

УДК 539.194:544.112

## ТЕОРЕТИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СЛАБОСВЯЗАННЫХ ТРЕХАТОМНЫХ СИСТЕМ С ПОМОЩЬЮ УРАВНЕНИЙ ФАДДЕЕВА В ПРЕДСТАВЛЕНИИ ПОЛНОГО ОРБИТАЛЬНОГО МОМЕНТА

© 2021 г. В. А. Градусов<sup>1</sup> \*, В. А. Руднев<sup>1</sup>, Е. А. Яревский<sup>1</sup>, С. Л. Яковлев<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования “Санкт-Петербургский государственный университет”, Санкт-Петербург, Россия

\*E-mail: v.gradusov@spbu.ru

Поступила в редакцию 20.11.2020 г.

После доработки 28.12.2020 г.

Принята к публикации 27.01.2021 г.

Представлены результаты расчетов спектров слабосвязанных трехатомных молекулярных комплексов – тримера гелия и молекул гелий–гелий–щелочной металл. Расчеты проведены на основе уравнений Фаддеева в представлении полного орбитального момента. Подтверждено наличие возбужденных состояний с ненулевым полным орбитальным моментом у некоторых молекул.

DOI: 10.31857/S0367676521050094

### ВВЕДЕНИЕ

Непрекращающийся интерес к теоретическому и экспериментальному исследованию слабосвязанных трехатомных молекул обусловлен, прежде всего, их связью с эффектом Ефимова [1] и возможностью исследования универсальных закономерностей в системах квантовых частиц [2]. Для теоретического описания таких систем, как правило, выбирается модель трех взаимодействующих бесструктурных атомов. Достоверность модели оправдывается существованием хороших полуэмпирических потенциалов взаимодействия атомов, основанных на приближении потенциалов, получаемых в квантово-химических расчетах.

Хотя наиболее изученной слабосвязанной трехатомной молекулой является тример гелия [3], представляют интерес также и другие молекулярные комплексы – такие, как, например, гелий–гелий–щелочной металл [4, 5]. Хотя энергии основных состояний с нулевым полным орбитальным моментом этих систем крайне близки к порогу развала [6], некоторые из них имеют также и возбужденные связанные состояния, в том числе со значением момента, большим нуля. Это было впервые установлено в расчетах, представленных в недавней работе [4]. Представляется важным подтвердить существование этих состояний в независимых расчетах. Однако, насколько известно авторам настоящей статьи, соответствующие результаты до сих пор представлены не были. Причиной этого может быть большая сложность этих расчетов. Для их проведения требуется подход,

комбинирующий хороший теоретический метод и эффективный вычислительный алгоритм.

Недавно нами был предложен и реализован [7] такой подход, основанный на решении уравнений Фаддеева–Меркурьева [8] в представлении полного орбитального момента [9]. В случае отсутствия в системе кулоновского взаимодействия уравнения Фаддеева–Меркурьева сводятся к обычным уравнениям Фаддеева. Эти уравнения, как известно, описывают связанные состояния и состояния рассеяния трех квантовых частиц. Тестовые расчеты [7] показали, что наш подход позволяет проводить высокоточные расчеты энергий связанных состояний с достаточно высокими значениями полного орбитального момента.

В данной работе мы применяем описанный выше подход к вычислению связанных состояний различных слабосвязанных молекул. В частности, мы исследуем вопрос о существовании возбужденных состояний с ненулевым полным орбитальным моментом комплексов гелий–гелий–щелочной металл.

### УРАВНЕНИЯ ФАДДЕЕВА

Уравнения Фаддеева для трех бесспиновых нерелятивистских квантовых частиц имеют вид

$$\{T_\alpha + V_\alpha(x_\alpha) - E\}\psi_\alpha(\vec{x}_\alpha, \vec{y}_\alpha) = -V_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) \times \sum_{\beta \neq \alpha} \psi_\beta(\vec{x}_\beta, \vec{y}_\beta), \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (1)$$

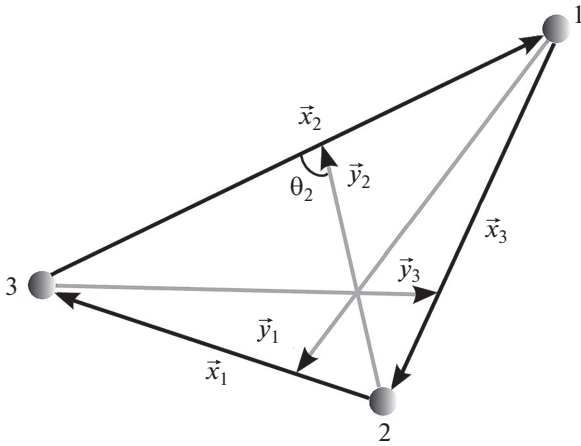


Рис. 1. Координаты Якоби в случае трех частиц.

