ЖУРНАЛ ФІЗИЧНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ
т. 10, № 1 (2006) с. 1–11

JOURNAL OF PHYSICAL STUDIES
v. 10, No. 1 (2006) p. 1–11

ДВОВИМІРНА ЗАДАЧА ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ ПРИ МАЛИХ МІЖЦЕНТРОВИХ ВІДСТАНЯХ

Д. Бондар[1], В. Лазур[1], М. Гнатіч[2]
[1] *Фізичний факультет Ужгородського національного університету,*
вул. Волошина, 54, Ужгород, 88000, Україна
dbondar@univ.uzhgorod.ua,
lazur@univ.uzhgorod.ua,
[2] *Institute of Experimental Physics Slovak Academy of Sciences,*
Watsonova 47, 043 53 Košice, Slovakia
hnatic@saske.sk

(Отримано 10 січня 2005 р.; в остаточному вигляді — 22 березня 2006 р.)

На основі методу відокремлення змінних визначено еліптичний інтеґрал руху в плоскій задачі двох кулонівських центрів $(Z_1eZ_2)_2$. Асимптотичними методами проаналізовано дискретний спектр задачі $(Z_1eZ_2)_2$ в межі об'єднаного атома ($R \ll 1$). Отримано асимптотичні розклади для квантового дефекту та енерґетичних термів системи $(Z_1eZ_2)_2$ при малих міжцентрових відстанях R з точністю до членів $O\left(R^6\right)$. Вивчено питання про вплив фактора розмірности на енерґетичний спектр молекулярного йона водню H_2^+.

Ключові слова: конфлюентне рівняння Гойна, функції Матьє, рівняння Айнса.

PACS number(s): 02.60.Lj, 02.30.Mv, 02.30.Gp, 03.65.Ge

I. ВСТУП

Поведінка воднеподібного атома (e, Z_1) поверхневого шару в полі сусіднього заряду Z_2 характеризується гамільтоніяном (в атомній системі одиниць, $e = \hbar = m = 1$)

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

плоскої задачі двох кулонівських центрів (скорочено задача $(Z_1eZ_2)_2$); тут $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$, $\mathbf{r}$ — двовимірні радіус-вектори електрона, які відраховуються від ядер і середини між'ядерної відстані R відповідно, а $\Delta_{\mathbf{r}}$ - двовимірний оператор Лапласа за декартовими координатами x, y електрона: $\mathbf{r} = (x, y)$. Зауважимо, що у вибраній системі одиниць одиницею довжини буде радіус Бора. Унікальна властивість задачі $(Z_1eZ_2)_2$ — можливість розділення змінних в еліптичних координатах — дає змогу звести її до розв'язку двох звичайних диференціяльних рівнянь класу Гойна [1–3].

Якщо заряд одного із центрів покласти рівним нулеві, тоді плоска система $(Z_1eZ_2)_2$ переходить у двовимірний воднеподібний атом. Це значно спрощує задачу. Ґрунтовно проаналізовано двовимірний атом водню в полярній, параболічній і еліптичній системах координат у працях [4–6]. Прихована симетрія та міжбазисні розклади в названій двовимірній моделі розглянуто пізніше в статті [7].

Двовимірна задача $(Z_1eZ_2)_2$ є зручним об'єктом для дослідження багатьох питань, які виникають при вивченні поверхневих явищ у конденсованих середовищах, а також деяких дефектів у твердих тілах [8]. Не виключається також можливість того, що до цієї задачі може привести відокремлення змінних у рівнянні Шрединґера, яке описує фізичні системи в просторах довільної розмірности (див., наприклад, [9]). Із порівняння енерґетичних спектрів та густини розподілу ймовірностей дво- та тривимірного йона молекули водню H_2^+ легко встановити роль фактора розмірности для двоцентрових систем та його вплив на фізичні спостережувані закономірності.

Але не зважаючи на зрозумілий інтерес до цієї задачі, її досі, наскільки відомо авторам, майже не вивчали [10]. Не існують і, найімовірніше, не можуть існувати загальні методи аналітичного розв'язку задачі $(Z_1eZ_2)_2$ при довільних значеннях параметрів Z_1, Z_2, R та квантових чисел — на такий висновок наштовхують результати вивчення [1] власних функцій краєвої задачі, яка породжена диференціяльними рівняннями класу Гойна. Визнання цього факту приводить до розуміння важливости асимптотичних розкладів розв'язків двовимірної задачі при великих ($R \gg 1$) та малих ($R \ll 1$) міжцентрових відстанях.

Ця праця присвячена аналізові асимптотичними методами дискретного спектра плоскої задачі двох кулонівських центрів у межі об'єднаного атома ($R \ll 1$). Ці методи базуються на тих або інших варіянтах теорії збурень (див. [1,11]) та систематичному використанні властивостей симетрії двовимірної моделі $(Z_1eZ_2)_2$. Усі характерні технічні прийоми та алґоритми побудови асимптотичних розв'язків в околі особливих точок будуть продемонстровані на прикладі доволі специфічних для цієї моделі явищ типу примежового шару (див., напр., [12], роз. 1.3). Зазначені особливості обґрунтовуються дуже складною поведінкою хвильової функції поблизу кожного з ядер.

Праця побудована так. У розділі II подано потрібну для подальшого розгляду інформацію про еліптичну систему координат. Також методом відокремлення змінних знайдено еліптичний інтеґрал руху. В розділі III отримано асимптотичні формули для власних значень константи відокремлення кутового рівняння (2.4) при $R \to 0$ з точністю до членів порядку $O\left(p^6\right)$. Процедура побудови асимптотичних розкладів розв'язків радіяльного рівняння (2.3) при малих R викладена в четвертому розділі. Поблизу кожної особливої точки ($\xi = 1$ та $\xi = \infty$) побудовано асимптотичний розклад розв'язку, який задовольняє радіяльне рівняння з точністю до малих членів. У V розділі отримано асимптотичні розклади для квантового дефекту та енерґетичних термів системи $(Z_1 e Z_2)_2$ при малих R з точністю до членів $O\left(R^6\right)$. Обчислення наступних членів розкладів досить громіздкі та неможливі без використання системи символьних обчислень Maple [13] або її аналогів. Розклади за степеням малого розмірного параметра R надають знайденим формулам для енерґії системи $(Z_1 e Z_2)_2$ вельми наочний вигляд та дозволяють отримати кількісне пояснення деяких важливих фізичних ефектів [1,11]; із деякими з них ми ознайомимося в останньому розділі.

II. ФОРМУЛЮВАННЯ ЗАДАЧІ

Двовимірна задача двох кулонівських центрів у квантовій механіці полягає у визначенні власних хвильових функцій та власних значень гамільтоніяна $\widehat{H}$ електрона в полі двох нерухомих ядер Z_1 та Z_2, які перебувають у площині електронного руху xy на відстані R один від одного. У безрозмірних змінних рівняння Шрединґера задачі $(Z_1 e Z_2)_2$ має вигляд

$$\widehat{H}\Psi(\mathbf{r};R) \equiv \left(-\frac{1}{2}\Delta_{\mathbf{r}} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}\right)\Psi(\mathbf{r};R) = E\Psi(\mathbf{r};R). \tag{2.1}$$

Надалі будемо вважати, що двовимірний вектор $\mathbf{r}$ заданий у плоскій еліптичній системі координат (u, ν) з початком у центрі відрізка R та фокусами на його кінцях:

$$\cosh u = (r_1 + r_2)/R, \qquad \cos\nu = (r_1 - r_2)/R.$$

Із цих співвідношень випливає, що координатні лінії $u = \text{const}$ та $\nu = \text{const}$ становлять собою дві сім'ї еліпсоїдів та гіпербол зі спільними фокусами в точках $(-R/2, 0)$ і $(R/2, 0)$.

Еліптичні координати є найзагальнішими ортогональними координатами на площині. Вони включають розмірний параметр R, при прямуванні якого до нуля ($R \to 0$) або до нескінченности ($R \to \infty$) еліптичні координати вироджуються в полярні та параболічні [6].

