Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Д. И. Бондарь, М. Гнатич, В. Ю. Лазур, Двумерная задача двух кулоновских центров при малых межцентровых расстояниях, *ТМФ*, 2006, том 148, номер 2, 269–287

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf2085>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.137.237

26 апреля 2023 г., 11:18:18

© 2006 г. Д. И. Бондарь*, М. Гнатич†, В. Ю. Лазур*

ДВУМЕРНАЯ ЗАДАЧА ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ ПРИ МАЛЫХ МЕЖЦЕНТРОВЫХ РАССТОЯНИЯХ

Асимптотическими методами проанализирован дискретный спектр задачи $(Z_1 e Z_2)_2$ в пределе объединенного атома ($R \ll 1$). Получены асимптотические разложения для квантового дефекта и энергетических термов системы $(Z_1 e Z_2)_2$ при малых межцентровых расстояниях R с точностью до членов $O(R^6)$. Исследован вопрос о влиянии фактора размерности на энергетический спектр молекулярного иона водорода H_2^+ .

Ключевые слова: плоская задача двух кулоновских центров, явления пограничного слоя, конфлюэнтное уравнение Гойна, функции Маттье, уравнение Айнса.

1. ВВЕДЕНИЕ

Поведение водородоподобного атома (e, Z_1) поверхностного слоя в поле соседнего заряда Z_2 характеризуется гамильтонианом ($e = \hbar = m = 1$)

$$\hat{H} = -\frac{\Delta_{\mathbf{r}}}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}$$

плоской задачи двух кулоновских центров $(Z_1 e Z_2)_2$; здесь $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}$ – двумерные радиус-векторы электрона, отсчитываемые от ядер и середины межъядерного расстояния R , соответственно, а $\Delta_{\mathbf{r}}$ – двумерный оператор Лапласа по декартовым координатам x, y электрона: $\mathbf{r} = (x, y)$. Уникальное свойство задачи $(Z_1 e Z_2)_2$ – возможность разделения переменных в эллиптических координатах – позволяет свести ее к решению двух обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ) класса Гойна [1], [2].

Если заряд одного из центров положить равным нулю, то система $(Z_1 e Z_2)_2$ переходит в двумерный водородоподобный атом. Это значительно упрощает задачу. Обстоятельный анализ двумерного атома водорода в полярной, параболической и

*Ужгородский национальный университет, г. Ужгород, Украина.
E-mail: dbondar@univ.uzhgorod.ua, lazur@univ.uzhgorod.ua

†Institute of Experimental Physics Slovak Academy of Sciences, Kosičce, Slovakia.
E-mail: hnatic@saske.sk

эллиптической системах координат был выполнен в работах [3], [4]. Скрытая симметрия и межбазисные разложения в названной двумерной модели обсуждались впоследствии в статье [5].

Двумерная задача $(Z_1eZ_2)_2$ является удобным объектом для выяснения многих вопросов, возникающих при исследовании поверхностных явлений в конденсированных средах, а также некоторых дефектов в твердых телах [6]. Не исключается также возможность того, что к этой задаче может привести разделение переменных в уравнении Шредингера, описывающем физические системы в пространстве произвольной размерности (см., например, [7]). Из сравнения энергетических спектров и плотностей распределения вероятностей двух- и трехмерного иона молекулы водорода H_2^+ легко установить роль фактора размерности для двухцентровых систем и его влияние на физически наблюдаемые закономерности.

Вопрос о влиянии размерности на спектральные характеристики двухцентровых систем имеет не только сугубо теоретический интерес. Он привлекает внимание в связи с описанием поведения атомов поверхностного слоя в полях соседних зарядов [6]. Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в материалах типа La_2CuO_4 также заметно усилило интерес к двумерной задаче $(Z_1eZ_2)_2$. Дело в том, что это явление носит планарный характер из-за того, что электроны проводимости локализуются в плоскостях, образованных атомами Cu и O [8].

Как легко видеть, выбранный в гамильтониане $\hat{H}$ “двумерный кулоновский потенциал” [3]–[5] не удовлетворяет двумерному уравнению Лапласа. Тем не менее он правильно описывает поведение атомов поверхностного слоя [6]. Действительно, нарушение трансляционной симметрии в направлении, перпендикулярном поверхности твердого тела, приводит к тому, что атомы поверхностного слоя находятся в особых условиях. В грубом приближении поведение таких атомов может быть описано добавочным потенциалом, представляющим собой одномерную вдоль оси z яму с бесконечными стенками. Зависимость от координаты z при этом в основном определяется ямой, и поэтому трехмерное кулоновское поле можно заменить двумерным (в плоскости xy) и далее, разделив переменные, получить вдоль оси z обычное квантование в одномерной бесконечной яме, а в плоскости xy – двумерную задачу $(Z_1eZ_2)_2$.

Однако, несмотря на понятный интерес к этой задаче, она до сих пор, насколько известно авторам, практически не исследовалась [9]. Нет и, по-видимому, не может быть общих методов аналитического решения задачи $(Z_1eZ_2)_2$ при произвольных значениях параметров Z_1 , Z_2 , R и квантовых чисел – к такому выводу приводят результаты изучения [1] собственных функций краевых задач, порождаемых дифференциальными уравнениями класса Гойна. Признание этого факта ведет к пониманию важности асимптотических разложений решений двумерной задачи при больших ($R \gg 1$) и малых ($R \ll 1$) межцентровых расстояниях.

Настоящая работа посвящена анализу асимптотическими методами дискретного спектра плоской задачи двух кулоновских центров в пределе объединенного атома ($R \ll 1$). Эти методы основаны на тех или иных вариантах теории возмущений (см. книги [1], [10]) и систематическом использовании свойств симметрии двумерной модели $(Z_1eZ_2)_2$. Все характерные технические приемы и алгоритм построения

асимптотических решений в окрестности особых точек будут представлены на примере весьма специфических для данной модели явлений типа пограничного слоя. Отмеченные особенности обуславливают весьма сложное поведение волновой функции вблизи каждого из ядер.

Работа построена следующим образом. В разделе 2 приводятся необходимые для дальнейшего сведения об эллиптической системе координат. Здесь же методом разделения переменных установлен эллиптический интеграл движения. В разделах 3 и 4 получены асимптотические формулы для собственных значений константы разделения углового уравнения (4) при $R \rightarrow 0$ с точностью до членов порядка $O(R^6)$ для случая одинаковых ($Z_1 = Z_2$) и различных ($Z_1 \neq Z_2$) зарядов. Процедура построения асимптотических разложений решений радиального уравнения (3) при малых R изложена в разделе 5. Вблизи каждой особой точки ($\xi = 1$ и $\xi = \infty$) построен асимптотический анзац решения, который удовлетворяет радиальному уравнению с точностью до малых членов. В разделе 6 получены асимптотические разложения для квантового дефекта и энергетических термов системы $(Z_1 e Z_2)_2$ при малых R с точностью до членов $O(R^6)$. Вычисления дальнейших членов разложения довольно громоздки и нереальны без использования системы символьных вычислений Maple¹⁾ или ее аналогов. Разложение по степеням малого скейлингового параметра R придает найденным формулам для энергии системы $(Z_1 e Z_2)_2$ весьма отчетливый характер и позволяет получить количественное объяснение некоторых важных физических эффектов [1], [10]; с некоторыми из них мы познакомимся в заключительном разделе.

2. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Плоская задача двух кулоновских центров в квантовой механике (сокращенно задача $(Z_1 e Z_2)_2$) состоит в определении собственных волновых функций и собственных значений энергий электрона в поле двух неподвижных ядер Z_1 и Z_2 , расположенных в плоскости электронного движения xy на расстоянии R друг от друга. В безразмерных переменных уравнение Шредингера задачи $(Z_1 e Z_2)_2$ имеет вид

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}; R) \equiv \left(-\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right) \Psi(\mathbf{r}; R) = E\Psi(\mathbf{r}; R). \quad (1)$$

В дальнейшем, если это не оговорено особо, будем считать, что двумерный вектор $\mathbf{r}$ задан в плоской эллиптической системе координат (u, ν) с началом в центре отрезка R и фокусами на его концах:

$$\operatorname{ch} u = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \cos \nu = \frac{r_1 - r_2}{R}.$$

Из этих соотношений следует, что координатные линии $u = \operatorname{const}$ и $\nu = \operatorname{const}$ представляют два семейства софокусных эллипсов и гипербол с фокусами в точках $(-R/2, 0)$ и $(R/2, 0)$.

