beta\alpha}xy\eta + s_{\beta\alpha}^2 y}, \\y_{\beta\alpha}(\eta) &= \sqrt{s_{\beta\alpha}^2 x - 2c_{\beta\alpha}s_{\beta\alpha}xy\eta + c_{\beta\alpha}^2 y},\end{aligned}$$

а $c_{\beta\alpha}$ и $s_{\beta\alpha}$ вычисляются по формулам (2.2) и (2.3) соответственно. Кроме того, здесь используются стандартные обозначения [105] для $3-j$, $6-j$ и $9-j$ символов Вигнера и через $P_k(\eta)$ обозначаются полиномы Лежандра k -го порядка. Напомним, что функции $h_{(\alpha;\lambda)(\beta;l'\lambda')}^l$ естественно возникают при вычислении матричных элементов операторов циклической перестановки частиц P^\pm между бисферическими гармониками (3.13) (см. [53, §VII.2] и/или [73, прил. II]). Заметим, что ядра $h_{l'l'}(x, x', \eta)$ (так же, как в общем случае ядра $h_{(\alpha;\lambda)(\beta;l'\lambda')}^l(x, y, \eta)$) зависят от гиперуглов

$$\theta = \operatorname{arctg} \frac{y}{x} \quad \text{и} \quad \theta' = \operatorname{arctg} \frac{y'}{x'}, \quad (3.20)$$

но совсем не зависят от гиперрадиуса

$$\rho = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{x'^2 + y'^2}. \quad (3.21)$$

По этой причине при численной аппроксимации уравнений (3.14), (3.16) вполне естественным оказывается использование полярных координат ρ, θ .

Необходимо особо подчеркнуть, что в случае трех тождественных бозонов из четности (3.2) функции $F(X)$ по отношению к соответствующей парной якобиевской переменной x следует, что все компоненты F_l с нечетными значениями индекса l должны быть тождественно равными нулю. Это обстоятельство приводит к существенному уменьшению количества парциальных уравнений.

Функции $F_l(x, y)$ удовлетворяют стандартным при использовании разложений по бисферическому базису граничным условиям

$$F_l(x, y)|_{x=0} = 0 \quad \text{и} \quad F_l(x, y)|_{y=0} = 0. \quad (3.22)$$

Парциальный вариант граничного условия (3.8), отвечающего наличию твердого кора, приобретает форму $\Psi_l(x, y)|_{x=c} = 0$, т. е.

$$F_l(c, y) + \sum_{l'} \int_{-1}^{+1} d\eta h_{l'l'}(c, y, \eta) F_{l'}(x', y') = 0. \quad (3.23)$$

Для задачи на связанные состояния требуется, чтобы функции $F_l(x, y)$ были квадратично-интегрируемыми в квадранте $\mathbb{R}_+^2 = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x \geq 0, y \geq 0\}$.

$y \geq 0$ }, т. е. они должны удовлетворять условию $F_l \in L_2(\mathbb{R}_+^2)$. Весьма полезным при вычислениях связанных состояний является использование их асимптотики при $y \rightarrow \infty$ (и $\rho \rightarrow \infty$). Последняя при выполнении условия (3.12) имеет вид

$$F_l(x, y) = \delta_{l0} \psi_d(x) \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d} y) \left[a_0 + o\left(y^{-1/2}\right) \right] + \frac{\exp(i\sqrt{E} \rho)}{\sqrt{\rho}} \left[A_l(\theta) + o\left(\rho^{-1/2}\right) \right], \quad (3.24)$$

где E — энергия связанного состояния. Амплитуды a_0 и $A_l(\theta)$ описывают асимптотические вклады в парциальную компоненту Фаддеева F_l (а следовательно, и в парциальную волновую функцию Ψ_l), обязанные своим присутствием каналам с двумя и тремя фрагментами соответственно. Энергия E и разность $E - \varepsilon_d$ в (3.24) отрицательны. Последнее означает, что при всяком $\theta \in (0, \pi/2)$ функция $F_l(x, y)$ при $\rho \rightarrow \infty$ убывает экспоненциально.

В предположении (3.12) асимптотические граничные условия для парциальных компонент Фаддеева волновой функции ($2 \rightarrow 2, 3$)-рассеяния при $X \rightarrow \infty$ и/или $y \rightarrow \infty$ следуют из (3.10), (3.13). А именно, при $E > \varepsilon_d$

$$F_l(x, y; E) = \delta_{l0} \psi_d(x) \left\{ \sin(\sqrt{E - \varepsilon_d} y) + \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d} y) \times \right. \\ \left. \times \left[a_0(E) + o\left(y^{-1/2}\right) \right] \right\} + \frac{\exp(i\sqrt{E} \rho)}{\sqrt{\rho}} \left[A_l(E, \theta) + o\left(\rho^{-1/2}\right) \right]. \quad (3.25)$$

Значение $a_0(E)$ (при $E > \varepsilon_d$) дает парциальную амплитуду упругого рассеяния. Функции $A_l(E, \theta)$ при $E > 0$ суть парциальные компоненты Фаддеева амплитуд развала рассматриваемой системы на три асимптотически свободные частицы. Собственно физические парциальные амплитуды развала $\mathcal{A}_l(E, \theta)$ вычисляются через функции $A_l(E, \theta)$ по формулам

$$\mathcal{A}_l(E, \theta) = A_l(E, \theta) + 2 \sum_{l'} \int_{-1}^1 d\eta h_{ll'}(x, y, \eta) A_{l'}(E, \theta'), \quad (3.26)$$

где θ и θ' даются равенствами (3.20).

Парциальная компонента матрицы рассеяния, отвечающая каналу упругого ($2 \rightarrow 2$)-рассеяния бозона на связанной паре тождественных бозонов при $L = 0$, для $E > \varepsilon_d$ задается выражением

$$S_0(E) = 1 + 2ia_0(E). \quad (3.27)$$

При этом фазы упругого рассеяния ($2 \rightarrow 2$) вычисляются по формуле

$$\delta_0(p) = \frac{1}{2} \operatorname{Im} \ln S_0(\varepsilon_d + p^2), \quad p > 0, \quad (3.28)$$

где переменная p представляет собой относительный импульс, сопряженный к переменной y . В то же время бозон-дибозонная длина рассеяния ℓ_{sc} дается выражением

$$\ell_{\text{sc}} = -\frac{\sqrt{3}}{2} \lim_{p \rightarrow 0} \frac{a_0(\varepsilon_d + p^2)}{p}. \quad (3.29)$$

Разумеется, при конкретных численных расчетах приходится ограничиваться лишь конечным числом уравнений (3.14), полагая, что $l \leq l_{\text{max}}$, где l_{max} — некоторое фиксированное четное число, $l_{\text{max}} \geq 0$. Условие $0 \leq l \leq l_{\text{max}}$ равносильно предположению о том, что потенциал $V(x)$ действует лишь в парных состояниях с $l = 0, 2, \dots, l_{\text{max}}$.

4. ЧИСЛЕННЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ПО ЭНЕРГИЯМ СВЯЗИ ТРИМЕРА ${}^4\text{He}_3$

Расчеты связанных состояний и процессов рассеяния ($2 \rightarrow 2, 3$) в системе трех атомов гелия ${}^4\text{He}$, проведенные в работах [49, 62, 63, 69, 72, 96, 106], основывались на использовании парциальных интегродифференциальных уравнений Фаддеева для модели твердого кора (3.14), (3.23). При этом в качестве взаимодействия между атомами гелия использовались три версии полуфеноменологических потенциалов, построенных в различное время Азизом и его сотрудниками, а именно потенциалы HFDHE2 [27], HFD-B [33] и LM2M2 [34]. Кроме того, использовался теоретический потенциал ТТУ Танга, Тоениса и Йиу [35]. Все эти потенциалы представлены в приложении. Принималось, что $\hbar^2/m = 12,12 \text{ К} \cdot \text{Å}^2$. Каждый из упомянутых потенциалов поддерживает единственное слабосвязанное состояние димера. Энергия ε_d этого состояния, а также длина атом-атомного рассеяния $\ell_{\text{sc}}^{(2)}$ представлены в табл. 1. Отметим, что более поздние потенциалы LM2M2 и ТТУ дают практически совпадающие длины рассеяния $\ell_{\text{sc}}^{(2)}$ и энергии димера ε_d . Расчетами с использованием потенциалов из [30] мы не занимались отчасти потому, что они довольно сильно пересвязывают димер. Так, предложенные в [30] потенциалы SAPT1 и SAPT2 дают для ε_d соответственно $-1,733$ и $-1,816$ мК (см., например, [107]). В этом смысле они оказываются даже хуже, чем построенный еще в 1987 г. потенциал HFD-B Азиза, Мак-Курга и Вонга [33].

Детальное описание используемых нами численных методов и подходов дано в [62]. Здесь мы упомянем лишь основные моменты вычислительной

Таблица 1. Энергии димера ε_d , обратные волновые длины $1/\varkappa^{(2)}$ и длины $\ell_{sc}^{(2)}$ рассеяния ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}$ для используемых потенциалов

Потенциал	ε_d , мК	$1/\varkappa^{(2)}$, Å	$\ell_{sc}^{(2)}$, Å
HFDHE2	-0,83012	120,83	124,65
HFD-B	-1,68541	84,80	88,50
LM2M2	-1,30348	96,43	100,23
TTY	-1,30962	96,20	100,01
Эксп. [46]	$1,1_{-0,2}^{+0,3}$	—	104_{-18}^{+8}

схемы, применявшейся для решения краевых задач (3.14), (3.22), (3.23) и (3.24) или (3.25), знание которых необходимо для понимания результатов расчетов.

Прежде всего отметим, что при конечно-разностной аппроксимации этих задач мы использовали сетку, ассоциированную с полярными координатами ρ и θ . Сетка выбиралась так, чтобы точки пересечения дуг $\rho = \rho_i$, $i = 1, 2, \dots, N_\rho$, и лучей $\theta = \theta_j$, $j = 1, 2, \dots, N_\theta$, с границей области кора $x = c$ автоматически являлись ее узлами. Значение параметра c (диаметра кора частиц) выбиралось так, чтобы при его уменьшении энергия связи тримера ${}^4\text{He}$ практически не изменялась. Было установлено, что выбор значений c в интервале 0,7–1,3 Å обеспечивает стабильность энергии связи димера ε_d в пределах шести значащих цифр. При этом энергия $E_t^{(0)}$ основного состояния тримера остается стабильной, по крайней мере в трех знаках. Причина такой стабильности проста: даже радиус в 2 Å находится внутри области очень сильного отталкивания межатомного He–He-потенциала (см. рис. 1). Например, в случае потенциала LM2M2 его величина для этого радиуса равна 538 К, а при 1,5 Å она достигает значения 5590 К. Все это позволяет зафиксировать значение c диаметра кора равным 1,0 Å. Если не оговаривается особо, приводимые в этом разделе наши результаты (они взяты в основном из [63]) соответствуют именно этому значению c .

Значения ρ_i выбираются согласно формулам

$$\rho_i = \frac{i}{N_c^{(\rho)} + 1} c, \quad i = 1, 2, \dots, N_c^{(\rho)},$$

$$\rho_{i+N_c^{(\rho)}} = \sqrt{c^2 + y_i^2}, \quad i = 1, 2, \dots, N_\rho - N_c^{(\rho)},$$

где $N_c^{(\rho)}$ — число дуг, находящихся внутри области кора, а

$$y_i = f(\tau_i) \sqrt{\rho_{N_\rho}^2 - c^2}, \quad \tau_i = \frac{i}{N_\rho - N_c^{(\rho)}}.$$

Нелинейная монотонно возрастающая функция $f(\tau)$, $0 \leq \tau \leq 1$, удовлетворяющая условиям $f(0) = 0$ и $f(1) = 1$, выбирается в виде

$$f(\tau) = \begin{cases} \alpha_0 \tau, & \tau \in [0, \tau_0], \\ \alpha_1 \tau + \tau^\nu, & \tau \in (\tau_0, 1]. \end{cases} \quad (4.1)$$

Значения α_0 , $\alpha_0 \geq 0$, и α_1 , $\alpha_1 \geq 0$, определяются через τ_0 и ν исходя из условия непрерывности функции $f(\tau)$ и ее производной в точке τ_0 . Обычно мы выбирали значения τ_0 между 0,1 и 0,2. Степень ν изменялась в интервале от 2 до 4 в зависимости от радиуса обрезания $\rho_{\max} = \rho_{N_\rho}$, величина которого принимала в наших расчетах значения между 50 и 4100 Å.

Узлы θ_j при $j = 1, 2, \dots, N_\rho - N_c^{(\rho)}$ определяются формулой $\theta_j = \arctg(y_j/c)$. Остальные θ_j , $j = N_\rho - N_c^{(\rho)} + 1, \dots, N_\theta$, выбираются равноотстоящими друг от друга. Описанный выбор сетки обусловлен необходимостью обеспечить ее более высокую плотность в области, где функции $F_l(x, y; z)$ изменяются наиболее быстро, т.е. при малых ρ и/или x . В асимптотической области сетка может быть гораздо менее плотной. При проведении расчетов [63] мы имели возможность использовать сетки размерностью $N_\theta = N_\rho = 500-800$. В дальнейшем (например, в [72]) благодаря появлению доступа к более мощным компьютерам размерность сеток была еще более увеличена (до $N_\theta = N_\rho = 2000-3000$). Число $N_\theta - (N_\rho - N_c^{(\rho)})$ узлов сетки по θ в области кора на последней дуге обычно было равно $N_c^{(\rho)} = 5$.

Как уже было отмечено выше (см. заключительную часть разд. 3), только компоненты F_l с четным l могут быть отличны от тождественного нуля. Следовательно, число уравнений, которые мы должны решить, равно $N_e = l_{\max}/2 + 1$, где l_{\max} — максимальная величина парного углового момента, принимаемая во внимание. Конечно-разностная аппроксимация N_e уравнений (3.14) сводит задачу к системе $N_e N_\theta N_\rho$ линейных алгебраических уравнений. Конечно-разностные уравнения, отвечающие дуге $i = N_\rho$, первоначально содержат неизвестные значения искомых функций $F_l(x, y; z)$ на дуге $i = N_\rho + 1$. Чтобы исключить эти неизвестные, мы выражаем их через величины $F_l(x, y; z)$ на дугах $i = N_\rho$ и $i = N_\rho - 1$, используя асимптотические формулы (3.24) или (3.25) так, как это описано в заключительной части приложения А статьи [62]. Матрица результирующей системы уравнений обладает блочно-трехдиагональной формой. Каждый блок имеет размерность $N_e N_\theta \times N_e N_\theta$ и содержит коэффициенты уравнений системы при искомым значениях функции $F_l(x, y; z)$ в узлах сетки, принадлежащих определенной дуге $\rho = \rho_i$. Главная диагональ матрицы системы состоит из N_ρ таких блоков.

