Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Лобашев, Н. Н. Трунов, Метод сокращенного квазиклассического описания, *ТМФ*, 1999, том 120, номер 1, 99–115

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf763>

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., 18:06:17

МЕТОД СОКРАЩЕННОГО КВАЗИКЛАССИЧЕСКОГО ОПИСАНИЯ

Развит новый вариант квазиклассического анализа системы связанных состояний в центрально-симметричных потенциалах. Каждому потенциалу взаимно однозначно сопоставляется определенная пара функций орбитального момента. Первая из этих функций определяет обычное условие ВКБ-квантования и группирует потенциалы в классы эквивалентности. Меллиновское преобразование этой функции обнаруживает сходное поведение для типичных потенциалов, что позволяет описывать класс эквивалентности малым числом параметров. В качестве таких параметров могут быть выбраны асимптотически точные оценки числа состояний. Получено уравнение для систематики состояний в самосогласованном атомном потенциале без явного вида потенциала. Вторая введенная функция различает потенциалы внутри класса эквивалентности и одновременно дает первую поправку к условию квантования.

1. ВВЕДЕНИЕ

Квазиклассическое приближение Венцеля–Крамерса–Бриллюэна (ВКБ) является одним из основных и наиболее универсальных методов решения задач, для которых неизвестны или громоздки точные решения. Практика показывает, что целесообразные модификации метода (например, более корректный учет окрестностей точек поворота и т. д.) приводят к хорошей точности ВКБ-приближения даже для весьма малых значений квантовых чисел — вплоть до низшего состояния. Естественно, что вариации метода ВКБ должны быть ориентированы на конкретные классы задач, хотя не исключено наличие неизвестных сейчас более точных или более универсальных вариантов метода ВКБ. Иными словами, ВКБ-приближение не ограничивается разложением по большому параметру, а дополняется исходя из других соображений (например, включение в волновую функцию первого приближения показателя экспоненты, учитывающего следующие приближения, расширяет набор точно решаемых методом ВКБ задач [1, с. 44]). В процессе развития таких методов могут появиться новые характеристики и понятия, имеющие эвристическое значение и формирующие систему представлений, и новые аппроксимации (о принципиальной роли приближенных методов в физике см. [2]). Разви-

*Всероссийский научно-исследовательский институт метрологии им. Д.И. Менделеева, Санкт-Петербург, Россия. E-mail:lobashov@friedman.usr.lgu.spb.su

тию интуиции применительно к современной квантовой механике посвящена книга [3]. Метод ВКБ позволяет дать простой и физически прозрачный анализ строения периодической системы элементов [4].

В предлагаемой статье развивается конструктивный способ квазиклассического анализа, позволяющий изучать как прямую, так и обратную задачи и основанный на принципе сокращенного описания, исключающего излишнюю (в рассматриваемой задаче) информацию. В разделе 2 на примере известной задачи о ВКБ-квантовании с исключенным из фазового интеграла центробежным членом показана необходимость уточнения и развития процедуры ВКБ-квантования. При этом обычное затруднение – недостаток точных решений для сравнения – обходится применением асимптотически точных оценок числа состояний в заданном потенциале. В разделе 3 выполняется экспоненциальное преобразование и вводится функция приведенного орбитального момента, определяющая условие квантования, устанавливается ее связь с некоторой совокупностью потенциалов – классом эквивалентности. Выделен “эталонный” класс изогонных потенциалов, для которых эта функция сводится к постоянной. В разделе 4 введено интегральное преобразование этой функции, связывающее ее с экспериментально определяемыми параметрами. Там же проведено сравнение с реальными потенциалами по данным таблицы. В разделе 5 изучена возможность дальнейшего сокращения описания до двух – трех параметров (при фиксированном энергетическом параметре) и получены уравнения для самосогласованного потенциала. В разделе 6 введена вторая функция, различающая потенциалы внутри класса эквивалентности и одновременно уточняющая условие квантования. В разделе 7 рассмотрены конкретные примеры и суммируются результаты и перспективы развиваемого подхода.

В работе рассматриваются центрально-симметричные потенциалы. Отсчет энергии ведется так, что в классически доступной области значения потенциала положительны. При этом энергии связи положительны и приближаются к нулю по мере роста квантовых чисел (исключения оговорены).

Всюду интегралы по координатам без указания пределов берутся по всей области положительности подынтегральной функции (т.е. в одномерном случае между точками поворота). Используется атомная система единиц. Постоянно встречающиеся квантовые числа ν и λ принимают полуцелые положительные значения.

2. УСЛОВИЕ КВАНТОВАНИЯ С ДОПОЛНИТЕЛЬНОЙ ФАЗОЙ

В [5; 6, с. 463] предложено удобное для приложений условие ВКБ-квантования с исключением центробежного потенциала из фазового интеграла. Дополнительный, зависящий от орбитального момента член в правой части условия квантования определялся в работе [5] сравнением с точными решениями для некоторых эталонных потенциалов в пределе больших квантовых чисел, а в книге [6] – сшивкой ВКБ-интеграла без центробежного члена в центральной части потенциальной ямы с точными решениями на краях ямы. В обоих вариантах энергия связи уровня E полагалась равной нулю. Для потен-

циалов атомного типа с асимптотиками

$$\begin{aligned} V(r) &\sim \frac{1}{r^\alpha}, & 0 \leq \alpha < 2, & \quad r \rightarrow 0, \\ V(r) &\sim \frac{1}{r^\beta}, & \beta > 2, & \quad r \rightarrow \infty, \end{aligned} \quad (1)$$

это условие в наших обозначениях принимает вид

$$\Phi \equiv \frac{1}{\pi} \int \sqrt{2V} dr = n_r + \frac{1}{2} + \phi \left(l + \frac{1}{2} \right), \quad (2)$$

причем согласно [5, 6]

$$\phi = \phi_{\text{as}} \equiv \phi_{<} + \phi_{>}, \quad \phi_{<} = \frac{1}{2 - \alpha}, \quad \phi_{>} = \frac{1}{\beta - 2} \quad (3)$$

(экспоненциально спадающим и финитным потенциалам отвечает значение $\beta = \infty$). Как видно из (2), в условии без предварительного постулирования появляется параметр $\lambda = l + 1/2$, где l – орбитальный момент. Дополнительная фаза (3) при $E = 0$, т.е. в момент появления уровня, аддитивно содержит вклады особых точек $r = 0, \infty$, причем не зависит от величины потенциала, а только от показателей асимптотики. Заметим, что эта фаза ϕ_{as} учитывает не только момент l как таковой, но и нарушение квазиклассичности в потенциале (1) при $r \rightarrow 0, \infty$.