Эллиптические координаты являются наиболее общими ортогональными координатами на плоскости. Они содержат в себе размерный параметр R , при стремлении

¹⁾www.maplesoft.com

которого к нулю ($R \rightarrow 0$) или бесконечности ($R \rightarrow \infty$) эллиптические координаты вырождаются в полярные и параболические [4].

Прямоугольные координаты электрона (x, y) связаны с эллиптическими координатами (u, ν) формулами

$$x = \frac{R}{2} \operatorname{ch} u \cos \nu, \quad y = \frac{R}{2} \operatorname{sh} u \sin \nu, \quad 0 \leq u < \infty, \quad 0 \leq \nu < 2\pi. \quad (2)$$

Часто вместо u, ν вводят переменные ξ, η с помощью тригонометрических подстановок

$$\xi = \operatorname{ch} u, \quad 1 \leq \xi < \infty; \quad \eta = \cos \nu, \quad -1 \leq \eta \leq 1.$$

Эллиптические координаты являются естественным средством исследования плоской задачи двух кулоновских центров. Подстановка $\Psi(\mathbf{r}; R) = \Pi(u)\Xi(\nu)$ переводит уравнение в частных производных (1) в два ОДУ

$$\left[\frac{d^2}{du^2} + 2p\alpha \operatorname{ch} u - p^2(\operatorname{ch}^2 u - 1) - \lambda \right] \Pi(p, \alpha; u) = 0, \quad (3)$$

$$\left[\frac{d^2}{d\nu^2} + 2p\beta \cos \nu - p^2(1 - \cos^2 \nu) + \lambda \right] \Xi(p, \beta; \nu) = 0, \quad (4)$$

где λ – константа разделения в эллиптических координатах,

$$p = \frac{R}{2}(-2E)^{1/2}, \quad \alpha = (Z_2 + Z_1)(-2E)^{-1/2}, \quad \beta = (Z_2 - Z_1)(-2E)^{-1/2}. \quad (5)$$

Возможность разделения переменных в двумерной задаче $(Z_1 e Z_2)_2$ в эллиптических координатах обусловлена существованием дополнительного эллиптического интеграла движения $\hat{\Lambda}$. Покажем это, построив интеграл $\hat{\Lambda}$ с помощью приведенных выше ОДУ (3), (4). Исключив из них энергетический параметр p^2 , получим выражение для оператора $\hat{\Lambda}$ в дифференциальной форме:

$$\hat{\Lambda} = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 u - \cos^2 \nu} \left[\sin^2 \nu \frac{\partial^2}{\partial u^2} - \operatorname{sh}^2 u \frac{\partial^2}{\partial \nu^2} + 2p\alpha \operatorname{ch} u \sin^2 \nu - 2p\beta \cos \nu \operatorname{sh}^2 u \right]. \quad (6)$$

Собственным значением этого оператора является константа разделения λ , а собственными функциями – решения уравнения (1). Оператор $\hat{\Lambda}$ коммутирует с гамильтонианом $\hat{H}$ задачи $(Z_1 e Z_2)_2$, поэтому операторы $\hat{H}$ и $\hat{\Lambda}$ могут быть диагонализированы одновременно. Соответствующее представление и отвечает разделению переменных в эллиптических координатах.

Удобно рассмотреть для уравнений (3), (4) краевые задачи с условиями ограниченности функций $\Pi(p, \alpha; u)$, $\Xi(p, \beta; \nu)$ на концах соответствующих промежутков, считая p, α, β независимыми параметрами, а $\lambda_u(p, \alpha)$, $\lambda_\nu(p, \beta)$ – спектральными параметрами. Собственные функции таких задач будем называть соответственно радиальными и угловыми кулоновскими эллиптическими функциями (РКЭФ, УКЭФ). Пара одномерных краевых задач для РКЭФ и УКЭФ эквивалентна исходной задаче (1) при условии равенства собственных чисел $\lambda_u(p, \alpha) = \lambda_\nu(p, \beta) = \lambda$ с учетом связи p, α, β с параметрами E, Z_1, Z_2, R .

Для построения асимптотических разложений задачи $(Z_1 e Z_2)_2$ при малых межцентровых расстояниях R требуются следующие разложения РКЭФ $\Pi(p, \alpha; u)$ и УКЭФ $\Xi(p, \beta; \nu)$ по малому параметру p :

$$\Pi(p, \alpha; u), \quad p \rightarrow 0, \quad \alpha = O(1); \quad (7)$$

$$\Xi(p, \beta; \nu), \quad p \rightarrow 0, \quad \beta = O(1). \quad (8)$$

Разложение (8) можно строить с помощью обычной теории возмущений по малому параметру p (см., например, книгу [10]). Более сложным оказывается асимптотический анализ радиального уравнения (3). Усложнение связано с наличием в этом уравнении двух различных масштабов расстояний (один из которых – масштаб пограничного слоя). Наличие двух масштабов указывает на сложную структуру разложений энергии и константы разделения по малому параметру p . Итоговые результаты (см. раздел 6) содержат члены двух различных типов: обычные степенные ряды по R и логарифмические члены, показывающие, что энергия не является аналитической функцией R . Ситуация сходна с той, которая имеет место для традиционной трехмерной задачи $Z_1 e Z_2$ [11].

Наши исследования радиального уравнения (3) основаны на работе [11], в которой впервые изучались асимптотики кулоновских сфероидальных функций по малому скейлинговому параметру p . О систематическом приложении этой техники к граничным задачам для уравнений класса Гойна сообщается в книге [1] и статье [12].

3. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ УКЭФ И СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ КОНСТАНТЫ РАЗДЕЛЕНИЯ В СЛУЧАЕ РАВНЫХ ЗАРЯДОВ

В симметричном случае $Z_1 = Z_2$ уравнение (4) для УКЭФ $\Xi(p, 0; \nu)$ не содержит параметра β , зависящего от зарядов, и переходит в уравнение Матье [13], [14]

$$\left[\frac{d^2}{d\nu^2} + \frac{p^2}{2} \cos 2\nu + \lambda_\nu - \frac{p^2}{2} \right] \Xi(p, 0; \nu) = 0. \quad (9)$$

Таким образом, уравнение Матье есть частный случай уравнения (4) при $\beta = 0$. Но ввиду его специального вида удобнее исследовать его непосредственно.

Обстоятельный анализ уравнения (9) был выполнен в книгах [13], [14], согласно которым физически приемлемыми решениями этого уравнения являются известные функции Матье

$$\Xi_l^{(+)}(p, 0; \nu) = ce_l\left(\nu, -\frac{p^2}{4}\right), \quad \Xi_l^{(-)}(p, 0; \nu) = se_l\left(\nu, -\frac{p^2}{4}\right), \quad (10)$$

которые можно разложить в ряды Фурье следующего вида:

$$ce_{2m}(\nu, q) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{2n} \cos(2n\nu), \quad se_{2m+2}(\nu, q) = \sum_{n=0}^{\infty} B_{2n+2} \sin[(2n+2)\nu], \quad (11)$$

$$ce_{2m+1}(\nu, q) = \sum_{n=0}^{\infty} A_{2n+1} \cos[(2n+1)\nu], \quad se_{2m+1}(\nu, q) = \sum_{n=0}^{\infty} B_{2n+1} \sin[(2n+1)\nu]. \quad (12)$$