Начиная с работы [63], при решении блочно-трехдиагональных систем линейных уравнений мы используем метод матричной прогонки (см., например, [108]). Этот метод позволяет избежать хранения больших промежуточных массивов данных на жестком диске и дает возможность проводить почти

Таблица 2. Абсолютные значения энергии (в мК) основного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$, полученные различными методами

Потенциал	I_{\max}	Уравнения Фаддеева									Вариационные методы						Адиабатические подходы	
		[63]	[1109]	[47]	[61]	[71]	[64]	[66]	[107]	[54]	[55]	[79]	[56]	[6]	[57]	[58]	[59]	[60]
HFDHE2	0	82,3		82	92												98,11	
	2	112,4	107	110														
	4	116,7					117,1										117,3	
HFD-B	0	94,2	96															
	2	127,7	130															
	4	132,5					133,0		133,0			129	131			119,3		
LM2M2	0	89,1															106,1	
	2	121,3																
	4	125,9				126,39	126,4	126,2	126,36			125,5	126,39					125,2
TTY	0	89,0																
	2	121,2																
	4	125,8					126,4	126,2	126,4		126,1	126,4	126					

Таблица 3. Абсолютные значения энергии $E_t^{(1)}$ возбужденного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$ (в мК)

Потенциал	l_{\max}	[63]	[47]	[61]	[107]	[55]	[59]	[71]	[60]	[64]
HFDHE2	0	1,46	1,46	1,04			1,517			
	2	1,65	1,6							
	4	1,67								1,665
HFD-B	0	2,45								
	2	2,71								
	4	2,74								2,734
LM2M2	0	2,02					2,118			
	2	2,25								
	4	2,28			2,265	2,19		2,268	2,269	2,271
TTY	0	2,02								
	2	2,25								
	4	2,28			2,277					2,280

все операции непосредственно в оперативной памяти компьютера. При этом время вычислений на одинаковых сетках сокращается по сравнению с [62] почти на порядок.

Наши результаты для энергии $E_t^{(0)}$ основного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$, взятые из [63], а также результаты, полученные другими авторами, представлены в табл. 2. Отметим, что при вычислениях [63] использовалась сетка со следующими параметрами: $N_\theta = N_\rho = 555$, $\tau_0 = 0,2$, $\nu = 3,6$ и $\rho_{\max} = 250 \text{ \AA}$. Как видно из третьей колонки табл. 2, наибольший вклад в энергию основного состояния вносят парциальные каналы $l = 0$ и $l = 2$, причем последний дает чуть более 30 %, и величина этого вклада примерно одна и та же для всех используемых потенциалов. Вклад парциальной волны с $l = 4$ имеет порядок 3–4 % (ср. с [109]). Вклад более высоких парциальных каналов составляет, по-видимому, менее 1 %. Видно, что значения энергии $E_t^{(0)}$, вычисленные в [63] при $l_{\max} = 4$, находятся в хорошем согласии с результатами других авторов.

Результаты, полученные в [63] для энергии $E_t^{(1)}$ возбужденного состояния тримера, а также результаты, доступные из литературы, представлены в табл. 3. Заметим, что в расчетах [63] использовались следующие параметры сетки: $N_\theta = N_\rho = 805$, $\tau_0 = 0,2$, $\nu_0 = 3,6$ и $\rho_{\max} = 300 \text{ \AA}$. Для того чтобы проиллюстрировать сходимость наших результатов, мы показываем в табл. 4 зависимость $E_t^{(1)}$ от параметров сетки в случае потенциала TTY (немного расширенную версию этой таблицы можно найти в [63]).

Из табл. 3 видно, что парциальная компонента с $l = 0$ обеспечивает около 71 % величины энергии возбужденного состояния. Вклад в $E_t^{(1)}$ от парциаль-

Таблица 4. Энергия $E_t^{(1)}$ (мК) возбужденного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$, вычисленная на различных сетках с потенциалом ТТУ

l_{\max}	$N_\theta = N_\rho = 252$ $\rho_{\max} = 250 \text{ \AA}$	$N_\theta = N_\rho = 652$ $\rho_{\max} = 300 \text{ \AA}$	$N_\theta = N_\rho = 805$ $\rho_{\max} = 300 \text{ \AA}$	$N_\theta = N_\rho = 1005$ $\rho_{\max} = 300 \text{ \AA}$
0	-2,108	-2,029	-2,024	-2,021
2	-2,348	-2,258	-2,253	-2,248

ного канала с $l = 2$ имеет порядок 25–26 %, тогда как $l = 4$ дает 3–4 %. Таким образом, величины этих вкладов примерно совпадают с аналогичными величинами для основного состояния. Наконец, из табл. 3 мы заключаем, что наши результаты для $E_t^{(1)}$ находятся в хорошем согласии с наилучшими результатами, найденными в литературе [60, 64, 107].

5. ФАЗЫ И ДЛИНА РАССЕЯНИЯ АТОМА ${}^4\text{He}$ НА ДИМЕРЕ ${}^4\text{He}_2$

Фазы упругого рассеяния атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}$ были вычислены впервые в работах [62, 69, 106]. Некоторое время спустя в [63] было осуществлено повторное вычисление фаз на существенно более мощных сетках и для большего набора He–He-потенциалов. Статья [63] содержит, в частности, подробные таблицы фаз ${}^4\text{He}$ – ${}^4\text{He}_2$, вычисленные с потенциалами HFD-B, LM2M2 и ТТУ для энергий $E = E_{\text{цм}}$ из интервала, заключенного между парным порогом ε_d и верхним значением в 2,45 мК. Тем самым были рассмотрены энергии, лежащие как ниже, так и выше порога развала системы на три частицы. Вычисления были проведены при значениях l_{\max} , равных 0, 2 и 4. Выяснилось, что после перехода к лабораторной системе фазы $\delta_0^{(l_{\max})}$, полученные для потенциалов HFD-B, LM2M2 и ТТУ для одинаковых l_{\max} , практически совпадают, в особенности это относится к потенциалам LM2M2 и ТТУ. Различие между $\delta_0^{(2)}$ и $\delta_0^{(4)}$ составляет всего лишь 0,5 %. Поэтому сейчас мы ограничиваемся тем, что приводим рис. 4, заимствованный из [63]. На этом рисунке представлены графики фаз ${}^4\text{He}$ – ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния только для потенциалов HFD-B и ТТУ. При построении этих графиков была использована нормировка, отвечающая теореме Левинсона: $\delta_0(0) - \delta_0(\infty) = n\pi$, где n — количество связанных состояний тримера (в данном случае $n = 2$).

Нам известно лишь о двух альтернативных трехчастичных расчетах фаз упругого ${}^4\text{He}$ – ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния, в которых использовались реалистические межатомные потенциалы. Это недавний расчет Лазаускаса и Карбонеля [71], а также более ранний расчет Руднева [70], оба выполненные на основании дифференциальных уравнений Фаддеева. В [71] фазы ${}^4\text{He}$ – ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния были

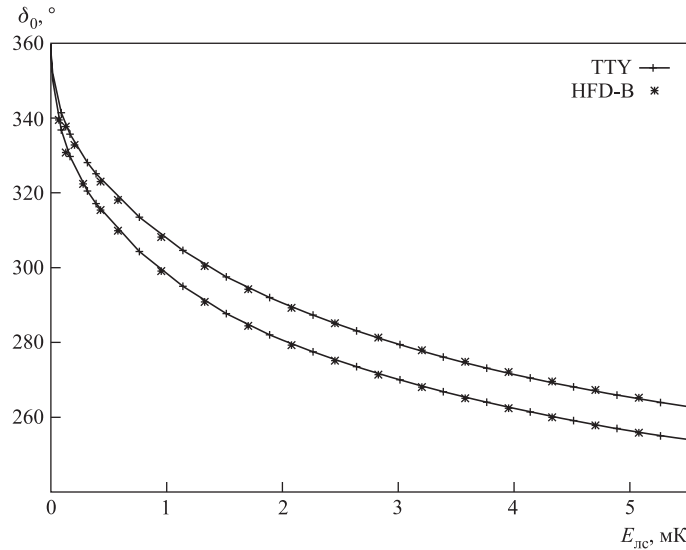


Рис. 4. S -волновые фазы рассеяния $\delta_0(E_{\text{лс}})$ атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ как функции энергии $E_{\text{лс}} = (3/2)(E + |\varepsilon_d|)$ в лабораторной системе. Использовались межатомные потенциалы HFD-B и ТТҮ. Нижняя кривая отвечает $l_{\text{max}} = 0$, а верхняя — $l_{\text{max}} = 2$

вычислены лишь для значений $E = E_{\text{цм}}$, находящихся в самой ближайшей окрестности двухчастичного порога ε_d , тогда как результаты расчета [70] покрывают практически весь интервал энергий, заключенный между энергией димера ε_d и порогом трехчастичного развала $E = 0$. В отличие от [63], метод решения дифференциальных уравнений Фаддеева, применявшийся в [70], не позволяет проводить расчеты рассеяния выше трехчастичного порога. Результаты по ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -фазам, полученные Рудневым [70], хорошо согласуются с результатами из [63] (рис. 5).

Отметим, что результаты, полученные в расчетах [63] с реалистическими атом-атомными потенциалами, активно используются как инструмент для фитирования параметров и/или проверки предположений в различных модельных расчетах (см., например, [91, 110–112]).

Непосредственный интерес представляет также структура самих парциальных компонент Фаддеева $F_l(x, y; E)$ и парциальных волновых функций $\Psi_l(x, y; E)$, отвечающих процессам рассеяния $2 \rightarrow 2, 3$. В качестве одного из возможных примеров мы построили в [62, 69] графики модулей функций F_l и Ψ_l для $l = 0, 2$ в случае рассеяния атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ при энергии $E = 1,4$ мК, расположенной немного выше порога развала системы на три отдельных атома. Вычисления величин $F_l(x, y; E)$ и $\Psi_l(x, y; E)$, необходимых для построения этих графиков (рис. 6–13), производились при $l_{\text{max}} = 2$ на

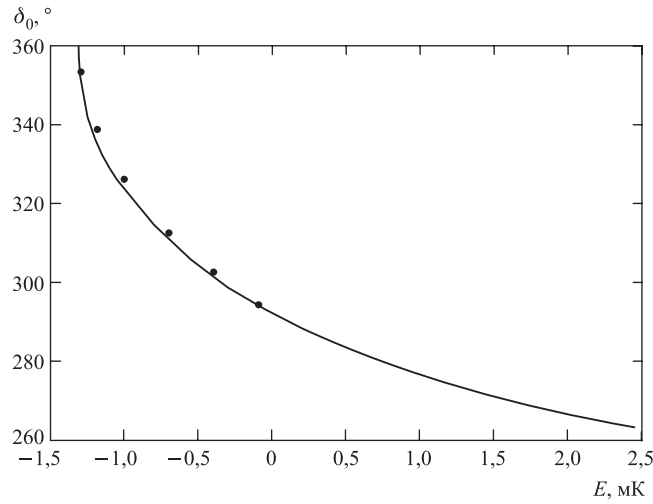


Рис. 5. Зависимость S -волновых фаз рассеяния $\delta_0(E)$ атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ от энергии $E = E_{\text{цм}}$ в системе центра масс. Использовался потенциал ТТУ. Сплошная кривая представляет результаты расчета [63], выполненного при $l_{\text{max}} = 4$. Точки соответствуют результатам из [70]

сетке, значения параметров которой $N_\rho = N_\theta = 320$ и $\rho_{\text{max}} = 400 \text{ \AA}$ вполне достаточны для обеспечения разумной точности визуализации. Отметим, что графики модулей парциальных компонент Фаддеева (рис. 6, 7, 10 и 11) были впервые опубликованы в [62], а графики модулей парциальных компонент волновой функции (рис. 8, 9, 12 и 13) — в [69].

Обратим внимание на рис. 6. На нем при $y \gtrsim 100 \text{ \AA}$ отчетливо видна падающая волна — синусоида $\sin(\sqrt{E - \varepsilon_d}y)$ (точнее, ее абсолютная величина), «промодулированная» экспоненциально спадающей волновой функцией димера $\psi_d(x)$. Естественно, что видна не «чистая» синусоида $\sin(\sqrt{E - \varepsilon_d}y) \times \psi_d(x)$, а результат ее сложения с рассеянной волной $a_0 \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d}y) \times \psi_d(x)$ и собственно трехчастичными слагаемыми. Именно последние порождают в асимптотике при больших ρ сферическую волну $A_l(\theta) \exp(i\sqrt{E}\rho)/\sqrt{\rho}$, описывающую развал.

После образования из $F_0(x, y; E)$ (а также из $F_2(x, y; E)$) по формуле (3.16) парциальной волновой функции $\Psi_0(x, y; E)$ падающая волна вместе со слагаемым, описывающим упругое рассеяние, проявляет себя уже и в области, где близки друг к другу атомы из двух других пар, т. е. в окрестности луча, отстоящего на 30° от оси x . Именно этой причиной объясняется наличие на рис. 8 второго хребта с синусоидальным профилем, расположенного вдоль упомянутого луча.

