АСИМПТОТИЧНИЙ ПІДХІД ДО ЗАДАЧІ ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ З СИЛЬНО ВІДРІЗНЯЮЧИМИСЯ ЗАРЯДАМИ

В.Ю. Лазур, Ю.Ю. Машіка

Ужгородський національний університет, кафедра теоретичної фізики,88000, Ужгород, вул. Волошина, 32

Методом еталонного рівняння докладно вивчена асимптотика дискретного спектра задачі двох кулонівських центрів з сильно відрізняючимися зарядами. Побудовані рівномірні асимптотичні розклади кутових і радіальних кулонівських сфероїдальних функцій та обчислені дві степеневі поправки до енергії. Приведено критерії застосовності одержаних формул та порівняння з чисельними розрахунками.

Вступ.

Визначення власних хвильових функцій і власних значень енергій електрона в полі двох фіксованих кулонівських центрів із зарядами Z_1 і Z_2, розташованих на відстані R один від одного – одна із класичних задач квантової механіки. В теорії атомних зіткнень ця задача носить такий же фундаментальний характер, як і задача про атом водню в теорії атома, однак на відміну від останньої задача двох центрів Z_1eZ_2 не має розв'язків в замкнутому аналітичному вигляді для довільних значень вільних параметрів Z_1, Z_2, R, а також квантових чисел. Її унікальна властивість - можливість відокремлення змінних в рівнянні Шредінгера у витягнутих сфероїдальних координатах – робить можливим точне розв'язання задачі за допомогою чисельних методів. Зараз накопичений обширний матеріал, отриманий шляхом розв'язання цієї задачі на ЕОМ (див., наприклад, [1] і наявні там посилання).

Можливість точного чисельного розв'язання задачі Z_1eZ_2 не знімає, однак, інтересу до асимптотичних методів з ряду причин. По-перше використання достатньо точних початкових даних, отриманих за допомогою асимптотичних методів, значно спрощує точний чисельний розрахунок. (див. [2]). По-друге асимптотичні розклади розв'язків задачі Z_1eZ_2 необхідні для постановки граничних умов в адіабатичному представленні задачі трьох тіл [3]. По-третє при зростанні квантових чисел або міжцентрових відстаней похибка обчислень, пов'язаних з застосуванням ЕОМ, різко зростає. Тому є доцільним розвинення асимптотичних методів розв'язування задачі Z_1eZ_2, які не тільки дозволяють отримувати результати в замкненій аналітичній формі, але й застосовні якраз в тих випадках, коли розв'язування задачі за допомогою звичайних алгоритмів наштовхується на обчислювальні труднощі.

Для того, щоб зробити більш зрозумілим зміст даної роботи, обговоримо коротко основні особливості задачі Z_1eZ_2 в асимптотичній (по міжцентровій відстані) області. В границі $R \to \infty$ терми двоцентрової задачі $E(R)$ переходять в рівні енергії ізольованого атома eZ_1 або eZ_2, а відповідні їм хвильові функції – у водневоподібні функції цих атомів у параболічних координатах. Завдяки цьому, власні функції і енергетичні терми $E_j(R)$ задачі Z_1eZ_2 зручно класифікувати за параболічними квантовими числами станів атомів eZ_1 і eZ_2: $j=[nn_1n_2m]$ і $j'=[n'n_1'n_2'm']$, відповідно. В асимптотичній області $R>>1$ хвильові функції, що відповідають eZ_1- і eZ_2-

термам, локалізовані біля кожного з центрів Z_1 і Z_2, а для термів $E_j(R)$ і $E_{j'}(R)$ справедливі асимптотичні розклади за оберненими степенями R. Для побудови асимптотичних розкладів енергії зазвичай використовують теорію збурень, а останнім часом і її алгебраїчну версію на основі групи O (4, 2) [4]. Центральне місце при виведенні степеневих розкладів енергії займає припущення, що електрон в основному знаходиться, або в потенціальній ямі заряду Z_1, або в потенціальній ямі заряду Z_2. Можливість класично дозволеного руху електрона (з даною енергією) у другій ямі при цьому не враховується, так як перехід електрона з однієї кулонівської ями в іншу є глибоко підбар'єрним і приводить до експоненційно малих (за R) поправок до енергій $E_j(R)$ і $E_{j'}(R)$. Таке нехтування впливом другої ями є закономірним до тих пір, поки терми E_j і $E_{j'}$ сильно відрізняються між собою. Однак, якщо в степеневому наближенні два терми з