Функции (11) и (12) являются ограниченными при всех действительных ν и периодическими с периодами π и 2π , соответственно. Известно [13], [14], что для уравнения (9) существует бесконечная счетная последовательность собственных значений константы разделения $\lambda_\nu = \lambda_{\nu l}^{(+)}(p)$, отвечающих четным периодическим решениям $\Xi_l^{(+)}(p, 0; \nu)$; существует также бесконечная счетная последовательность собственных значений $\lambda_\nu = \lambda_{\nu l}^{(-)}(p)$, отвечающих нечетным периодическим решениям $\Xi_l^{(-)}(p, 0; \nu)$. Функции $\Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \nu)$ и соответствующие им собственные значения $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$ нумеруются по числу нулей l на интервале $0 \leq \nu < \pi$, причем оказывается, что допустимы следующие значения углового квантового числа l : $0, 1, 2, \dots$ для четных решений $\Xi_l^{(+)}(p, 0; \nu)$ и $1, 2, 3, \dots$ для нечетных решений $\Xi_l^{(-)}(p, 0; \nu)$. Асимптотические разложения для собственных значений $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}(p)$ при $p \rightarrow 0$ можно получить, используя теорию возмущений по малому параметру p [13]. Несколько первых членов степенных разложений $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}(p)$ для $l = 0, 1, 2$ имеют вид

$$\lambda_{\nu 0}^{(+)} = \frac{p^2}{2} - \frac{p^4}{32} + O(p^8), \quad (13)$$

$$\lambda_{\nu 1}^{(+)} = 1 + \frac{p^2}{4} - \frac{p^4}{128} + O(p^6), \quad (14)$$

$$\lambda_{\nu 2}^{(+)} = 4 + \frac{p^2}{2} + \frac{5p^4}{192} + O(p^8), \quad (15)$$

$$\lambda_{\nu 1}^{(-)} = 1 + \frac{3p^2}{4} - \frac{p^4}{128} + O(p^6), \quad (16)$$

$$\lambda_{\nu 2}^{(-)} = 4 + \frac{p^2}{2} - \frac{p^4}{192} + O(p^8). \quad (17)$$

Для всех остальных значений $l \geq 3$ и не слишком большого p собственные значения $\lambda_{\nu l}^{(+)}$ и $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ приблизительно равны, и для них может быть использовано асимптотическое приближение [13]

$$\lambda_{\nu l}^{(\pm)} = l^2 + \frac{p^2}{2} + \frac{p^4}{32(l^2 - 1)} + \frac{(5l^2 + 7)p^8}{8192(l^2 - 1)^3(l^2 - 4)} + O(p^{12}), \quad l \geq 3. \quad (18)$$

Ввиду того, что знаменатели в правой части равенства (18) обращаются в нуль при $l = n$, в этой формуле нужно ограничиваться только первыми $n - 1$ членами, не содержащими $l^2 - n^2$. Для разности между четными и нечетными собственными значениями констант разделения $\lambda_{\nu l}^{(+)}$ и $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ справедлива оценка [13]

$$\lambda_{\nu l}^{(+)} - \lambda_{\nu l}^{(-)} = O\left(\frac{(-1)^l}{l^{l-1}} \left(\frac{p}{2}\right)^{2l}\right). \quad (19)$$

4. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ УКЭФ И КОНСТАНТЫ РАЗДЕЛЕНИЯ В СЛУЧАЕ РАЗЛИЧНЫХ ЗАРЯДОВ

Уравнение (4) относится к классу ОДУ с периодическими коэффициентами. Подстановкой

$$\Xi(p, \beta; \nu) = e^{-p \cos \nu} W(p, \beta; \nu) \quad (20)$$

и последующей заменой $\nu = 2\zeta$ оно приводится к уравнению Айнса [15]

$$\left[\frac{d^2}{d\zeta^2} + 4p \sin(2\zeta) \frac{d}{d\zeta} + 4p(1 + 2\beta) \cos(2\zeta) + 4\lambda_\nu \right] W(p, \beta; \nu) = 0. \quad (21)$$

В общем случае, когда заряды Z_1, Z_2 отличны от нуля, физически допустимые решения уравнения (21) могут быть разложены в тригонометрические ряды

$$W_l^{(+)}(\nu) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos(2n\zeta), \quad l \geq 0, \quad (22)$$

$$W_l^{(-)}(\nu) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n \sin[(2n+2)\zeta], \quad l \geq 1. \quad (23)$$

Функции $W_l^{(+)}(\nu)$ и $W_l^{(-)}(\nu)$ в этих разложениях снова являются четными или нечетными относительно замены $\nu \rightarrow -\nu$.

Подставляя разложение (22) в уравнение (21), после некоторых элементарных преобразований получаем рекуррентные соотношения для коэффициентов a_n :

$$\begin{aligned} 2\lambda_{\nu l}^{(+)} a_0 + p(2\beta - 1)a_1 &= 0, \\ 2p(2\beta + 1)a_0 + 2(\lambda_{\nu l}^{(+)} - 1)a_1 + p(2\beta - 3)a_2 &= 0, \\ p(2\beta + 2n - 1)a_{n-1} + 2(\lambda_{\nu l}^{(+)} - n^2)a_n + p(2\beta - 2n - 1)a_{n+1} &= 0, \quad n \geq 2. \end{aligned} \quad (24)$$

Конечные во всех точках физической области (2) и периодические с периодом 2π решения $W_l^{(\pm)}(\nu)$ уравнения (21) существуют лишь при определенных значениях констант разделения $\lambda_\nu = \lambda_{\nu l}^{(\pm)}(p, \beta)$. Асимптотические разложения для коэффициентов a_n, b_n и собственных значений $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$ в приближении объединенного атома (т.е. при $p \rightarrow 0$) можно строить с помощью варианта теории возмущений, изложенного в работе [11]. Процедура построения коэффициентов a_n разложения (22) основана на формальном ряде

$$a_n = p^{|n-l|} \sum_{j=0}^{\infty} [a_n]_{2j} p^{2j}, \quad a_l = 1. \quad (25)$$

Аналогичное разложение по степеням малого параметра p будем использовать и для собственных значений константы разделения:

$$\lambda_{\nu l}^{(+)} = \sum_{j=0}^{\infty} [\lambda_{\nu l}^{(+)}]_{2j} p^{2j}. \quad (26)$$

Подставляя разложения (25), (26) в (24) и приравнявая нулю коэффициенты при последовательных степенях p , мы приходим к системе уравнений для коэффициентов

$[a_n]_{2j}, [\lambda_{\nu l}^{(+)}]_{2j}$. Решение этой системы сводится к рекуррентной алгебраической процедуре, которая позволяет определить как коэффициенты $[a_n]_{2j}$ разложения (25), так и коэффициенты $[\lambda_{\nu l}^{(+)}]_{2j}$ разложения (26) собственных значений $\lambda_{\nu l}^{(+)}$ по малому параметру p . Приведем здесь только часть полученных результатов:

$$\lambda_{\nu 0}^{(+)} = -\frac{1}{2}(4\beta^2 - 1)p^2 + \frac{1}{32}(4\beta^2 - 1)(28\beta^2 + 1)p^4 + O(p^6), \quad (27)$$

$$\lambda_{\nu 1}^{(+)} = 1 + \left(\frac{5}{3}\beta^2 + \frac{1}{4}\right)p^2 + \left(-\frac{763}{216}\beta^4 + \frac{121}{144}\beta^2 - \frac{1}{128}\right)p^4 + O(p^6), \quad (28)$$

$$\lambda_{\nu 2}^{(+)} = 4 + \left(\frac{2}{15}\beta^2 + \frac{1}{2}\right)p^2 + \left(\frac{433}{13500}\beta^4 - \frac{31}{360}\beta^2 + \frac{5}{192}\right)p^4 + O(p^6), \quad (29)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{\nu l}^{(+)} = l^2 + \frac{4\beta^2 + 4l^2 - 1}{2(4l^2 - 1)}p^2 + \\ + \frac{(320l^2 + 112)\beta^4 - 24(4l^2 - 1)^2\beta^2 + (4l^2 - 1)^3}{32(l^2 - 1)(4l^2 - 1)^3}p^4 + O(p^6), \quad l \geq 3. \end{aligned} \quad (30)$$

Асимптотические разложения для $\lambda_{\nu l}^{(-)}(p, \beta)$ при $p \rightarrow 0$ могут быть получены путем таких же вычислений, как и в случае четных собственных значений константы разделения $\lambda_{\nu l}^{(+)}(p, \beta)$. А именно, подставляя разложение (23) в уравнение (21), мы приходим к рекуррентным соотношениям для коэффициентов b_n :

$$\begin{aligned} 2(\lambda_{\nu l}^{(-)} - 1)b_0 + p(2\beta - 3)b_1 = 0, \\ p(2\beta + 2n + 1)b_{n-1} + 2(\lambda_{\nu l}^{(-)} - [n + 1]^2)b_n + p(2\beta - 2n - 3)b_{n+1} = 0, \quad n \geq 1. \end{aligned} \quad (31)$$