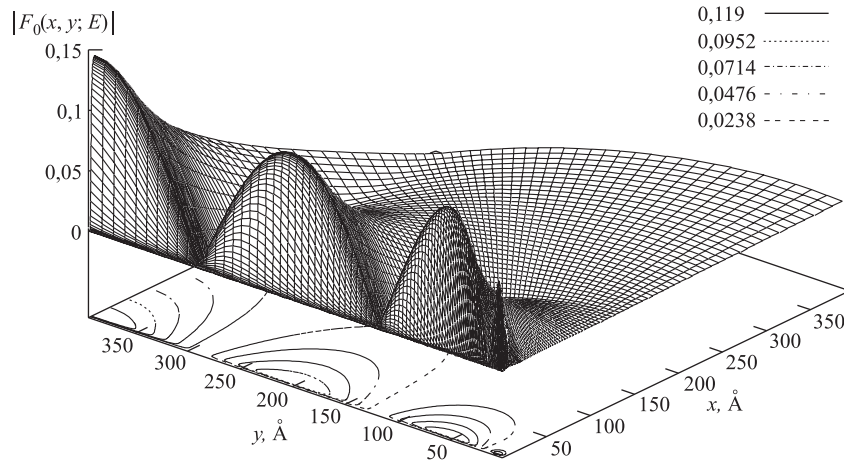


Рис. 6. Поверхность графика модуля парциальной компоненты Фаддеева $F_0(x, y; E)$, описывающей процесс ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}_2$ -рассеяния при энергии $E = E_{\text{цм}} = 1,4$ мКв в случае, когда взаимодействие между атомами ${}^4\text{He}$ описывается потенциалом HFD-B. Значения якобиевских переменных x и y даны в Å

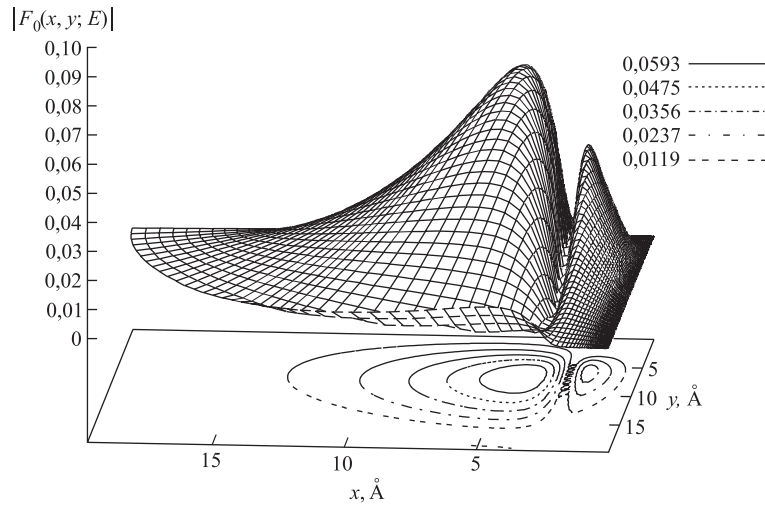


Рис. 7. Фрагмент поверхности $|F_0(x, y; E)|$, показанной на рис. 6

В асимптотике (3.25) компоненты $F_2(x, y; E)$ член с синусоидальной падающей волной отсутствует. Поэтому у графика $|F_2(x, y; E)|$ (см. рис. 10) никаких хребтов нет. Однако у поверхности модуля парциальной волновой

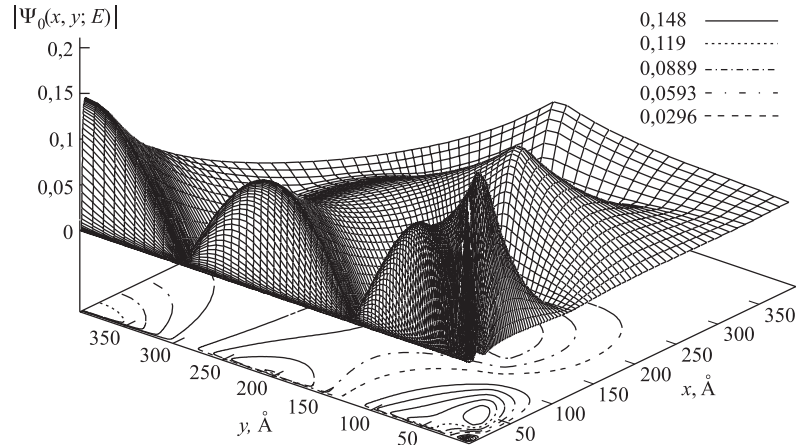


Рис. 8. Поверхность графика модуля парциальной компоненты $\Psi_0(x, y; E)$ полной волновой функции, описывающей процесс ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}_2$ -рассеяния при энергии $E = E_{\text{цм}} = 1,4$ мК в случае, когда взаимодействие между атомами ${}^4\text{He}$ описывается потенциалом HFD-B

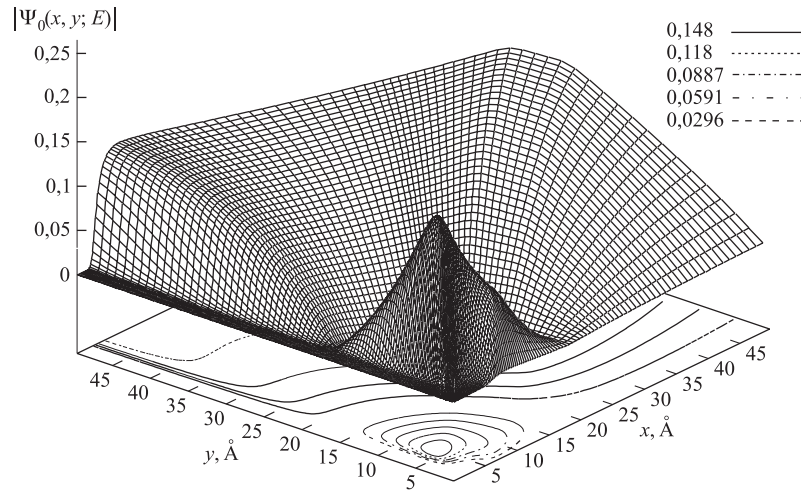


Рис. 9. Фрагмент поверхности $|\Psi_0(x, y; E)|$, показанной на рис. 8

функции $|\Psi_2(x, y; E)|$ синусоидальный хребет все же возникает — он попросту порождается вкладом в правую часть выражения (3.16) для $\Psi_2(x, y; E)$ от членов с $\sin(\sqrt{E - \varepsilon_d}y)$ и $\exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d}y)$ в асимптотике компоненты Фаддеева $F_0(x, y; E)$ для нулевого парциального канала.

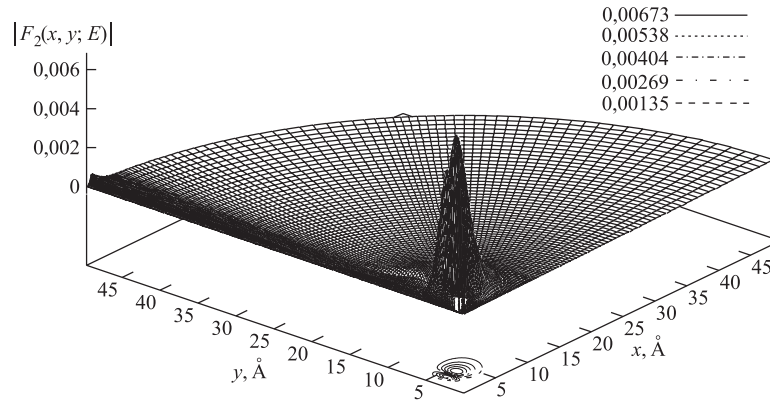


Рис. 10. Поверхность графика модуля парциальной компоненты Фаддеева $F_2(x, y; E)$, отвечающей процессу ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}_2$ -рассеяния при энергии $E = E_{\text{цм}} = 1,4$ мК в случае, когда взаимодействие между атомами ${}^4\text{He}$ описывается потенциалом HFD-B

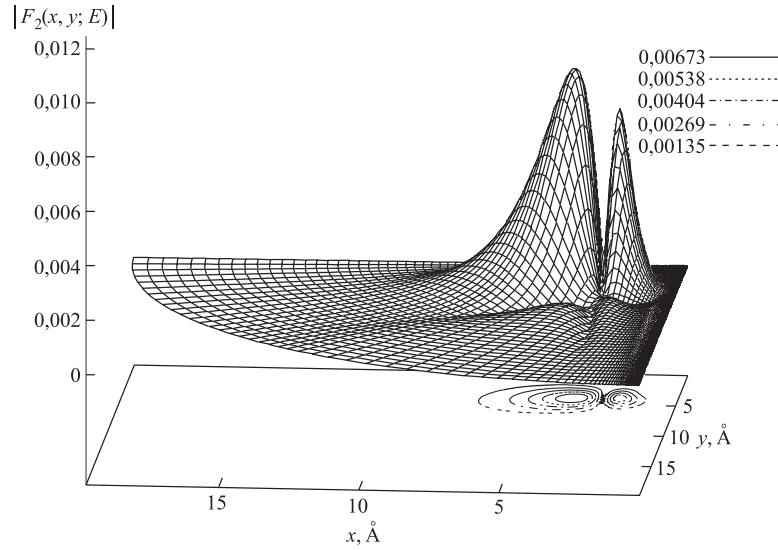


Рис. 11. Фрагмент поверхности $|F_2(x, y; E)|$, изображенной на рис. 10

Следует подчеркнуть, что строение функций

$$F_0(x, y; E), \quad F_2(x, y; E), \quad \Psi_0(x, y; E) \quad \text{и} \quad \Psi_2(x, y; E)$$

в области $\rho < 15$ Å (см. рис. 7, 9, 11 и 13) в существенном не зависит от E , по крайней мере, пока E изменяется в рассматривавшемся нами интервале

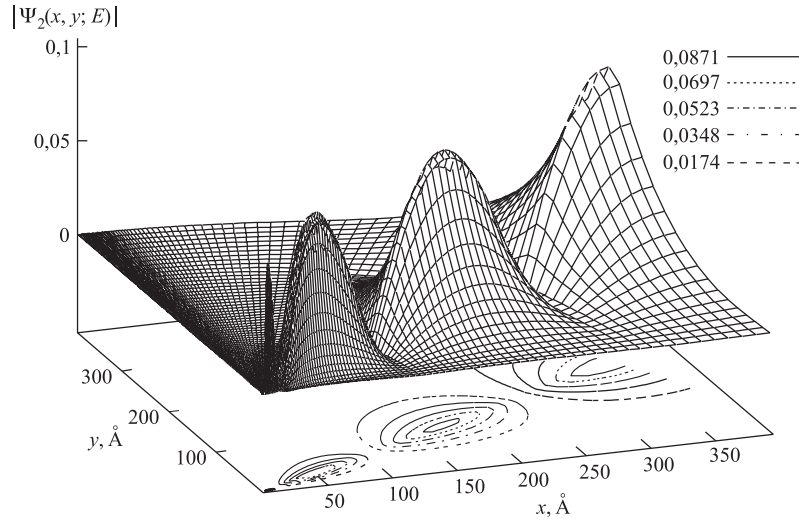


Рис. 12. Поверхность графика модуля парциальной компоненты $\Psi_2(x, y; E)$ полной волновой функции, описывающей процесс ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}_2$ -рассеяния при энергии $E = E_{\text{цм}} = 1,4$ мК в случае, когда взаимодействие между атомами ${}^4\text{He}$ описывается потенциалом HFD-B

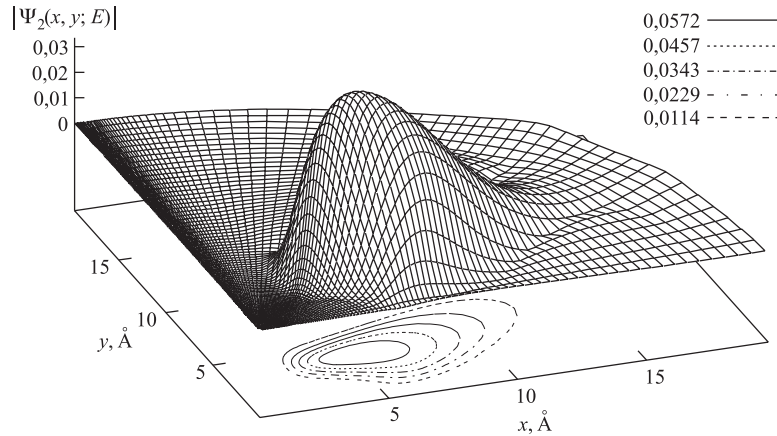


Рис. 13. Фрагмент поверхности $|\Psi_2(x, y; E)|$, изображенной на рис. 12

энергий $\varepsilon_d < E \lesssim 2,4$ мК. В этой области функции $F_l(x, y; E)$ и $\Psi_l(x, y; E)$ пропорциональны соответствующим парциальным компонентам Фаддеева и парциальным волновым функциям, описывающим основное состояние тримера (ср., например, рис. 7 с рис. 2 из статьи [109]).

Таблица 5. Длина рассеяния ℓ_{sc} (в Å) атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ в случае потенциала ТТУ для $l_{\max} = 0$ как функция параметров сетки ρ_{\max} и $N = N_\rho = N_\theta$

ρ_{\max}	N				
	1005	1505	2005	2505	3005
600	162,33	159,80	158,91	158,61	158,31
700	164,13	159,99	158,57	157,99	157,65
800	167,15	160,98	158,90	158,03	157,46
900	171,19	162,52	159,66	158,40	157,66

Ясно, что чем ближе энергия рассеяния E подходит к парному порогу ε_d , тем большими оказываются расстояния выхода компонент Фаддеева $F_i(x, y; E)$ на асимптотику (3.25). Поэтому, в сравнении с энергиями связи и фазовыми сдвигами, длина He–He₂-рассеяния ℓ_{sc} оказывается величиной, значительно более чувствительной к уровню качества выбираемых сеток, в особенности к величине радиуса обрезания ρ_{\max} . Для того чтобы исследовать степень этой чувствительности (см. [72]), мы выбрали последовательность возрастающих значений радиуса обрезания ρ_{\max} . Одновременно с ростом ρ_{\max} повышалась и размерность сетки $N = N_\theta = N_\rho$ с той целью, чтобы локально сохранялся ее шаг по переменным ρ и θ . Разумеется, при проведении такого анализа было достаточно ограничиться рассмотрением случая $l_{\max} = 0$. Результаты по длине рассеяния ℓ_{sc} , полученные при использовании потенциала ТТУ, приведены в табл. 5. Кроме того, они представлены на рис. 14. Этот рисунок демонстрирует, что при увеличении размерности сетки N сходимость длины ${}^4\text{He}$ – ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния оказывается в существенном достигнутой, однако различным ρ_{\max} отвечают различные предельные значения ℓ_{sc} . Это наблюдение касается, в частности, перехода от $\rho_{\max} = 600$ Å к $\rho_{\max} = 700$ Å, тогда как переход от 800 к 900 Å не дает почти никаких изменений.

Работая всегда на «максимуме» доступных нам компьютерных мощностей, в статьях [62, 63] и [72, 113] мы последовательно улучшали качество наших результатов по ℓ_{sc} . Наши лучшие на данный момент результаты [72, 113] для ℓ_{sc} в случае потенциалов LM2M2, ТТУ и HFD-V представлены в табл. 6. Эти результаты получены при использовании сетки с параметрами $N_\rho = N_\theta = 2005$ и $\rho_{\max} = 700$ Å.