При любом значении $E > 0$ в статье [5] предполагалось, что вклад в фазу $\phi_{<}$ сохранится, т.к. здесь $V \gg E$ при $r \rightarrow 0$, в то время как $\phi_{>}$ необходимо опустить, поскольку при любой $E > 0$ имеется стандартный линейный участок $V(r)$ вблизи точки поворота. Иными словами, $\phi_{\text{as}} = \phi_{<}$ при всех $E > 0$.

Непосредственная проверка справедливости соотношений (2), (3) затрудняется малым количеством потенциалов, для которых известны решения при всех l ; возможно, этот список исчерпывается рассмотренными ниже. Поэтому мы применим здесь иной, независимый способ проверки, имеющий самостоятельное значение в контексте данной статьи.

Для этого заметим, что при подобном увеличении потенциала, т.е. при замене $V(r) \rightarrow FV(r)$ с большой постоянной $F \gg 1$, точность выполнения линейного условия (2) может только возрастать (поправочные по амплитуде члены в правой части равенства (2) всегда имеют порядок F^{-1} , см. далее раздел 6). В то же время при $F \gg 1$ в нижеследующих оценках с точностью $O(F^{-1})$ можно пренебречь дробными частями чисел и заменить суммирование интегрированием. Тогда для числа связанных состояний N_l с заданным моментом l из условия (2) получим $N_l \simeq \Phi - l\phi$, максимальное значение момента $l_{\text{max}} = \Phi/\phi$ и полное число связанных состояний

$$\overline{N}_3 = \sum_{l=0}^{l_{\text{max}}} (2l+1) N_l \simeq \frac{\Phi^3}{3\phi^2}. \quad (4)$$

Оценка $\overline{N}_3 \sim F^{3/2}$ в формуле (4) неулущаема по степени F , асимптотически точна при условии линейности (2) по ϕ и, по-видимому, дополняет известные типы оценок (см., например, [7, § XIII.3В и § XIII.15; 8]).

С другой стороны, широко известна [9] ВКБ-оценка полного числа связанных состояний в данном потенциале (не определяемая предыдущими построениями)

$$N_3 = \frac{4\sqrt{2}}{3\pi} \int (FV)^{3/2} r^2 dr. \quad (5)$$

Поскольку точное число уровней N связано с N_3 соотношением [7, с. 114]

$$\lim_{F \rightarrow \infty} \frac{N}{N_3} = 1,$$

ниже мы опосредованно используем сравнение с точными решениями. Очевидно, что необходимым условием справедливости (2) является совпадение числа $\overline{N}_3$ из (4) и числа N_3 из (5), что фиксирует значение

$$\phi = \left(\frac{\Phi^3}{3N_3} \right)^{1/2} \equiv \phi_{1,3}. \quad (6)$$

Опуская множитель $2l + 1$ в (4), получим полное число уровней (без умножения на кратность вырождения)

$$\overline{N}_2 \simeq \frac{\Phi^2}{2\phi}. \quad (7)$$

Фактически $\overline{N}_2$ – число оболочек, т.е. групп состояний с заданными значениями (n_r, l) или, что то же, (n, l) , где n – главное квантовое число. Иная оценка для N_2 получается аналогично (5),

$$N_2 = \frac{1}{2} \int V r dr \quad (8)$$

(соответствующий результат из книги [9, с. 215] необходимо удвоить, учитывая отрицательные значения проекции момента). Из сравнения соотношений (7) и (8) вытекает значение фазы

$$\phi = \frac{\Phi^2}{2N_2} \equiv \phi_{1,2}, \quad (9)$$

т.е. еще одно условие справедливости равенства (2).

Сравнение $\phi_0 \equiv \phi_{as}$ (3) и $\phi_{1,3}$ (6), $\phi_{1,2}$ (9) для ряда потенциалов приведено в таблице. Видно, что потенциалы распадаются на два класса. В первом $\phi_{as} = \phi_{1,3} = \phi_{1,2}$. Во втором наблюдается сильное отличие фазы ϕ_{as} от $\phi_{1,3}$ или $\phi_{1,2}$, так что ϕ_{as} не является репрезентативным параметром.

Ясно, что необходим более глубокий анализ, который позволил бы объяснить эту качественную разницу и дать точное выражение дополнительной фазы для каждого потенциала во всем диапазоне λ с учетом возможной нелинейности. В частности, нуждается в объяснении и использовании примечательный факт практически точного совпадения $\phi_{1,3}$ и $\phi_{1,2}$ для всех потенциалов таблицы (с точностью не хуже 1–3 %).

Фазы модельных потенциалов $V(r)$: $\phi_0 = \phi_{\text{ас}}$ (3) или ϕ_p (24) при $p \rightarrow 0$; ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 (24), ϕ_p (24) при $p \rightarrow \infty$; $\phi_{1,3}$ (6), $\phi_{1,2}$ (9); фазы $\tilde{\phi}_0, \tilde{\phi}_\infty$, вычисленные по аппроксимации (30).

N	$V(r)$	ϕ_0	ϕ_1	ϕ_2	ϕ_3	ϕ_∞	$\phi_{1,3}$	$\phi_{1,2}$	$\tilde{\phi}_0$	$\tilde{\phi}_\infty$
1	$\frac{1}{r(1+r)^2}$	2	2	2	2	2	2	2		
2	$\frac{1}{r(1+r^2)}$	2	1.669	1.571	1.526	1.414	1.746	1.774	2.048	1.403
3	$\frac{1}{r(1+\sqrt{r})^4}$	2	2.547	2.667	2.716	2.828	2.466	2.432	1.826	2.835
4	$\frac{1}{r(1+r)^{2.5}}$	1.667	1.769	1.793	1.803	1.826	1.752	1.745	1.633	1.827
5	e^{-r}	1/2	0.865	0.924	0.947	1	0.827	0.810	0.483	1.003
6	$\frac{e^{-r}}{r}$	1	1.316	1.359	1.376	1.414	1.286	1.273	0.996	1.416
7	$\frac{e^{-\sqrt{r}}}{r}$	1	1.731	1.847	1.894	2	1.654	1.621	0.940	2.005
8	$\frac{(1-r)^n}{r}$									
	$n \rightarrow 0$	1	0.637	0.500	0.424	0	0.780	0.811	0.958	0.161
	$n = 1$	1	1	1	1	1	1	1		
	$n = 2$	1	1.103	1.125	1.134	1.155	1.087	1.081	0.970	1.156
	$n = 3$	1	1.155	1.185	1.198	1.225	1.134	1.125	0.951	1.226
	$n \rightarrow \infty$	1	1.316	1.359	1.376	1.414	1.286	1.273	0.996	1.417
9	$1 - r^n$									
	$n \rightarrow 0$	1/2	0.658	0.680	0.688	0.707	0.643	0.637	0.486	0.708
	$n = 1$	1/2	0.551	0.563	0.568	0.577	0.544	0.540	0.512	0.583
	$n = 2$	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2		
	$n = 3$	1/2	0.469	0.461	0.457	0.447	0.476	0.478	0.506	0.446
	$n \rightarrow \infty$	1/2	0.318	0.250	0.212	0	0.390	0.405	0.479	0.081