Коэффициенты разложения b_n и собственные значения $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ находятся, как и прежде, в виде формальных рядов по степеням p^2 :

$$b_n = p^{|n-l+1|} \sum_{j=0}^{\infty} [b_n]_{2j} p^{2j}, \quad b_{l-1} = 1, \quad \lambda_{\nu l}^{(-)} = \sum_{j=0}^{\infty} [\lambda_{\nu l}^{(-)}]_{2j} p^{2j}, \quad l \geq 1. \quad (32)$$

Тем же способом, что и в предыдущем случае, получаем для собственных значений константы разделения $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ асимптотические разложения

$$\lambda_{\nu 1}^{(-)} = 1 + \left(-\frac{1}{3}\beta^2 + \frac{3}{4}\right)p^2 + \left(\frac{5}{216}\beta^4 - \frac{7}{144}\beta^2 - \frac{1}{128}\right)p^4 + O(p^6), \quad (33)$$

$$\lambda_{\nu 2}^{(-)} = 4 + \left(\frac{2}{15}\beta^2 + \frac{1}{2}\right)p^2 + \left(-\frac{317}{13500}\beta^4 + \frac{19}{360}\beta^2 - \frac{1}{192}\right)p^4 + O(p^6), \quad (34)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{\nu l}^{(-)} = l^2 + \frac{4\beta^2 + 4l^2 - 1}{2(4l^2 - 1)}p^2 + \\ + \frac{(320l^2 + 112)\beta^4 - 24(4l^2 - 1)^2\beta^2 + (4l^2 - 1)^3}{32(l^2 - 1)(4l^2 - 1)^3}p^4 + O(p^6), \quad l \geq 3. \end{aligned} \quad (35)$$

Сравнение формул (35) и (30) показывает, что асимптотические разложения для $\lambda_{\nu l}^{(+)}$ и $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ при $l \geq 3$ совпадают с точностью до членов $O(p^{2l})$.

Все найденные выше асимптотические формулы сильно упрощаются в случае одинаковых центров, когда $Z_1 = Z_2$ и β тождественно равно нулю. В этом случае построенные здесь выражения (27)–(30), (33)–(35) для $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}(p, \beta)$ при $p \rightarrow 0$ с точностью до членов $O(p^6)$ совпадают с соответствующими асимптотическими выражениями (13)–(18) для константы разделения $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}(p)$ периодических функций Матье.

При частных значениях параметров функции $\Xi_l^{(\pm)}(p, \beta; \nu)$ выражаются через известные специальные функции. В симметричном случае $Z_1 = Z_2$ они выражаются через периодические функции Матье (12), в случае $Z_2 = 0$ – через угловую волновую функцию двумерного водородоподобного атома в эллиптической системе координат [4], в случае $p = 0$ – через тригонометрические функции $\cos(l\varphi)$ и $\sin(l\varphi)$, соответственно (φ – полярный угол).

5. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ РЕШЕНИЙ РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ

Введем новую переменную $\xi = \operatorname{ch} u$ и преобразуем радиальное уравнение (3) к алгебраическому виду:

$$\left[(\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} + \xi \frac{d}{d\xi} - p^2(\xi^2 - 1) + 2p\alpha\xi - \lambda_u \right] \Pi(p, \alpha; \xi) = 0. \quad (36)$$

Это уравнение является конфлюэнтным уравнением Гойна [1], [2]. Функция $\Pi(p, \alpha; \xi)$ удовлетворяет граничным условиям

$$|\Pi(p, \alpha; 1)| < \infty, \quad \Pi(p, \alpha; \xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0. \quad (37)$$

При конечных значениях ξ и малых $p \ll 1$ уравнение (36) можно рассматривать как возмущение уравнения для полиномов Чебышева. Это означает, что при стремлении p к нулю ограниченные в особой точке $\xi = 1$ решения радиального уравнения (36) приближаются к многочленам Чебышева первого рода $T_n(\xi)$ [14]. Все это наводит на мысль о представлении решения $\Pi_{<}(\xi) \equiv \Pi_{<}(p, \alpha; \xi)$ уравнения (36), ограниченного в особой точке $\xi = 1$, посредством бесконечной суммы следующего вида:

$$\Pi_{<}(\xi) = e^{-p\xi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_n T_{\tau+n}(\xi), \quad d_n = p^{|n|} \sum_{j=0}^{\infty} [d_n]_{2j} p^{2j}, \quad d_0 \equiv 1. \quad (38)$$

Подставляя разложение (38) в уравнение (36) и используя дифференциальное уравнение и рекуррентные формулы для многочленов Чебышева первого рода $T_n(\xi)$, получим трехчленную рекуррентную систему уравнений для коэффициентов d_n :

$$p \left(n + \tau - \alpha - \frac{1}{2} \right) d_{n-1} + (\lambda_u - (\tau + n)^2) d_n - p \left(n + \tau + \alpha + \frac{1}{2} \right) d_{n+1} = 0. \quad (39)$$

Асимптотическое разложение для константы разделения λ_u в терминах τ может быть получено при использовании рекуррентного процесса, описанного в предыдущем разделе. Три первых члена этого разложения даются выражением

$$\lambda_u(p) = \tau^2 + \frac{4\alpha^2 + 4\tau^2 - 1}{2(4\tau^2 - 1)}p^2 + \frac{(320\tau^2 + 112)\alpha^4 - 24(4\tau^2 - 1)^2\alpha^2 + (4\tau^2 - 1)^3}{32(\tau^2 - 1)(4\tau^2 - 1)^3}p^4 + O(p^6). \quad (40)$$

Из инвариантности решения $\Pi_{<}(\xi)$ и разложения для константы разделения (40) относительно замены $\tau \rightarrow -\tau$ следует, что коэффициенты $d_n(\tau)$ подчиняются следующему соотношению симметрии:

$$d_n(-\tau) = d_{-n}(\tau). \quad (41)$$

В области больших ξ ($\xi = O(p^{-1})$) используем новый масштаб для независимой переменной

$$x = p(\xi + 1) \quad (42)$$

и введем новую функцию $\tilde{\Pi}(x)$, определив ее равенством

$$\tilde{\Pi}(x) = (\xi + 1)^{-1/2}\Pi(\xi). \quad (43)$$

Подстановка выражения (43) в уравнение (36) дает следующее уравнение для $\tilde{\Pi}(x)$:

$$\left[\frac{d}{dx} x^2 \frac{d}{dx} - x^2 + 2\alpha x - \tau^2 + \frac{1}{4} \right] \tilde{\Pi}(x) + \frac{p}{x - 2p} \left[x \frac{d}{dx} + (\tau^2 - \lambda_u) \frac{x}{p} + 2\alpha x - 2\tau^2 + \frac{1}{2} \right] \tilde{\Pi}(x) \equiv \hat{T}\tilde{\Pi}(x) + p\hat{Q}\tilde{\Pi}(x) = 0. \quad (44)$$

При малых p оператор $p\hat{Q}$ является возмущением оператора $\hat{T}$, и поэтому нам потребуются решения предельного уравнения $\hat{T}R(x) = 0$. Два линейно независимых решения $R_\tau(x)$ и $R_{-\tau}(x)$ названного вспомогательного уравнения $\hat{T}R(x) = 0$ выражаются через регулярное в нуле решение $F(a; c; x)$ конфлюэнтного гипергеометрического уравнения:

$$R_\tau(x) = e^{-x} x^{\tau-1/2} F\left(-\alpha + \tau + \frac{1}{2}; 2\tau + 1; 2x\right). \quad (45)$$

Величина τ определяет характер ветвления решений уравнения (36) при обходе точки $\xi = \infty$ и называется показателем характеристической экспоненты [16]. А именно, существуют два линейно независимых решения $\Pi_\tau^{(1)}(p, \alpha; x)$ и $\Pi_{-\tau}^{(1)}(p, \alpha; x)$ уравнения (44), которые при обходе точки $x = \infty$ удовлетворяют условиям

$$\Pi_\tau^{(1)}(e^{2\pi i} x) = e^{2\pi i \tau} \Pi_\tau^{(1)}(x), \quad \Pi_{-\tau}^{(1)}(e^{2\pi i} x) = e^{-2\pi i \tau} \Pi_{-\tau}^{(1)}(x).$$

Согласно упомянутой симметрии $\tau \rightarrow -\tau$ решение радиального уравнения $\Pi_{>}(\xi)$, которое является продолжением $\Pi_{<}(\xi)$ в область больших ξ , можно представить в виде линейной комбинации

$$\begin{aligned}\Pi_{>}(\xi) &= g(\tau)\Pi_{\tau}^{(1)}(x) + g(-\tau)\Pi_{-\tau}^{(1)}(x), \\ \Pi_{\tau}^{(1)}(x) &= \sqrt{\xi+1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} h_n(\tau)R_{\tau+n}(x), \\ h_n(\tau) &= p^{|n|} \sum_{j=0}^{\infty} [h_n]_{2j} p^{2j}, \quad h_0(\tau) \equiv 1.\end{aligned}\tag{46}$$

Фигурирующие здесь константы $g(\tau)$ и $g(-\tau)$ будут найдены позже путем сшивания решений $\Pi_{<}(\xi)$ и $\Pi_{>}(\xi)$ в области перекрывания.