Они описывают связанные состояния и состояния рассеяния с энергией  $E$  частиц, имеющих массы  $m_\alpha$ , в системе центра масс [8]. В дальнейшем будем считать, что встречающиеся в обозначениях греческие индексы  $\alpha, \beta, \gamma$  нумеруют частицы и пробегают значения  $\{1, 2, 3\}$ . Кроме того, парой  $\alpha$  будем называть пару частиц с номерами, дополняющими номер  $\alpha$ . Например, парой 1 называется пара частиц 2 и 3. Положения частиц в системе центра масс описываются приведенными координатами Якоби  $\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha$ , которые представляют собой умноженные на величины  $\sqrt{2\mu_\alpha}$  и  $\sqrt{2\mu_{\alpha(\beta\gamma)}}$  векторы Якоби, изображенные на рис. 1. Здесь приведенные массы выражаются формулами

$$\mu_\alpha = \frac{m_\beta m_\gamma}{m_\beta + m_\gamma}, \quad \mu_{\alpha(\beta\gamma)} = \frac{m_\alpha(m_\beta + m_\gamma)}{m_\alpha + m_\beta + m_\gamma}. \quad (2)$$

Векторы Якоби описывают относительные положения частиц пары  $\alpha$  и частицы  $\alpha$  и центра масс пары  $\alpha$ , соответственно. Три возможных набора приведенных координат Якоби связаны между собой ортогональными преобразованиями [8]. В дальнейшем предполагается, что в формулах координаты  $\bar{x}_\beta, \bar{y}_\beta$  выражены через координаты  $\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha$ . Операторы кинетической энергии даются выражениями  $T_\alpha = -\Delta_{\bar{x}_\alpha} - \Delta_{\bar{y}_\alpha}$ . Взаимодействие частиц пары  $\alpha$  описывается центральным короткодействующим (убывающим быстрее  $1/x_\alpha^2$  при  $x_\alpha \rightarrow \infty$ ) потенциалом  $V_\alpha(x_\alpha)$ . Система уравнений (1) строго эквивалентна уравнению Шрёдингера [8], решение которого – волновая функция – может быть получена по формуле  $\Psi = \sum_\alpha \psi_\alpha$ . Решения уравнений Фаддеева  $\psi_\alpha$  называются компонентами волновой функции. Для расчетов связанных состояний уравнения (1) дополняются нулевыми граничными условиями типа Дирихле  $\psi_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) \rightarrow 0$

при  $x_\alpha$  или  $y_\alpha \rightarrow \infty$ . Это дает задачу на собственные значения, из которой определяется дискретный спектр энергий трехчастичной системы.

Каждое из уравнений системы (1) представляет собой шестимерное уравнение в частных производных. Решать такие уравнения даже на современных компьютерах затруднительно. По этой причине для проведения расчетов мы далее переходим к уравнениям Фаддеева, записанным в представлении полного орбитального момента. Для получения этих уравнений компоненты  $\psi_\alpha$  разлагаются в ряд по собственным функциям оператора квадрата полного орбитального момента системы частиц. Этот подход, предложенный в работе [9], приводит к конечной системе связанных трехмерных уравнений в частных производных. В следующей части настоящего раздела мы кратко описываем вывод этих уравнений.

Прежде всего, введем новые кинематические координаты  $(X_\alpha, \Omega_\alpha)$  в шестимерном конфигурационном пространстве задачи. Координаты  $X_\alpha = \{x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha\}$  описывают положения частиц в плоскости, их содержащей. Здесь  $z_\alpha = (\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha)/(x_\alpha, y_\alpha)$  – косинус угла между векторами  $\bar{x}_\alpha$  и  $\bar{y}_\alpha$ . Оставшиеся три координаты  $\Omega_\alpha = \{\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha\}$  описывают положение указанной плоскости в пространстве. Они определяются как три угла Эйлера, вращение на которые переводит некоторую лабораторную систему координат в связанную с частицами прямоугольную систему координат, в которой вектор  $\bar{y}_\alpha$  расположен вдоль оси  $z$ , а вектор  $\bar{x}_\alpha$  расположен в плоскости  $xz$ .