$$n_1 = n_1', \qquad m = m' \qquad (1)$$

перетинаються при зменшенні міжцентрової відстані, то врахування експоненційних поправок приводить до розщеплення кожного з цих термів на два близьких терми, що відповідають станам, в котрих електрон рухається одночасно в обох ямах. Про такі малі розщеплення між термами однакової симетрії на дійсній осі R говорять як про квазіперетини. Герштейн і Кривченков [5] встановили правила кореляції станів системи Z_1eZ_2, звернувши особливу увагу на ту обставину, що поряд з квазіперетинами можливі точні перетини, тобто порушення застосовності відомої теореми Неймана-Вігнера в її стандартному формулюванні. Алілуєв і Матвієнко [6] показали, що система Z_1eZ_2 володіє більш високою симетрією, ніж геометрична, внаслідок чого терми, які перетинаються, мають різну симетрію. Цим самим доведена справедливість теореми Неймана-Вігнера у її загальному формулюванні.

Квазіперетини енергетичних термів на скінчених відстанях вперше були детально досліджені при чисельних розрахунках Пономарьовим і Пузиніною [7]. Фізично квазіперетини такого типу пов'язані з резонансною підбар'єрною взаємодією станів, локалізованих в різних потенціальних ямах кутового рівняння задачі. В працях [8, 9] при розрахунках термів системи Z_1eZ_2 в комплексній площині міжцентрової відстані R були виявлені приховані квазіперетини нового типу з

$$n_2 = n_2', \qquad m = m'. \qquad (2)$$

Ці квазіперетини мають місце для всіх значень зарядів Z_1, Z_2 (включаючи і випадок молекулярного іону водню H_2^+), і пояснюють не тільки переходи між зв'язаними станами, але й процес іонізації, для котрого до недавно не було обґрунтованого механізму в одноелектронному наближенні. Формально квазіперетини (2) можна вважати квазіперетинами в радіальному рівнянні, так як в них беруть участь стани з різним числом нулів в радіальній хвильовій функції.

Нижче при аналізі двоцентрової задачі Z_1eZ_2 будуть розглядатися тільки квазіперетини типу (1). Асимптотичним розрахункам величин, що характеризують обмінне розщеплення термів при квазіперетинах (1), присвячена значна кількість робіт. Стан проблеми і список праць з цієї тематики до 1976 року подані в монографії [2]. На той час були розвинені методи обчислення степеневих поправок у високих порядках теорії збурень [10], побудовані головні експоненційні поправки для випадку однакових зарядів [11,12] і запропоновано спосіб знаходження наступних експоненційних поправок для основного стану H_2^+ [13]. Комаров і Слав'янов [14-16] розробили рекурентну схему одночасного знаходження степеневих і експоненційних поправок до енергії і провели розрахунки для довільних нижніх квантових чисел і не надто різних зарядів. В подальшому ці результати були підтверджені і підсилені обчисленнями у більш високих порядках у працях [17-19].

У всіх згаданих вище працях при побудові асимптотичних розкладів вважалося, що єдиним великим параметром є R, а Z_1, Z_2 і параболічні квантові числа – порядку одиниці. Однак при розрахунках розщеплення термів ΔE координата квазіперетину R_c вже не є вільним параметром, а залежить від зарядів і квантових чисел. Для того щоб R_c було достатньо великим, доводиться припускати, що деякі з вільних параметрів та індексів великі. При цьому порушується вихідне припущення про те, що R – єдиний великий параметр. Нижче асимптотичні розклади отримані для задачі Z_1eZ_2 з сильно відрізняючимися зарядами. Окремо розібрано випадок, коли великими параметрами одного порядку є одночасно R, Z_2, n_2'.