Прямокутні координати електрона (x, y) пов'язані з еліптичними координатами (u, ν) формулами:

$$x = \frac{R}{2}\cosh u \cos\nu, \qquad y = \frac{R}{2}\sinh u \sin\nu, \qquad 0 \le u < \infty, \qquad 0 \le \nu < 2\pi. \tag{2.2}$$

Часто, замість координат u, ν, за допомогою тригонометричних підстановок уводять змінні ξ, η

$$\xi = \cosh u, \quad 1 \le \xi < \infty, \quad \eta = \cos\nu, \quad -1 \le \eta \le 1.$$

Еліптичні координати є природним інструментом вивчення плоскої задачі двох кулонівських центрів. Підстановка $\Psi(\mathbf{r};R) = \Pi(u)\Xi(\nu)$ зводить рівняння в частинних похідних (2.1) до двох звичайних диференціяльних рівнянь

$$\left[\frac{d^2}{du^2} + 2p\alpha\cosh u - p^2\left(\cosh^2 u - 1\right) - \lambda\right]\Pi(p,\alpha;u) = 0, \tag{2.3}$$

$$\left[\frac{d^2}{d\nu^2} + 2p\beta\cos\nu - p^2\left(1 - \cos^2\nu\right) + \lambda\right]\Xi(p,\beta;\nu) = 0, \tag{2.4}$$

у яких λ — константа відокремлення в еліптичних координатах, а

$$p = (R/2)(-2E)^{1/2}, \quad \alpha = (Z_2 + Z_1)(-2E)^{-1/2}, \quad \beta = (Z_2 - Z_1)(-2E)^{-1/2}. \tag{2.5}$$

Можливість відокремлення змінних у двовимірній задачі $(Z_1 e Z_2)_2$ в еліптичних координатах зумовлена існуванням додаткового еліптичного інтеґрала руху $\widehat{\Lambda}$. Покажемо це, побудувавши інтеґрал $\widehat{\Lambda}$ за допомогою наведених вище звичайних диференціяльних рівнянь (2.3), (2.4). Виключивши з них енерґетичний параметр p^2, отримаємо вираз для оператора $\widehat{\Lambda}$ у диференціяльній формі:

$$\widehat{\Lambda} = \frac{1}{\cosh^2 u - \cos^2\nu}\left[\sin^2\nu\frac{\partial^2}{\partial u^2} - \sinh^2 u\frac{\partial^2}{\partial\nu^2} + 2p\alpha\cosh u\sin^2\nu - 2p\beta\cos\nu\sinh^2 u\right]. \tag{2.6}$$

Власним значенням цього оператора є константа відокремлення λ, а власними функціями — розв'язки рівняння (2.1). Оператор $\widehat{\Lambda}$ комутує з гамільтоніяном $\widehat{H}$ задачі $(Z_1eZ_2)_2$, тому оператори $\widehat{H}$ та $\widehat{\Lambda}$ можуть бути діягоналізовані одночасно. Це представлення й відповідає відокремленню змінних в еліптичних координатах.

Для рівнянь (2.3), (2.4) зручно розглянути крайові задачі з умовами обмежености функцій $\Pi(p,\alpha;u)$, $\Xi(p,\beta;\nu)$ на кінцях відповідних проміжків, уважаючи p, α, β – незалежними параметрами, а $\lambda_u(p,\alpha)$, $\lambda_\nu(p,\beta)$ – спектральними параметрами. Власні функції таких задач будемо називати відповідно радіяльними та кутовими кулонівськими еліптичними функціями (РКЕФ, ККЕФ). Пара одновимірних крайових задач для РКЕФ і ККЕФ еквівалентна початковій задачі (2.1) при умові рівности власних значень $\lambda_u(p,\alpha) = \lambda_\nu(p,\beta) = \lambda$ із урахуванням зв'язку p, α, β з параметрами E, Z_1, Z_2, R.

Для побудови асимптотичних розкладів задачі $(Z_1eZ_2)_2$ при малих міжцентрових відстанях R нам потрібні такі розклади РКЕФ $\Pi(p,\alpha;u)$ і ККЕФ $\Xi(p,\beta;\nu)$ за малим параметром p:

$$\Pi(p,\alpha;u), \qquad p\to 0, \tag{2.7}$$
$$\Xi(p,\beta;\nu), \qquad p\to 0. \tag{2.8}$$

Розклади (2.8) можна побудувати за допомогою звичайної теорії збурень за малим параметром p (див., наприклад, [11]). Складнішим виявляється асимптотичний аналіз радіяльного рівняння (2.3). Ускладнення пов'язане з наявністю в рівнянні (2.3) двох різних масштабів відстаней (один з яких — масштаб примежового шару). Наявність двох масштабів указує на складну структуру розкладів енерґії та константи відокремлення за малим параметром p. Кінцеві результати (див. розділ V) містять члени двох різних типів: звичайні степеневі ряди за R та логарифмічні члени, які вказують, що енерґія не є аналітичною функцією R. Ситуація подібна до тієї, що характерна для традиційної тривимірної задачі Z_1eZ_2 [14].

Наші дослідження радіяльного рівняння (2.3) базуються на праці [14], у якій уперше вивчено асимптотики кулонівських сфероїдальних функцій при малому скейлінґовому параметрі p. Систематичне застосування цієї техніки до граничних задач для рівнянь класу Гойна див. у праці [15] та монографії [1].

III. АСИМПТОТИЧНІ РОЗКЛАДИ ККЕФ І КОНСТАНТИ ВІДОКРЕМЛЕННЯ

Рівняння (2.4) належить до класу звичайних диференціяльних рівнянь із періодичними коефіцієнтами. За допомогою підстановки

$$\Xi(p,\beta;\nu) = e^{-p\cos\nu}W(p,\beta;\nu) \tag{3.9}$$

і заміни змінних $\nu = 2\zeta$ воно зводиться до рівняння Айнса [16]

$$\left[\frac{d^2}{d\zeta^2} + 4p\sin(2\zeta)\frac{d}{d\zeta} + 4p(1+2\beta)\cos(2\zeta) + 4\lambda_\nu\right] \times W(p,\beta;\nu) = 0. \tag{3.10}$$

У загальному випадку фізично допустимі розв'язки рівняння (3.10) можна розкласти у тригонометричні ряди

$$W_l^{(+)}(\nu) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n\cos(2n\zeta), \qquad (l\geq 0), \tag{3.11}$$
$$W_l^{(-)}(\nu) = \sum_{n=0}^{\infty} b_n\sin[(2n+2)\zeta], \qquad (l\geq 1). \tag{3.12}$$

Функції $W_l^{(+)}(\nu)$ та $W_l^{(-)}(\nu)$ у цих розкладах є відповідно парними або непарними щодо заміни $\nu\to-\nu$.

Підставляючи розклади (3.11) у рівняння (3.10), після деяких елементарних перетворень отримуємо тричленні рекурентні співвідношення між коефіцієнтами a_n:

$$\begin{aligned}
&2\lambda_{\nu l}^{(+)}a_0 + p(2\beta-1)a_1 = 0,\\
&2p(2\beta+1)a_0 + 2\left(\lambda_{\nu l}^{(+)}-1\right)a_1 + p(2\beta-3)a_2 = 0,\\
&p(2\beta+2n-1)a_{n-1} + 2\left(\lambda_{\nu l}^{(+)}-n^2\right)a_n\\
&+p(2\beta-2n-1)a_{n+1} = 0, \qquad (n\geq 2).
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Скінченні у всіх точках фізичної ділянки (2.2) та періодичні з періодом 2π розв'язки $W_l^{(\pm)}(\nu)$ рівняння (3.10) існують тільки при певних значеннях констант відокремлення $\lambda_\nu = \lambda_{\nu l}^{(\pm)}(p,\beta)$. Асимптотичні розклади для коефіцієнтів a_n, b_n та власних значень $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$ в наближенні об'єднаного атома ($p\to 0$) можна побудувати за допомогою варіянта теорії збурень, викладеного в праці [14]. Процедура побудови коефіцієнтів a_n розкладу (3.11) базується на формальному ряді

$$a_n = p^{|n-l|}\sum_{j=0}^{\infty}[a_n]_{2j}\,p^{2j}, \qquad a_l = 1. \tag{3.14}$$