Подстановка разложения (46) в уравнение (44) после использования рекуррентных соотношений для функции $R_{\tau+n}(x)$ [11] приводит к трехчленному рекуррентному соотношению для коэффициентов $h_n(\tau)$:

$$p \frac{(\tau+n-1/2)^2 - \alpha^2}{(2\tau+2n-1)(\tau+n)} h_{n-1} + [(\tau+n)^2 - \lambda_u] h_n - p(\tau+n+1)(2\tau+2n+1) h_{n+1} = 0. \tag{47}$$

Из анализа трехчленных рекуррентных систем (47) и (39) следует, что коэффициенты $d_n(\tau)$ и $h_n(\tau)$ связаны соотношением

$$h_n(\tau) = d_n(\tau)(-2)^n \frac{\Gamma(2\tau+1)\Gamma(\tau+\alpha+n+1/2)}{\Gamma(2\tau+2n+1)\Gamma(\tau+\alpha+1/2)}. \tag{48}$$

Последнее равенство легко проверить и прямой подстановкой выражения (48) в рекуррентное соотношение (47).

Построенные решения $\Pi_{<}(\xi)$ и $\Pi_{>}(\xi)$ нам необходимо сшить в области перекрывания

$$\xi = O\left(\frac{1}{\sqrt{p}}\right), \tag{49}$$

где пригодны оба разложения (38), (46). Наш первый шаг при проведении процедуры сшивания состоит в расщеплении полного асимптотического поведения решения $\Pi_{<}(\xi)$ при $\xi \rightarrow \infty$. С этой целью преобразуем разложение (38) в области сшивки (49) так, чтобы оно имело форму, подобную (46). Желаемая форма для $\Pi_{<}(\xi)$ получается из (38) путем использования формулы (см. книгу [14], том 2)

$$T_n(\xi) = F\left(-n, n; \frac{1}{2}; \frac{1-\xi}{2}\right)$$

и соотношения связи (2.10(3)) из книги [14], том 1, для локальных решений гипергеометрического уравнения. В результате указанных преобразований получим представление для $\Pi_{<}(\xi)$

$$\Pi_{<}(\xi) = \Pi_{\tau}^{(2)}(\xi) + \Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi) \tag{50}$$

в терминах гипергеометрической функции $F(a, b; c; z)$:

$$\Pi_{\tau}^{(2)}(\xi) = e^{-p\xi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_n(\tau) 2^{2\tau+2n-1} \left(\frac{\xi+1}{2}\right)^{\tau+n} F\left(-\tau-n, \frac{1}{2}-\tau-n; 1-2\tau-2n; \frac{2}{\xi+1}\right).$$

Существенно, что каждый член линейной комбинации (50) также является решением радиального уравнения.

Следствием наших преобразований является тот факт, что теперь решение $\Pi_{<}(\xi)$ радиального уравнения (36), которое ограничено в точке $\xi = 1$, мы можем разложить в ряд по степеням малого параметра p с коэффициентами, зависящими от $\xi + 1$. Следует также отметить, что связь (48) совместима с упомянутой выше симметрией построенных решений $\Pi_{<}(\xi)$ и $\Pi_{>}(\xi)$.

Посмотрим, что происходит с решениями уравнения (36), когда ξ описывает на комплексной ξ -плоскости замкнутый контур γ , обходящий против часовой стрелки особую точку $\xi = +1$: $\xi + 1 \rightarrow e^{2\pi i}(\xi + 1)$, $x \rightarrow e^{2\pi i}x$. Из формул (46) и (50) следует, что эффект от обхода по контуру γ определяется преобразованиями

$$\begin{aligned} \Pi_{\tau}^{(1)}(x) &\rightarrow e^{2\pi i\tau} \Pi_{\tau}^{(1)}(x), & \Pi_{-\tau}^{(1)}(x) &\rightarrow e^{-2\pi i\tau} \Pi_{-\tau}^{(1)}(x), \\ \Pi_{\tau}^{(2)}(\xi) &\rightarrow e^{2\pi i\tau} \Pi_{\tau}^{(2)}(\xi), & \Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi) &\rightarrow e^{-2\pi i\tau} \Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi). \end{aligned} \quad (51)$$

Любые три из функций $\Pi_{\tau}^{(1)}(x)$, $\Pi_{-\tau}^{(1)}(x)$, $\Pi_{\tau}^{(2)}(\xi)$ и $\Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi)$ связаны друг с другом линейным соотношением с постоянными коэффициентами. Положим

$$\Pi_{\tau}^{(1)}(x) = A\Pi_{\tau}^{(2)}(\xi) + B\Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi). \quad (52)$$

Тогда, совершив обход по контуру γ , приводящий к преобразованиям (51), мы получаем вместо (52) соотношение $\Pi_{\tau}^{(1)}(x) = A\Pi_{\tau}^{(2)}(\xi) + B e^{-4\pi i\tau} \Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi)$. Сравнивая это равенство с равенством (52), нетрудно понять, что $B = 0$. Тогда в терминах принятых в данном разделе обозначений (46) условия сшивания решений $\Pi_{<}(\xi)$ и $\Pi_{>}(\xi)$ принимают вид

$$\Pi_{\tau}^{(2)}(\xi) = g(\tau)\Pi_{\tau}^{(1)}(x), \quad \Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi) = g(-\tau)\Pi_{-\tau}^{(1)}(x). \quad (53)$$

Формулы (53) – точные, а не асимптотические. Заменяя в них функции $F(a, b; c; 2/(\xi + 1))$, $F(a'; c'; 2x)$ гипергеометрическими рядами Гаусса и Куммера, соответственно, и приравнявая коэффициенты при последовательных степенях $\xi + 1$, можно получить разложения для $g(\tau)$ и $g(-\tau)$ по малому параметру p . Мы приведем здесь лишь финальный результат:

$$\frac{g(-\tau)}{g(\tau)} = \left(\frac{p}{2}\right)^{2\tau} \left[1 - \frac{8\alpha^2\tau}{(4\tau^2 - 1)^2} p^2 + O(p^4)\right]. \quad (54)$$

Когда α и τ принимают произвольные значения, решение $\Pi_{>}(\xi)$ в пределе $x \rightarrow \infty$ представляет собой линейную комбинацию экспонент, одна из которых растет, а вторая убывает при увеличении x . Приравнявая нулю коэффициент при растущей экспоненте, мы получаем дисперсионное уравнение, связывающее параметры α , τ и p :

$$\operatorname{tg} \pi \left(\alpha + \frac{1}{2} \right) = \operatorname{tg}(\pi\tau) \frac{1 - \epsilon}{1 + \epsilon}, \quad (55)$$

где

$$\epsilon = p^{2\tau} \frac{\Gamma(-2\tau+1)\Gamma(\tau+\alpha+1/2)}{\Gamma(2\tau+1)\Gamma(-\tau+\alpha+1/2)} \left[1 - \frac{8\alpha^2\tau}{(4\tau^2-1)^2} p^2 + O(p^4) \right]. \quad (56)$$