Задачу Z_1eZ_2 при $Z_1 << Z_2 \approx R$ досліджували також Комаров і Соловйов [20], які, однак, ввели в розгляд занадто жорстке, додаткове обмеження на допустимі значення міжцентрової відстані і їх результат для ΔE отримується як частковий випадок із нашого більш загального результату (…).

1. Основні рівняння в координатному представленні

Стаціонарне рівняння Шредінгера задачі Z_1eZ_2 в координатному представленні
($e = \hbar = m = 1$)

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z_1}{\left|\vec{r}+\vec{R}/2\right|} - \frac{Z_2}{\left|\vec{r}-\vec{R}/2\right|}\right]\Psi = E(R)\Psi \quad (3)$$

допускає відокремлення змінних у витягнутих сфероїдальних координатах $\xi \in [1,\infty)$, $\eta \in [-1,1]$, $\varphi \in [0,2\pi)$. Записуючи хвильову функцію Ψ у вигляді добутку

$$\Psi = \frac{U(\xi)}{\sqrt{\xi^2-1}}\frac{V(\eta)}{\sqrt{1-\eta^2}}\frac{\exp(\pm im\varphi)}{\sqrt{2\pi}} \quad (4)$$

і підставляючи її в рівняння (3), отримуємо наступні рівняння для $U(\xi)$ і $V(\eta)$:

$$U''(\xi) + \left[-p^2 + \frac{a\xi-\lambda}{\xi^2-1} + \frac{1-m^2}{\left(\xi^2-1\right)^2}\right]U(\xi) = 0, \quad (5)$$

$$V''(\eta) + \left[-p^2 + \frac{b\eta-\lambda}{1-\eta^2} + \frac{1-m^2}{\left(1-\eta^2\right)^2}\right]V(\eta) = 0, \quad (6)$$

де $p = R(-2E)^{1/2}/2$, $a = (Z_1+Z_2)R$, $b = (Z_2-Z_1)R$, λ – константа відокремлення, а m – модуль магнітного квантового числа.

Вимога обмеженості Ψ накладає на $U(\xi)$ і $V(\eta)$ граничні умови

$$U(\xi)\big|_{\xi=1} = 0,\; U(\xi)\big|_{\xi\to\infty} \to 0, \quad (7)$$

$$V(\eta)\big|_{\eta=\pm1} = 0. \quad (8)$$

Часто замість функцій $U(\xi)$ і $V(\eta)$ вводять інші функції: $\mathrm{X}(\xi) = U(\xi)/\sqrt{\xi^2-1}$, $Y(\eta) = V(\eta)/\sqrt{1-\eta^2}$, які задовольняють рівнянням

$$\frac{d}{d\xi}\left(\xi^2-1\right)\frac{d}{d\xi}X + \left[-\left(\xi^2-1\right)p^2 + a\xi - \lambda - \frac{m^2}{\xi^2-1}\right]X = 0, \quad (9)$$

$$\frac{d}{d\eta}\left(1-\eta^2\right)\frac{d}{d\eta}Y + \left[-\left(1-\eta^2\right)p^2 + b\eta + \lambda - \frac{m^2}{1-\eta^2}\right]Y = 0. \quad (10)$$

Для знаходження енергетичних термів системи $E(R)$ діють наступним чином. Спочатку розглядають окремо дві задачі Штурма-Ліувілля: (5), (7) для радіального і (6), (8) для кутового рівнянь, причому власними значеннями вважають λ_ξ і λ_η, а p залишають вільним параметром. Прирівнюючи потім λ_ξ і λ_η, отримують енергію як функцію міжцентрової відстані. Таким чином, вихідною задачею є побудова асимптотик власних функцій $U(\xi)$, $V(\eta)$ і власних значень λ_ξ, λ_η за великим параметром (у нашому випадку для $p \to \infty$).