3. СВЯЗЬ ФАЗЫ И ПОТЕНЦИАЛА

В основу дальнейшего рассмотрения положим уравнение Шредингера для потенциала $V(r)$ и энергии связи $E \geq 0$, в котором наряду с лангеровской заменой переменной $r = e^x$ выполнено преобразование волновой функции [1, с. 30], исключающее появление первой производной (всюду ниже производные берутся по x),

$$\psi'' + [W(x, E) - \lambda^2] \psi = 0. \quad (10)$$

Здесь введены обозначения

$$W(x, E) = W_0(x) - 2Ee^{2x}, \quad W_0(x) = W(x, 0) = 2r^2 V(r) \Big|_{r=e^x}. \quad (11)$$

Это преобразование единственное, обладающее совокупностью двух свойств. Во-первых, влияние производной Шварца сводится лишь к изменению центробежного слагаемого, в то время как в общем случае в уравнение (10) входила бы наряду с $W(x)$ некоторая функция, зависящая от конкретного вида преобразования. Во-вторых, оно переносит особую точку $r = 0$ в $-\infty$, что позволяет единообразно рассматривать обе точки поворота вплоть до значения $E = 0$. Заметим, что только первым свойством обладают также все степенные преобразования, а только вторым (обычно и отмечаемым), например, все преобразования с экспоненциальными асимптотиками.

Величина $\lambda = l + 1/2$ может равняться лишь одному из полупелых положительных чисел, значение же E становится одним из параметров нового потенциала $W(x, E)$ наряду с параметрами, входящими в определение исходного потенциала V (например, зарядом ядра в самосогласованном потенциале атома).

Мы приходим, таким образом, к штурмовской задаче об определении параметров W (включая E), отвечающих одному из заданных значений λ . ВКБ-спектр уравнения (10) определяется стандартным условием

$$\frac{1}{\pi} \int \sqrt{W(x, E) - \lambda^2} dx = n_r + \frac{1}{2} \equiv \nu. \quad (12)$$

Напомним, что интеграл берется по всей области положительности подынтегральной функции. Далее параметр E , как правило, будем опускать.

Перепишем условие (12) в тождественном виде

$$\frac{1}{\pi} \int dx \sqrt{W(x)} = \nu + \Delta(\lambda) \quad (13)$$

и изучим свойства функции Δ , рассматриваемой как функция непрерывного параметра L :

$$\Delta(L) = \frac{1}{\pi} \int dx \left[\sqrt{W(x)} - \sqrt{W(x) - L^2} \right] \equiv \int_0^L \phi(L) dL. \quad (14)$$

Все рассматриваемые ниже потенциалы $W(x)$ имеют единственный максимум при $x = x_{\max}$ (можно считать $x_{\max} = 0$), так что аргумент функции Δ ограничен областью

$$0 \leq L \leq \sqrt{\max_x W(x)}.$$

При $|x| \rightarrow \infty$ потенциалы либо стремятся к нулю на обоих концах оси, либо из-за члена Ee^{2x} в (11) или вида модельного потенциала $V(r)$ становятся отрицательными при больших $x > 0$; область $W(x) < 0$ не дает вклада в интегралы (12)–(14).

Дифференцируя выражение (14) по L , получаем

$$\int \frac{dx}{\sqrt{W(x) - L^2}} = \frac{\pi\phi(L)}{L}. \quad (15)$$

Интеграл (15) пропорционален периоду колебаний в одномерной потенциальной яме $W(x)$ с импульсом $p(x) = \sqrt{W(x) - L^2}$ в классической механике. Это позволяет использовать с некоторыми переобозначениями решение задачи о восстановлении потенциала по известной зависимости периода колебаний от энергии [10, § 12]. Далее удобно ввести приведенные переменные $U(x)$, Λ :

$$0 \leq U(x) = \frac{W(x)}{A^2} \leq 1, \quad 0 \leq \Lambda = \frac{L}{A} \leq 1, \quad A^2 \equiv \max_x W(x, E). \quad (16)$$

Обычно считается, что максимум функции W достигается в точке $x = x_{\max} = 0$.

Для наших потенциалов, монотонных на каждой из полуосей $x < 0$, $x > 0$, однозначно определена координата левого $x_-(U) < 0$ и правого $x_+(U) > 0$ “склонов” потенциальной ямы в симметричном потенциале

$$x_{\pm}(U) = \pm X(U), \quad X(U) = \int_{\sqrt{U}}^1 \frac{d\Lambda \phi(\Lambda)}{\sqrt{\Lambda^2 - U}}. \quad (17)$$

Обращение функции $X(U)$ определяет сам потенциал. Фактически переход от (15) к (17) выполняется заменой переменной с учетом двух “склонов” потенциальной ямы, $dx = dU(dx_-/dU - dx_+/dU) > 0$, и последующим применением уравнения Абеля (ср. вычисления раздела 6).

Кроме того, существует бесконечное (трансфинитное) множество потенциалов, отвечающих той же функции $\phi(\Lambda)$ и получаемых всевозможными деформациями симметричного потенциала, сохраняющими монотонность каждого “склона” и ширину ямы $2X(U)$ при каждом значении U . Назовем такие деформации и соответствующие им функции $\mathcal{D}_{\pm}(U) > 0$ допустимыми. Тогда можно записать

$$\begin{aligned} x_{\pm}(U) &= \pm \mathcal{D}_{\pm}(U) X(U), & \mathcal{D}_+(U) + \mathcal{D}_-(U) &= 2, \\ x_+(U) - x_-(U) &= 2X(U). \end{aligned} \quad (18)$$

Считаем значения $\mathcal{D}_{\pm}$ конечными в точке $U = 1$, что обеспечивает сохранение точки максимума $x_{\max} = 0$. Физически обоснованные потенциалы параболичны вблизи точки $x = x_{\max}$ (это не всегда верно для модельных потенциалов). Сохранение параболичности для деформированных потенциалов тогда заведомо выполняется, если $\mathcal{D}_{\pm}(1) = 1$. К допустимым деформациям относятся также, очевидно, трансляция $x \rightarrow x + y$ с любым y (что соответствует масштабному преобразованию $r \rightarrow re^y$), отражение $x \rightarrow -x$ и произвольное изменение $A > 0$. Таким образом, в действительности каждый потенциал $V(r)$ представляет собой двухпараметрическое семейство с произвольной амплитудой A и масштабным фактором e^y . Как видно из (15), при изменении A функции $\phi(\Lambda)$ и $\Delta(\Lambda)$ действительно являются функциями приведенной переменной Λ .