Аналогічні розклади за степенями малого параметра p будемо використовувати і для власних значень константи відокремлення:

$$\lambda_{\nu l}^{(+)} = \sum_{j=0}^{\infty}\left[\lambda_{\nu l}^{(+)}\right]_{2j}p^{2j}. \tag{3.15}$$

Підставляючи розклади (3.14), (3.15) у (3.13) та прирівнюючи до нуля коефіцієнти при однакових степенях p, ми отримуємо систему рівнянь щодо коефіцієнтів $[a_n]_{2j}$, $\left[\lambda_{\nu l}^{(+)}\right]_{2j}$. Розв'язання цієї системи зводиться до рекурентної алґебраїчної процедури, яка дає змогу визначити як коефіцієнти $[a_n]_{2j}$ розкладу (3.14), так і коефіцієнти $\left[\lambda_{\nu l}^{(+)}\right]_{2j}$ розкладу (3.15) власних значень $\lambda_{\nu l}^{(+)}$ за малим параметром p. Наведемо тут лише частину отриманих результатів:

$$\lambda_{\nu 0}^{(+)} = -\frac{1}{2}\left(4\beta^2-1\right)p^2 + \frac{1}{32}\left(4\beta^2-1\right)\left(28\beta^2+1\right)p^4 + O\left(p^6\right), \tag{3.16}$$

$$\lambda_{\nu 1}^{(+)} = 1 + \left(\frac{5}{3}\beta^2+\frac{1}{4}\right)p^2 + \left(-\frac{763}{216}\beta^4+\frac{121}{144}\beta^2-\frac{1}{128}\right)p^4 + O\left(p^6\right), \tag{3.17}$$

$$\lambda_{\nu 2}^{(+)} = 4 + \left(\frac{2}{15}\beta^2+\frac{1}{2}\right)p^2 + \left(\frac{433}{13500}\beta^4-\frac{31}{360}\beta^2+\frac{5}{192}\right)p^4 + O\left(p^6\right), \tag{3.18}$$

$$\lambda_{\nu l}^{(+)} = l^2 + \frac{4\beta^2+4l^2-1}{2(4l^2-1)}p^2 + \frac{(320l^2+112)\beta^4-24(4l^2-1)^2\beta^2+(4l^2-1)^3}{32(l^2-1)(4l^2-1)^3}p^4 + O\left(p^6\right), \quad (l\geq 3). \tag{3.19}$$

Асимптотичні розклади для $\lambda_{\nu l}^{(-)}(p,\beta)$ при $p\to 0$ можна отримати аналогічно, як і для парних власних значень константи відокремлення $\lambda_{\nu l}^{(+)}(p,\beta)$. А саме, підставляючи розклади (3.12) у рівняння (3.10), ми приходимо до рекурентних співвідношень між коефіцієнтами b_n:

$$\begin{aligned} &2\left(\lambda_{\nu l}^{(-)}-1\right)b_0 + p(2\beta-3)b_1 = 0,\\ &p(2\beta+2n+1)b_{n-1} + 2\left(\lambda_{\nu l}^{(-)}-[n+1]^2\right)b_n\\ &+p(2\beta-2n-3)b_{n+1} = 0, \quad (n\geq 1). \end{aligned} \tag{3.20}$$

Коефіцієнти розкладу b_n та власні значення $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ шукаємо, як і вище, у вигляді формальних рядів за степенями p^2:

$$b_n = p^{|n-l+1|}\sum_{j=0}^{\infty}\left[b_n\right]_{2j}p^{2j}, \qquad b_{l-1}=1,$$

$$\lambda_{\nu l}^{(-)} = \sum_{j=0}^{\infty}\left[\lambda_{\nu l}^{(-)}\right]_{2j}p^{2j}, \qquad (l\geq 1). \tag{3.21}$$

Таким же способом отримуємо для власних значень константи відокремлення $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ асимптотичні розклади

$$\lambda_{\nu 1}^{(-)} = 1 + \left(-\frac{1}{3}\beta^2+\frac{3}{4}\right)p^2 + \left(\frac{5}{216}\beta^4-\frac{7}{144}\beta^2-\frac{1}{128}\right)p^4 + O\left(p^6\right), \tag{3.22}$$

$$\lambda_{\nu 2}^{(-)} = 4 + \left(\frac{2}{15}\beta^2+\frac{1}{2}\right)p^2 + \left(-\frac{317}{13500}\beta^4+\frac{19}{360}\beta^2-\frac{1}{192}\right)p^4 + O\left(p^6\right), \tag{3.23}$$

$$\lambda_{\nu l}^{(-)} = l^2 + \frac{4\beta^2+4l^2-1}{2(4l^2-1)}p^2 + \frac{(320l^2+112)\beta^4-24(4l^2-1)^2\beta^2+(4l^2-1)^3}{32(l^2-1)(4l^2-1)^3}p^4 + O\left(p^6\right), \quad (l\geq 3). \tag{3.24}$$

Порівняння формул (3.24) та (3.19) показує, що асимптотичні розклади для $\lambda_{\nu l}^{(+)}$ та $\lambda_{\nu l}^{(-)}$ при $l\geq 3$ збігаються з точністю до членів $O\left(p^{2l}\right)$.

Усі знайдені вище асимптотичні формули значно спрощуються при однакових центрах, коли $Z_1=Z_2$ та β дорівнює нулеві.

При певних значеннях параметрів функції $\Xi_l^{(\pm)}(p,\beta;\nu)$ виражаються через відомі спеціяльні функції. У симетричному випадку $Z_1=Z_2$ вони виражаються через періодичні функції Матьє $ce_l(\nu,q), se_l(\nu,q)$ [17,18]

$$\begin{aligned} \Xi_l^{(+)}(p,0;\nu) &= ce_l\left(\nu,-\frac{p^2}{4}\right),\\ \Xi_l^{(-)}(p,0;\nu) &= se_l\left(\nu,-\frac{p^2}{4}\right); \end{aligned} \tag{3.25}$$

якщо $Z_2=0$ — через кутову хвильову функцію двовимірного воднеподібного атома в еліптичній системі координат [6]; коли $p=0$ — через тригонометричні функції $\cos(l\varphi)$ і $\sin(l\varphi)$ відповідно (φ — полярний кут).

IV. АСИМПТОТИЧНІ РОЗКЛАДИ РОЗВ'ЯЗКІВ РАДІЯЛЬНОГО РІВНЯННЯ

Увівши нову змінну $\xi=\cosh u$, перетворимо радіяльне рівняння (2.3) до алґебраїчного вигляду

$$L(\alpha,\xi)\Pi(p,\alpha;\xi) \equiv \left[\left(\xi^2-1\right)\frac{d^2}{d\xi^2}+\xi\frac{d}{d\xi}-p^2\left(\xi^2-1\right) + 2p\,\alpha\xi-\lambda_u\right]\Pi(p,\alpha;\xi)=0. \tag{4.26}$$

Це рівняння є конфлюентним рівнянням Гойна [1–3]. Функція $\Pi(p,\alpha;\xi)$ задовольняє граничні умови

$$|\Pi(p,\alpha;1)|<\infty, \qquad \Pi(p,\alpha;\xi)\overset{\xi\to\infty}{\longrightarrow}0. \tag{4.27}$$

Схема побудови асимптотичних розкладів розв'язків рівняння (4.26) за малим скейлінґовим параметром p в околі особливих точок $\xi = 1$ і $\xi \to \infty$ включає в себе такі кроки:

- використання двох різних масштабів (один із котрих — масштаб примежового шару);
- зображення диференціяльного оператора у вигляді суми $L = L_0 + pL_1$ та обчислення розв'язків рівняння $L_0\Pi(\xi) = -pL_1\Pi(\xi)$ за допомогою теорії збурень за малим параметром p;
- зшивання розв'язків, побудованих у двох ділянках зміни ξ, на їх перетині.

На фінальному кроці методом послідовних наближень розв'язуємо дисперсійне рівняння на власні значення енерґії.