Для побудови розв’язків диференціальних крайових задач розроблені ефективні асимптотичні методи, котрі дозволяють вивчати поведінку розв’язків поблизу особливих точок та їх залежність від параметрів, що вельми важливо для фізичних застосувань [2]. В даній роботі ми скористаємося одним з таких методів – методом еталонних рівнянь, який успішно використовувався при розв'язуванні багатьох задач атомної та молекулярної фізики.[2,21-23]

2. Асимптотичні розклади кутової $U(\xi)$ і радіальної $V(\eta)$ функції і відповідних їм власних значень λ при $Z_1 << Z_2 \sim n_2' \sim R$

Для побудови асимптотичних розкладів $U(\xi)$, $V(\eta)$ скористаємося методом еталонного рівняння, в якому будемо розглядати R, Z_2 і n_2' в якості великих параметрів одного порядку. При цьому будемо вважати, що Z_1 та інші квантові числа порядку одиниці. Таке виділення великих параметрів реалізується, наприклад, у фізично важливому випадку перезарядки атома водню на багатозарядному іоні.

Перепишемо рівняння (5) і (6), ввівши позначення, більш зручні для досліджуваної нами ділянки спектру:

$$\frac{d^2U}{d\xi^2}+\left[-p^2\left(1-\frac{2\alpha}{\xi+1}\right)+\frac{2p\mu}{\xi^2-1}+\frac{1-m^2}{\left(\xi^2-1\right)^2}\right]U(\xi)=0, \quad (11)$$

$$\frac{d^2V}{d\eta^2}+\left[-p^2\left(1-\frac{2\beta}{1-\eta}\right)+\frac{2p\nu}{1-\eta^2}+\frac{1-m^2}{\left(1-\eta^2\right)^2}\right]V(\eta)=0, \quad (12)$$

де

$$\nu=\left(\lambda_\eta-b\right)/2p,\quad \mu=\left(a-\lambda_\xi\right)/2p, \quad (13)$$

$$\beta=\frac{b}{2p^2}=\frac{2(Z_2-Z_1)}{R(-2E)},\quad \alpha=\frac{a}{2p^2}=\frac{2(Z_2+Z_1)}{R(-2E)}. \quad (14)$$

Розрахунок розщеплення термів вимагає детального аналізу асимптотик кутового рівняння (12). Для побудови асимптотичних розв'язків цього рівняння необхідно фіксувати величину параметрів ν, β і m по відношенню до асимптотичного параметру p. При $Z_1 \sim Z_2 << R$ [14-16] параметри b і λ порядку $O(p)$. Якщо ж $Z_1 << Z_2 \sim R$, то ці параметри $O\left(p^2\right)$. Дослідження цього останнього випадку і є нашою метою, тоді як в першому випадку ($Z_1 \sim Z_2 << R$) застосовна асимптотична теорія [2]. При цьому будемо вважати, що $m=0(1)$, а порядок різниці $b-\lambda_\eta$ менший порядку її складових b і λ_η, тобто $b-\lambda_\eta=O(p)$. При виконанні умов $0<\beta<1$ і $(1-\beta)p>>1$ кутове рівняння (12) має полюси при $\eta=\pm1$ і близькі до них точки повороту

$$\eta_-\cong-1+\frac{\nu}{(1-\beta)p},\quad \eta_+\cong1-2\beta-\frac{\nu}{(1-\beta)p}. \quad (15)$$

Асимптотика розв'язку будується в двох перекриваючихся інтервалах зміни η: $D_-=[-1,\eta_1]$, $D_+=[\eta_2,1]$, $\eta_-<\eta_2<\eta_1<\eta_+$. Еталонним рівнянням поблизу кожного з центрів є рівняння Уіттекера [24].

На проміжку D_- розв'язок рівняння (12) представляється у вигляді

$$V_-(\eta)=N_-[u'(\eta)]^{-1/2}M_{\chi,m/2}[2pu(\eta)], \quad (16)$$

де N_- – нормуюча постійна, $M_{\chi,m/2}(z)$ – регулярний в нулі розв'язок рівняння Уіттекера, а не визначений поки що індекс χ буде зв'язаний в подальшому з параболічними квантовими числами атомів (eZ_1) і (eZ_2). Застосовуючи рекурентну процедуру, описану в нашій попередній праці [21], знаходимо масштабне перетворення

$$u(\eta)=2(1-\beta)^{1/2}-[(1-2\beta-\eta)(1-\eta)]^{1/2}+2\beta\ln\left\{\frac{(1-\eta)^{1/2}+(1-2\beta-\eta)^{1/2}}{2^{1/2}\left[1+(1-\beta)^{1/2}\right]}\right\}+O\left(p^{-1}\right). \quad (17)$$