Итак, возникает естественное разбиение потенциалов на классы $\{\phi(\Lambda)\}$. Конкретный представитель класса характеризуется, кроме фазы $\phi(\Lambda)$, набором величин $(y, \mathcal{D}_+(U), A)$. Для симметричного представителя, возникающего при обращении функции $X(U)$, $\mathcal{D}_+ = \mathcal{D}_- \equiv 1$ (а также $y = 0$, $A = 1$). Различение потенциалов внутри заданного класса рассмотрено в разделе 6.

Моменты потенциала типа (2), (5), (8), выраженные через функцию $W(x)$ или потенциал $U(x)$, имеют вид

$$M_p = \int dx W^{p/2}(x) = A^p \int dx U^{p/2}(x). \quad (19)$$

Интегрируя по частям в формуле (19), получим

$$\frac{M_p}{A^p} = \int_0^1 [x_+(U) - x_-(U)] dU^{p/2} = p \int_0^1 X(U) U^{p/2-1} dU.$$

Внеинтегральные члены $xU^{p/2}$ при $U \rightarrow 0$ исчезают, даже если $x_{\pm} \rightarrow \infty$, т.к. из (17) следует, что при всех конечных $\phi(\Lambda)$ величина $x(U)$ растет не быстрее чем $|\ln U|$. Следующая из (14) замена $x_+ - x_-$ на $2X(U)$ для симметричного представителя явно выражает важное свойство инвариантности моментов в каждом классе $\{\phi(\Lambda)\}$, т.е. их независимости от конкретного представителя класса.

Из вышесказанного следует, что условие квантования (13) относится не к некоторому потенциалу $W(x)$, а к целому классу эквивалентности $\{\phi(\Lambda)\}$, что в явном виде может быть записано как уравнение для определения дискретных значений $A(\lambda, \nu)$:

$$A \int_{\lambda/A}^1 \phi(\Lambda) d\Lambda = \nu, \quad (20)$$

где λ и ν принимают все положительные полуцелые значения. При изменении A значение аргумента на нижнем пределе непрерывно изменяется. Однако при конечных A остается область $\Lambda < 1/2A$, значения $\phi(\Lambda)$ в которой не отражаются на условии (13) или (20).

В классической механике угол поворота траектории Ψ за один оборот в потенциале $V(r)$ с энергией E и моментом L дается формулой [10, с. 48], в наших обозначениях совпадающей с формулой (15) при $\Psi = 2\phi(\Lambda)\pi$. Таким образом, угол Ψ одинаков для всех функций $W(x)$, принадлежащих одному классу $\{\phi(\Lambda)\}$. Выделенным классом является $\phi(\Lambda) = \phi = \text{const}$. Такие потенциалы назовем изогонными, имея в виду независимость угла поворота Ψ от момента.

В этом простейшем, но особо важном в приложениях “эталонном” случае изогонного потенциала интегрированием (17) с $\phi(\Lambda) = \phi = \text{const}$ найдем профиль симметричного представителя

$$\begin{aligned} \pm x_{\pm}(U) &= X(U) = \phi \operatorname{Arch} \frac{1}{\sqrt{U}}, \\ U(x) &= U_{\text{sym}}(x) = \frac{1}{\operatorname{ch}^2(\sigma x)}, \quad \sigma \equiv \frac{1}{\phi}. \end{aligned} \quad (21)$$

В исходных координатах функция

$$V(r) = \frac{1}{r^2[r^\sigma + r^{-\sigma}]^2} \quad (22)$$

представляет семейство потенциалов, точные решения для которых при $E = 0$ известны. Действительно, в точное условие квантования число n входит в сумме с ϕl . Частный случай (22) при $\sigma = 1/2$ (потенциал Тайца [11, табл. 1]) применялся как аппроксимация самосогласованного потенциала атома [12, 13]. Теперь мы видим, что эти потенциалы представляют лишь малую часть всех изогонных потенциалов, получаемых из (21) деформациями (18). Мы вернемся к этому классу потенциалов в разделе 7.

4. МОМЕНТЫ ПОТЕНЦИАЛА И ФАЗЫ

При изучении более сложных потенциалов удобно использовать интегральные преобразования функции $\phi(\Lambda)$. Введем удобные для дальнейших применений моменты фазы

$$\phi_p = p \int_0^1 \Lambda^{p-1} \phi(\Lambda) d\Lambda, \quad (23)$$

отличающиеся от меллиновского образа функции $\phi(\Lambda)$ множителем p . Для изогонных потенциалов интегральный оператор (23) сводится к единичному, т.е. при $\phi(\Lambda) = \phi = \text{const}$ имеем $\phi_p = \phi$ при всех $p \geq 0$. Для определения ϕ_p умножим обе части соотношения (15) на Λ^{p-1} и проинтегрируем по Λ от нуля до единицы. Меняя порядок интегрирования в правой части, найдем

$$\phi_p = \frac{M_p}{A^p m_p}, \quad m_p = B\left(\frac{p}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad (24)$$

где момент M_p задается формулой (19), A определено в (16), а $B(u, v)$ – бета-функция; m_p совпадает со значением момента M_p для изогонного приведенного потенциала (21) с $\sigma = 1$, когда все $\phi_p = 1$.

Из общих свойств преобразования Меллина (или Лапласа при замене $\Lambda = e^{-z}$) следует, что

$$\phi(\Lambda = 0) = \phi_0, \quad \phi(\Lambda = 1) = \phi_\infty. \quad (25)$$

При любых значениях Λ значения $\phi(\Lambda)$ получаются обратным преобразованием ϕ_p/p ; при этом, как видно из (23), функцию $\phi(\Lambda)$ продолжаем нулем вне интервала $(0, 1)$.

Таким образом, класс эквивалентности $\{\phi(\Lambda)\}$ также взаимно однозначно определяется функцией ϕ_p или, что то же, функцией M_p для приведенного потенциала.