При скінченних значеннях ξ та малих $p \ll 1$ рівняння (4.26) можна розглядати як збурене рівняння для поліномів Чебишова. Це означає, що при прямуванні p до нуля обмежений в особливій точці $\xi = 1$ розв'язок радіяльного рівняння (4.26) прямує до многочлена Чебишова першого роду $T_n(\xi)$ [18]. Це наштовхує на думки записати розв'язок $\Pi_<(\xi) \equiv \Pi_<(p, \alpha; \xi)$ рівняння (4.26), обмежений в особливій точці $\xi = 1$, як нескінченну суму такого вигляду:

$$\Pi_<(\xi) = e^{-p\xi} \sum_{n=-\infty}^{\infty} d_n T_{\tau+n}(\xi), \tag{4.28}$$

$$d_n = p^{|n|} \sum_{j=0}^{\infty} [d_n]_{2j}\, p^{2j}, \qquad d_0 \equiv 1.$$

Виділення експоненційного множника в (4.28) відображає асимптотичну поведінку розв'язку рівняння (4.26) при $\xi \to \infty$. Включення в розклади (4.28) додаткового параметра τ приводить до нових явищ, які впливають на вигляд розкладів для λ_u. Ми опишемо їх нижче.

Підставляючи розклади (4.28) у рівняння (4.26) і використовуючи диференціяльне рівняння та рекурентні формули для многочленів Чебишова першого роду $T_n(\xi)$, отримаємо тричленну рекурентну систему рівнянь для коефіцієнтів d_n:

$$\begin{aligned} &p\left(n + \tau - \alpha - \tfrac{1}{2}\right) d_{n-1} + \left(\lambda_u - (\tau + n)^2\right) d_n \\ &-p\left(n + \tau + \alpha + \tfrac{1}{2}\right) d_{n+1} = 0. \end{aligned} \tag{4.29}$$

Із (4.29) та симетрійних властивостей функції $\Pi_<(\xi)$ щодо заміни $\tau \to -\tau$ випливає, що в асимптотичному розкладі $\lambda_u(p)$ за малим параметром p будуть наявні тільки парні степені τ. Асимптотичний розклад для константи відокремлення λ_u у термінах τ можна отримати, використовуючи рекурентну процедуру, описану в попередньому розділі. Три перші члени цього розкладу визначаємо виразом

$$\begin{aligned} \lambda_u(p) &= \tau^2 + \frac{4\alpha^2 + 4\tau^2 - 1}{2(4\tau^2 - 1)} p^2 \\ &+ \frac{(320\tau^2 + 112)\alpha^4 - 24(4\tau^2 - 1)^2\alpha^2 + (4\tau^2 - 1)^3}{32(\tau^2 - 1)(4\tau^2 - 1)^3} p^4 \\ &+ O\left(p^6\right). \end{aligned} \tag{4.30}$$

Із інваріянтности розв'язку $\Pi_<(\xi)$ та розкладу для константи відокремлення (4.30) щодо заміни $\tau \to -\tau$ випливає, що коефіцієнти $d_n(\tau)$ задовольняють таке співвідношення симетрії:

$$d_n(-\tau) = d_{-n}(\tau). \tag{4.31}$$

У ділянці великих ξ $\left(\xi = O\left(p^{-1}\right)\right)$ використаймо новий масштаб для незалежної змінної

$$x = p(\xi + 1) \tag{4.32}$$

і введімо нову функцію $\widetilde{\Pi}(x)$, означивши її рівністю

$$\widetilde{\Pi}(x) = (\xi + 1)^{-\frac{1}{2}} \Pi(\xi). \tag{4.33}$$

Підстановка (4.33) у (4.26) дає таке рівняння для $\widetilde{\Pi}(x)$:

$$\begin{aligned} &\left[\frac{d}{dx} x^2 \frac{d}{dx} - x^2 + 2\alpha x - \tau^2 + \frac{1}{4}\right] \widetilde{\Pi}(x) \\ &+ \frac{p}{x - 2p} \left[x \frac{d}{dx} + \left(\tau^2 - \lambda_u\right) \frac{x}{p} + 2\alpha x - 2\tau^2 + \frac{1}{2}\right] \widetilde{\Pi}(x) \\ &\equiv \widehat{T}\widetilde{\Pi}(x) + p\widehat{Q}\widetilde{\Pi}(x) = 0. \end{aligned} \tag{4.34}$$

При малих p оператор $p\widehat{Q}$ є збуренням до оператора $\widehat{T}$, і тому нам потрібні розв'язки наступного граничного рівняння $\widehat{T}R(x) = 0$. Два лінійно незалежні розв'язки $R_\tau(x)$ та $R_{-\tau}(x)$ допоміжного рівняння $\widehat{T}R(x) = 0$ виражаються через реґулярний у нулі розв'язок $F(a; c; x)$ конфлюентного гіпергеометричного рівняння:

$$R_\tau(x) = e^{-x} x^{\tau - \frac{1}{2}} F\left(-\alpha + \tau + \tfrac{1}{2}; 2\tau + 1; 2x\right). \tag{4.35}$$

Величина τ визначає характер розгалуження розв'язків рівняння (4.26) при обході точки $\xi = \infty$ і називається показником характеристичної експоненти [19]. Тобто існують два лінійно незалежні розв'язки $\Pi^{(1)}_\tau(p, \alpha; x)$ і $\Pi^{(1)}_{-\tau}(p, \alpha; x)$ рівняння (4.34), які при обході точки $x = \infty$ задовольняють умови

$$\begin{aligned} \Pi^{(1)}_\tau\left(e^{2\pi i} x\right) &= e^{2\pi i\tau} \Pi^{(1)}_\tau(x), \\ \Pi^{(1)}_{-\tau}\left(e^{2\pi i} x\right) &= e^{-2\pi i\tau} \Pi^{(1)}_{-\tau}(x). \end{aligned}$$

Згідно зі згаданою симетрією $\tau \to -\tau$, розв'язок радіяльного рівняння $\Pi_>(\xi)$, який є аналітичним продовженням $\Pi_<(\xi)$ у ділянку великих ξ, можна зобразити у вигляді лінійної комбінації

$$\Pi_>(\xi) = g(\tau)\Pi^{(1)}_\tau(x) + g(-\tau)\Pi^{(1)}_{-\tau}(x), \tag{4.36}$$

$$\Pi^{(1)}_\tau(x) = \sqrt{\xi + 1} \sum_{n=-\infty}^{\infty} h_n(\tau) R_{\tau+n}(x),$$

$$h_n(\tau) = p^{|n|} \sum_{j=0}^{\infty} [h_n]_{2j}\, p^{2j}, \qquad h_0(\tau) \equiv 1.$$

Константи $g(\tau)$ та $g(-\tau)$ будуть знайдені пізніше шляхом зшивання розв'язків $\Pi_<(\xi)$ та $\Pi_>(\xi)$ в ділянці перекриття.

Підстановка розкладу (4.36) у рівняння (4.34) після використання рекурентних співвідношень для функції $R_{\tau+n}(x)$ [14] приводить до тричленного рекурентного співвідношення між коефіцієнтами $h_n(\tau)$:

$$p\frac{\left(\tau+n-\frac{1}{2}\right)^2-\alpha^2}{(2\tau+2n-1)(\tau+n)}h_{n-1}+\left[(\tau+n)^2-\lambda_u\right]h_n \\ -p(\tau+n+1)(2\tau+2n+1)h_{n+1}=0. \quad (4.37)$$

Із аналізу тричленних рекурентних систем (4.37) та (4.29) випливає, що коефіцієнти $d_n(\tau)$ та $h_n(\tau)$ пов'язані співвідношенням

$$h_n(\tau)=d_n(\tau)(-2)^n\frac{\Gamma(2\tau+1)\Gamma\left(\tau+\alpha+n+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(2\tau+2n+1)\Gamma\left(\tau+\alpha+\frac{1}{2}\right)}. \quad (4.38)$$

Останню рівність легко перевірити й безпосередньою підстановкою (4.38) у рекурентні співвідношення (4.37).