В этих новых координатах уравнения Фаддеева принимают вид

$$\{T_\alpha + V_\alpha(x_\alpha) - E\}\psi_\alpha(X_\alpha, \Omega_\alpha) = -V_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) \times \sum_{\beta \neq \alpha} \psi_\beta(X_\beta, \Omega_\beta), \quad \alpha = 1, 2, 3. \quad (3)$$

Здесь  $\psi_\alpha(X_\alpha, \Omega_\alpha)$  обозначают компоненты, выраженные в новых переменных. Оператор кинетической энергии в новых переменных имеет вид

$$T_\alpha = -\frac{1}{y_\alpha^2} \frac{\partial}{\partial y_\alpha} y_\alpha^2 \frac{\partial}{\partial y_\alpha} - \frac{1}{x_\alpha^2} \frac{\partial}{\partial x_\alpha} x_\alpha^2 \frac{\partial}{\partial x_\alpha} - \left( \frac{1}{y_\alpha^2} + \frac{1}{x_\alpha^2} \right) \times \left( \frac{1}{\sin \theta_\alpha} \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} \sin \theta_\alpha \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} + \frac{1}{\sin^2 \theta_\alpha} \frac{\partial^2}{\partial \varphi_\alpha^2} \right) + \frac{\mathbf{J}^2 - \mathbf{K}_\alpha}{y_\alpha^2}. \quad (4)$$

Здесь первые слагаемые действуют по переменным  $X_\alpha$ , последнее слагаемое действует по всем шести кинематическим переменным, однако вы-

ражается через операторы, имеющие ясный физический смысл. В частности, оператор

$$\mathbf{J}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin \vartheta_\alpha} \frac{\partial}{\partial \vartheta_\alpha} \sin \vartheta_\alpha \frac{\partial}{\partial \vartheta_\alpha} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta_\alpha} \times \right. \quad (5)$$

$$\left. \times \left( \frac{\partial^2}{\partial \phi_\alpha^2} - 2 \cos \vartheta_\alpha \frac{\partial^2}{\partial \phi_\alpha \partial \varphi_\alpha} + \frac{\partial^2}{\partial \varphi_\alpha^2} \right) \right]$$

представляет собой оператор квадрата полного орбитального момента системы, а оператор

$$\mathbf{K}_\alpha = \frac{\partial}{\partial \theta_\alpha} (\mathbf{J}_\alpha^{(+)} + \mathbf{J}_\alpha^{(-)}) + \text{ctg} \theta_\alpha (\mathbf{J}_\alpha^{(+)} - \mathbf{J}_\alpha^{(-)}) + 2\mathbf{J}_z^2 \quad (6)$$

выражается через операторы, связанные с проекциями полного орбитального момента на различные оси

$$\mathbf{J}_\alpha^{(\pm)} = \mp e^{\mp i \phi_\alpha} \left[ \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta_\alpha} + \frac{i}{\sin \vartheta_\alpha} \frac{\partial}{\partial \phi_\alpha} - i \text{ctg} \vartheta_\alpha \frac{\partial}{\partial \varphi_\alpha} \right], \quad (7)$$

$$\mathbf{J}_z = -i \partial / \partial \varphi_\alpha.$$

В качестве следующего шага разлагаем компоненты волновой функции в ряды

$$\Psi_\alpha(X_\alpha, \Omega_\alpha) = \sum_{J=0}^{+\infty} \sum_{\tau=\pm 1} \sum_{M=-J}^J \sum_{M'=M_0}^J \frac{\Psi_{\alpha MM'}^{J\tau}(X_\alpha)}{x_\alpha y_\alpha} F_{MM'}^{J\tau}(\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha) \quad (8)$$