Асимптотичний розклад для спектрального параметру ν має вигляд

$$v = 2(1-\beta)^{1/2}\chi - \frac{1}{p}\left[\chi^2\left(1+\frac{3\beta}{4(1-\beta)}\right) + \frac{1-m^2}{4}\left(1+\frac{\beta}{4(1-\beta)}\right)\right] + O\left(p^{-2}\right). \quad (18)$$

Поблизу правого центру $(\eta \in D_+)$ розв'язок кутового рівняння (12) має вигляд, аналогічний (16), але з іншим параметром χ' і з іншим масштабним перетворенням

$$V_+(\eta) = N_+[v'(\eta)]^{1/2} M_{\chi', m/2}[2pv(\eta)], \quad (19)$$

$(N_+ = const)$,

$$v(\eta) = 1 - \eta + O\left(p^{-1}\right). \quad (20)$$

В даному випадку індекс χ' еталонної функції в (19) є величиною порядку $O(p)$; значення χ' і χ зв'язані між собою співвідношенням

$$\chi' = \beta p + \chi. \quad (21)$$

Побудовані розв'язки $V_-(\eta)$ і $V_+(\eta)$ повинні бути лінійно залежними в області перекривання D_- і D_+, тобто при $\eta_2 < \eta < \eta_1$, а отже, повинна виконуватися рівність

$$V_-(\eta) = CV_+(\eta), \ (c = const) \quad (22)$$

і рівність їй еквівалентна

$$V_-'(\eta)V_+(\eta) - V_-(\eta)V_+'(\eta) = 0. \quad (23)$$

Підставляючи в умову (23) знайдені розклади функцій $V_-(\eta)$ і $V_+(\eta)$ і використовуючи асимптотику функцій Уіттекера за великим аргументом в області D_- і за одночасно великим індексом χ' та аргументом в області D_+, отримуємо основне для подальших досліджень трансцендентне рівняння, яке пов'язує індекси χ і χ':

$$\left[\frac{1}{\pi}tg\left(\pi\left(\chi - \frac{m+1}{2}\right)\right)\right]\left[\frac{1}{\pi}tg\left(\pi\left(\chi' - \frac{m+1}{2}\right)\right)\right] = \delta^2. \quad (24)$$

Величина δ, що входить в це рівняння, визначається рівністю

$$\delta = (4p)^{\chi}\left[2\pi\Gamma\left(\chi + \frac{(1+m)}{2}\right)\Gamma\left(\chi + \frac{(1-m)}{2}\right)\right]^{-1/2} \exp\left\{-\left[2(1-\beta)^{1/2} + 2\beta\ln\frac{\beta^{1/2}}{1+(1-\beta)^{1/2}}\right]p + \chi\ln\frac{4(1-\beta)^{3/2}}{\beta}\right\}\left[1 + O\left(1/p\right)\right]. \quad (25)$$

Зазначимо, що отримана формула (25) відображає всі специфічні риси розглядуваної тут задачі і містить в собі відомі в літературі випадки асимптотичних розрахунків величини δ. Вона при $\beta \to 0$ $(Z_1 \sim Z_2 << R)$ відтворює (з тією ж точністю, що й формула Стірлінга) відомий результат праць [15-19]:

$$\delta^{(ac)} = \frac{(4p)^{\chi+\chi'}\exp(-2p)}{\left[\Gamma\left(\chi + \frac{1+m}{2}\right)\Gamma\left(\chi + \frac{1-m}{2}\right)\Gamma\left(\chi' + \frac{1+m}{2}\right)\Gamma\left(\chi' + \frac{1-m}{2}\right)\right]}\left[1 + O\left(1/p\right)\right], \quad (26)$$