Побудовані розв'язки $\Pi_<(\xi)$ та $\Pi_>(\xi)$ нам необхідно зшити в ділянці перекриття

$$\xi=O\left(1/\sqrt{p}\right), \quad (4.39)$$

де справедливі обидва розклади (4.28), (4.36). Наш перший крок при зшиванні полягає в розщепленні виразу для повної асимптотичної поведінки розв'язку $\Pi_<(\xi)$ при $\xi\to\infty$. Із цією метою перетворимо розклад (4.28) у ділянці зшивання (4.39) так, щоб він мав форму, подібну до (4.36). Шукану форму для $\Pi_<(\xi)$ отримуємо із (4.28) за допомогою формули (див. [18, т. 2])

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

та співвідношення зв'язку 2.10(3) ([18, т. 1]) для локальних розв'язків гіпергеометричного рівняння. У результаті вказаних перетворень отримаємо представлення для $\Pi_<(\xi)$

$$\Pi_<(\xi)=\Pi_\tau^{(2)}(\xi)+\Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi) \quad (4.40)$$

у термінах гіпергеометричної функції $F(a,b;c;z)$:

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

Важливо, що кожний член лінійної комбінації (4.40) також є розв'язком радіяльного рівняння.

Унаслідок розв'язок $\Pi_<(\xi)$ радіяльного рівняння (4.26), обмежений у точці $\xi=1$, ми можемо розкласти в ряд за степенями малого параметра p з коефіцієнтами, які залежать від $\xi+1$. Зауважимо, що зв'язок (4.38) сумісний із указаною вище симетрією побудованих розв'язків $\Pi_<(\xi)$ і $\Pi_>(\xi)$.

Проаналізуймо поведінку розв'язків рівняння (4.26), коли ξ описує на комплексній ξ-площині замкнутий контур γ навколо особливої точки $\xi=+1$ і обхід здійснюється проти годинникової стрілки: $\xi+1\to e^{2\pi i}(\xi+1)$, $x\to e^{2\pi i}x$. Із формул (4.36) та (4.40) випливає, що в результаті обходу вздовж контуру γ отримаємо

$$\Pi_\tau^{(1)}(x)\to e^{2\pi i\tau}\Pi_\tau^{(1)}(x),\ \Pi_{-\tau}^{(1)}(x)\to e^{-2\pi i\tau}\Pi_{-\tau}^{(1)}(x), \\ \Pi_\tau^{(2)}(\xi)\to e^{2\pi i\tau}\Pi_\tau^{(2)}(\xi),\ \Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi)\to e^{-2\pi i\tau}\Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi). \quad (4.41)$$

Довільні три з функцій $\Pi_\tau^{(1)}(x)$, $\Pi_{-\tau}^{(1)}(x)$, $\Pi_\tau^{(2)}(\xi)$ та $\Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi)$ пов'язані між собою лінійними такими співвідношеннями:

$$\Pi_\tau^{(1)}(x)=A\Pi_\tau^{(2)}(\xi)+B\Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi) \quad (4.42)$$

зі сталими коефіцієнтами A, B. Тоді, виконавши обхід уздовж контуру γ, який приводить до перетворення (4.41), ми отримуємо, замість (4.42), співвідношення $\Pi_\tau^{(1)}(x)=A\Pi_\tau^{(2)}(\xi)+Be^{-4\pi i\tau}\Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi)$. Порівнюючи цю рівність з рівністю (4.42), неважко зрозуміти, що $B=0$. Тоді в термінах, прийнятих у цьому розділі позначень (4.36), умова зшивання розв'язків $\Pi_<(\xi)$ та $\Pi_>(\xi)$ набирає вигляду

$$\Pi_\tau^{(2)}(\xi)=g(\tau)\Pi_\tau^{(1)}(x),\ \Pi_{-\tau}^{(2)}(\xi)=g(-\tau)\Pi_{-\tau}^{(1)}(x). \quad (4.43)$$

Формули (4.43) – точні, а не асимптотичні. Замінюючи в (4.43) функції $F\left(a,b;c;\frac{2}{\xi+1}\right)$, $F(a';c';2x)$ гіпергеометричними рядами Ґауса й Куммера відповідно та прирівнюючи коефіцієнти при однакових степенях $\xi+1$, можна отримати розклади для $g(\tau)$ і $g(-\tau)$ за малим параметром p. Ми наведемо тут лише підсумковий результат для відношення:

$$\frac{g(-\tau)}{g(\tau)}=\left(\frac{p}{2}\right)^{2\tau}\left[1-\frac{8\alpha^2\tau}{(4\tau^2-1)^2}p^2+O\left(p^4\right)\right]. \quad (4.44)$$

Коли α і τ приймають довільні значення, розв'язок $\Pi_>(\xi)$ в межі $x\to\infty$ становить собою лінійну комбінацію експонент, одна з яких зростає, а друга спадає зі зростанням x. Прирівнюючи до нуля коефіцієнт при зростаючій експоненті, ми отримуємо дисперсійне рівняння, яке пов'язує параметри α, τ і p:

$$\tan\pi\left(\alpha+\tfrac{1}{2}\right)=\tan(\pi\tau)\frac{1-\epsilon}{1+\epsilon}, \quad (4.45)$$

де

$$\epsilon=p^{2\tau}\frac{\Gamma(-2\tau+1)\Gamma\left(\tau+\alpha+\frac{1}{2}\right)}{\Gamma(2\tau+1)\Gamma\left(-\tau+\alpha+\frac{1}{2}\right)} \\ \times\left[1-\frac{8\alpha^2\tau}{(4\tau^2-1)^2}p^2+O\left(p^4\right)\right]. \quad (4.46)$$

V. АСИМПТОТИЧНІ РОЗКЛАДИ ЕНЕРҐІЇ І КВАНТОВОГО ДЕФЕКТУ

У попередніх розділах ми розв'язували дві краєві задачі окремо: для радіяльного (2.3) та кутового (2.4) рівнянь, причому власними значеннями в кутовому рівнянні вважалися константи відокремлення $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$, а p залишалося вільним параметром. У радіяльному рівнянні, замість λ_u, в ролі незалежного параметра виступає показник характеристичної експоненти τ. При $p \to 0$ константа відокремлення λ_u виражається через τ за допомогою асимптотичного розкладу (4.30), який можна отримати з (3.19) та (3.24) формальною заміною $l \to \tau$, $\beta \to -\alpha$. Прирівнюючи вираз (4.30) для λ_u до власного значення $\lambda_{\nu l}^{(+)}$ $\left(\lambda_{\nu l}^{(-)}\right)$ кутового рівняння (3.16)–(3.19) ((3.22)–(3.24)), можна записати функцію $\tau_l^{(\pm)} = \tau_l^{(\pm)}(\alpha, \beta, p)$ у вигляді асимптотичного ряду за степенями малого параметра p. У часткових випадках, коли $l = 0$, $l = 1$ та $l = 2$, маємо

$$\tau_0^{(+)} = 2\sqrt{2s}\,\alpha p + \frac{\sqrt{2s}\alpha}{8}\left(56s\alpha^2 + 36\alpha^2 + 3\right)p^3 + O\left(p^5\right), \tag{5.47}$$

$$\tau_1^{(+)} = 1 + \left(-\frac{10}{3}s\alpha^2 + \frac{1}{2}\alpha^2 - \frac{1}{8}\right)p^2 + O\left(p^4\right), \tag{5.48}$$

$$\tau_1^{(-)} = 1 + \left(\frac{2}{3}s\alpha^2 - \frac{1}{2}\alpha^2 + \frac{1}{8}\right)p^2 + O\left(p^4\right), \tag{5.49}$$

$$\tau_2^{(+)} = 2 - \frac{2}{15}s\alpha^2p^2 + \left(\left[\frac{418}{3375}s^2 - \frac{31}{450}s + \frac{1}{144}\right]\alpha^4 + \left[\frac{31}{360}s - \frac{5}{288}\right]\alpha^2 + \frac{1}{256}\right)p^4 + O\left(p^6\right), \tag{5.50}$$

$$\tau_2^{(-)} = 2 - \frac{2}{15}s\alpha^2p^2 + \left(\left[-\frac{332}{3375}s^2 + \frac{19}{450}s - \frac{1}{144}\right]\alpha^4 + \left[-\frac{19}{360}s + \frac{5}{288}\right]\alpha^2 - \frac{1}{256}\right)p^4 + O\left(p^6\right). \tag{5.51}$$