по базису функций  $F_{MM'}^{J\tau}$ , зависящих от углов Эйлера. Коэффициенты разложения  $\Psi_{\alpha MM'}^{J\tau}$  будем называть парциальными компонентами волновой функции. Функции  $F_{MM'}^{J\tau}$  являются линейными комбинациями D-функций Вигнера

$$F_{MM'}^{J\tau}(\Omega_\alpha) = \frac{1}{\sqrt{2 + 2\delta_{M'0}}} \times \quad (9)$$

$$\times (D_{MM'}^J(\Omega_\alpha) + \tau(-1)^{M'} D_{M,-M'}^J(\Omega_\alpha)),$$

определенными как в [10, 11]. Функция  $F_{MM'}^{J\tau}$  является одновременно собственной функцией операторов квадрата и проекции полного орбитального момента, а также оператора  $P$  инверсии координат частиц

$$\mathbf{J}^2 F_{MM'}^{J\tau} = J(J+1) F_{MM'}^{J\tau}, \quad \mathbf{J}_z F_{MM'}^{J\tau} = -M F_{MM'}^{J\tau}, \quad (10)$$

$$P F_{MM'}^{J\tau} = \tau(-1)^J F_{MM'}^{J\tau}.$$

Она описывает состояние системы со значениями полного орбитального момента  $J$ , его проекции  $M$  и пространственной четности  $\tau = \pm 1$ . Функции  $F_{MM'}^{J\tau}$  удовлетворяют условиям ортогональности

$$\int_0^{2\pi} d\phi_\alpha \int_0^{2\pi} d\varphi_\alpha \int_0^\pi d\vartheta_\alpha \sin \vartheta_\alpha \left( F_{M_1 M_1}^{J_1 \tau_1}(\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha) \right)^* \times \quad (11)$$

$$\times F_{M_2 M_2}^{J_2 \tau_2}(\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha) = \frac{8\pi^2}{2J_1 + 1} \delta_{J_1 J_2} \delta_{\tau_1 \tau_2} \delta_{M_1 M_2} \delta_{M_1 M_2'}.$$

Кроме того, набор функций с целыми  $J \geq 0$ ,  $\tau = \pm 1$ ,  $|M| \leq J$  и  $(1 - \tau)/2 \leq M' \leq J$  образуют базис в пространстве квадратично интегрируемых функций со значениями аргументов в области  $[0, 2\pi] \times [0, \pi] \times [0, 2\pi]$ .

Наконец, функции  $F_{MM'}^{J\tau}$  от углов Эйлера, определенных относительно двух различных наборов координат Якоби  $\{\bar{x}_\alpha, \bar{y}_\alpha\}$  и  $\{\bar{x}_\beta, \bar{y}_\beta\}$ , связаны соотношениями

$$F_{MM'}^{J\tau}(\phi_\beta, \vartheta_\beta, \varphi_\beta) = \sum_{M''=(1-\tau)/2}^J \frac{(-1)^{M'-M''} 2}{\sqrt{2 + 2\delta_{M''0}}} F_{M'' M''}^{J\tau} \times \quad (12)$$

$$\times (0, w_{\beta\alpha}, 0) F_{MM'}^{J\tau}(\phi_\alpha, \vartheta_\alpha, \varphi_\alpha),$$

в которых кинематический угол  $w_{\beta\alpha}$  определяется выражением

$$w_{\beta\alpha} = \begin{cases} \arccos \frac{-s_{\beta\alpha} x_\alpha z_\alpha + c_{\beta\alpha} y_\alpha}{y_\beta}, & \text{если } (\beta, \alpha) = (2, 1), (3, 2), (1, 3), \\ 2\pi - \arccos \frac{-s_{\beta\alpha} x_\alpha z_\alpha + c_{\beta\alpha} y_\alpha}{y_\beta} & \text{в остальных случаях,} \end{cases} \quad (13)$$

в котором область значений арккосинуса полагается равной  $[0, \pi]$ .