Отметим, что с учетом данных, представленных в табл. 5 и на рис. 14, выбор $\rho_{\max} = 700$ Å при переходе от $l_{\max} = 0$ к $l_{\max} = 2$ и 4 может рассматриваться как достаточно оправданный. Наши предыдущие результаты по длине He–He₂-рассеяния были опубликованы в [63], где, ввиду недостаточных компьютерных возможностей, мы были вынуждены ограничиться выбором $\rho_{\max} = 460$ Å и $N_\rho = N_\theta = 605$. Можно полагать, что по сравнению с [63] в работе [72] мы достигли примерно 10%-го улучшения результатов для ℓ_{sc} , на что указывает и тенденция, обнаруживающаяся на рис. 14.

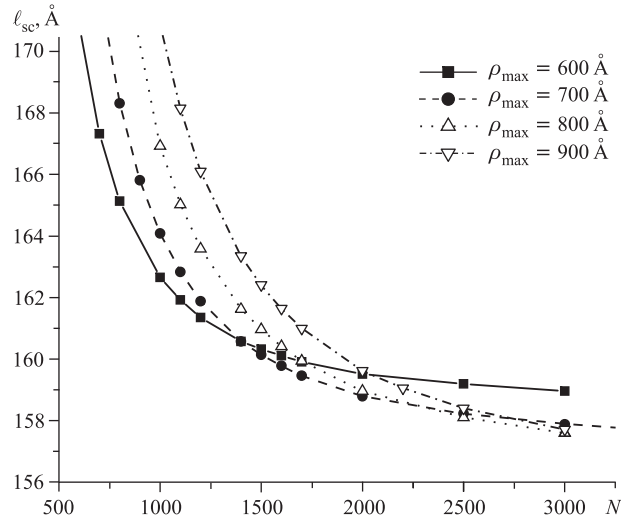


Рис. 14. Длина рассеяния ℓ_{sc} атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ при $l_{\max} = 0$ в случае потенциала ТТУ как функция размерности сетки $N \equiv N_\rho = N_\theta$

Таблица 6. Длина рассеяния ℓ_{sc} (в \AA) атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$

Потенциал	l_{\max}	[72]	[55]	[70]	[91]	[111]
LM2M2	0	158,2				
	2	122,9				
	4	118,7	126	115,4	114,25	113,1
ТТУ	0	158,6				
	2	123,2				
	4	118,9		115,8		114,5
HFD-B	0	159,6				
	2	128,4				
	4	124,7		121,9		120,2

Табл. 6 содержит также результаты из работ [55] и [70], полученные при расчетах с реалистическими межатомными потенциалами. Подход [55] основан на использовании комбинации метода Монте-Карло и гиперсферической адиабатики. В статье [70] использовались трехмерные дифференциальные уравнения Фаддеева в представлении полного углового момента. Наши результаты для ℓ_{sc} из [72], приведенные в табл. 6, согласуются с этими альтернативными расчетами достаточно хорошо.

Хорошее качество наших результатов для ℓ_{sc} подтверждается также экстраполяцией кривых на рис. 14. Согласно этому рисунку длина рассеяния ℓ_{sc} , рассматриваемая как функция переменной N , при $N \sim 3000$ в существенном выходит на соответствующую горизонтальную асимптоту. Однако полная стабилизация при $N \sim 3000$ все же еще не наступает. Для того чтобы произвести оценку асимптотических значений ℓ_{sc} , в [72] мы использовали аппроксимацию кривых на рис. 14 посредством функции вида

$$\ell_{sc}(N) = \alpha + \frac{\beta}{N - \gamma}. \quad (5.1)$$

Очевидно, $\ell_{sc}(\infty) = \alpha$. Константы α , β и γ фиксируются значениями ℓ_{sc} при $N = 1005, 2005$ и 3005 . Таким образом при $\rho_{\max} = 600, 700, 800$ и 900 \AA мы получаем асимптотические значения $\ell_{sc}(\infty) = 157,5, 156,4, 155,4$ и $154,8 \text{ \AA}$ соответственно. Сопоставление с табл. 5 показывает, что отличие этих асимптотических значений от соответствующих величин ℓ_{sc} при $N = 3005$ лежит в пределах от 1 до 3 \AA .

В случае $l_{\max} = 4$ и $\rho_{\max} = 700 \text{ \AA}$ длина рассеяния для потенциала LM2M2 вычислялась при $N = 1005, 1505$ и 2005 . Использование экстраполяционной формулы (5.1) с параметрами α , β и γ , определенными по этим трем точкам, приводит к значению $\ell_{sc}(\infty) = 117,0 \text{ \AA}$. Таким образом, отличие длины рассеяния, полученной при $N = 2005$, от результата экстраполяции составляет 1,7 \AA . По-видимому, прямые расчеты ℓ_{sc} для более высоких N и l_{\max} должны привести лишь к очень небольшой модификации этого результата. Опираясь на такую аргументацию, мы заключаем, что истинное значение ℓ_{sc} в случае потенциалов LM2M2 и ТТУ может лежать в интервале между 115 и 116 \AA . Это заключение поддерживает результаты, полученные Рудневым в [70]. В недавней работе Лазаускаса и Карбонеля [71] для случая потенциала LM2M2 найдено значение $\ell_{sc} = 115,2 \text{ \AA}$. Отметим, что расчеты в [71] были проведены на основании дифференциальной формулировки задачи рассеяния для системы нескольких частиц с твердым кором, разработанной в [76, 77] и представленной для трехчастичного случая в разд. 2.

Следует указать на то, что кроме безмодельных расчетов [55, 63, 70–72] и др., основанных на использовании реалистических потенциалов, проводились и модельные вычисления длины ℓ_{sc} , результаты которых приведены в двух последних колонках табл. 6. Расчеты [91] основывались на использовании потенциала Ямагучи, приводящего к легко решаемым одномерным интегральным уравнениям в импульсном пространстве. В сущности, подход [111] (см. также статью [114] и содержащиеся в ней ссылки) представляет собой модель потенциалов нулевого радиуса с обрезанием по большим импульсам, делающим соответствующее одномерное уравнение Скорнякова–Тер-Мартиросяна [115] хорошо определенным. Параметр обрезания в [111,

114] и эффективный радиус потенциала Ямагучи в [91] являются подгоночными параметрами моделей. Их значения подбираются так, чтобы воспроизводилась энергия основного или возбужденного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$, полученная в расчетах с реалистическими потенциалами. Другими словами, подходы [111] и [91] характеризуются замечательной простотой, но при получении на их основе конкретных результатов неизбежно приходится опираться на результаты безмодельных трехчастичных расчетов. Надо сказать, что своим успехом модельные вычисления обязаны тому обстоятельству, что в условиях близости эффекта Ефимова можно говорить о существовании универсальных закономерностей в поведении трехбозонных систем. На наличие таких закономерностей указывалось, в сущности, еще самим Ефимовым [39, 40, 50]. Обсуждение различных вопросов, связанных с проявлениями универсальных закономерностей в системах нескольких частиц с большими парными длинами рассеяния, а также соответствующие ссылки можно найти в недавнем обзоре [110].

6. О ЕФИМОВСКОЙ ПРИРОДЕ ВОЗБУЖДЕННОГО СОСТОЯНИЯ ТРИМЕРА ${}^4\text{He}_3$

Эффект Ефимова представляет собой замечательное явление, как нельзя лучше иллюстрирующее разнообразие возможностей при переходе от задачи двух тел к задаче трех тел. Хорошо известно (см., например, [116, разд. XIII.3]), что любая система двух частиц с достаточно быстро убывающим и не слишком сингулярным взаимодействием $V(\mathbf{x})$ обладает не более чем конечным числом связанных состояний. Более того, для числа $\mathfrak{N}(V)$ связанных состояний, отвечающих потенциалу V и рассматриваемых с учетом их кратностей, справедлива оценка Бирмана–Швингера [116, теорема XIII.10]

$$\mathfrak{N}(V) \leq \left(\frac{1}{4\pi}\right)^2 \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{x} \int_{\mathbb{R}^3} d\mathbf{y} \frac{|V(\mathbf{x})||V(\mathbf{y})|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2}. \quad (6.1)$$

Для конечности числа двухчастичных связанных состояний достаточно лишь ограниченности интеграла в правой части (6.1). В случае системы трех частиц, даже с гладкими финитными парными потенциалами, при определенных условиях реализуется прямо противоположная ситуация: число связанных состояний может оказаться бесконечным. Такая спектральная ситуация имеет место в случае, когда ни одна из парных подсистем не имеет связанных состояний, но хотя бы две из них обладают бесконечными длинами рассеяния. В этом и состоит эффект Ефимова [39, 40, 50]. Для указанной ситуации математически строго доказано, что количество $N(E)$ связанных состояний с

энергиями, лежащими ниже величины $E < 0$, логарифмически возрастает при $E \rightarrow 0$ и, более того, существует конечный предел [117] (см. также [118])

$$\lim_{E \uparrow 0} \frac{N(E)}{|\ln |E||} = \Upsilon > 0. \quad (6.2)$$

При этом величина Υ не зависит от конкретного вида парных (быстро убывающих) потенциалов и определяется лишь соотношениями между массами частиц. Качественный анализ, проведенный самим Ефимовым [39,40], позволяет рассчитывать также и на существование предела

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_{n+1}}{E_n} = \exp\left(-\frac{1}{\Upsilon}\right),$$

где через E_n обозначены энергии связанных состояний, пронумерованные в порядке убывания абсолютной величины. Если частицы являются тождественными бозонами, это рассмотрение приводит к асимптотическому соотношению

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{E_{n+1}}{E_n} = \exp\left(-\frac{2\pi}{\omega_0}\right) \approx \frac{1}{515,035},$$

где ω_0 , $\omega_0 \approx 1,0062378$, — единственное положительное решение трансцендентного уравнения

$$1 - \frac{8}{\sqrt{3}} \frac{\text{sh}(\pi\omega/6)}{\omega \text{ch}(\pi\omega/2)} = 0, \quad (6.3)$$

впервые появившегося еще в работе Данилова [119] при исследовании уравнения Скорнякова–Тер-Мартirosяна [115]. Некоторые точные утверждения по поводу более детального асимптотического поведения ефимовских уровней E_n системы трех тождественных бозонов при $n \rightarrow \infty$ можно найти в [120]. Анализ [120] следует альтернативному подходу к обоснованию эффекта Ефимова, независимо предложенному Фаддеевым [121] и Амадо и Ноблом [122, 123] вскоре после выхода работ [39] и [40]. Этот подход основывается на явном выделении нефредгольмовой (при $\ell_{sc}^{(2)} \rightarrow \infty$) компоненты интегрального оператора уравнений Фаддеева в импульсном представлении и исследовании порождаемого ею трехчастичного спектра (см. [53, с. 103–105]). Отметим, что первое вполне строгое доказательство эффекта Ефимова, данное Яфаевым в [124], также следует подходу [121–123].

Все изученные конкретные двухчастичные системы (как ядерные, так и атомные) обладают конечными длинами рассеяния. Это означает, что практическое наблюдение «полномасштабного» эффекта Ефимова (с возникновением бесконечного набора трехчастичных связанных состояний) вряд ли возможно. Однако огромный интерес представляют и системы, в которых этот эффект может проявляться лишь частично. Качественный анализ, проведенный Ефимовым в [39,40] (см. также обзор Филлипса [125]), показывает,

что если двухчастичная длина рассеяния $\ell_{sc}^{(2)}$ велика по сравнению с эффективным радиусом r_0 парных сил, то в системе трех тождественных бозонов на расстояниях $r_0 \lesssim \rho \lesssim \ell_{sc}^{(2)}$ присутствует эффективное притягивающее взаимодействие типа $1/\rho^2$. На этом основании для общего числа N связанных состояний трехбозонной системы делается оценка [40]

$$N \simeq \frac{\omega_0}{\pi} \ln \left| \frac{\ell_{sc}^{(2)}}{r_0} \right|. \quad (6.4)$$

Уже формула (6.3) указывает на тесную связь эффекта Ефимова с эффектом Томаса [126]. Напомним, что суть последнего сводится к неполугограниченности снизу [127] оператора Шредингера для системы трех частиц, взаимодействия в которой описываются потенциалами нулевого радиуса, и тем самым к возможности коллапса этой системы и падения частиц на ее центр масс. В сущности, асимптотическая оценка (6.4) обслуживает сразу оба эффекта: при $r_0 \neq 0$ и $|\ell_{sc}^{(2)}| \rightarrow \infty$ она указывает на количество ефимовских уровней, экспоненциально накапливающихся к трехчастичному порогу, тогда как при конечной ненулевой $\ell_{sc}^{(2)}$ и $r_0 \rightarrow 0$ эта оценка описывает количество уровней энергии в эффекте Томаса, уходящих на $-\infty$. Тот факт, что эффекты Ефимова и Томаса представляют собой две стороны одной медали, отмечался, в частности, в работах [128, 129]. В настоящее время в связи с обсуждением универсальных закономерностей, характерных для трехчастичных систем при ультранизких энергиях, наблюдается тенденция (см., например, [130]) использовать единый термин «уровни Томаса–Ефимова» для дискретного спектра, порождаемого обоими эффектами.

До сих пор мы говорили лишь об уединенных трехчастичных системах, не взаимодействующих с внешним миром. Обычно предполагается, явно или неявно (см., например, [84, 131, 132]), что оценки типа (6.4) имеют место и в случае трехатомных систем, находящихся во внешнем магнитном поле. Если система такова, что при ее помещении в магнитное поле у парных подсистем за счет зеемановского взаимодействия возникает фешбаховский резонанс [133], то появляется инструмент для управления двухчастичной длиной рассеяния путем варьирования напряженности магнитного поля. Прежде всего это относится к системам, состоящим из щелочных атомов. В 2006 г. были объявлены результаты экспериментов [132, 134] по трехчастичной рекомбинации в ультрахолодном газе атомов цезия, которые рассматриваются авторами этих экспериментов как свидетельство возникновения по крайней мере одного ефимовского состояния системы $^{133}\text{Cs}_3$ при изменении напряженности магнитного поля. Обсуждение и варианты интерпретации результатов экспериментов [132, 134] можно найти в [130, 135].