В таблице приведены значения $\phi_0, \phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_\infty$ для ряда потенциалов, хорошо демонстрирующие графики соответствующих ϕ_p (при переходе от $V(r)$ к $W(x)$ считается, что $E = 0$). Из явных формул (для потенциалов таблицы интегралы M_p легко берутся аналитически и выражаются через гамма-функции) для ϕ_p видно, что плавный монотонный ход ϕ_p сохраняется и при нецелых значениях p .

Несовпадение любых двух значений ϕ_p означает неизогонность потенциала. Отметим, что практическая близость спектров для изогонного и заданного потенциалов не сводится к оценке разброса значений ϕ_p (см. раздел 5). Как видно, во всех случаях ϕ_0 совпадает с ϕ_{as} из (3). Это явление имеет общий характер и связано с тем, что при $p \rightarrow 0$ значение $M_p \rightarrow \infty$, причем центральная область потенциала дает конечный вклад, а каждая из крайних областей $x \rightarrow \pm\infty$ (т.е. $r \rightarrow \infty, 0$) дает вклады, пропорциональные $\phi_{>}/p$, $\phi_{<}/p$, сингулярность которых компенсируется делением на $m_p \sim 2/p$. Обращает на себя внимание относительно быстрое изменение ϕ_p в области малых p (для неизогонных потенциалов), так что при $p \geq 1$ наблюдается монотонное приближение к ϕ_∞ с небольшим изменением ϕ_p .

Совпадение значений ϕ_p для конечного множества точек, конечно, не гарантирует эквивалентности потенциалов, но может нести важную физическую информацию (см. раздел 5). Исходные моменты M_p , m_p пробегают все значения на полуоси $(0, \infty)$, монотонно спадая по мере роста p . Выбранное нами представление $M_p = \phi_p A^p m_p$ позволяет характеризовать физически актуальные потенциалы плавной “огibaющей” ϕ_p с ограниченной вариацией во всем диапазоне $0 \leq p \leq \infty$ ($\phi_\infty = \lim_{p \rightarrow \infty} \phi_p$). Предельное значение $\phi_\infty = \phi(\Lambda = 1)$ получается методом перевала, примененным к M_p и m_p , в виде

$$\phi_\infty = \sqrt{\frac{2}{|U''(x_{\text{max}})|}}. \quad (26)$$

Модельные потенциалы могут иметь при $U'(x_{\text{max}}) = 0$ разные значения $U''(x_{\text{max}} \pm 0)$, тогда следует взять полусумму радикалов с U'' (малой деформацией U эта особенность устраняется практически без изменения ϕ_p). Для изогонных потенциалов соотношение (26) дает $\phi_\infty = \phi$. Классификация по $\phi(\Lambda)$ или ϕ_p включает и потенциалы с ухудшенными аналитическими свойствами (изломы, скачки, особенности в точке минимума и т.д.) при условии конечности M_p . В таких случаях, однако, константа $1/2$ в формуле (12) может измениться на другую, так что отпадает вопрос об учете поправок следующего по A^{-1} порядка.

5. ОПИСАНИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ МИНИМАЛЬНЫМ ЧИСЛОМ ПАРАМЕТРОВ

Выясним теперь возможности практического описания неизогонных потенциалов минимальным числом параметров.

Выделенными значениями фазы являются ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 , имеющие непосредственный физический смысл. Как следует из раздела 2, эти значения равны соответственно отношению максимального радиального квантового числа, числа оболочек с заданными величинами (n_r, l) и полного числа связанных состояний в данном потенциале и в изогонном потенциале с $\phi = 1$ при равных амплитудах. По существу, к определению этих значений ϕ_p сводятся многие задачи о структуре периодической системы элементов [4].

Рассмотрим потенциалы с совпадающей тройкой значений $\{\phi_k\} \equiv \{\phi_1, \phi_2, \phi_3\}$. Поскольку задание функции $\phi(\Lambda)$ эквивалентно заданию ϕ_p при всех p , то игнорирование

значений ϕ_p с $p \neq 1, 2, 3$, вообще говоря, приводит к включению в $\{\phi_k\}$ потенциалов из разных классов $\{\phi(\Lambda)\}$. Мы увидим, однако, что для физически интересных потенциалов эти классификации практически равнозначны.

Упомянутая в разделе 4 универсальность поведения функции ϕ_p в интервале $p = (1, \infty)$ косвенно указывает на то, что эти значения уже являются асимптотическими для ϕ_p . Вычисляя M_p и m_p по методу перевала, получим для них стандартные разложения по степеням $p^{-(m+1/2)}$, где $m = 1, 2, \dots$, откуда

$$\phi_p = \phi_\infty \left[1 + \frac{a}{p} + \frac{b}{p^2} + \dots \right]. \quad (27)$$

Быстрому достижению асимптотики соответствует случай $a \ll 1$, $b < a$ и т.д. Такое поведение действительно имеет место для отношения гамма-функций $\Gamma(z)$ (входящих во все значения ϕ_p потенциалов таблицы) к их стирлинговской асимптотике.

Естественной (но, разумеется, не единственной) аппроксимацией величины ϕ_p , пригодной во всем диапазоне $(0, \infty)$ и обеспечивающей степенное разложение (27), является дробно-линейная функция, т.е. аппроксимант Паде с тремя параметрами. Отсюда следует и универсальная аппроксимация $\phi(\Lambda)$:

$$\begin{aligned} \phi_p &= \chi + \kappa \frac{\tau}{\tau + p}, \\ \phi(\Lambda) &= \chi + \kappa [1 - \Lambda^\tau]. \end{aligned} \quad (28)$$

Между тройками (ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3) и (χ, κ, τ) существует взаимно однозначное соответствие. Полагая в формулах (28) $p = 1, 2, 3$, решаем получившуюся систему относительно τ , κ , χ :

$$\begin{aligned} \tau &= \frac{4\phi_2 - 3\phi_3 - \phi_1}{\phi_1 + \phi_3 - 2\phi_2}, \\ \kappa &= 2 \frac{(\phi_2 - \phi_1)(\phi_1 - \phi_3)(\phi_3 - \phi_2)}{(4\phi_2 - 3\phi_3 - \phi_1)(\phi_1 + \phi_3 - 2\phi_2)}, \\ \chi &= \phi_1 + \frac{(\phi_2 - \phi_1)(\phi_1 - \phi_3)}{\phi_1 + \phi_3 - 2\phi_2}. \end{aligned} \quad (29)$$

Критерием корректности аппроксимации (28) служит близость вычисленных по (28) предельных значений

$$\tilde{\phi}_0 = \chi + \kappa, \quad \tilde{\phi}_\infty = \chi, \quad (30)$$

где κ , χ определены из (29), к реальным значениям ϕ_0 , ϕ_∞ (24) для всех потенциалов таблицы.