Для всіх інших значень $l = 3, 4, \ldots$ аналогічно приходимо до такого розкладу для показника характеристичної експоненти:

$$\tau_l^{(\pm)} = l + \alpha^2 sA_l p^2 \tag{5.52}$$
$$+\alpha^2 s\left(\alpha^2 sB_l + \alpha^2 C_l + D_l\right)p^4 + O\left(p^6\right), \quad (l \geq 3),$$

де введено позначення

$$s = \frac{Z_1Z_2}{(Z_1+Z_2)^2}, \quad A_l = \frac{-4}{(4l^2-1)\,l},$$
$$B_l = \frac{4\left(12l^4 + 17l^2 - 2\right)}{(4l^2-1)^3\left(l^2-1\right)l^3}, \tag{5.53}$$
$$C_l = \frac{-18}{(4l^2-1)^2\left(l^2-1\right)l}, \quad D_l = \frac{3}{2\left(4l^2-1\right)\left(l^2-1\right)l}.$$

Із виразів (5.47)-(5.52) випливає, що нульовий член розкладу $\tau_l^{(\pm)}(\alpha, \beta, 0) = l$, тобто показник характеристичної експоненти в наближенні об'єднаного атома, дорівнює кутовому квантовому числу l.

Підставляючи тепер розклади (5.47) у дисперсійне рівняння (4.45) і розв'язуючи його методом послідовних наближень, отримуємо асимптотичні розклади для енергії $E_{n0}^{(+)}$ у вигляді ряду, який містить логарифмічні члени:

$$E_{n0}^{(+)} = \frac{-2Z^2}{(2n-1)^2}\left[1 + \frac{8s}{2n-1}\left(\ln\frac{ZR}{2n-1} + \Psi(n) + 2\gamma\right)(ZR)^2 + \mathcal{E}_4R^4 + O\left(R^5\right)\right]. \tag{5.54}$$

Тут $Z = Z_1 + Z_2$ — заряд об'єднаного ядра; $\Psi(n)$ – логарифмічна похідна гамма-функції:

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

а $\gamma = 0.57722\ldots$ — стала Ейлера [17, 18]. Остаточна формула для коефіцієнта $\mathcal{E}_4$ достатньо громіздка навіть для основного стану ($n = 1$):

$$\mathcal{E}_4 = -\frac{2}{3}Z^4s\left[\left(-4\pi^2s + 24s\gamma^2 - 144s\gamma - 69s - 18\right)\ln ZR + s(24\gamma - 72)\ln^2 ZR\right.$$
$$\left. + 8s\ln^3 ZR + s\left(8\gamma^3 - 72\gamma^2 - (4\pi^2+69)\gamma - 56\zeta(3)\right) - 18\gamma + 12\right]. \tag{5.55}$$

Тут $\zeta(n)=\sum_{k=1}^{\infty}\frac{1}{k^n}$ — дзета-функція Рімана ($\zeta(3)=1.202056903\ldots$) [17, 18].

Аналогічні розклади для енергії $E_{nl}^{(\pm)}$ при малих R можна вивести і для збуджених станів системи $(Z_1eZ_2)_2$ з кутовим квантовим числом $l=1$ і $l=2$:

$$E_{n1}^{(+)}=\frac{-2Z^2}{(2n-1)^2}\left[1+\frac{2[10s(2n-1)^2-3n(n-1)][5s(2n-1)^2-3n(n-1)]}{3(2n-1)^3[10s(2n-1)^2-9n(n-1)]}(ZR)^2+O\left(R^4\right)\right], \tag{5.56}$$

$$E_{n1}^{(-)}=\frac{-2Z^2}{(2n-1)^2}\left[1-\frac{2[s(2n-1)^2-3n(n-1)][2s(2n-1)^2-9n(n-1)]}{3(2n-1)^3[2s(2n-1)^2-3n(n-1)]}(ZR)^2+O\left(R^4\right)\right], \tag{5.57}$$

$$E_{n2}^{(+)}=\frac{-2Z^2}{(2n-1)^2}\left[1+\frac{2s(ZR)^2}{15(2n-1)}-\frac{(2n-1)(418n-299)s-465(n^2-n-1)}{6750(2n-1)^3}s(ZR)^4\right.$$
$$\left.-\frac{(n^2-1)(n-2)n}{540(2n-1)^5}\left(\ln\frac{ZR}{2n-1}+\Psi(n+2)\right)s(ZR)^6+O\left(R^6\right)\right], \tag{5.58}$$

$$E_{n2}^{(-)}=\frac{-2Z^2}{(2n-1)^2}\left[1+\frac{2s(ZR)^2}{15(2n-1)}+\frac{n(n^2-1)(n-2)}{18(2n-1)^5}(ZR)^4+\frac{4(2n-1)(83n-19)s-285(n^2-n-1)}{6750(2n-1)^3}s(ZR)^4\right.$$
$$\left.-\frac{(n^2-1)(n-2)n}{540(2n-1)^5}\left(\ln\frac{ZR}{2n-1}+\Psi(n+2)\right)s(ZR)^6+O\left(R^6\right)\right], \tag{5.59}$$

Для всіх інших станів системи $(Z_1eZ_2)_2$ з $l\geq 3$ після доволі громіздких перетворень отримуємо

$$E_{nl}^{(\pm)}=-\frac{Z^2}{2\left(n-\frac{1}{2}\right)^2}\left(1-\frac{s}{2\left(n-\frac{1}{2}\right)}A_l(ZR)^2+\frac{s}{32\left(n-\frac{1}{2}\right)^3}\right. \tag{5.60}$$
$$\left.\times\left[s\left(n-\tfrac{1}{2}\right)\left(6A_l^2-4\left(n-\tfrac{1}{2}\right)B_l\right)-4D_l-4\left(n-\tfrac{1}{2}\right)^2C_l\right](ZR)^4+O\left(R^6\right)\right).$$

Енерґія двовимірної системи $(Z_1eZ_2)_2$ виражається через квантовий дефект $\Delta_{nl}^{(\pm)}$ згідно з формулою

$$E_{nl}^{(\pm)}=-\frac{2Z^2}{\left(2n+2\Delta_{nl}^{(\pm)}-1\right)^2}. \tag{5.61}$$

Звідси та з розкладів (5.54)-(5.60) для власних значень енерґії $E_{nl}^{(\pm)}$ можна також одержати асимптотичні представлення для квантового дефекту $\Delta_{nl}^{(\pm)}$. Для декількох перших значень $l(=0,1,2)$ маємо

$$\Delta_{n0}^{(+)}=-2\left(\ln\frac{ZR}{2n-1}+\Psi(n)+2\gamma\right)s(ZR)^2+\mathcal{D}_4R^4+O\left(R^5\right), \tag{5.62}$$

$$\Delta_{n1}^{(+)}=-\frac{[10s(2n-1)^2-3n(n-1)][5s(2n-1)^2-3n(n-1)]}{6(2n-1)^2[10s(2n-1)^2-9n(n-1)]}(ZR)^2+O\left(R^4\right), \tag{5.63}$$

$$\Delta_{n1}^{(-)}=\frac{[s(2n-1)^2-3n(n-1)][2s(2n-1)^2-9n(n-1)]}{6(2n-1)^2[2s(2n-1)^2-3n(n-1)]}(ZR)^2+O\left(R^4\right), \tag{5.64}$$

$$\Delta_{n2}^{(+)}=-\frac{s}{30}(ZR)^2+\left[\frac{209}{27000}s-\frac{31(n^2-n-1)}{1800(2n-1)^2}\right]s(ZR)^4$$
$$+\frac{(n^2-1)(n-2)n}{2160(2n-1)^4}\left(\ln\frac{ZR}{2n-1}+\Psi(n+2)\right)s(ZR)^6+O\left(R^6\right), \tag{5.65}$$

$$\Delta_{n2}^{(-)}=-\frac{s}{30}(ZR)^2-\left[\frac{83}{13500}s^2-\frac{19(n^2-n-1)}{1800(2n-1)^2}s+\frac{n(n^2-1)(n-2)}{72(2n-1)^4}\right](ZR)^4$$
$$+\frac{(n^2-1)(n-2)n}{2160(2n-1)^4}\left(\ln\frac{ZR}{2n-1}+\Psi(n+2)\right)s(ZR)^6+O\left(R^6\right), \tag{5.66}$$