6. АСИМПТОТИЧЕСКИЕ РАЗЛОЖЕНИЯ ЭНЕРГИИ И КВАНТОВОГО ДЕФЕКТА

В предыдущих разделах мы изучали порознь две краевые задачи для радиально-го (3) и углового (4) уравнений, причем собственными значениями в угловом уравнении считаются константы разделения $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$, а p остается свободным параметром. В радиальном уравнении вместо λ_u в роли независимого параметра выступает показатель характеристической экспоненты τ . При $p \rightarrow 0$ константа разделения λ_u выражается через τ с помощью асимптотического разложения (40), которое отличается от (30) и (35) формальной заменой $l \rightarrow \tau$, $\beta \rightarrow -\alpha$. Приравнивая выражение (40) для λ_u собственному значению $\lambda_{\nu l}^{(+)} (\lambda_{\nu l}^{(-)})$ углового уравнения (27)–(30) ((33)–(35)), можно представить функцию $\tau_l^{(\pm)} = \tau_l^{(\pm)}(\alpha, \beta, p)$ в виде асимптотического ряда по степеням малого параметра p . В частных случаях, когда $l = 0$, $l = 1$ и $l = 2$, имеем

$$\tau_0^{(+)} = 2\sqrt{2s}\alpha p + \frac{\sqrt{2s}\alpha}{8}(56s\alpha^2 + 36\alpha^2 + 3)p^3 + O(p^5), \quad (57)$$

$$\tau_1^{(+)} = 1 + \left(-\frac{10}{3}s\alpha^2 + \frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{1}{8} \right) p^2 + O(p^4), \quad (58)$$

$$\tau_1^{(-)} = 1 + \left(\frac{2}{3}s\alpha^2 - \frac{1}{2}\alpha^2 + \frac{1}{8} \right) p^2 + O(p^4), \quad (59)$$

$$\begin{aligned} \tau_2^{(+)} = 2 - \frac{2}{15}s\alpha^2 p^2 + \\ + \left(\left[\frac{418}{3375}s^2 - \frac{31}{450}s + \frac{1}{144} \right] \alpha^4 + \left[\frac{31}{360}s - \frac{5}{288} \right] \alpha^2 + \frac{1}{256} \right) p^4 + O(p^6), \end{aligned} \quad (60)$$

$$\begin{aligned} \tau_2^{(-)} = 2 - \frac{2}{15}s\alpha^2 p^2 + \\ + \left(\left[-\frac{332}{3375}s^2 + \frac{19}{450}s - \frac{1}{144} \right] \alpha^4 + \left[-\frac{19}{360}s + \frac{5}{288} \right] \alpha^2 - \frac{1}{256} \right) p^4 + O(p^6). \end{aligned} \quad (61)$$

Для всех остальных значений $l = 3, 4, \dots$ аналогичным образом приходим к следующему разложению для показателя характеристической экспоненты:

$$\tau_l^{(\pm)} = l + \alpha^2 s A_l p^2 + \alpha^2 s (\alpha^2 s B_l + \alpha^2 C_l + D_l) p^4 + O(p^6), \quad l \geq 3, \quad (62)$$

где в правой части введены обозначения

$$\begin{aligned} s = \frac{Z_1 Z_2}{(Z_1 + Z_2)^2}, \quad A_l = \frac{-4}{(4l^2 - 1)l}, \quad B_l = \frac{4(12l^4 + 17l^2 - 2)}{(4l^2 - 1)^3(l^2 - 1)l^3}, \\ C_l = \frac{-18}{(4l^2 - 1)^2(l^2 - 1)l}, \quad D_l = \frac{3}{2(4l^2 - 1)(l^2 - 1)l}. \end{aligned} \quad (63)$$

Из выражений (57)–(62) следует, что нулевой член разложения $\tau_l^{(\pm)}(\alpha, \beta, 0) = l$, т.е. показатель характеристической экспоненты в приближении объединенного атома равен угловому квантовому числу l .

Подставляя теперь разложение (57) в дисперсионное уравнение (55) и решая его методом последовательных приближений, получаем асимптотическое разложение для энергии $E_{n0}^{(+)}$ в виде ряда, содержащего логарифмические члены:

$$E_{n0}^{(+)} = \frac{-2Z^2}{(2n-1)^2} \left[1 + \frac{8s}{2n-1} \left(\ln \frac{ZR}{2n-1} + \Psi(n) + 2\gamma \right) (ZR)^2 + \mathcal{E}_4 R^4 + O(R^5) \right]. \quad (64)$$

Здесь через $\Psi(n)$ обозначена логарифмическая производная гамма-функции

$$\Psi(n+1) = \frac{d \ln \Gamma(x+1)}{dx} \Big|_{x=n} = \sum_{k=1}^n \frac{1}{k} - \gamma,$$

а $\gamma = 0.57722\dots$ – постоянная Эйлера. Что же касается коэффициента $\mathcal{E}_4$, то даже для основного состояния ($n=1$) окончательная формула для него достаточно громоздка:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_4 = & -\frac{2}{3} Z^4 s [(-4\pi^2 s + 24s\gamma^2 - 144s\gamma - 69s - 18) \ln ZR + s(24\gamma - 72) \ln^2 ZR + \\ & + 8s \ln^3 ZR + s(8\gamma^3 - 72\gamma^2 - (4\pi^2 + 69)\gamma - 56\zeta(3)) - 18\gamma + 12]. \end{aligned} \quad (65)$$

Здесь $\zeta(n) = \sum_{k=1}^{\infty} (1/k^n)$ – дзета-функция Римана ($\zeta(3) = 1.202056903\dots$).

Аналогичные разложения для энергии $E_{nl}^{(\pm)}$ при малых R можно вывести и для возбужденных состояний системы $(Z_1 e Z_2)_2$ с угловыми квантовыми числами $l=1$ и $l=2$:

$$\begin{aligned} E_{n1}^{(+)} = & \frac{-2Z^2}{(2n-1)^2} \left[1 + \right. \\ & \left. + \frac{2[10s(2n-1)^2 - 3n(n-1)][5s(2n-1)^2 - 3n(n-1)]}{3(2n-1)^3[10s(2n-1)^2 - 9n(n-1)]} (ZR)^2 + O(R^4) \right], \end{aligned} \quad (66)$$

$$\begin{aligned} E_{n1}^{(-)} = & \frac{-2Z^2}{(2n-1)^2} \left[1 - \right. \\ & \left. - \frac{2[s(2n-1)^2 - 3n(n-1)][2s(2n-1)^2 - 9n(n-1)]}{3(2n-1)^3[2s(2n-1)^2 - 3n(n-1)]} (ZR)^2 + O(R^4) \right], \end{aligned} \quad (67)$$

$$\begin{aligned} E_{n2}^{(+)} = & \frac{-2Z^2}{(2n-1)^2} \left[1 + \frac{2s(ZR)^2}{15(2n-1)} - \frac{(2n-1)(418n-299)s - 465(n^2 - n - 1)}{6750(2n-1)^3} s(ZR)^4 - \right. \\ & \left. - \frac{(n^2-1)(n-2)n}{540(2n-1)^5} \left(\ln \frac{ZR}{2n-1} + \Psi(n+2) \right) s(ZR)^6 + O(R^6) \right], \end{aligned} \quad (68)$$

$$\begin{aligned} E_{n2}^{(-)} = & \frac{-2Z^2}{(2n-1)^2} \left[1 + \frac{2s(ZR)^2}{15(2n-1)} + \right. \\ & + \frac{n(n^2-1)(n-2)}{18(2n-1)^5} (ZR)^4 + \frac{4(2n-1)(83n-19)s - 285(n^2 - n - 1)}{6750(2n-1)^3} s(ZR)^4 - \\ & \left. - \frac{(n^2-1)(n-2)n}{540(2n-1)^5} \left(\ln \frac{ZR}{2n-1} + \Psi(n+2) \right) s(ZR)^6 + O(R^6) \right]. \end{aligned} \quad (69)$$

Для всех остальных состояний системы $(Z_1 e Z_2)_2$ с $l \geq 3$ после довольно громоздких выкладок получаем

$$E_{nl}^{(\pm)} = -\frac{Z^2}{2(n-1/2)^2} \left(1 - \frac{s}{2(n-1/2)} A_l (ZR)^2 + \frac{s}{32(n-1/2)^3} \times \right. \\ \left. \times \left[s \left(n - \frac{1}{2} \right) \left(6A_l^2 - 4 \left(n - \frac{1}{2} \right) B_l \right) - 4D_l - 4 \left(n - \frac{1}{2} \right)^2 C_l \right] (ZR)^4 + O(R^6) \right). \quad (70)$$