Функции ϕ_p для этих потенциалов аналитичны и конечны в правой полуплоскости по переменной p . Такие функции полностью определяются дискретным рядом значений [14]; подходит, например, ряд ϕ_k при $k = 1, 2, 3, \dots$. Как видим, основная информация сосредоточена в первых трех членах ряда, что соответствует малому изменению ϕ_p в асимптотике (27) при $k > 3$.

Наконец, значительная часть информации сохраняется и в парах вида (ϕ_1, ϕ_3) . Исходя из результатов раздела 3 естественно за меру расстояния между двумя потенциалами принять величину

$$\rho(U_1, U_2) = \int_0^1 d\Lambda [\Delta_1(\Lambda) - \Delta_2(\Lambda)]^2 \quad (31)$$

с функциями Δ (14), вычисленными на этих потенциалах. Взяв для заданного потенциала U_1 в качестве аппроксимирующего изогонный потенциал с $\Delta_2 = \bar{\phi}\Lambda$, минимизируя расстояние ρ по $\bar{\phi}$, получим оптимальное значение

$$\bar{\phi} = \frac{3\phi_1 - \phi_3}{2}, \quad (32)$$

где ϕ_1, ϕ_3 — фазы ϕ_p (24) потенциала U_1 . С точностью до малых членов порядка $(\phi_1/\phi_3 - 1)^2$ значение (32) совпадает со значением $\phi_{1,3}$ (6), полученным из иных соображений.

Использование функции $\phi_{1,3}$, непосредственно связанной с полным числом состояний, особенно удобно в случае самосогласованных потенциалов. Полное число электронов Z в атоме выразим через оценку $\bar{N}_3$ (4), удвоенную из-за спинового вырождения: $Z = 2\bar{N}_3$. Подставляя в условие квантования (2) $\phi \equiv \phi_{1,3}$ и Φ , выраженное через Z и $\phi_{1,3}$ согласно (6), получаем уравнение

$$\left(\frac{3}{2}\phi_{1,3}^2\right)^{1/3} Z^{1/3} = \nu + \phi_{1,3}\lambda \quad (33)$$

с одним параметром $\phi_{1,3}$. Уравнение (33) определяет в данном приближении структуру периодической системы элементов. В разделе 2 приведены две независимые оценки $\phi_{1,2}$ и $\phi_{1,3}$ для фазы в предположении линейности правой части уравнения (33) по квантовым числам. Их близкое совпадение для всех типичных модельных потенциалов таблицы, что можно представить условием

$$\left|1 - \frac{\phi_1\phi_3}{\phi_2^2}\right| \ll 1,$$

косвенно означает малость нелинейных по ν, λ поправок в (33). Это справедливо для потенциалов, имеющих разную гладкость и разные асимптотики (в том числе для стандартного томас-фермиевского потенциала [9, § 70]), и соответствует реальной ситуации. Задавшись формой потенциала, можно уточнить оценку посредством аппроксимации (28).

В работе [4] получен узкий интервал допустимых значений постоянной фазы исходя из реальной периодической системы элементов. При сравнении необходимо в (33) считать $\phi_{1,3} = 1 + (\beta - 2)^{-1}$, где β — приведенные в [4] значения показателя асимптотики (1). Наряду со степенными потенциалами (строка № 4 в нашей таблице), к которым относятся потенциал работы [4] и томас-фермиевский потенциал, в этот интервал попадает и быстроспадающий потенциал № 7 нашей таблицы, соответствующая которому

томас-фермиевская электронная плотность успешно применялась в вариационных расчетах атома [6, с. 123].

Таким образом, наилучшее приближение к реальному условию квантования, линейное по λ и пригодное во всем диапазоне изменения λ , определяется именно значением $\phi_{1,3}$. Заметим, что значение $\phi_{1,3}$ не может быть найдено априори и для потенциалов таблицы равно ϕ_p при некотором $p < 1$.

6. РАЗЛИЧИЕ ПОТЕНЦИАЛОВ ВНУТРИ КЛАССА ЭКВИВАЛЕНТНОСТИ

Как показано выше, по заданной функции $\phi(\Lambda)$ восстанавливается профиль симметричного представителя класса (17). Для различения потенциалов внутри класса можно было бы использовать функцию деформации $\mathcal{D}_+(U)$ из (18). Целесообразно, однако, маркировать потенциалы функцией, непосредственно входящей в уточненное условие ВКБ-квантования. Такое условие, удерживающее пропорциональную $\hbar^2$ поправку [1, с. 112; 6, с. 471], в наших обозначениях принимает вид

$$A\phi_1 = \nu + A\Delta(\Lambda) + \frac{1}{24\pi} \frac{R(\Lambda^2)}{A},$$

$$R(\mu) = \frac{d^2}{d\mu^2} I(\mu), \quad I(\mu) = \int \frac{dx}{\sqrt{U(x) - \mu}} \left(\frac{dU}{dx} \right)^2. \quad (34)$$

Безразмерным параметром разложения является величина A^{-1} , причем A пропорционально $\nu_{\max}$ согласно (20). Здесь для краткости записи положено $\Lambda^2 = \mu$ и использована форма поправки $I(\mu)$ из книги [6]. Нам необходимо показать, что функция $I(\mu)$ вместе с (18) однозначно определяет потенциал $U(x)$. Для этого перейдем в $I(\mu)$ к переменной U , рассматривая I как сумму интегралов по левому ($x < 0$) и правому ($x > 0$) “склонам” потенциальной ямы,

$$I(\mu) = \int_{\mu}^1 \frac{dU}{\sqrt{U - \mu}} g(U), \quad (35)$$

где

$$g(U) = -\frac{1}{\frac{dx_+}{dU}} + \frac{1}{\frac{dx_-}{dU}}$$

(оба вклада в $g(U)$ положительны и совпадают для симметричного представителя). Дифференцируя по U равенство (18), при заданных $X(U)$ и $g(U)$ получаем два уравнения для двух функций $dx_{\pm}/dU$, что однозначно определяет их, а с ними и профиль $U(x)$. Отметим, что при всех допустимых деформациях неизменно поведение $g(U)$ у дна ямы; согласно формуле (26) здесь $U = 1 - x^2/\phi_{\infty}$, что по (35) дает

$$g(U) \rightarrow \frac{4}{\phi_{\infty}} \sqrt{1 - U}, \quad U \rightarrow 1. \quad (36)$$