Подставляя ряды (8) в уравнения (3) и проектируя их на базисные функции  $F_{MM'}^{J\tau}$ , получаем систему трехмерных уравнений Фаддеева в представлении полного орбитального момента, связывающих парциальные компоненты

$$\left[ T_{\alpha MM'}^{J\tau} + V_\alpha(x_\alpha) - E \right] \Psi_{\alpha MM'}^{J\tau}(X_\alpha) + T_{\alpha M, M'-1}^{J\tau-} \Psi_{\alpha M, M'-1}^{J\tau}(X_\alpha) + T_{\alpha M, M'+1}^{J\tau+} \Psi_{\alpha M, M'+1}^{J\tau}(X_\alpha) = -V_\alpha(x_\alpha, y_\alpha) \times \quad (14)$$

$$\times \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{x_\beta y_\alpha}{x_\beta y_\beta} \sum_{M''=M_0}^J \frac{(-1)^{M''-M'} 2}{\sqrt{2 + 2\delta_{M''0}}} F_{M'' M''}^{J\tau}(0, w_{\beta\alpha}, 0) \Psi_{\beta MM''}^{J\tau}(X_\beta).$$

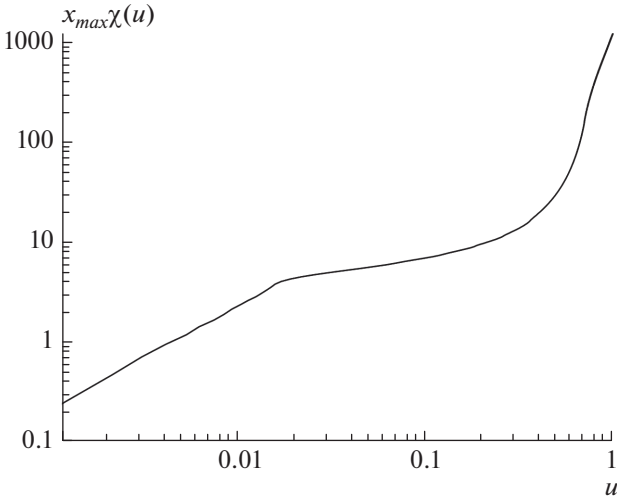


Рис. 2. Функция  $x_{\max}\chi(u)$ , использованная в расчетах молекулы  ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$ .

Здесь операторы кинетической энергии имеют вид

$$T_{\alpha MM'}^{J\tau} = -\frac{\partial^2}{\partial y_\alpha^2} + \frac{1}{y_\alpha^2} (J(J+1) - 2M'^2) - \frac{\partial^2}{\partial x_\alpha^2} - \left( \frac{1}{y_\alpha^2} + \frac{1}{x_\alpha^2} \right) \left( \frac{\partial}{\partial z_\alpha} (1 - z_\alpha^2) \frac{\partial}{\partial z_\alpha} - \frac{M'^2}{1 - z_\alpha^2} \right), \quad (15)$$

$$T_{\alpha M, M'\pm 1}^{J\tau\pm} = \pm \frac{1}{2} \lambda^{J, \pm M'} \sqrt{1 + \delta_{M'0(1)}} \times \left[ -\sqrt{1 - z_\alpha^2} \frac{\partial}{\partial z_\alpha} \pm (M' \pm 1) \frac{z_\alpha}{\sqrt{1 - z_\alpha^2}} \right].$$

Важнейшим свойством системы (14) является то, что уравнения, в которых участвуют парциальные компоненты  $\Psi_{\alpha MM'}^{J\tau}$  с различными индексами  $J$ ,  $M$  и  $\tau$ , образуют независимые системы уравнений. Это является прямым следствием того, что для рассматриваемых трехчастичных систем полный орбитальный момент, его проекция и пространственная четность являются сохраняющимися величинами. Таким образом, для вычисления спектра системы при данных значениях  $J$ ,  $M$  и  $\tau$  требуется решить граничную задачу с  $3n_M$  уравнениями (14), где

$$n_M = J - (1 - \tau)/2 + 1 \quad (16)$$

обозначает количество возможных значений индекса  $M'$  парциальных компонент  $\Psi_{\alpha MM'}^{J\tau}$  при данных  $J$  и  $\tau$ . К нулевым асимптотическим граничным условиям типа Дирихле добавляются также нулевые условия на прямых  $x_\alpha = 0$  и  $y_\alpha = 0$ .