а коефіцієнт $\mathcal{D}_4$, у зв'язку з його громіздкістю, подамо тільки для основного стану ($n=1$):

$$\mathcal{D}_4 = \frac{1}{6}sZ^4\Bigg[\left(24s\gamma^2 - 69s - 4s\pi^2 - 18\right)\ln ZR + 24s\gamma\ln^2 ZR + 8s\ln^3 ZR + \gamma\left(8s\gamma^2 - 4s\pi^2 - 69s - 18\right) + 12 - 56s\zeta(3)\Bigg]. \tag{5.67}$$

Наведемо також два старші члени розкладу $\Delta_{nl}^{(\pm)}$ за степенями малої між'ядерної відстані R для стану з $l \geq 3$:

$$\Delta_{nl}^{(\pm)} = \frac{A_l}{4}s(ZR)^2 + \frac{s}{16}\left(sB_l + C_l + \frac{D_l}{\left(n-\frac{1}{2}\right)^2}\right)(ZR)^4 + O\left(R^6\right), \quad (l \geq 3). \tag{5.68}$$

Розв'язуючи дисперсійне рівняння (4.45), ми бачимо, що асимптотичні розклади для енерґії (5.60) та квантового дефекту (5.68) при малих R містять тільки парні степені R аж до членів порядку $O\left(R^{2l}\right)$. Наступні поправки, починаючи з доданка, пропорційного R^{2l+2}, пов'язані з наявністю в рівнянні (4.45) параметра ϵ і включають логарифми. На відміну від тривимірного випадку [14], ці додаткові поправки не можна обчислити в загальному вигляді для довільних значень кутового квантового числа l. Вельми цікавим є сам факт появи логарифмічних членів, які показують, що енерґія не є аналітичною функцією ZR.

VI. ЗВ'ЯЗОК ДВОВИМІРНОЇ ЗАДАЧІ $(Z_1eZ_2)_2$ З ТРИВИМІРНОЮ ЗАДАЧЕЮ Z_1eZ_2 ТА КЛАСИФІКАЦІЯ ТЕРМІВ СИСТЕМИ $(Z_1eZ_2)_2$

За своєю структурою асимптотична формула (5.60) ідентична аналогічній формулі (5.9) із праці [14][1] для термів тривимірної системи Z_1eZ_2. Перехід від тривимірного випадку до двовимірного в розкладах для квантового дефекту (5.8) та енерґії (5.9) праці [14] здійснюємо за допомогою заміни

$$n \to n - \tfrac{1}{2}, \qquad l \to l - \tfrac{1}{2}, \qquad m \to -\tfrac{1}{2}. \tag{6.69}$$

Порівнюючи отримані вирази для $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$ (3.19), λ_u (4.30) та $\tau_l^{(\pm)}$ (5.52) з аналогічними асимптотичними виразами для станів із сферичними квантовими числами n, l, m об'єднаного атома в тривимірному випадку [14], неважко переконатися, що вони збігаються у всіх порядках за параметром p, якщо в указаних формулах (5.1), (3.15) та (4.2) праці [14] виконати заміни (6.69):

$$\nu\Bigg|_{\substack{l \to l-\frac{1}{2}\\ m \to -\frac{1}{2}}} = \tau_l^{(\pm)} - \frac{1}{2},$$

$$\lambda_{lm}^{(\eta)}\Bigg|_{\substack{l \to l-\frac{1}{2}\\ m \to -\frac{1}{2}}} = \lambda_{\nu l}^{(\pm)} - \frac{1}{4},$$

$$\lambda^{(\xi)}\Bigg|_{\substack{\nu \to \tau-\frac{1}{2}\\ m \to -\frac{1}{2}}} = \lambda_u(\tau) - \frac{1}{4}.$$

Класифікацію станів двовимірної системи $(Z_1eZ_2)_2$ в межі $R \to 0$ природно проводити за головним квантовим числом n $(n = 1, 2, 3, \ldots)$, кутовим квантовим числом l $(0 \leq l \leq n-1$ для $\Xi_l^{(+)}$ і $1 \leq l \leq n-1$ для $\Xi_l^{(-)})$ та квантовим числом I_ν, яке є власним значенням оператора $\widehat{I}_\nu$ інверсії кутової координати електрона:

$$\widehat{I}_\nu \Xi(p, \beta; \nu) = \Xi(p, \beta; -\nu) = I_\nu \Xi(p, \beta; \nu). \tag{6.70}$$

у цій статті кутові функції Ξ, для яких $I_\nu = +1$ та $I_\nu = -1$, позначені через $\Xi^{(+)}$ та $\Xi^{(-)}$ відповідно.

У симетричному випадку $Z_1 = Z_2$ виникає додаткова класифікація за квантовим числом, яке є власним значенням оператора $\widehat{w}$ інверсії координат електрона щодо прямої $x = 0$, що еквівалентне заміні $\nu \to \pi - \nu$ у кутовому рівнянні:

$$\widehat{w}\Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \nu) = \Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \pi - \nu) = w^{(\pm)}\Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \nu). \tag{6.71}$$

Розв'язки $\Xi_l^{(\pm)}(p, 0; \nu)$ поділяються на симетричні $(w^{(\pm)} = +1)$ та антисиметричні $(w^{(\pm)} = -1)$ залежно від значень числа l,

$$w^{(+)} = (-1)^l, \qquad w^{(-)} = (-1)^{l+1}. \tag{6.72}$$

Операція $\widehat{w}$ відповідає перестановці зарядів Z_1 і Z_2.

---

[1] У формулі (5.3) праці [14] допущена (на с. 2237) неточність у виразі для коефіцієнта C_{lm}; наведемо тут виправлений результат

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

Двовимірні розв'язки $\Psi_{nl}^{(\pm)}(\mathbf{r};R)$ допускають додаткову класифікацію за власним значенням I оператора інверсії $\widehat{I}$ координат електрона

$$\widehat{I}\Psi_{nl}^{(\pm)}(\mathbf{r};R) = \Psi_{nl}^{(\pm)}(-\mathbf{r};R) = I\Psi_{nl}^{(\pm)}(\mathbf{r};R). \qquad (6.73)$$

Інверсія $\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$ еквівалентна заміні $\nu \to \pi + \nu$. Величина I залежить тільки від парности числа l: $I = (-1)^l$.

VII. ОБГОВОРЕННЯ РЕЗУЛЬТАТІВ

Еліптичний базис $\Psi_{nl}^{(\pm)}(\xi,\nu;R) = \Pi_{nk}^{(\pm)}(\xi;R)\Xi_{nl}^{(\pm)}(\nu;R)$ є власною системою функцій гамільтоніяна $\widehat{H}$ та додаткового еліптичного інтеґрала руху $\widehat{\Lambda}$, отриманого відокремленням змінних. Власні значення $\lambda_{\nu l}^{(\pm)}$ оператора $\widehat{\Lambda}$ мають зміст констант відокремлення в еліптичних координатах. Еліптичний базис розбивається на два підбазиси $\Psi_{nl}^{(+)}$ і $\Psi_{nl}^{(-)}$, перший з яких парний, а другий непарний щодо заміни $\widehat{I}_\nu : \nu \to -\nu$. Можливість такого розбиття є наслідком інваріянтности операторів $\widehat{H}$ та $\widehat{\Lambda}$ щодо інверсії змінної ν. Ціле додатне число l нумерує в порядку зростання значення константи відокремлення $\lambda_l^{(\pm)}$ і визначає кількість нулів кутової функції $\Xi_{nl}^{(\pm)}(\nu;R)$; в парному за ν підбазисі $0 \le l \le n-1$, у непарному - $1 \le l \le n-1$. Цей факт пояснює прийнятий у розділі III спосіб нумерації констант відокремлення та ККЕФ. Кількість нулів радіяльної еліптичної функції $\Pi_{nk}^{(\pm)}(\xi;R)$ визначаємо виразом

$$k = \begin{cases} n-l-1+\mathrm{Ent}\left(\Delta_{nl}^{(\pm)}+l-\tau_l^{(\pm)}\right), & Z_1Z_2 \neq 0, \\ n-l-1, & Z_1Z_2 = 0, \end{cases} \qquad (7.74)$$

де Ent (x) — ціла частина дійсного числа x. Еліптичний параметр R може змінюватися в межах $0 \le R < \infty$, і в нашій задачі має динамічний зміст, тобто входить у вирази для спектра енерґії.