Можно считать уже общепринятым, что возбужденное состояние тримера $^4\text{He}_3$ имеет ефимовскую природу. Это предположение было высказано еще в

статье [41], которая содержит первый расчет энергии возбужденного состояния на основании интегральных уравнений Фаддеева. Убедительное обоснование ефимовской природы этого состояния было впервые дано в расчетах Корнелиуса и Глэкле [47]. Десятилетие спустя выводы [47] были поддержаны в [59] и [62]. Несмотря на то, что в [47, 59, 62] использовались весьма различные версии ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}$ -потенциалов Азиза [27, 33, 34], их основной результат по поводу возбужденного состояния совпадает. А именно, в [47, 59, 62] было установлено, что при умножении потенциала на возрастающий фактор $\lambda > 1$ разность $\varepsilon_d(\lambda) - E^*(\lambda)$ между энергией $\varepsilon_d(\lambda)$ димера ${}^4\text{He}_2$ и энергией возбужденного состояния тримера $E^* \equiv E_t^{(1)}$ сначала увеличивается, но затем ее поведение радикально меняется: эта разность начинает монотонно убывать и при $\lambda \approx 1,2$ уровень E^* исчезает. Именно такое нестандартное поведение энергии $E^*(\lambda)$ при, казалось бы, все более усиливающейся связи между атомами гелия указывает на ефимовскую природу возбужденного состояния тримера. Наоборот, при довольно слабом уменьшении λ (всего лишь на 2%) у тримера наблюдается возникновение второго возбужденного состояния $E^{**} \equiv E_t^{(2)}$ [47, 59]. В недавних работах [136] и [71] обсуждение ефимовской природы возбужденных состояний тримера ${}^4\text{He}_3$ ведется также на языке длин рассеяния.

По-видимому, наиболее подробное исследование природы возбужденного состояния тримера ${}^4\text{He}_3$ было проведено в статье [48] (см. также [96] и [49]), где был детально изучен механизм возникновения новых ефимовских состояний из резонансов при уменьшении потенциалов взаимодействия между атомами гелия. Одной из главных целей [48] было выяснение судьбы возбужденного состояния после его исчезновения на физическом листе при $\lambda > 1$, а также изучение механизма возникновения новых возбужденных состояний при $\lambda < 1$. В [48] было обнаружено, в частности, что в случае взаимодействий [33] и $l_{\text{max}} = 0$ возбужденный уровень тримера $E^*(\lambda)$ сливается с двухчастичным порогом $\varepsilon_d(\lambda)$ при $\lambda \approx 1,175$ и при дальнейшем уменьшении фактора λ превращается в виртуальный уровень первого порядка (простой вещественный полюс аналитического продолжения матрицы рассеяния) на нефизическом листе, связанном с физическим листом переходом через непрерывный спектр между порогами $\varepsilon_d(\lambda)$ и 0. Новые возбужденные уровни при $\lambda < 1$ рождаются также из виртуальных уровней первого порядка. Последние появляются парами. Появлению пары виртуальных уровней первого порядка предшествует слияние пары сопряженных резонансов первого порядка в виртуальный уровень второго порядка. Следует, однако, отметить, что упомянутые резонансы, вообще говоря, не являются истинными резонансами тримера ${}^4\text{He}_3$, поскольку они оказываются расположенными за пределами той области энергий, для которой обоснованна применимость используемого в [48] метода вычисления резонансов.

Таблица 7. Зависимость энергии связи ε_d димера ${}^4\text{He}_2$, энергий первого, E^* , и второго, E^{**} , возбужденных состояний тримера ${}^4\text{He}_3$, а также энергии E_{virt} виртуальных уровней тримера ${}^4\text{He}_3$ и длин ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}$ - и ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}_2$ -рассеяния $\ell_{\text{sc}}^{(2)}$ и ℓ_{sc} от потенциального фактора λ . Значения энергий и длин даны в мК и \AA соответственно. Прочерки означают отсутствие соответствующих состояний. Использовался потенциал HFD-B [33]. Все трехчастичные результаты получены при $I_{\text{max}} = 0$

λ	ε_d	$\varepsilon_d - E^*$	$\varepsilon_d - E_{\text{virt}}$	$\varepsilon_d - E^{**}$	ℓ_{sc}	$\ell_{\text{sc}}^{(2)}$
1,30	-199,45	—	1,831	—	-61	11,4
1,20	-99,068	—	0,01552	—	-340	14,7
1,18	-82,927	—	0,00058	—	-1783	15,8
1,17	-75,367	0,0063	—	—	8502	16,3
1,15	-61,280	0,0737	—	—	256	17,7
1,10	-32,222	0,4499	—	—	152	23,1
1,0	-1,685	0,773	—	—	160	88,6
0,995	-1,160	0,710	—	—	151	106
0,990	-0,732	0,622	—	—	143	132
0,9875	-0,555	0,573	0,222	—	125	151
0,985	-0,402	0,518	0,097	—	69	177
0,982	-0,251	0,447	0,022	—	-75	223
0,980	-0,170	0,396	0,009	—	-337	271
0,9775	-0,091	0,328	0,003	—	-6972	370
0,975	-0,036	0,259	—	0,002	7120	583
0,973	-0,010	0,204	—	0,006	4260	1092

Чтобы проиллюстрировать сказанное выше, мы приводим здесь табл. 7, заимствованную из [136] (следует отметить, что значения содержащихся в этой таблице энергий были вычислены еще в [48]). Как видно из табл. 7, при $0,9875 \leq \lambda \leq 1,17$ у тримера ${}^4\text{He}_3$ имеется возбужденное состояние, причем только одно (см. третий столбец таблицы). При $\lambda \geq 1,18$ возбужденные состояния отсутствуют, зато существует виртуальный уровень с энергией E_{virt} (см. четвертый столбец таблицы), представляющий собой результат перехода энергии первого возбужденного состояния на нефизический лист.

Когда λ уменьшается примерно до 0,986, на нефизическом листе обнаруживается новый виртуальный уровень (см. четвертый столбец табл. 7). Для энергии этого уровня мы используем прежнее обозначение E_{virt} . При дальнейшем уменьшении потенциального фактора λ приблизительно до 0,976 виртуальный уровень E_{virt} переходит на физический лист и, тем самым, возникает второе возбужденное состояние (см. нижнюю часть пятого столбца), энергию которого мы обозначаем через E^{**} .

В обоих случаях, когда при уменьшении λ происходит качественный скачок и соответствующее виртуальное состояние превращается в связанное,

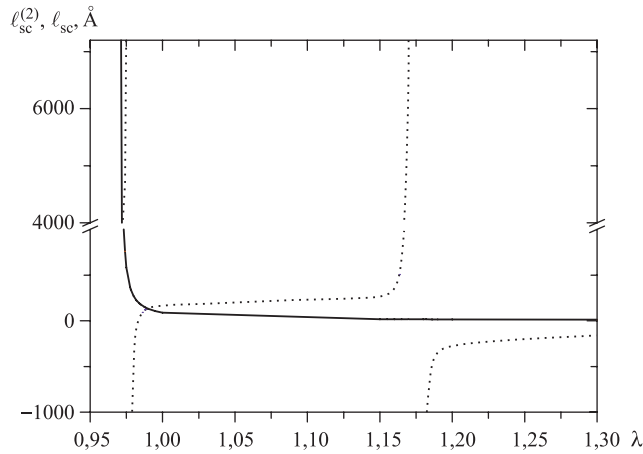


Рис. 15. Зависимость атом-атомной длины ${}^4\text{He}\text{-}{}^4\text{He}$ -рассеяния $l_{sc}^{(2)}$ (сплошная кривая) и длины рассеяния l_{sc} атома ${}^4\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ (пунктирная кривая) от потенциального фактора λ

длина рассеяния атома на димере l_{sc} изменяет знак и проходит через полюс (см. предпоследний столбец табл. 7). При этом атом-атомная длина рассеяния $l_{sc}^{(2)}$ изменяется непрерывно и монотонно. Поведение обеих длин рассеяния, представленных в табл. 7, отображено графически на рис. 15. Отметим, что, как и сама таблица, этот рисунок взят из статьи [136].

7. СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ И РАССЕЯНИЕ В СИСТЕМЕ ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$

В настоящем разделе мы будем обсуждать «несимметричную» систему, образованную двумя атомами ${}^4\text{He}$ и одним атомом ${}^3\text{He}$. При этом будем считать, что атомам ${}^4\text{He}$ присвоены номера 1 и 2, тогда как номер 3 ассоциируется с атомом ${}^3\text{He}$. Для простоты будем полагать, что в якобиевских переменных x_α , задаваемых формулами (2.1), радиус твердого кора s является одним и тем же для всех трех парных подсистем. Система ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ отличается от системы трех бозонов, рассмотренной в разд. 3, прежде всего тем, что тождественными являются только две частицы — бозоны ${}^4\text{He}$. Атом ${}^3\text{He}$ является фермионом. При расчетах трехатомной системы ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ этот атом можно считать скалярной частицей, поскольку во взаимодействии с бозонами ${}^4\text{He}$ его фермионные степени свободы никак не участвуют. Как уже отмечалось во введении, взаимодействия между атомами ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$ не отли-

чаются от взаимодействия между атомами ${}^4\text{He}$. Ввиду существенно меньшей массы атома ${}^3\text{He}$ двухатомная система ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}$ связанными состояниями не обладает [59, 60].

Напомним, что в случае потенциалов с твердым кором компоненты Фаддеева $F_\alpha(X)$ определяются через полную волновую функцию по формуле (2.10). Инвариантность волновой функции $\Psi(X)$ системы ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ относительно перестановки частиц атомов ${}^4\text{He}$ (частиц 1 и 2) означает, что такой инвариантностью обладает и компонента Фаддеева $F_3(\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3)$, т. е.

$$F_3(-\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3) = F_3(\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3). \quad (7.1)$$

Тождественность двух атомов ${}^4\text{He}$ означает также, что компоненты Фаддеева $F_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1)$ и $F_2(\mathbf{x}_2, \mathbf{y}_2)$ переходят друг в друга при подходящем повороте координатного пространства. Поэтому достаточно рассматривать только две независимые компоненты Фаддеева. Компонента $F_3(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ естественным образом ассоциируется с подсистемой ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}$. Вторая компонента, скажем, $F_1(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ отвечает сразу двум парным подсистемам ${}^3\text{He}-{}^4\text{He}$. С учетом сказанного заключаем, что для рассматриваемого сейчас случая система уравнений Фаддеева (2.13) может быть записана в виде

$$(-\Delta_X - E)F_\alpha(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) = \begin{cases} 0, & |\mathbf{x}_\alpha| < c, \\ -V_\alpha(\mathbf{x}_\alpha)\Psi^{(\alpha)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha), & |\mathbf{x}_\alpha| > c, \end{cases} \quad (7.2)$$

$$\Psi^{(\alpha)}(\mathbf{x}_\alpha, \mathbf{y}_\alpha) \Big|_{|\mathbf{x}_\alpha|=c} = 0, \quad (7.3)$$

$$\alpha = 1, 3,$$

где индексы 1 и 3 у полной волновой функции $\Psi(X)$ означают ее запись в терминах координат $\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1$ и $\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3$ соответственно. Точнее,

$$\begin{aligned} \Psi^{(1)}(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) = & F_1(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) + \\ & + F_1(c_{21}\mathbf{x}_1 + s_{21}\mathbf{y}_1, -s_{21}\mathbf{x}_1 + c_{21}\mathbf{y}_1) + \\ & + F_3(c_{31}\mathbf{x}_1 + s_{31}\mathbf{y}_1, -s_{31}\mathbf{x}_1 + c_{31}\mathbf{y}_1) \end{aligned}$$

и

$$\begin{aligned} \Psi^{(3)}(\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3) = & F_3(\mathbf{x}_3, \mathbf{y}_3) + \\ & + F_1(c_{13}\mathbf{x}_3 + s_{13}\mathbf{y}_3, -s_{13}\mathbf{x}_3 + c_{13}\mathbf{y}_3) + \\ & + F_1(c_{23}\mathbf{x}_3 + s_{23}\mathbf{y}_3, -s_{23}\mathbf{x}_3 + c_{23}\mathbf{y}_3). \end{aligned}$$

Обозначения V_1 и V_3 используются для одного и того же атом-атомного потенциала, но в первом случае его аргумент выражается через якобиевскую переменную \mathbf{x}_1 , тогда как во втором — через якобиевскую переменную \mathbf{x}_3 .

Полагая далее, что трехчастичная система ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ находится в состоянии с полным угловым моментом $L = 0$, проведем разложение компонент Фаддеева F_1 и F_3 в ряд по бисферическим гармоникам (3.11):

$$F_\alpha(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_l \frac{F_l^{(\alpha)}(x, y)}{xy} \mathcal{Y}_{l10}(\hat{\mathbf{x}}, \hat{\mathbf{y}}), \quad \alpha = 1, 3, \quad (7.4)$$

где $\mathbf{x} \equiv \mathbf{x}_\alpha$ и $\mathbf{y} \equiv \mathbf{y}_\alpha$ при соответствующем значении индекса α . Ввиду (7.1) у функции F_3 отличными от нуля будут лишь парциальные компоненты $F_l^{(3)}$ с четными значениями момента l . А в целом результатом преобразования уравнений Фаддеева (7.2) и краевых условий (7.3) окажется система парциальных интегродифференциальных уравнений

$$\begin{aligned} \left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{\partial^2}{\partial y^2} + l(l+1) \left(\frac{1}{x^2} + \frac{1}{y^2} \right) - E \right) F_l^{(\alpha)}(x, y) = \\ = \begin{cases} 0, & x < c, \\ -V_\alpha(x) \Psi_l^{(\alpha)}(x, y), & x > c, \end{cases} \quad \alpha = 1, 3, \end{aligned} \quad (7.5)$$

которые должны рассматриваться совместно с граничными условиями

$$\Psi_l^{(\alpha)}(x, y) \Big|_{x=c} = 0, \quad \alpha = 1, 3. \quad (7.6)$$

При этом парциальные волновые функции $\Psi_l^{(\alpha)}$, $\alpha = 1, 3$, выражаются через парциальные компоненты Фаддеева $F_l^{(\alpha)}$ по формулам

$$\begin{aligned} \Psi_l^{(1)}(x, y) = F_l^{(1)}(x, y) + \sum_{l'} \int_0^1 d\eta \left[h_{(1;l)(2;l'l')}^0(x, y, \eta) F_{l'}^{(1)}(x_{21}(\eta), y_{21}(\eta)) + \right. \\ \left. + h_{(1;l)(3;l'l')}^0(x, y, \eta) F_{l'}^{(3)}(x_{31}(\eta), y_{31}(\eta)) \right], \\ \Psi_l^{(3)}(x, y) = F_l^{(3)}(x, y) + \sum_{l'} \int_0^1 d\eta \left[h_{(3;l)(1;l'l')}^0(x, y, \eta) F_{l'}^{(1)}(x_{13}(\eta), y_{13}(\eta)) + \right. \\ \left. + h_{(3;l)(2;l'l')}^0(x, y, \eta) F_{l'}^{(1)}(x_{23}(\eta), y_{23}(\eta)) \right], \end{aligned}$$

содержащим угловые функции $h_{(\alpha;l)(\beta;l'\lambda')}^l(x, y, \eta)$. Последние задаются равенствами (3.19) при $L = 0$, $\lambda = l$ и $\lambda' = l'$.