В случае, когда в системе имеются тождественные частицы, количество уравнений может быть существенно сокращено за счет дополнительной симметрии парциальных компонент. В частно-

сти, в случае тождественности частиц 1 и 2 выполняется

$$\Psi_{2MM'}^{J\tau}(x_2, y_2, z_2) = p(-1)^{M'} \Psi_{1MM'}^{J\tau}(x_2, y_2, -z_2), \quad (17)$$

$$\Psi_{3MM'}^{J\tau}(x_3, y_3, z_3) = p(-1)^{M'} \Psi_{3MM'}^{J\tau}(x_3, y_3, -z_3),$$

а в случае тождественности всех трех частиц

$$\Psi_{1(2,3)MM'}^{J\tau}(x_1, y_1, z_1) = p(-1)^{M'} \Psi_{1MM'}^{J\tau}(x_1, y_1, -z_1). \quad (18)$$

Здесь  $p = \pm 1$  обозначает симметрию/антисимметрию волновой функции системы относительно перестановки координат тождественных частиц. Число уравнений в этих двух случаях сокращается до  $2n_M$  и  $n_M$ , соответственно.

Алгоритм численного решения уравнений (14) основан на методе сплайн-коллокации и изложен в статье [7], к которой мы отсылаем заинтересованного в его подробностях читателя.

## РЕЗУЛЬТАТЫ

В данном разделе представлены результаты расчетов спектров слабосвязанных молекул  ${}^4\text{He}_3$  и  ${}^4\text{He}_2\text{X}$ , где X – атом щелочного металла  ${}^6\text{Li}$  или  ${}^{23}\text{Na}$ . В расчетах для описания взаимодействий гелий-щелочной металл мы использовали потенциалы КТТУ [12], в качестве потенциала пары гелий-гелий был выбран ТТУ [13]. Они представляют собой модифицированные потенциалы Леннарда-Джонса.

В расчетах мы использовали специально подобранную по методике работы [14] сетку узлов сплайна по переменной  $x_\alpha$ . Она подбирается как сетка, оптимальная для расчета связанных состояний частиц пары  $\alpha$  с помощью радиального уравнения Шрёдингера. Технически она получается из сетки узлов, равноотстоящих на заданном интервале, по формуле  $x_i = x_{\max}\chi(i/N)$ ,  $i = 0, \dots, N$  при помощи монотонного отображения  $\chi : [0, 1] \rightarrow [0, 1]$ . Это отображение, в свою очередь, выражается через так называемую градуировочную функцию  $\varepsilon(x)$  по формуле

$$\chi^{-1}(u) = \frac{\int_0^{ux_{\max}} dx \varepsilon(x)}{\int_0^{x_{\max}} dx \varepsilon(x)}. \quad (19)$$

В случае используемого в расчетах базиса  $S_5^3$  сплайнов градуировочная функция вычисляется по формуле

$$\varepsilon(x) = \left( \sum_{m=1}^n \left| \frac{d^6}{dx^6} \varphi_m(x) \right|^2 \right)^{1/13}, \quad (20)$$

где  $\varphi_m$  обозначают радиальные волновые функции всевозможных связанных состояний двух частиц. Шестая производная волновой функции может быть выражена с помощью радиального уравнения Шрёдингера через значения самой функции

**Таблица 1.** Сходимость значений энергии основного состояния молекулы  ${}^4\text{He}_3$  в зависимости от количества базисных функций по переменным  $x_\alpha, y_\alpha, z_\alpha$ . Эталонное значение [10]:  $-4.00722 \cdot 10^{-7}$  а. е.

Размер базиса	$E, 10^{-7}$ а. е.
(73, 118, 15)	-4.01966
(88, 148, 18)	-4.00865
(103, 178, 21)	-4.00824
(118, 208, 24)	-4.00755
(148, 268, 30)	-4.00738

**Таблица 2.** Значения энергий связанных состояний молекул  ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$  и  ${}^4\text{He}_2{}^{23}\text{Na}$

Молекула	$(J, p, n)$	$E, 10^{-7}$ а. е.	$E, 10^{-7}$ а. е. [4]
${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$	(0, +1, 0)	-1.812	-1.865
${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$	(0, +1, 1)	-0.0614	-0.0662
${}^4\text{He}_2{}^{23}\text{Na}$	(0, +1, 0)	-4.780	-4.835
${}^4\text{He}_2{}^{23}\text{Na}$	(1, -1, 0)	-1.98	-1.963

и ее производной, которые получаются решением уравнения на неоптимальной сетке узлов. На рис. 2 приведен пример использованной в расчетах функции  $\chi$ . Сетки узлов сплайнов по переменным  $y_\alpha, z_\alpha$  выбираются такими же, как в работе [7].