Энергия двумерной системы $(Z_1 e Z_2)_2$ выражается через квантовый дефект $\Delta_{nl}^{(\pm)}$ по формуле

$$E_{nl}^{(\pm)} = -\frac{2Z^2}{(2n + 2\Delta_{nl}^{(\pm)} - 1)^2}. \quad (71)$$

Отсюда и из разложений (64)–(70) для собственных значений энергии $E_{nl}^{(\pm)}$ можно также получить асимптотические представления для квантового дефекта $\Delta_{nl}^{(\pm)}$. Для нескольких первых значений $l = 0, 1, 2$ имеем

$$\Delta_{n0}^{(+)} = -2 \left(\ln \frac{ZR}{2n-1} + \Psi(n) + 2\gamma \right) s (ZR)^2 + \mathcal{D}_4 R^4 + O(R^5), \quad (72)$$

$$\Delta_{n1}^{(+)} = -\frac{[10s(2n-1)^2 - 3n(n-1)][5s(2n-1)^2 - 3n(n-1)]}{6(2n-1)^2[10s(2n-1)^2 - 9n(n-1)]} (ZR)^2 + O(R^4), \quad (73)$$

$$\Delta_{n1}^{(-)} = \frac{[s(2n-1)^2 - 3n(n-1)][2s(2n-1)^2 - 9n(n-1)]}{6(2n-1)^2[2s(2n-1)^2 - 3n(n-1)]} (ZR)^2 + O(R^4), \quad (74)$$

$$\Delta_{n2}^{(+)} = -\frac{s}{30} (ZR)^2 + \left[\frac{209}{27000} s - \frac{31(n^2 - n - 1)}{1800(2n-1)^2} \right] s (ZR)^4 + \\ + \frac{(n^2 - 1)(n-2)n}{2160(2n-1)^4} \left(\ln \frac{ZR}{2n-1} + \Psi(n+2) \right) s (ZR)^6 + O(R^6), \quad (75)$$

$$\Delta_{n2}^{(-)} = -\frac{s}{30} (ZR)^2 - \left[\frac{83}{13500} s^2 - \frac{19(n^2 - n - 1)}{1800(2n-1)^2} s + \frac{n(n^2 - 1)(n-2)}{72(2n-1)^4} \right] (ZR)^4 + \\ + \frac{(n^2 - 1)(n-2)n}{2160(2n-1)^4} \left(\ln \frac{ZR}{2n-1} + \Psi(n+2) \right) s (ZR)^6 + O(R^6), \quad (76)$$

а коэффициент $\mathcal{D}_4$ ввиду его громоздкости приведем только для основного состояния ($n = 1$):

$$\mathcal{D}_4 = \frac{1}{6} s Z^4 [(24s\gamma^2 - 69s - 4s\pi^2 - 18) \ln ZR + 24s\gamma \ln^2 ZR + \\ + 8s \ln^3 ZR + \gamma(8s\gamma^2 - 4s\pi^2 - 69s - 18) + 12 - 56s\zeta(3)]. \quad (77)$$

Приведем также два старших члена разложения $\Delta_{nl}^{(\pm)}$ по малому межъядерному расстоянию R для состояния с $l \geq 3$:

$$\Delta_{nl}^{(\pm)} = \frac{A_l}{4} s (ZR)^2 + \frac{s}{16} \left(sB_l + C_l + \frac{D_l}{(n-1/2)^2} \right) (ZR)^4 + O(R^6), \quad l \geq 3. \quad (78)$$

При решении дисперсионного уравнения (55) мы видим, что асимптотические разложения для энергии (70) и квантового дефекта (78) при малых R содержат лишь четные степени R вплоть до членов порядка $O(R^{2l})$. Последующие поправки, начиная со слагаемого, пропорционального R^{2l+2} , связаны с наличием в уравнении (55) параметра ϵ и включают логарифмы. В отличие от трехмерного случая [11] эти дополнительные поправки не могут быть вычислены в общем виде для произвольных значений углового квантового числа l . Весьма интересен сам факт появления логарифмических членов, показывающих, что энергия не является аналитической функцией ZR .

7. СВЯЗЬ ДВУМЕРНОЙ ЗАДАЧИ (Z_1eZ_2)₂ С ТРЕХМЕРНОЙ ЗАДАЧЕЙ Z_1eZ_2 И КЛАССИФИКАЦИЯ ТЕРМОВ СИСТЕМЫ (Z_1eZ_2)₂

По своей структуре асимптотическая формула (70) идентична аналогичной формуле (5.9) из работы [11]²⁾ для термов трехмерной системы Z_1eZ_2 . Переход от трехмерного случая к двумерному в разложениях для квантового дефекта (5.8) и энергии (5.9) из работы [11] осуществляется заменами

$$n \rightarrow n - \frac{1}{2}, \quad l \rightarrow l - \frac{1}{2}, \quad m \rightarrow -\frac{1}{2}. \quad (79)$$

Сравнивая полученные выражения для $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$ (30), λ_u (40) и $\tau_l^{(\pm)}$ (62) с аналогичными асимптотическими выражениями для состояний со сферическими квантовыми числами n, l, m объединенного атома в трехмерном случае [11], нетрудно убедиться, что они совпадают во всех порядках по p , если в названных формулах (5.1), (3.15) и (4.2) из работы [11] произвести замены (79):

$$\nu \left| \begin{array}{l} l \rightarrow l - \frac{1}{2} \\ m \rightarrow -\frac{1}{2} \end{array} \right. = \tau_l^{(\pm)} - \frac{1}{2}, \quad \lambda_{lm}^{(\eta)} \left| \begin{array}{l} l \rightarrow l - \frac{1}{2} \\ m \rightarrow -\frac{1}{2} \end{array} \right. = \lambda_{\nu l}^{(\pm)} - \frac{1}{4}, \quad \lambda^{(\xi)} \left| \begin{array}{l} \nu \rightarrow \tau - \frac{1}{2} \\ m \rightarrow -\frac{1}{2} \end{array} \right. = \lambda_u(\tau) - \frac{1}{4}.$$

Классификацию состояний двумерной системы (Z_1eZ_2)₂ в пределе $R \rightarrow 0$ естественно проводить по главному квантовому числу n ($n = 1, 2, 3, \dots$), угловому квантовому числу l ($0 \leq l \leq n - 1$ для $\Xi_l^{(+)}$ и $1 \leq l \leq n - 1$ для $\Xi_l^{(-)}$), а также по квантовому числу I_ν , которое является собственным значением оператора $\hat{I}_\nu$ инверсии угловой координаты электрона:

$$\hat{I}_\nu \Xi(p, \beta; \nu) = \Xi(p, \beta; -\nu) = I_\nu \Xi(p, \beta; \nu). \quad (80)$$

В этой статье угловые функции Ξ , для которых $I_\nu = +1$ и $I_\nu = -1$, обозначены через $\Xi^{(+)}$ и $\Xi^{(-)}$, соответственно.

²⁾ В формуле (5.3) работы [11] допущена (на стр. 2237) опечатка в формуле для коэффициента C_{lm} ; приведем здесь исправленный результат:

$$C_{lm} = \frac{A_{lm}}{2l+1} \left(\frac{(2l+1)^3}{8} A_{lm}^2 - \frac{A_{lm}}{2} - \frac{18m^2(4m^2-1)(2l+1)}{l^2(l+1)^2(2l-1)^2(2l+3)^2} \right) - \frac{B_{lm}}{2}.$$

В симметричном случае $Z_1 = Z_2$ возникает дополнительная классификация по квантовому числу, которое является собственным значением оператора $\hat{w}$ отражения координат электрона относительно прямой $x = 0$, что эквивалентно замене $\nu \rightarrow \pi - \nu$ в угловом уравнении:

$$\hat{w}\Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \nu) = \Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \pi - \nu) = w^{(\pm)}\Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \nu). \quad (81)$$

Решения $\Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \nu)$ делятся на симметричные ($w^{(\pm)} = +1$) и антисимметричные ($w^{(\pm)} = -1$) в зависимости от значения числа l :

$$w^{(+)} = (-1)^l, \quad w^{(-)} = (-1)^{l+1}. \quad (82)$$

Операция $\hat{w}$ соответствует перестановке зарядов Z_1 и Z_2 .