а при виборі залежності параметра β від p у формі

$$\beta = \frac{1}{2} + \frac{\beta}{p} \quad (27)$$

$$\delta^{KC} = (2p)^{\chi}\left[2\pi\Gamma\left(\chi + \frac{1+m}{2}\right)\Gamma\left(\chi + \frac{1-m}{2}\right)\right]^{-1/2} \times$$

(таке виділення явної залежності β від p відповідає параметризації роботи [20]) приводить до виразу

$$\times\exp\left\{-\left[2^{1/2}-\ln\left(2^{1/2}+1\right)\right]p+2\beta\ln\left(2^{1/2}+1\right)+\frac{5}{2}\chi\ln 2\right\}\left[1+O\left[1/2\right]\right], \qquad (28)$$

отриманого Комаровим і Соловйовим [20]. Необхідно, однак, мати на увазі, що параметризація (27) обмежує коректність асимптотичних розкладів розв'язків крайових задач (7), (11) і (8), (12) лише околом деякого часткового значення міжцентрової відстані $R=R_0$, що визначається співвідношенням

$R_0=2Z_2\left[(\chi+k)/Z_1\right]^2$.

Тут R_0 – відстань між ядрами, при якій зсув енергії $-Z_2/R$ рівний енергії $E_1^{(0)}=-\frac{Z_1^2}{2(\chi+k)^2}=-\frac{-Z_1^2}{2n^2}$ незбуреного атома eZ_1.

Формули (17) і (20) разом з представленнями (16) і (19) дозволяють побудувати головний член асимптотики кутової функції $V(\eta)$. Так, використовуючи асимптотику функцій Уіттекера за великим аргументом в області D_- і за одночасно великим індексом χ' та аргументом в області D_+, неважко показати, що на перетині $D_-\bigcap D_+$ асимптотичні розклади, отримані із (16) і (19), співпадають з точністю до числового множника. Обчисливши цей множник у відповідності з умовою проміжного нормування

$$\int_{-1}^{1}\left(1-\eta^2\right)^{-1}V^2(\eta)d\eta=1, \qquad (29)$$

отримаємо

$$V_-(\eta)=\frac{d_-}{m!}\left[\frac{2\Gamma\left(\chi+\frac{1+m}{2}\right)}{\Gamma\left(\chi+\frac{1-m}{2}\right)}\right]^{1/2}M_{\chi,\frac{m}{2}}(2pu),$$

$$\eta\in D_-, \qquad (30)$$

$$V_+(\eta)=\frac{d_+}{m!}2^{1/2}(\beta\cdot p)^{\frac{m}{2}}(1-\beta)^{1/4}M_{\chi',\frac{m}{2}}(2p\nu),$$

$$\eta\in D_+, \qquad (31)$$

де

$$d_-=\left|\frac{\sin[\pi(2\chi'-1-m)]}{\sin[\pi(2\chi-1-m)]+\sin[\pi(2\chi'-1-m)]}\right|^{1/2}\operatorname{sgn}\left[\frac{-\cos\left[\pi\left(\chi-\frac{1+m}{2}\right)\right]}{\sin\left[\pi\left(\chi'-\frac{1+m}{2}\right)\right]}\right], \qquad (32)$$

$$d_+=\left|\frac{\sin[\pi(2\chi-1-m)]}{\sin[\pi(2\chi-1-m)]+\sin[\pi(2\chi'-1-m)]}\right|^{1/2}, \qquad d_+^2+d_-^2=1, \qquad (33)$$

$\operatorname{sgn}(x)$ – знак x, а функції $u(\eta)$ і $\nu(\eta)$ в аргументах функцій Уіттекера як і раніше даються виразами (17) і (20).