Поскольку всегда $g(1) = 0$, то и $I(1) = 0$. Для решения уравнения (35) относительно $g(U)$ воспользуемся уравнением Абеля [15]

$$z(\eta) = \int_0^\eta \frac{y(\zeta) d\zeta}{\sqrt{\eta - \zeta}}, \quad y(\eta) = \frac{d}{d\eta} \frac{1}{\pi} \int_0^\eta \frac{z(\zeta) d\zeta}{\sqrt{\eta - \zeta}},$$

к которому приводится уравнение (35) заменой $1 - \mu = \eta$, $1 - U = \zeta$. С учетом того что $I(\eta = 0) = 0$, получим

$$g(U) = \frac{1}{\pi} \int_U^1 \frac{d\mu I'(\mu)}{\sqrt{\mu - U}}. \quad (37)$$

Таким образом, по заданному значению $I(\mu)$ однозначно определяется значение $g(U)$, а с ним и $U(x)$ в заданном классе (в разных классах $\phi(\Lambda)$ одной функции $g(U)$ соответствуют разные $U(x)$).

Более того, как видно из (34), неоднозначность связи $R(\mu)$ и $I(\mu)$ может в силу условия $I(1) = 0$ заключаться только в добавлении к I линейного члена $d(1 - \mu)$. Будучи подставлен в формулу (37), этот член даст как раз вклад в функцию $g(U)$ вида (36), что и определяет коэффициент d в каждом классе. Поэтому для однозначного фиксирования $U(x)$ в каждом классе пригодны на равных правах функции $I(\Lambda^2)$, $R(\Lambda^2)$ или $g(U)$. Наиболее удобно использование функции $R(\Lambda^2)$, как непосредственно определяющей поправку в (34) и не зацепляющейся с вкладом (37) в $g(U)$, фиксируемым классом эквивалентности.

Подведем итог полученным результатам. Мы классифицировали потенциалы с конечным значением $\nu_{\max}$ в (34) (что равнозначно условию $M_p < \infty$ при всех $p \neq 0$) и достаточно гладкие для конечности $R(\Lambda^2)$ из (34). Каждый потенциал $U(x)$ приведен во взаимно однозначное соответствие с парой функций $\{\phi(\Lambda), R(\Lambda^2)\}$ или, что то же, с парой $\{\phi_p, R(\Lambda^2)\}$. Эти функции выбраны так, что непосредственно входят в условие ВКБ-квантования.

Функция $\phi(\Lambda)$ (или ϕ_p) определяет классы эквивалентности потенциалов. В главном приближении ВКБ такие потенциалы приводят к тождественным спектрам, схемам заполнения уровней и т.д. Внутри класса потенциалы отличаются функциями $R(\Lambda^2)$; соответствующая им поправка в условии квантования убывает с ростом амплитуды потенциала. Можно сказать, что функция $R(\Lambda^2)$ описывает некоторое “квантовое размытие” классического потенциала. В частности, в каждом классе имеется “наиболее классический” потенциал с $R(\Lambda^2) \equiv 0$.

Асимптотическую симметрию класса потенциала можно определить по симметрии “наиболее классического” потенциала с $R \equiv 0$, при необходимости учитывая R как возмущение. Например, потенциалы Ленца имеют в таком подходе ту же симметрию, что и кулоновский потенциал. Фактически это и получено в статье [16] иным путем, без привлечения идей ВКБ.

7. ПРИМЕНЕНИЕ РАЗВИТОГО ПОДХОДА

Применим развитый выше подход для изучения “эталонного” класса изогонных потенциалов и сделаем сравнение с точными результатами.

Для симметричного представителя (21) нетрудно по (34) найти значение $R(\Lambda^2) = -3\pi/\phi$, что дает вместе с равенствами $\Delta(\Lambda) = \phi\Lambda$ и $\phi_1 = \phi$ уточненное условие квантования

$$A\phi = \nu + A\Delta\left(\frac{\lambda}{A}\right) + \frac{1}{24\pi} \frac{R(\Lambda^2)}{A} = \nu + \phi\lambda - \frac{1}{8A\phi}. \quad (38)$$

Сравним условие (38) с точным уравнением для появления новых состояний с квантовыми числами $\nu = n + 1/2$; $\lambda = l + 1/2$ (заметим, что для этого не требуются громоздкие решения уравнения Шредингера с потенциалом (22), приведенные в [16]; достаточно воспользоваться с нужными переобозначениями решениями [9, с. 99] уравнения Шредингера с потенциалом (21)):

$$\sqrt{A^2\phi^2 + \frac{1}{4}} = \nu + \phi\lambda. \quad (39)$$

Сохраняя в (38) и (39) только главные, линейные по A и не зависящие от A члены, получим совпадение условий; относительная малость дополнительного члена под радикалом (39) обеспечивает малость поправок даже при $n, l \sim 1$. Заметим, что первый поправочный член разложения радикала (39) как раз дает в данном случае поправку R в (38). Таким образом, потенциалы Ленца очень хорошо описываются введенными классами $\{\phi, R\}$. Пренебрежение R , что соответствует отбрасыванию $1/4$ в (39), приведет к относительной погрешности $1/(8A^2\phi^2)$, малой при $A \geq 1$.

Простейшей модификацией симметричного представителя (21) является деформация (18) с $\mathcal{D}_{\pm} = 1 \pm \delta$, $\delta(U) \equiv \text{const}$, приводящая к семейству

$$W(x) = \frac{1}{\text{ch}^2 \sigma_{-} x}, \quad x < 0; \quad W(x) = \frac{1}{\text{ch}^2 \sigma_{+} x}, \quad x > 0; \quad \frac{1}{\sigma_{+}} + \frac{1}{\sigma_{-}} = 2\phi \quad (40)$$

с любыми постоянными $\sigma_{\pm} > 0$ (скачок второй производной, когда $x \rightarrow \pm 0$, при необходимости ликвидируется малым изменением $\mathcal{D}_{\pm}(U)$). Потенциалы (40), будучи выражены в первоначальной переменной, актуальны как пробные с варьируемыми параметрами σ_{+} , A и масштабом $r \rightarrow r/\varrho$ в задачах статистической теории атома.

Нетрудно найти для (40) величину

$$R(\Lambda^2) = -\frac{3\pi}{(1 - \delta^2)\phi}. \quad (41)$$

Теперь у нас нет аналитических решений (40), но условия (38), (41) дают достаточно точные решения при всех δ , не слишком близких к единице. Условие малости $R(\Lambda^2)/A$ позволяет контролировать погрешность в зависимости от $A(1 - \delta^2)$.