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

Таблиця 1. Енерґія основного стану 2D H_2^+ і 3D H_2^+.

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	

Таблиця 2. Порівняння високозбуджених рівнів енерґії 2D H_2^+ і 3D H_2^+ ($R = 0.05$).

Як ілюстрацію отриманих асимптотичних формул (5.54)—(5.60) застосуємо їх для розрахунків електронних станів найпростіших двоцентрових систем $(Z_1eZ_2)_2$. У таблиці 1 порівнюються значення енерґії основного стану двовимірного (2D) і тривимірного (3D) йона молекули водню H_2^+, обчислених за формулою (5.54) та аналогічною асимптотичною формулою (5.6) для тривимірної задачі [14]. Як видно з таблиці, зі збільшенням R різниця термів $\Delta E(R) = E_{100}^{(3D)}(R) - E_{10}^{(2D)}(R)$ швидко зростає і при $R = 0.35$ приблизно дорівнює 12.90, що становить понад 700% значення енерґії тривимірної системи H_2^+. У таблиці 2 порівнюються результати асимптотичних розрахунків енерґії $E_{nl}^{(2D)}$ та $E_{nlm}^{(3D)}$ збуджених станів двовимірного та відповідного тривимірного молекулярного йона H_2^+ при між'ядерній відстані $R = 0.05$. Із даних цієї таблиці випливає, що зі збільшенням квантових чисел n та l вплив фактора розмірности на енерґетичний спектр молекулярного йона водню H_2^+ асимптотично зменшується і для високозбуджених (рідберґовських) станів стає незначним.

Питання про вплив розмірности на спектральні характеристики двоцентрових систем має не тільки суто теоретичний інтерес. Воно є цікавим і у зв'язку з описом поведінки атомів поверхневого шару в полях сусідніх зарядів [8].

Повний аналіз плоскої задачі двох кулонівських центрів повинен містити в собі цілий комплекс додаткових питань. Зауважимо, наприклад, що ще не вивчено асимптотичної поведінки термів двовимірної системи $(Z_1eZ_2)_2$ при великих міжцентрових відстанях та поблизу межі неперервного спектра; перехід від об'єднаного атома до роз'єднаних, а також неперервний спектр задачі $(Z_1eZ_2)_2$. Ці питання ми плануємо розглянути в наступних працях, а тут відзначимо тільки таке. Якщо в межі об'єднаного атома ($R \ll 1$) кутове рівняння (2.4) розв'язувалось досить просто, а всі труднощі виникали в радіяльному рівнянні (2.3), то в протилежному граничному випадку роз'єднаних атомів ($R \gg 1$) без ускладнень розв'язується радіяльне рівняння, а кутове вимагає спеціяльного розгляду.

Важливо також підкреслити, що в межі об'єднаного атома сформульована гранична задача для радіяльного рівняння (2.3) характеризується явищем примежового шару. Через це в розкладах енерґії (5.54)-(5.60) за малим скейлінґовим параметром з'являються неаналітичні за R логарифмічні члени. Якщо порівнювати ситуацію з наближенням роз'єднаних атомів (див. [11]), то там також виникають неаналітичні за R^{-1} члени в розкладі енерґії за оберненими степенями R. В останньому випадку неаналітичні члени добре вивчені (щонайменше у традиційній тривимірній задачі [11]), відома їхня фізична природа та фізичні ефекти, до яких вони приводять (так звана обмінна або резонансна взаємодія станів, локалізованих на різних ядрах). У цьому плані подальше вивчення неаналітичности за R енерґії двовимірної системи $(Z_1eZ_2)_2$ в межі об'єднаного атома є особливо потрібним і перспективним.

Можна узагальнити отримані результати на багатовимірний випадок, коли змінні в рівнянні Шредінґера відповідної двоцентрової задачі розділяються в системах координат D-вимірних ($D \geq 4$) еліпсоїдів та гіперболоїдів обертання.

[1] S. Yu. Slavyanov, W. Lay, *Special Function: A Unified Theory Based on Singularities* (Oxford University Press, New York, 2000).
[2] A. Ishkhanyan, J. Phys. A: Math. Gen. **38**, L491 (2005).
[3] E. S. Cheb-Terrab, J. Phys. A: Math. Gen. **37**, 9923 (2004).
[4] B. Zaslow, M. E. Zandler, Am. J. Phys. **35**, 1118 (1965).
[5] A. Cisneros, H. V. McIntosh, J. Math. Phys. **10**, 277 (1968).
[6] Л. Г. Мардоян, Г. С. Погосян, А. Н. Сисакян, В. М. Тер-Антонян, Теор. мат. физ. **61**, 99 (1984).
[7] L. G. Mardoyan, G. S. Pogosyan, A. N. Sissakian, V. M. Ter-Antonyan, J. Phys. A: Math. Gen. **18**, 455 (1985).
[8] А. Я. Шик, Л. Г. Бакуева, С. Ф. Мусихин, С. А. Рыков, *Физика низкоразмерных систем* (Наука, Санкт-Петербург, 2001).
[9] Н. Ф. Трускова, Яд. физ. **36**, 790 (1982).
[10] M. Fabbri, A. F. da Silva, Phys. Rev. A **32**, 1870 (1985).
[11] И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов, *Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции* (Наука, Москва, 1976).
[12] В. М. Бобочко, М. О. Перестюк, *Асимптотичне інтегрування рівняння Ліувілля з точками звороту* (Наукова думка, Київ, 2002).
[13] www.maplesoft.com
[14] D. I. Abramov, S. Yu. Slavyanov, J. Phys. B: Atom. Molec. Phys. **11**, 2229 (1978).
[15] W. Lay, S. Yu. Slavyanov, Proc. Roy. Soc. Lond. A **455**, 4347 (1999).
[16] F. M. Arscott, Proc. Roy. Soc. Edinburg **A67**, 265 (1967).
[17] *Справочник по специальным функциям* Ред. М. Абрамовиц, Л. Стиган, (Наука, Москва, 1979); M. Abramowitz, I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions* (Dover, New York, 1965).
[18] Г. Бейтмен, А. Эрдейи, *Высшие трансцендентные функции,* В 3-х томах (Наука, Москва, 1967); H. Bateman, A. Erdelyi, *Higher Transcendental Functions,* vol 1-3 (McGraw-Hill, New York, 1953).
[19] P. J. Greenland, W. Greiner, Theor. Chim. Acta **42**, 273 (1976).

THE TWO DIMENSIONAL TWO COULOMB CENTERS PROBLEM AT SMALL INTERCENTRE SEPARATION

D. Bondar[1], V. Lazur[1], M. Hnatič[2]

[1]*Department of Theoretical Physics, Uzhgorod National University, Voloshin Str. 54, 88 000 Uzhgorod, Ukraine*

[2]*Institute of Experimental Physics Slovak Academy of Sciences, Watsonova 47, 043 53 Košice, Slovakia*

An elliptic motion integral for the planar two Coulomb center problem $(Z_1eZ_2)_2$ is obtained by the method of separation of variables. Discrete spectrum of $(Z_1eZ_2)_2$ problem is analyzed by asymptotic methods in the case of united atom ($R \ll 1$). Asymptotic expansions for the energy terms and the quantum defect of the system $(Z_1eZ_2)_2$ are obtained to order $O\left(R^6\right)$. Influence of the dimensional factor to the energy spectrum of hydrogen molecular ion H_2^+ is studied.