В табл. 1 для иллюстрации возможностей нашего подхода представлены результаты сходимости значений энергии основного состояния с  $J = 0, p = 1$  молекулы  ${}^4\text{He}_3$ , известной с хорошей точностью [3], в зависимости от размера базиса сплайнов, по которому разлагается парциальная компонента. Из представленных результатов видно, что в расчетах удается достигнуть точной 4–5 значащей цифры значения энергии.

В табл. 2 мы приводим полученные с помощью нашего подхода и представленные в работе [4] значения энергий основного и возбужденного состояний комплексов  ${}^4\text{He}_2{}^6\text{Li}$  и  ${}^4\text{He}_2{}^{23}\text{Na}$ . Наши результаты подтверждают существование связанного состояния с  $J = 1$  у молекулы  ${}^4\text{He}_2{}^{23}\text{Na}$ . Поскольку в [4] был использован другой потенциал пары гелий-гелий, можно говорить лишь о качественном сравнении значений энергии. Из представленных результатов можно заключить, что

спектр в достаточной степени независим от используемых потенциальных моделей.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Представленные в статье результаты подтвердили эффективность подхода, основанного на использовании уравнений Фаддеева в представлении полного орбитального момента. В частности, нам удалось подтвердить существование возбужденного связанного состояния с  $J = 1$  молекулы  ${}^4\text{He}_2{}^{23}\text{Na}$ . Наш подход мы предполагаем в дальнейшем использовать для расчетов состояний рассеяния с  $J \geq 0$  в трехчастичных системах.

Работа Градусова В.А. поддержана РФФ (проект № 19-72-00076). Работа Руднева В.А., Яревского Е.А. и Яковлева С.Л. поддержана РФФИ (проект № 18-02-00492).

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Efimov V. // Phys. Lett. B. 1970. V. 33. No. 8. P. 563.
2. Roudnev V., Cavagnero M. // Phys. Rev. Lett. 2012. V. 108. № 11. Art. No. 110402.
3. Roudnev V., Cavagnero M. // J. Phys. B. 2012. V. 45. No. 2. Art. No. 025101.
4. Suno H., Hiyama E., Kamimura M. // Few-Body Syst. 2013. V. 54. P. 1557.
5. Korobitsin A.A., Kolganova E.A. // Springer Proc. Phys. 2020. V. 238. P. 35.
6. Stipanović P., Vranješ Markić L., Zarić D. et al. // J. Chem. Phys. 2017. V. 146. Art. No. 014305.
7. Gradusov V.A., Roudnev V.A., Yarevsky E.A. et al. // arXiv: 2005.05398. 2020.
8. Меркурьев С.П., Фаддеев Л.Д. Квантовая теория рассеяния для систем нескольких частиц. М.: Наука, 1985.
9. Kostykin V.V., Kvitsinsky A.A., Merkuriev S.P. // Few-Body Syst. 1989. V. 6. P. 97.
10. Биденхарн Л., Лаук Дж. Угловой момент в квантовой физике. Т. 1. М.: Мир, 1984.
11. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Ленинград: Наука, 1975.
12. Kleinekathöfer U., Lewerenz M., Mladenović M. // Phys. Rev. Lett. 1999. V. 83. No. 23. P. 4717.
13. Tang K.T., Toennies J.P., Yiu C.L. // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 74. No. 9. P. 1546.
14. Roudnev V., Cavagnero M. // Comp. Phys. Commun. 2011. V. 182. P. 2099.

## Theoretical study of weakly-bound triatomic systems with Faddeev equations in total orbital momentum representation

V. A. Gradusov<sup>a,\*</sup>, V. A. Roudnev<sup>a</sup>, E. A. Yarevsky<sup>a</sup>, S. L. Yakovlev<sup>a</sup>

<sup>a</sup>Department of Computational Physics, St Petersburg State University, St Petersburg, 199034 Russia

\*e-mail: v.gradusov@spbu.ru

We report the results of calculations of spectra of the weakly-bound triatomic molecular systems—the Helium trimer and helium–helium–alkali molecules. The calculations are carried out on the basis of the Faddeev equations in total orbital momentum representation. The existence of excited states with nonzero total orbital momentum of some molecules is approved.