Розглянемо тепер випадок $Z_1\sim Z_2<<R\sim\chi'$, який відповідає задачі Z_1eZ_2 з мало відрізняючимися зарядами. Невелика різниця зарядів Z_1 і Z_2 приводить до $\beta=\frac{b}{2p^2}\sim O\left(1/p\right)$. Перехід в загальних формулах (38) і (39) до розглядуваної границі $\beta\to 0$ дає

$$V_-(\eta)=\frac{d_-}{m!}\left[\frac{2\Gamma\left(\chi+\frac{1+m}{2}\right)}{\Gamma\left(\chi+\frac{1-m}{2}\right)}\right]^{1/2}M_{\chi,\frac{m}{2}}(2p(1+\eta)), \qquad \eta\in D_-, \qquad (34)$$

$$V_+(\eta)=\frac{d_+}{m!}2^{1/2}(\chi')^{\frac{m}{2}}M_{\chi',\frac{m}{2}}(2p(1-\eta)),\qquad \eta\in D_+. \qquad (35)$$

У випадку параметризації (27) для двоцентрової кутової функції $V(\eta)$ діють вельми громіздкі представлення і ми їх тут не приводимо.

Приступимо тепер до розв'язування системи двох рівнянь (21), (24) відносно χ і χ'. Вигляд правої частини рівняння (24) підказує (так як δ – експоненційно мала за параметром p величина) метод розв'язування цієї системи - ітераційну процедуру. Тому природно шукати χ і χ' у вигляді

$$\chi=\chi_0+\delta\chi,\ \chi'=\chi_0'+\delta\chi', \qquad (36)$$

де χ_0, χ_0' - нульове наближення до розв'язку системи, а $\delta\chi$ і $\delta\chi'$ – експоненційно малі поправки, які знайдемо інтегруючи рівняння (21), (24). При розв'язуванні системи (21), (24) потрібно розрізняти два випадки в залежності від того, чи є $\beta\cdot p$ цілим чи ні [2]. Розглянемо спочатку “нерезонансний” випадок, коли $\beta\cdot p$ не є цілим числом і тільки один із тангенсів в (24) малий. Тоді рівняння (24) має дві серії розв'язків, що відповідають почерговому обертанню в нуль одного з тангенсів в (24). Покладемо

$$\chi_0=n_2+\frac{1+m}{2},\quad n_2=0,1,2,...; \qquad (37)$$

тоді χ_0' визначається формулою (21): $\chi_0'=n_2+\frac{1+m}{2}+\beta\cdot p$. Врахування правої частини рівняння (24) дає

$$\delta\chi=\delta\chi'=\frac{\pi\delta^2}{tg(\pi\beta\cdot p)}, \qquad (38)$$

де величина δ визначається формулою (25) з $\chi=\chi_0$. Підставляючи в (32), (33) значення χ_0, χ_0' із (37), що залежать від індексу n_2, отримуємо для коефіцієнтів кутової функції d_- і d_+ наступні оцінки

$$d_-\cong -sign[\sin(\pi\beta\cdot p)],$$

$$d_+\cong\left|\frac{\pi\delta}{\sin(\pi\beta\cdot p)}\right|. \qquad (39)$$

Кутова функція $V(\eta)$, що відповідає знайденим χ_0 і χ_0', в основному локалізована в області D_- і експонгенційно мала в області D_+. Стани, що залежать від індексу n_2 з (37), прийнято називати станами лівого центру (“eZ_1 - стани”) [50].

Якщо покласти

$$\chi_0'=n_2'+\frac{1+m}{2},\qquad n_2'=0,1,2,..., \qquad (40)$$

що відповідають локалізації кутової функції $V(\eta)$ в області D_+, то χ_0 визначається за формулою (21) ($\chi_0=n_2'+\frac{1+m}{2}-\beta\cdot p$) і замість (38), (39) отримуємо

$$\delta\chi'=\delta\chi=-\frac{\pi\delta^2}{tg(\pi\beta\cdot p)}, \qquad (41)$$

$$d_-\cong \mathrm{sgn}[\sin(\pi\beta\cdot p)]\left|\frac{\pi\delta}{\sin(\pi\beta\cdot p)}\right|,$$

$$d_+\approx 1. \qquad (42)$$

Стани, що залежать від індексу n_2' з (40), природно називати станами правого центру (“eZ_2 - станами”).