Связанному состоянию системы ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ отвечает асимптотическое граничное условие (ср. с (2.17)–(2.20))

$$F_l^{(\alpha)}(x, y) = \delta_{\alpha 3} \delta_{l0} \psi_d(x) \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d} y) \left[a_0 + o\left(y^{-1/2}\right) \right] + \frac{\exp(i\sqrt{E}\rho)}{\sqrt{\rho}} \left[A_l^{(\alpha)}(\theta) + o\left(\rho^{-1/2}\right) \right] \quad (7.7)$$

при $\rho = \sqrt{x^2 + y^2} \rightarrow \infty$ и/или $y \rightarrow \infty$. Как и в разд. 3, здесь используется утверждение (3.12) о том, что димер ${}^4\text{He}_2$ обладает только одним связанным состоянием (с энергией ε_d и волновой функцией ψ_d) и это состояние существует лишь при $l = 0$.

Парциальные асимптотические условия при $\rho \rightarrow \infty$ и/или $y \rightarrow \infty$, отвечающие процессам упругого рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ или развала системы на три частицы, имеют вид (ср. с (3.25))

$$F_l^{(\alpha)}(x, y; E) = \delta_{\alpha 3} \delta_{l0} \psi_d(x) \left\{ \sin(\sqrt{E - \varepsilon_d} y) + \exp(i\sqrt{E - \varepsilon_d} y) \times \right. \\ \left. \times \left[a_0(E) + o\left(y^{-1/2}\right) \right] \right\} + \frac{\exp(i\sqrt{E}\rho)}{\sqrt{\rho}} \left[A_l^{(\alpha)}(E, \theta) + o\left(\rho^{-1/2}\right) \right], \quad (7.8)$$

где $a_0(E)$ (при $E > \varepsilon_d$) — S -волновая амплитуда упругого рассеяния. При $E > 0$ функции $A_l(E, \theta)$ представляют собой парциальные компоненты Фаддеева полной амплитуды развала.

Как обычно, при практическом решении системы (7.5), (7.6) приходится ее обрезать, ограничиваясь рассмотрением парциальных компонент Фаддеева $F_l^{(\alpha)}$ лишь при значениях $l \leq l_{\max}$, где l_{\max} — некоторое положительное целое число.

Длина рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ вычисляется как предел

$$\ell_{\text{sc}} = -\frac{1}{2} \sqrt{1 + 2 \frac{m_{{}^4\text{He}}}{m_{{}^3\text{He}}} \lim_{p \rightarrow 0} \frac{a_0(\varepsilon_d + p^2)}{p}},$$

где через $m_{{}^4\text{He}}$ и $m_{{}^3\text{He}}$ обозначены массы атомов ${}^4\text{He}$ и ${}^3\text{He}$ соответственно. S -волновые фазы рассеяния $\delta_0(p)$ определяются точно по тем же формулам (3.27) и (3.28), что и в случае симметричной системы ${}^4\text{He}_3$. Отметим, что $m_{{}^3\text{He}}/m_{{}^4\text{He}} = 0,753517$.

В работах [80, 82, 138] уравнения (7.5), рассматриваемые совместно с краевыми условиями (7.6) и асимптотическими граничными условиями (7.7) или (7.8), использовались для вычисления соответственно связанного состояния системы ${}^3\text{He}{}^4\text{He}_2$ и характеристик рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$. В [66, 81] для этой же цели использовались трехмерные дифференциальные

Таблица 8. Абсолютная величина энергии связи тримера ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ (в мК)

Потенциал	l_{\max}	[138]	[60]	[79]	[81]	[66]
HFD-B					17,06	16,0
LM2M2	0	7,30				
	2	13,15				
	4	13,84	13,66		14,21	13,3
TTY	0	7,25				
	2	13,09				
	4	13,78		14,165	14,17	13,2

уравнения Фаддеева [83], которые получаются из шестимерных уравнений Фаддеева (7.2) в отсутствие твердого кора (т. е. при $c = 0$) в результате от- деления углов Эйлера, фиксирующих положение той плоскости, в которой находятся ядра атомов.

Табл. 8 содержит результаты по энергии связи тримера ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$, доступ- ные из литературы. Наряду с величинами, взятыми из [81, 138] и [66], мы приводим результаты, опубликованные в статьях [79] и [60]. При вычисле- ниях [79] использовались вариационный подход и квантовый метод Монте- Карло, а в [60] решались дифференциальные уравнения Фаддеева в гипер- сферическом адиабатическом представлении.

В нашей работе [138] при расчетах системы ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ использовался тот же метод [62] дискретизации парциальных дифференциальных уравнений Фаддеева, что и в случае симметричной системы ${}^4\text{He}_3$. Этот метод опи- сан выше в разд. 4. Результаты из [138], указанные в табл. 8, были получены на сетке с $N_\rho = 600$, $N_\theta = 605$ и $\rho_{\max} = 200 \text{ \AA}$. Максимальное значение l_{\max} парциального углового момента l достигало значения 4. Как видно из второй и третьей колонок табл. 8, основной вклад в энергию связи тримера ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ вносят парциальные каналы с $l = 0$ и $l = 1, 2$ — около 53 и 42 % соответственно. Совокупный вклад каналов $l = 3$ и $l = 4$ составляет при- мерно 5 %, т. е. приблизительно ту же величину, что и в случае основного и возбужденного состояний симметричной системы ${}^4\text{He}_3$ (см. табл. 2 и 3). При выборе бóльших l_{\max} следует ожидать небольшого увеличения энергии связи ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ и ее сближения с соответствующими результатами из [81]. Как видно из табл. 8, различие результатов, полученных разными группами при использовании одних и тех же межатомных потенциалов, достаточно ве- лико и может достигать 8 %. Следует отметить, что в [81] были вычислены значения энергии связи системы ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ также и с потенциалами SAPT1 и SAPT2 из [30]. Эти значения равны соответственно 17,13 и 17,66 мК.

Табл. 9, заимствованная из [78], показывает, как энергии связи димера ${}^3\text{He}^4\text{He}$ и тримера ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ зависят от изменяющейся величины массы $m_{{}^3\text{He}}$

Таблица 9. Энергия связи ε_d димера ${}^3\text{He}^4\text{He}$ и энергии основного, $E_t^{(0)}$, и возбужденного, $E_t^{(1)}$, состояний тримера ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ (в мК) как функции изменяющейся массы атома ${}^3\text{He}$. Все результаты взяты из [78]. Они были получены при $l_{\max} = 0$ с потенциалом ТТУ на сетке с параметрами $N_\theta = 155$, $N_\rho = 150$ и $\rho_{\max} = 100 \text{ \AA}$

$m_{{}^3\text{He}}/m_{{}^4\text{He}}$	$ \varepsilon_d $	$ E_t^{(0)} $	$ E_t^{(1)} $	$m_{{}^3\text{He}}/m_{{}^4\text{He}}$	$ \varepsilon_d $	$ E_t^{(0)} $	$ E_t^{(1)} $
1,00	1,30962	92,5	2,12	0,95	0,00917	71,5	—
0,99	0,85500	88,2	1,78	0,94	—	67,4	—
0,98	0,49197	83,9	1,54	0,90	—	51,8	—
0,97	0,22518	79,7	1,39	0,85	—	34,0	—
0,96	0,05951	75,6	1,32	0,80	—	19,0	—
0,955	0,01690	73,5	1,31	0,75	—	7,8	—

(при фиксированной — физической — величине массы атомов ${}^4\text{He}$). Хотя это вычисление, проведенное с минимально возможным числом парциальных уравнений (7.5) и на относительно небольшой сетке, имеет чисто демонстрационный характер, оно вполне передает существо дела. Как видно из табл. 9, при $l_{\max} = 0$ возбужденное состояние тримера ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ и связанное состояние двухатомной подсистемы ${}^3\text{He}^4\text{He}$ возникают при очень близких значениях отношения масс атомов ${}^3\text{He}$ и ${}^4\text{He}$. В обоих случаях это отношение лежит в интервале $0,95 < m_{{}^3\text{He}}/m_{{}^4\text{He}} < 0,955$. Очевидно, что возникающее таким образом возбужденное состояние ${}^3\text{He}^4\text{He}_2$ имеет ефимовскую природу.

Результаты расчета фаз рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ представлены только в работах, выполненных нашей группой [80, 136, 138]. На рис. 16, взятом из [80], изображены графики зависимостей этих фаз от энергии в системе центра масс. Вычисления [80] проводились на сетке с $N_\rho = 502$, $N_\theta = 500$ и $\rho_{\max} = 460 \text{ \AA}$. Точно такая же сетка использовалась в [63] для вычисления фаз ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния, представленных на рис. 4. Как и в случае ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -рассеяния (см. разд. 5), переход от $l_{\max} = 2$ к $l_{\max} = 4$ изменяет значения ${}^3\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -фаз не более чем на 0,5%. При вычислении фаз рассматривались энергии как ниже, так и выше порога развала системы на три атома. Согласно [137] кривые для ${}^4\text{He}$ - ${}^4\text{He}_2$ -фаз, вычисленных при использовании потенциала LM2M2, практически совпадают с соответствующими кривыми, построенными в случае потенциала ТТУ.

Все имеющиеся к настоящему времени результаты по длине рассеяния ℓ_{sc} атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$, полученные при использовании потенциалов HFD-B, LM2M2 и ТТУ, а также потенциалов SAPT1 и SAPT2 из [30], представлены в табл. 10. Отметим, что приведенные в этой таблице значения ℓ_{sc} из [138] (в случае ТТУ см. также [80]) были найдены при $l_{\max} \leq 4$ на сетке с параметрами $N_\rho = 600$, $N_\theta = 607$ и $\rho_{\max} = 200 \text{ \AA}$. Следует ожидать, что при увеличении числа рассматриваемых парциальных волн l_{\max} может произойти

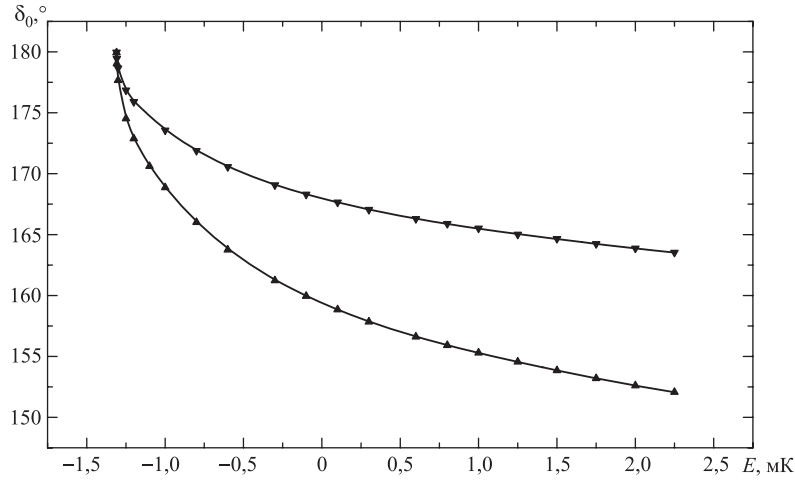


Рис. 16. S -волновые фазы $\delta_0(E)$ упругого рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ в случае потенциала ТТУ как функции энергии E в системе центра масс. Нижняя и верхняя кривые отвечают соответственно $l_{\max} = 0$ и $l_{\max} = 2$

Таблица 10. Длина рассеяния атома ${}^3\text{He}$ на димере ${}^4\text{He}_2$ (в \AA)

Потенциал	l_{\max}	[138]	[81]
HFD-B			19,1
LM2M2	0	38,5	
	2	22,2	
	4	21,0	19,4
TTY	0	38,8	
	2	22,4	
	4	21,2	19,8
SAPT1			19,2
SAPT2			19,0

некоторое небольшое увеличение значения ℓ_{sc} и сближение соответствующих результатов со значениями ℓ_{sc} из [81]. Интересно, что использование простейшей экстраполяционной формулы

$$\ell_{sc}(l_{\max}) = \alpha + \frac{\beta}{l_{\max} - \gamma},$$

параметры α , β и γ в которой фиксируются значениями ℓ_{sc} при $l_{\max} = 0, 2$ и 4, приводит к оценкам $\ell_{sc}(\infty) = 19,6 \text{ \AA}$ в случае потенциала LM2M2 и

$\ell_{sc}(\infty) = 19,8 \text{ \AA}$ в случае потенциала ТТҮ. Первая из этих оценок отличается только на $0,2 \text{ \AA}$ от значения ℓ_{sc} , приведенного для потенциала LM2M2 в [81] (см. табл. 10). Вторая же оценка совпадает со значением ℓ_{sc} , полученным в [81] для случая ТТҮ.

Благодарности. Авторы выражают свою глубокую признательность за сотрудничество проф. Й. К. Хо и проф. С. А. Софианосу. Авторы благодарны также проф. В. Б. Беляеву и проф. Х. Токи за обеспечение возможности численных расчетов на суперкомпьютере Исследовательского центра ядерной физики (RCNP) Университета Осаки (Япония). Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, немецкого научно-исследовательского общества (DFG) и программы «Гейзенберг–Ландау». Первый автор (Е. А. К.) была поддержана также Фондом Александра фон Гумбольдта.

Приложение МЕЖАТОМНЫЕ He–He-ПОТЕНЦИАЛЫ HFDHE2, HFD-V, LM2M2 И ТТҮ

Строение полуэмпирических реалистических потенциалов HFDHE2 [27] и HFD-V [33], построенных Азизом с сотрудниками, описывается формулой

$$V(x) = \varepsilon V_b(\zeta), \quad (\text{A.1})$$

где $\zeta = x/r_m$, а член $V_b(\zeta)$ имеет вид

$$V_b(\zeta) = A \exp(-\alpha\zeta + \beta\zeta^2) - \left[\frac{C_6}{\zeta^6} + \frac{C_8}{\zeta^8} + \frac{C_{10}}{\zeta^{10}} \right] F(\zeta),$$

причем x выражается в тех же единицах длины, что и r_m (для рассматриваемого случая это ангстремы). Функция $F(\zeta)$ задается выражением

$$F(\zeta) = \begin{cases} \exp\left[-(D/\zeta - 1)^2\right], & \text{если } \zeta \leq D, \\ 1, & \text{если } \zeta > D. \end{cases}$$

Кроме члена $V_b(\zeta)$ потенциал LM2M2 [34] включает добавочное слагаемое $V_a(\zeta)$:

$$V(r) = \varepsilon \{V_b(\zeta) + V_a(\zeta)\}, \quad (\text{A.2})$$

где

$$V_a(\zeta) = \begin{cases} A_a \left\{ \sin \left[\frac{2\pi(\zeta - \zeta_1)}{\zeta_2 - \zeta_1} - \frac{\pi}{2} \right] + 1 \right\}, & \zeta_1 \leq \zeta \leq \zeta_2, \\ 0, & \zeta \notin [\zeta_1, \zeta_2]. \end{cases}$$

Параметры потенциалов HFDHE2, HFD-V и LM2M2 приведены в табл. 11.