Двумерные решения $\Psi_{nl}^{(\pm)}(\mathbf{r}; R)$, кроме того, допускают классификацию по собственным значениям I оператора инверсии $\hat{I}$ координат электрона:

$$\hat{I}\Psi_{nl}^{(\pm)}(\mathbf{r}; R) = \Psi_{nl}^{(\pm)}(-\mathbf{r}; R) = I\Psi_{nl}^{(\pm)}(\mathbf{r}; R). \quad (83)$$

Инверсия $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ эквивалентна замене $\nu \rightarrow \pi + \nu$. Величина I зависит только от четности числа l : $I = (-1)^l$.

8. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Эллиптический базис $\Psi_{nl}^{(\pm)}(\xi, \nu; R) = \Pi_{nk}^{(\pm)}(\xi; R)\Xi_{nl}^{(\pm)}(\nu; R)$ является собственной функцией гамильтониана $\hat{H}$ и получаемого методом разделения переменных дополнительного эллиптического интеграла движения $\hat{\Lambda}$. Собственные значения $\lambda_{nl}^{(\pm)}$ оператора $\hat{\Lambda}$ имеют смысл констант разделения в эллиптических координатах. Эллиптический базис разбивается на два подбазиса $\Psi_{nl}^{(+)}$ и $\Psi_{nl}^{(-)}$, первый из которых четен, а второй нечетен относительно замены $\hat{I}_\nu: \nu \rightarrow -\nu$. Возможность такого разбиения является следствием инвариантности операторов $\hat{H}$ и $\hat{\Lambda}$ относительно инверсии по переменной ν . Целое положительное число l нумерует в порядке возрастания значения константы разделения $\lambda_l^{(\pm)}$ и определяет число нулей угловой функции $\Xi_{nl}^{(\pm)}(\nu; R)$; в четном по ν подбазисе $0 \leq l \leq n - 1$, в нечетном $-1 \leq l \leq n - 1$. Этот факт объясняет принятый нами в разделе 4 способ нумерации констант разделения и УКЭФ. Число нулей радиальной эллиптической функции $\Pi_{nk}^{(\pm)}(\xi; R)$ определяется выражением

$$k = \begin{cases} n - l - 1 + \text{Ent}(\Delta_{nl}^{(\pm)} + l - \tau_l^{(\pm)}), & Z_1 Z_2 \neq 0, \\ n - l - 1, & Z_1 Z_2 = 0, \end{cases} \quad (84)$$

где $\text{Ent}(x)$ – целая часть действительного числа x . Эллиптический параметр R может изменяться в пределах $0 \leq R < \infty$ и в нашей задаче имеет динамический смысл, т.е. входит в выражение для спектра энергий.

В качестве иллюстрации полученных асимптотических формул (64)–(70) применим их для расчета электронных состояний простейших двухцентровых систем $(Z_1 e Z_2)_2$. В табл. 1 сравниваются значения энергии основного состояния двумерного (2D) и трехмерного (3D) иона молекулы водорода H_2^+ , вычисленные по формуле (64) и аналогичной асимптотической формуле (5.6) для трехмерной задачи из

Табл. 1. Энергия основного состояния $2D\text{-}H_2^+$ и $3D\text{-}H_2^+$

R	$-E_{100}^{(3D)}(R)$	$-E_{10}^{(2D)}(R)$
0.05	1.9939765	7.722719226
0.15	1.95566	6.925890280
0.25	1.8978	7.523194845
0.35	1.8304	14.73385689

Табл. 2. Сравнение высоковозбужденных уровней энергии $2D\text{-}H_2^+$ с $3D\text{-}H_2^+$ ($R = 0.05$)

n	l	m	$-E_{nlm}^{(3D)}$	$-E_{nl}^{(2D)}$
5	4	0	0.08000023088	0.09876586759
		3	0.07999991919	
		4	0.07999967677	
7	6	0	0.04081635371	0.04733732055
		3	0.04081633624	
		6	0.04081628381	
10	9	0	0.02000000295	0.02216066883
		5	0.02000000049	
		9	0.01999999499	
15	14	0	0.008888889133	0.009512485436
		7	0.008888888962	
		14	0.008888888450	
30	29	0	0.002222222226	0.002298190179
		15	0.002222222223	
		29	0.002222222215	

работы [11]. Как видно из табл. 1, разность термов $\Delta E(R) = E_{100}^{(3D)}(R) - E_{10}^{(2D)}(R)$ при увеличении R быстро возрастает и при $R = 0.35$ приблизительно равна 12.90, что составляет более 700% значения энергии трехмерной системы H_2^+ . В табл. 2 приведено сравнение результатов асимптотических вычислений энергий $E_{nl}^{(2D)}$ и $E_{nlm}^{(3D)}$ возбужденных состояний соответственно двумерного и трехмерного молекулярного иона H_2^+ при межъядерном расстоянии $R = 0.05$. Из сравнения данных этой таблицы следует, что при увеличении квантовых чисел n и l влияние фактора размерности на энергетический спектр молекулярного иона водорода H_2^+ асимптотически уменьшается и для высоковозбужденных (ридберговских) состояний становится несущественным.

Полный анализ плоской задачи двух кулоновских центров должен включать в себя целый комплекс дополнительных вопросов. Укажем, в частности, что еще не изучено асимптотическое поведение термов двумерной системы $(Z_1eZ_2)_2$ при больших межцентровых расстояниях и вблизи границы сплошного спектра, переход от объединенного атома к разъединенным, а также сплошной спектр задачи $(Z_1eZ_2)_2$.

Можно также обобщить полученные результаты на многомерный случай, когда переменные в уравнении Шредингера соответствующей двухцентровой задачи разделяются в системах координат D -мерных ($D \geq 4$) эллипсоидов и гиперboloидов вращения. Эти вопросы мы намерены рассмотреть в последующих работах.

Список литературы

- [1] S. Yu. Slavyanov, W. Lay, *Special Functions: A Unified Theory Based on Singularities*, Oxford University Press, N.Y., 2000.
- [2] A. Ishkhanyan, *J. Phys. A*, **38** (2005), L491; E. S. Cheb-Terrab, *J. Phys. A*, **37** (2004), 9923.
- [3] B. Zaslowsky, M. E. Zandler, *Amer. J. Phys.*, **35** (1967), 1118; A. Cisneros, H. V. McIntosh, *J. Math. Phys.*, **10** (1969), 277.
- [4] Л. Г. Мардоян, Г. С. Погосян, А. Н. Сисакян, В. М. Тер-Антонян, *ТМФ*, **61** (1984), 99.
- [5] L. G. Mardoyan, G. S. Pogosyan, A. N. Sissakian, V. M. Ter-Antonyan, *J. Phys. A*, **18** (1985), 455.
- [6] А. Я. Шик, Л. Г. Бакуева, С. Ф. Мусихин, С. А. Рыков, *Физика низкоразмерных систем*, Наука, СПб., 2001.
- [7] Н. Ф. Трускова, *ЯФ*, **36** (1982), 790.
- [8] A. S. Davydov, *Phys. Rep.*, **190** (1990), 191.
- [9] M. Fabbri, A. F. da Silva, *Phys. Rev. A*, **32** (1985), 1870.
- [10] И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов, *Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции*, Наука, М., 1976.
- [11] D. I. Abramov, S. Yu. Slavyanov, *J. Phys. B*, **11** (1978), 2229.
- [12] W. Lay, S. Yu. Slavyanov, *Proc. Roy. Soc. London A*, **455** (1999), 4347.
- [13] М. Абрамовиц, Л. Стиган, *Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами*, Наука, М., 1979.
- [14] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции*, Наука, М., 1967.
- [15] F. M. Arscott, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh A*, **67** (1967), 265.
- [16] P. J. Greenland, W. Greiner, *Theor. Chem. Acta*, **42** (1976), 273.

Поступила в редакцию 28.11.2005,
после доработки 19.12.2005