Найдем изогонный потенциал, для которого $R(\Lambda^2) \equiv 0$. В этом случае поведение $g(U)$, описываемое формулой (36), справедливо при всех U . Исключая из (18), (35) одну из функций $dx_{\pm}/dU$, находим

$$U(x) = e^{\sigma x}(2 - e^{\sigma x}), \quad \sigma = \frac{1}{\phi}. \quad (42)$$

Потенциал (42) отличается от (21) или (40) тем, что при $\sigma x > \ln 2$ он пересекает ось $U = 0$, т.е. при обычных обозначениях образует барьер. При $x \rightarrow -\infty$ этот потенциал по-прежнему стремится к нулю. Очевидно, что инверсия $x \rightarrow -x$ или сдвиг $x \rightarrow x + y$ сохраняет значение $R(\Lambda^2) \equiv 0$. Используя решение для потенциала Морса (42) [9, с. 98], получим абсолютное совпадение ВКБ-условия появления новых уровней $A\phi = \nu + \lambda$ с соответствующим точным условием.

Возвращаясь от (42) к первоначальной переменной согласно (11) при $\sigma = 1$, получим потенциал $1/r - 1/2$, т.е. кулоновский потенциал притяжения с $Z = 1$ и энергией связи $E = 1/2$. Допустимые деформации позволяют изменить как Z , так и E , не выходя из класса эквивалентности.

Аналогично при $\sigma = 2$ имеем потенциал $1 - r^2/2$, т.е. осцилляторный потенциал с энергией $E = -1$. В данном случае знак энергии связи оказался отрицательным, т.к. уровни разбегаются по мере роста квантовых чисел (в отличие от атомных потенциалов) и невозможно отсчитывать их от предельного значения, приписав ему $E = 0$.

Изогонность только кулоновского и осцилляторного потенциалов при всех энергиях связи обусловлена в конечном счете тем, что лишь при $\sigma = 1$ или $\sigma = 2$ одно из слагаемых (42) принимает вид энергетической добавки Ee^{2x} в преобразованном потенциале $W(x, E)$ (11).

Независимость для этих потенциалов функции $\phi(\Lambda, E)$ как от Λ , так и от E обеспечивает совпадение ВКБ-спектров с точными, а также независимость угла поворота классических траекторий от момента и энергии. При этом значения фаз обеспечивают известную замкнутость траекторий.

Для потенциалов же иного вида необходимо учесть в полученных выше условиях квантования и схемах аппроксимации зависимость функций $A(E)$, $M_p(E)$, $\phi_p(E)$ и $\phi(\Lambda, E)$ от E как от параметра. Удобно использовать функции $\phi_1(E)$, $\phi_2(E)$, $\phi_3(E)$, т.к. они определяются всей областью интегрирования и потому являются плавными функциями энергии.

В то же время расходимость величины M_p (19) при $p \rightarrow 0$ и $E = 0$ обуславливает зависимость предельного значения

$$\phi_p(E) = (\phi_> + \phi_<) - \phi_> E^{p\gamma}, \quad \gamma = \frac{\beta - 2}{2\beta} > 0,$$

с фазами $\phi_>$, $\phi_<$ из (3) от порядка выполнения предельных переходов $p \rightarrow 0$ и $E \rightarrow 0$.

Вышеразвитые методы описания потенциала непосредственно переносятся на случай быстроспадающих одномерных потенциалов, если считать исходным уравнение (10) с $E = 0$ и величиной λ^2 , приобретающей теперь смысл непрерывно меняющейся энергии связи.

Использование вместо потенциала его преобразования $(\phi(\Lambda), R(\Lambda^2))$ возможно не только в методах ВКБ, но и в других квантово-механических расчетах, а также в задачах классической механики. Так, в последнее время интенсивно развиваются методы расчета спектра в потенциалах, не допускающих аналитических решений: осцилляторное приближение [17], применение интегральных преобразований с последующим сведе-

нием задачи к алгебраической [18] и т.д. Точность предложенного в нашей статье метода позволяет даже без учета поправки R использовать его в данном круге задач.

Список литературы

- [1] *М. В. Федорюк*. Асимптотические методы для линейных обыкновенных дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1983.
- [2] *В. А. Фок*. УФН. 1936. Т. 16. С. 1070.
- [3] *Б. Н. Захарьев*. Уроки квантовой интуиции. Дубна: ОИЯИ, 1996.
- [4] *Ю. В. Тарбеев, Н. Н. Трунов, А. А. Лобашев, В. В. Кугарь*. ЖЭТФ. 1997. Т. 112. С. 1226.
- [5] *М. С. Маринов, В. С. Попов*. ЖЭТФ. 1974. Т. 67. С. 1250.
- [6] *В. М. Галицкий, Б. М. Карнаков, В. И. Коган*. Задачи по квантовой механике. М.: Наука, 1992.
- [7] *М. Рид, Б. Саймон*. Анализ операторов. Методы современной математической физики. Т. 4. М.: Мир, 1982.
- [8] *B. Simon*. On the number of bound states of two-body Schrödinger operators. In: Studies in Mathematical Physics: Essays in honor of V. Bargmann. Eds. E. Lieb, B. Simon, A.S. Wightman. Princeton: Princeton Univ. Press, 1976. P. 305.
- [9] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*. Квантовая механика. Теоретическая физика. Т. 3. М.: Наука, 1989.
- [10] *Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц*. Механика. Теоретическая физика. Т. 1. М.: Наука, 1988.
- [11] *T. Tietz*. J. Chem. Phys. 1954. V. 22. P. 2094; Nuovo Cimento. 1955. V. 1. P. 955.
- [12] *Ю. Н. Демков, В. Н. Островский*. ЖЭТФ. 1972. Т. 62. С. 125.
- [13] *V. N. Ostrovsky*. J. Phys. B. 1981. V. 14. P. 4425.
- [14] *М. А. Евграфов*. Асимптотические оценки и целые функции. М.: Наука, 1979.
- [15] *М. А. Евграфов*. Аналитические функции. М.: Наука, 1968.
- [16] *Ю. Н. Демков, В. Н. Островский*. ЖЭТФ. 1971. Т. 60. С. 2011.
- [17] *М. Динейхан, Г. В. Ефимов*. ЭЧАЯ. 1995. Т. 26. № 3. С. 651.
- [18] *А. С. Вишневцев, В. О. Галкин, А. В. Татаринцев, Р. Н. Фаустов*. ТМФ. 1997. Т. 113. № 3. С. 397.

Поступила в редакцию 13.I.1999 г.