Таблица 11. Параметры межатомных ${}^4\text{He}-{}^4\text{He}$ потенциалов HFDHE2, HFD-B и LM2M2

Параметр	HFDHE2 [27]	HFD-B [33]	LM2M2 [34]
ε , К	10,8	10,948	10,97
r_m , Å	2,9673	2,963	2,9695
A	544850,4	184431,01	189635,353
α	13,353384	10,43329537	10,70203539
β	0	-2,27965105	-1,90740649
C_6	1,3732412	1,36745214	1,34687065
C_8	0,4253785	0,42123807	0,41308398
C_{10}	0,178100	0,17473318	0,17060159
D	1,241314	1,4826	1,4088
A_a	—	—	0,0026
ζ_1	—	—	1,003535949
ζ_2	—	—	1,454790369

Потенциал ТГҮ [35] имеет следующую форму:

$$V(x) = A [V_{\text{ex}}(x) + V_{\text{disp}}(x)],$$

где x обозначает расстояние между атомами ${}^4\text{He}$, заданное в атомных единицах длины. (Следуя [35], при переводе этих единиц в ангстремы мы использовали фактор 1 а. е. = 0,52917 Å.) Функция V_{ex} определяется равенством

$$V_{\text{ex}}(x) = D x^p \exp(-2\beta x),$$

где $p = 7/2\beta - 1$, а функция V_{disp} имеет вид

$$V_{\text{disp}}(x) = - \sum_{n=3}^N C_{2n} f_{2n}(x) x^{-2n}.$$

Коэффициенты C_{2n} определяются рекуррентными соотношениями

$$C_{2n} = \left(\frac{C_{2n-2}}{C_{2n-4}} \right)^3 C_{2n-6}.$$

Функции f_{2n} задаются формулой

$$f_{2n}(x) = 1 - \exp(-bx) \sum_{k=0}^{2n} \frac{(bx)^k}{k!},$$

где

$$b(x) = 2\beta - \left[\frac{7}{2\beta} - 1 \right] \frac{1}{x}.$$

Параметры потенциала ТТУ приведены в табл. 12.

Таблица 12. Параметры межатомного $^4\text{He}-^4\text{He}$ потенциала ТТУ

A, K	315766,2067*	C_6	1,461
$\beta, (\text{a. e.})^{-1}$	1,3443	C_8	14,11
D	7,449	C_{10}	183,5
N	12		

*Значение параметра A получено из данных, представленных в [35], с помощью переводного коэффициента $1 \text{ K} = 3,1669 \cdot 10^{-6} \text{ a. e.}$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Grebenev S., Toennies J. P., Vilesov A. F. Superfluidity within a Small Helium-4 Cluster: The Microscopic Andronikashvili Experiment // Science. 1998. V. 279. P. 2083–2086.
2. Lehman K. K., Scoles G. The Ultimate Spectroscopic Matrix // Ibid. P. 2065–2066.
3. Dalfovo F. et al. Theory of Bose–Einstein Condensation in Trapped Gases // Rev. Mod. Phys. 1999. V. 71. P. 463–512.
4. Köhler T. et al. Long-Range Nature of Feshbach Molecules in Bose–Einstein Condensates // Phys. Rev. Lett. 2003. V. 91. P. 230401.
5. Northby J. A. Experimental Studies of Helium Droplets // J. Chem. Phys. 2001. V. 115. P. 10065–10077.
6. Lewerenz M. Structure and Energetics of Small Helium Clusters: Quantum Simulations Using a Recent Perturbational Pair Potential // J. Chem. Phys. 1997. V. 106. P. 4596–4603.
7. Debye P. Die van der Waalsschen Kohäsionskräfte // Phys. Z. 1920. Bd. 21. S. 178–187.
8. Keesom W. H. Die van der Waalsschen Kohäsionskräfte // Phys. Z. 1921. Bd. 22. S. 129–141.
9. Keesom W. H. Die Berechnung der molekularen Quadrupolmomente aus Zustandsgleichung // Phys. Z. 1922. Bd. 23. S. 225–228.
10. Jones J. E. On the Determination of Molecular Fields: II. From the Equation of State of a Gas // Proc. Roy. Soc. Ser. A. 1924. V. 106/738. P. 463–477.
11. Brush S. G. Interatomic Forces and Gas Theory from Newton to Lennard-Jones // Arch. Rational Mech. Anal. 1970. V. 39. P. 1–19.
12. Pedemonte L., Bracco G. Study of He Flow Properties to Test He Dimer Potentials // J. Chem. Phys. 2003. V. 119. P. 1433–1441.
13. Hirschfelder J. O., Meath W. J. The Nature of Intermolecular Forces // Intermolecular Forces / Ed. by J. O. Hirschfelder. N. Y.: Intersci. Publ., 1967. P. 3–106.

14. *Born M., Oppenheimer R.* Zur Quantentheorie der Molekeln // *Ann. Phys.* 1927. V. 84. P. 457–484.
15. *Eckart C.* The Kinetic Energy of Polyatomic Molecules // *Phys. Rev.* 1935. V. 46. P. 383–387.
16. *Korona T. et al.* Helium Dimer Potential from Symmetry-Adapted Perturbation Theory Calculations Using Large Gaussian Geminal and Orbital Basis Sets // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 106. P. 5109–5122.
17. *Tang K.T., Toennies J.P., Yiu C.L.* The Generalized Heitler–London Theory for Interatomic Interaction and Surface Integral Method for Exchange Energy // *Intern. Rev. Phys. Chem.* 1998. V. 17. P. 363–406.
18. *Wang S.C.* Die gegenseitige Einwirkung zweier Wasserstoffatome // *Phys. Z.* 1927. V. 28. P. 663–666.
19. *Slater J.C.* The Normal State of Helium // *Phys. Rev.* 1928. V. 32. P. 349–360.
20. *London F.* Zur Theorie and Systematik der Molekularkräfte // *Z. Phys.* 1930. V. 63. P. 245–279.
21. *Eisenschütz R., London F.* Über das Verhältnis der van der Waalschen Kräfte zu den homöopolaren Bindungskräften // *Ibid.* V. 60. P. 491–527.
22. *Slater J.C., Kirkwood J.G.* The van der Waals Forces in Gases // *Phys. Rev.* 1931. V. 37. P. 682–697.
23. *de Boer J., Michels A.* Contribution to the Quantum-Mechanical Theory of the Equation of State and the Law of Corresponding States. Determination of the Law of Force of Helium // *Physica.* 1938. V. 5. P. 945–957.
24. *Anderson J.B., Traynor C.A., Boghosian B.M.* An Exact Quantum Monte Carlo Calculation of the Helium–Helium Intermolecular Potential // *J. Chem. Phys.* 1993. V. 99. P. 345–351.
25. *Liu B., McLean A.D.* The Interacting Correlated Fragments Model for Weak Interactions, Basis Set Superposition Error, and the Helium Dimer Potential // *J. Chem. Phys.* 1989. V. 91. P. 2348–2359.
26. *Phillipson P.E.* Repulsive Interaction Between Two Ground-State Helium Atoms // *Phys. Rev.* 1962. V. 125. P. 1981–1992.
27. *Aziz R.A. et al.* An Accurate Intermolecular Potential for Helium // *J. Chem. Phys.* 1979. V. 79. P. 4330–4342.
28. *Beck D.E.* A New Interatomic Potential Function for Helium // *Mol. Phys.* 1968. V. 14. P. 311–315; Errata. 1968. V. 15. P. 322.
29. *Bruch L.W., McGee I.J.* Semiempirical Potential and Bound State of the Helium-4 Diatom // *J. Chem. Phys.* 1967. V. 46. P. 2959–2967.
30. *Janzen A.R., Aziz R.A.* An Accurate Potential Energy Curve for Helium Based on *ab initio* Calculations // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 107. P. 914–919.
31. *Janzen A.R., Aziz R.A.* Modern He–He Potentials: Another Look at Binding Energy, Effective Range Theory, Retardation, and Efimov States // *J. Chem. Phys.* 1995. V. 103. P. 9626–9630.

32. Tang K. T., Toennies J. P. An Improved Simple Model for the van der Waals Potential Based on Universal Damping Functions for the Dispersion Coefficients // J. Chem. Phys. 1984. V. 80. P. 3726–3741.
33. Aziz R. A., McCourt F. R. W., Wong C. C. K. A New Determination of the Ground State Interatomic Potential for He₂ // Mol. Phys. 1987. V. 61. P. 1487–1511.
34. Aziz R. A., Slaman M. J. An Examination of *ab initio* Results for Helium Potential Energy Curve // J. Chem. Phys. 1991. V. 94. P. 8047–8053.
35. Tang K. T., Toennies J. P., Yiu C. L. Accurate Analytical He–He van der Waals Potential Based on Perturbation Theory // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. P. 1546–1549.
36. Bruch L. W., McGee I. J. Semiempirical Helium Intermolecular Potential: II. Dilute Gas Properties // J. Chem. Phys. 1970. V. 52. P. 5884–5895.
37. Uang Y.-H., Stwalley W. C. The Possibility of a ⁴He₂ Bound State, Effective Range Theory, and Very Low Energy He–He Scattering // J. Chem. Phys. 1982. V. 76. P. 5069–5072.
38. de Boer J. The Equation of State of Gases at Low Temperatures // Physica. 1958. V. 24. P. S90–S97.
39. Efimov V. Energy Levels Arising from Resonant Two-Body Forces in a Three-Body System // Phys. Lett. B. 1970. V. 33. P. 563–564.
40. Ефимов В. Н. Слабосвязанные состояния трех резонансно взаимодействующих частиц // ЯФ. 1970. Т. 12. С. 1080–1090.
41. Lim T. K., Duffy S. K., Damert W. C. Efimov State in the ⁴He Trimer // Phys. Rev. Lett. 1977. V. 38. P. 341–343.
42. Bishop R. F., Ghassib H. B., Strayer M. R. Low-Energy He–He Interactions with Phenomenological Potentials // J. Low Temp. Phys. 1977. V. 26. P. 669–690.
43. Luo F. et al. The Weakest Bond: Experimental Observation of Helium Dimer // J. Chem. Phys. 1993. V. 98. P. 3564–3567.
44. Schöllkopf W., Toennies J. P. Nondestructive Mass Selection of Small van der Waals Clusters // Science. 1994. V. 266. P. 1345–1348.
45. Luo F., Giese C. F., Gentry W. R. Direct Measurement of the Size of the Helium Dimer // J. Chem. Phys. 1996. V. 104. P. 1151–1154.
46. Grisenti R. et al. Determination of the Bond Length and Binding Energy of the Helium Dimer by Diffraction from a Transmission Grating // Phys. Rev. Lett. 2000. V. 85. P. 2284–2287.
47. Cornelius T., Glöckle W. Efimov States for Three ⁴He Atoms? // J. Chem. Phys. 1986. V. 85. P. 3906–3912.
48. Колганова Е. А., Мотовилов А. К. О механизме возникновения ефимовских состояний в тримере гелия ⁴He // ЯФ. 1999. Т. 62. С. 1253–1267.
49. Motovilov A. K., Kolganova E. A. Structure of T- and S-matrices in Unphysical Sheets and Resonances in Three-Body Systems // Few-Body Syst. Suppl. 1999. V. 10. P. 75–84.

50. *Efimov V.* Energy Levels of Three Resonantly Interacting Particles // *Nucl. Phys. A.* 1973. V. 210. P. 157–188.
51. *Hegerfeldt G. C., Köhler T.* How to Study the Elusive Efimov State of the $^4\text{He}_3$ Molecule through a New Atom-Optical State-Selection Technique // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 84. P. 3215–3219.
52. *Brühl R. et al.* Matter Wave Diffraction from an Inclined Transmission Grating: Searching for the Elusive ^4He Trimer Efimov State // *Phys. Rev. Lett.* 2005. V. 95. P. 06002(4).
53. *Меркурьев С. П., Фаддеев Л. Д.* Теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
54. *Barnett R. N., Whaley K. B.* Variational and Diffusion Monte-Carlo Techniques for Quantum Clusters // *Phys. Rev. A.* 1993. V. 47. P. 4082–4098.
55. *Blume D., Greene C. H.* Monte Carlo Hyperspherical Description of Helium Cluster Excited States // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. P. 8053–8067.
56. *Guardiola R., Portesi M., Navarro J.* High-Quality Variational Wave Functions for Small ^4He Clusters // *Phys. Rev. B.* 1999. V. 60. P. 6288–6291.
57. *Pandharipande V. R. et al.* Calculations of Ground-State Properties of Liquid ^4He Droplets // *Phys. Rev. Lett.* 1983. V. 50. P. 1676–1679.
58. *Rick S. W., Lynch D. L., Doll J. D.* A Variational Monte Carlo Study of Argon, Neon, and Helium Clusters // *J. Chem. Phys.* 1991. V. 95. P. 3506–3520.
59. *Esry B. D., Lin C. D., Greene C. H.* Adiabatic Hyperspherical Study of the Helium Trimer // *Phys. Rev. A.* 1996. V. 54. P. 394–401.
60. *Nielsen E., Fedorov D. V., Jensen A. S.* The Structure of the Atomic Helium Trimers: Halos and Efimov States // *J. Phys. B.* 1998. V. 31. P. 4085–4105.
61. *Nakaichi-Maeda S., Lim T. K.* Zero-Energy Scattering and Bound States in the ^4He Trimer and Tetramer // *Phys. Rev. A.* 1983. V. 28. P. 692–696.
62. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sofianos S. A.* Three-Body Configuration Space Calculations with Hard-Core Potentials // *J. Phys. B.* 1998. V. 31. P. 1279–1302.
63. *Motovilov A. K. et al.* Binding Energies and Scattering Observables in the $^4\text{He}_3$ Atomic System // *Eur. Phys. J. D.* 2001. V. 13. P. 33–41.
64. *Roudnev V., Yakovlev S.* Investigation of $^4\text{He}_3$ Trimer on the Base of Faddeev Equations in Configuration Space // *Chem. Phys. Lett.* 2000. V. 328. P. 97–106.
65. *Roudnev V. A., Yakovlev S. L., Sofianos S. A.* Bound-State Calculations for Three Atoms without Explicit Partial Wave Decomposition // *Few-Body Syst.* 2005. V. 37. P. 179–196.
66. *Salci M. et al.* Finite Element Investigation of the Ground States of the Helium Trimers $^4\text{He}_3$ and $^4\text{He}_2\text{-}^3\text{He}$ // *Intern. J. Quant. Chem.* 2007. V. 107. P. 464–468.
67. *Lee T. G. et al.* The Helium Trimer Has no Bound Rotational Excited States // *J. Phys. B.* 2001. V. 34. P. L203–L210.

68. *Matveenko A. V., Alt E. O.* Does He-Trimer Have Bound Rotational States? // *Hyp. Int.* 2001. V. 138. P. 421–425.
69. *Motovilov A. K., Sofianos S. A., Kolganova E. A.* Bound States and Scattering Processes in the $^4\text{He}_3$ Atomic System // *Chem. Phys. Lett.* 1997. V. 275. P. 168–172.
70. *Roudnev V.* Ultra-Low Energy Elastic Scattering in a System of Three He Atoms // *Chem. Phys. Lett.* 2003. V. 367. P. 95–101.
71. *Lazauskas R., Carbonell J.* Description of ^4He Tetramer Bound and Scattering States // *Phys. Rev. A.* 2006. V. 73. P. 062717(11).
72. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sandhas W.* Scattering Length of the Helium-Atom–Helium-Dimer Collision // *Phys. Rev. A.* 2004. V. 70. P. 052711(4).
73. *Merkuriev S. P., Gignoux C., Laverne A.* Three-Body Scattering in Configuration Space // *Ann. Phys. (N. Y.).* 1976. V. 99. P. 30–71.
74. *Merkuriev S. P., Motovilov A. K.* Faddeev Equations for Simple Layer Potential Density // *Lett. Math. Phys.* 1983. V. 7. P. 497–503.
75. *Меркурьев С. П., Мотовилов А. К.* Задача рассеяния для трех твердых сфер и теория потенциала // Теория квантовых систем с сильным взаимодействием: Сб. науч. тр. Калинин, 1983. С. 95–114.
76. *Меркурьев С. П., Мотовилов А. К., Яковлев С. Л.* Задача нескольких тел в модели граничных условий и обобщенные потенциалы // ТМФ. 1993. Т. 94. С. 435–447.
77. *Мотовилов А. К.* Дифференциальные уравнения для компонент волновой функции в задаче трех твердых сфер // Вестн. Ленингр. гос. ун-та. Сер. физ.-хим. 1983. № 22. С. 76–79.
78. *Sandhas W. et al.* Binding Energies and Scattering Observables in the $^4\text{He}_3$ and $^3\text{He}^4\text{He}_3$ Systems // *Few-Body Syst.* 2004. V. 34. P. 137–142.
79. *Bressanini D. et al.* Quantum Monte Carlo Investigation of Small ^4He Clusters with a ^3He Impurity // *J. Chem. Phys.* 2000. V. 112. P. 717–722.
80. *Kolganova E. A. et al.* The $^3\text{He}^4\text{He}_2$ Three-Atomic System within the Hard-Core Faddeev Approach // Избранные вопросы теоретической физики и астрофизики: Сб. науч. тр., посвящ. 70-летию В. Б. Беляева. Дубна, 2003. С. 129–135.
81. *Roudnev V.* Localized Component Method: Application to Scattering in a System of Three Atoms // *Few-Body Problems in Physics: Proc. of the 17th Intern. IUPAP Conf. on Few-Body Problems in Physics.* Amsterdam, 2004. P. S292–S294.
82. *Kolganova E. A. et al.* The $^3\text{He}^4\text{He}_2$ Trimer within the Hard-Core Faddeev Approach // *Czech. J. Phys.* 2003. V. 53. P. B301–B304.
83. *Kostrykin V. V., Kvitsinsky A. A., Merkuriev S. P.* Faddeev Approach to the Three-Body Problem in Total-Angular-Momentum Representation // *Few-Body Syst.* 1989. V. 6. P. 97–113.
84. *Bedaque P. F., Braaten E., Hammer H.-W.* Three-Body Recombination in Bose Gases with the Large Scattering Length // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 85. P. 908–911.

85. Guéry-Odelin D., Shlyapnikov G.V. Excitation-Assisted Inelastic Processes in Trapped Bose–Einstein Condensatuion // *Phys. Rev. A*. 2000. V. 61. P. 013605(4).
86. Kartavtsev O.I., Macek J.H. Low-Energy Three-Body Recombination near a Feshbach Resonance // *Few-Body Syst.* 2002. V. 31. P. 1432–5411.
87. Nielsen E., Macek J.H. Low-Energy Recombination of Identical Bosons by Three-Body Collisions // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 83. P. 1566–1569.
88. Braaten E., Hammer H.-W. Efimov Physics in Cold Atoms // *Ann. Phys. (N.Y.)*. 2007. V. 322. P. 120–163.
89. Esry B.D., Greene C.H., Burke J.P., Jr. Recombination of Three Atoms in the Ultracold Limit // *Phys. Rev. Lett.* 1999. V. 83. P. 1751–1754.
90. Nielsen E. *et al.* The Three-Body Problem with Short-Range Interactions // *Phys. Rep.* 2001. V. 347. P. 373–459.
91. Пеньков Ф.М. Однопараметрические зависимости спектров, длин рассеяния и коэффициентов рекомбинации в системе трех бозонов // *ЖЭТФ*. 2003. Т. 124. С. 536–544.
92. Suno H. *et al.* Three-Body Recombination of Cold Helium Atoms // *Phys. Rev. A*. 2002. V. 65. P. 042725(7).
93. Квицинский А.А. и др. Квантовая задача N тел в конфигурационном пространстве // *ЭЧАЯ*. 1986. Т. 17. С. 267–317.
94. Motovilov A.K. Explicit Representations for the T-Matrix on Unphysical Energy Sheets and Resonances in Two- and Three-Body Systems // *Few-Body Syst.* 2006. V. 38. P. 115–120.
95. Motovilov A.K. Representations for the Three-Body T-Matrix, Scattering Matrices and Resolvent on Unphysical Energy Sheets // *Math. Nachr.* 1997. V. 187. P. 147–210.
96. Kolganova E. A., Motovilov A. K. Scattering and Resonances in the ^4He Three-Atomic System // *Comp. Phys. Commun.* 2006. V. 126. P. 88–92.
97. Kolganova E. A., Motovilov A. K. Three-Body Resonances in Framework of the Faddeev Configuration Space Approach // *Proc. of the 9th Intern. Conf. on Computational Modelling and Computing in Physics*. Dubna, 1997. P. 177–180.
98. Noyes H.P., Fiedeldey H. Calculations of the Three-Nucleon Low Energy Parameters // *Three-Particle Scattering in Quantum Mechanics: Proc. Texas A&M Conf.* / Ed. by J. Gillespie and J. Nuttall. N. Y., 1968. P. 195–204.
99. Меркурьев С.П., Яковлев С.Л. Квантовая теория рассеяния для системы N тел в конфигурационном пространстве // *ТМФ*. 1983. Т. 56 С. 60–73.
100. Merkuriev S.P., Yakovlev S.L., Gignoux C. Four-Body Yakubovsky Differential Equations for Identical Particles // *Nucl. Phys. A*. 1984. V. 431. P. 125–138.
101. Ефимов В.Н., Шульц Г. Модель граничных условий в задаче двух и трех частиц // *ЭЧАЯ*. 1976. Т. 7. С. 875–915.

102. *Мотовилов А. К.* Квантовая задача трех тел в модели граничных условий. Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Л.: Изд-во Ленингр. гос. ун-та, 1984.
103. *Schulze B., Wildenhain G.* Methoden der Potentialtheorie für elliptische differential Gleichungen beliebiger Ordnung. Berlin: Academie-Verlag, 1977.
104. *Буслаев В. С.* Об асимптотическом поведении спектральных характеристик внешних краевых задач для оператора Шредингера // Изв. АН СССР. Сер. мат. 1975. Т. 39. С. 149–235.
105. *Messiah A.* Quantum Mechanics. V. II. Amsterdam: North-Holland Publ. Comp., 1966.
106. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sofianos S. A.* Ultralow Energy Scattering of a He Atom off a He Dimer // Phys. Rev. A. 1997. V. 56. P. R1686–R1689.
107. *Barletta P., Kievsky A.* Variational Description of the Helium Trimer Using Correlated Hyperspherical Harmonic Basis Functions // Phys. Rev. A. 2001. V. 64. P. 042514(9).
108. *Самарский А. А.* Теория разностных схем. М.: Наука, 1977.
109. *Carbonell J., Gignoux C., Merkuriev S. P.* Faddeev Calculations in Configuration Space with Cartesian Coordinates // Few-Body Syst. 1993. V. 15. P. 15–23.
110. *Braaten E., Hammer H.-W.* Universality in Few-Body Systems with Large Scattering Length // Phys. Rep. 2006. V. 428. P. 259–390.
111. *Braaten E., Hammer H.-W.* Universality in the Three-Body Problem for ^4He Atoms // Phys. Rev. A. 2003. V. 67. P. 042706(12).
112. *Yamashita M. T. et al.* Scaling Limit of Virtual States of Triatomic Systems // Phys. Rev. A. 2002. V. 66. P. 052702(7).
113. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sandhas W.* Scattering Length for Helium Atom-Diatom Collision // Few-Body Syst. 2006. V. 38. P. 205–208.
114. *Bedaque P. F., Hammer H.-W., van Kolck U.* The Three-Boson System with Short-Range Interactions // Nucl. Phys. A. 1999. V. 646. P. 444–466.
115. *Скорняков Г. В., Тер-Мартirosян К. А.* Задача трех частиц при короткодействующих силах. Рассеяние нейтронов малой энергии дейтонами // ЖЭТФ. 1956. Т. 31. С. 775–790.
116. *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. Т. 4: Анализ операторов: Пер. с англ. М.: Мир, 1982.
117. *Tamura H.* The Efimov Effect of the Three-Body Schrödinger Operators: Asymptotics for the Number of Negative Eigenvalues // Nagoya Math. J. 1993. V. 130. P. 55–83.
118. *Sobolev A. V.* The Efimov Effect. Discrete Spectrum Asymptotics // Commun. Math. Phys. 1993. V. 156. P. 101–126.
119. *Данилов Г. С.* К задаче трех тел при короткодействующих силах // ЖЭТФ. 1961. Т. 40, вып. 2. С. 498–507.
120. *Albeverio S., Lakaev S., Makarov K. A.* The Efimov Effect and an Extended Szegő-Kac Limit Theorem // Lett. Math. Phys. 1988. V. 43. P. 73–85.

121. *Фаддеев Л. Д.* Метод интегральных уравнений в теории рассеяния для трех и более частиц. М.: МИФИ, 1971. 50 с.
122. *Amado R. D., Noble J. V.* On Efimov's Effect: A New Pathology of Three-Particle Systems // *Phys. Lett. B.* 1971. V. 35. P. 25–27.
123. *Amado R. D., Noble J. V.* On Efimov's Effect: A New Pathology of Three-Particle Systems: II // *Phys. Rev. D.* 1971. V. 5. P. 1992–2002.
124. *Яфаев Д. Р.* К теории дискретного спектра трехчастичного оператора Шредингера // *Матем. сб.* 1974. Т. 94(136). С. 567–593.
125. *Phillips A. C.* Three-Body Systems in Nuclear Physics // *Rep. Prog. Phys.* 1977. V. 40. P. 905–961.
126. *Thomas L. H.* The Interaction between a Neutron and a Proton and the Structure of H^3 // *Phys. Rev.* 1935. V. 47. P. 903–909.
127. *Минлос Р. А., Фаддеев Л. Д.* О точечном взаимодействии для системы из трех частиц в квантовой механике // *Докл. АН СССР.* 1961. Т. 141, № 6. С. 1335–1338.
128. *Albeverio S., Høegh-Krohn R., Wu T. T.* A Class of Exactly Solvable Three-Body Quantum Mechanical Problems and the Universal Low Energy Behavior // *Phys. Lett. A.* 1981. V. 83. P. 105–109.
129. *Макаров К. А., Мележик В. В.* Две стороны медали: эффект Ефимова и коллапс в системе трех частиц с точечными взаимодействиями. I // *ТМФ.* 1996. Т. 415, № 3. С. 415–432.
130. *Lee M. D., Köhler T., Julienne P. S.* Excited Thomas–Efimov Levels in Ultracold Gases // *Phys. Rev. A.* 2007. V. 76. P. 012720(16).
131. *Jonsell S.* Efimov States for Systems with Negative Scattering Lengths // *Europhys. Lett.* 2006. V. 76. P. 8–14.
132. *Kraemer T. et al.* Evidence for Efimov Quantum States in an Ultracold Gas of Caesium Atoms // *Nature.* 2006. V. 440. P. 315–318.
133. *Moerdijk A. J., Verhaar B. J., Axelsson A.* Resonances in Ultracold Collisions of ^6Li , ^7Li , and ^{23}Na // *Phys. Rev. A.* 1995. V. 51. P. 4852–4861.
134. *Nägerl H.-C. et al.* Experimental Evidence for Efimov Quantum States. [cond-mat/0611629](https://arxiv.org/abs/cond-mat/0611629).
135. *Esry B. D., Greene C. H.* A ménage à trois laid bare // *Nature.* 2006. V. 440. P. 289–290.
136. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sandhas W.* Ultracold Scattering Processes in Three-Atomic Helium Systems // *Nucl. Phys. A.* 2007. V. 790. P. 752c–756c.
137. *Sandhas W. et al.* Binding Energies and Scattering Observables in the $^3\text{He}^4\text{He}_2$ Atomic System // *Proc. of the 17th Intern. IUPAP Conf. on Few-Body Problems in Physics.* Amsterdam, 2004. P. S337–S339.
138. *Kolganova E. A., Motovilov A. K., Sandhas W.* Binding Energies and Scattering Observables in the $^4\text{He}_3$ and $^3\text{He}^4\text{He}_2$ Three-Atomic Systems // *Few-Body Syst.* 2004. V. 34. P. 137–142.