Розглянемо тепер “резонансний” випадок. Він виникає, коли при деякому p значення $\beta\cdot p$ потрапляють в малі околи цілих чисел

$$\beta\cdot p=n_2'-n_2, \qquad (43)$$

тобто рівності (37) і (40) виконуються одночасно. При цьому обидва тангенси в рівнянні (24) малі. За методом ітерацій отримуємо для $\delta\chi$ і $\delta\chi'$ вираз

$$\delta\chi=\delta\chi'=\pm\delta. \qquad (44)$$

два значення $\delta\chi$ відповідають тому, що маємо два близькі власні значення λ_η. Відбувається “квазіперетин” власних значень. Фактично це означає, що власні значення λ_η (див. (13), (18)), які при $\beta\cdot p=n_2'-n_2$ без врахування добавок $\delta\chi$, $\delta\chi'$ співпадають у всіх порядках по p, при врахуванні цих добавок виявляються розщепленими на експоненційно малу величину. Якщо звернутися до поведінки власних функцій, що відповідають квазіперетинаючимся власним значенням, то можна переконатися, що вони не локалізовані переважно на якомусь-одному із центрів і розрізняються тільки тим, що одна із них має додатковий нуль в підбар'єрній області $D_- \cap D_+$. В точках квазіперетину (43) для коефіцієнтів d_- і d_+ хвильової функції $V(\eta)$ справедливі оцінки

$$d_- = 2^{-1/2}\,\mathrm{sgn}\left[(-1)^{n_2+n_2'+1}\delta\chi\right],$$
$$d_+ = 2^{-1/2}. \qquad (45)$$

Завершуючи наш розгляд кутового рівняння (12), відмітимо, що експоненційні поправки $\delta\chi$ і $\delta\chi'$ при квазіперетинах (див. (44)) лінійні по δ, а не квадратичні, як в нерезонансному випадку (38), (41). Цього і слід було очікувати, оскільки в нерезонансному випадку, коли з даною енергією є стан тільки в одній ямі, ці поправки обумовлені двократними підбар'єрними переходами (із вихідної потенціальної ями в іншу і навпаки), тоді як в резонансному випадку із-за наявності зв'язаного стану в обох ямах маємо однократні "обмінно-перезарядочні" переходи. "Резонанс" проявляється в тому, що у порівнянні з нерезонансним випадком сильно зростає енергія обмінної взаємодії.

Побудуємо тепер асимптотичні розклади за великим параметром p для розв'язків крайової задачі Штурма-Ліувілля (11), (7). Перед тим як це зробити, необхідно фіксувати величину параметрів, що входять в радіальне рівняння (11), по відношенню до асимптотичного параметру p. Щоб була пряма відповідність з параметризацією кутового рівняння (12), припустимо, що α, m і спектральний параметр μ порядку одиниці. Це означає, що $\alpha = O\left(p^2\right)$, $\lambda_\xi = O\left(p^2\right)$, в той час як порядок різниці $\alpha - \lambda_\xi$ менше порядку складових α і λ_ξ, тобто $\alpha - \lambda_\xi = O(p)$. При виконанні умов $0 < \alpha < 1$ і $(1-\alpha)p >> 1$ в рівнянні (11) на промені $[1,\infty)$ є полюс при $\xi = 1$ і близька до нього точка повороту

$$\xi_t = 1 + \frac{\mu}{(1-\alpha)p}. \qquad (46)$$

Аналізуючи рівняння (11) приходимо до того ж еталонного рівняння, що і для кутового рівняння. Розв'язок вихідного рівняння (11) будується у вигляді

$$U(\xi) = N\left[\omega'(\xi)\right]^{1/2} M_{k,\frac{m}{2}}\left[2p\omega(\xi)\right], \qquad (47)$$

де N – нормувальна постійна. Якщо вибрати $k = n_1 + \frac{(m+1)}{2}$, де $n_1 = 0,1,2,\ldots$, то розв'язок буде спадати на нескінченності, а функцію Уіттекера можна буде виразити через поліноми Лагера. Безпосередній підрахунок показує, що n_1, яке входить в цю формулу, дорівнює числу нулів радіальної функції.

Як і раніше, будемо шукати $\omega(\xi)$ і μ у вигляді асимптотичних розкладів за оберненими степенями p. Тоді для визначення послідовних коефіцієнтів розкладів прийдеться по суті повторити всі викладки, які проводились при побудові асимптотики кутової функції на проміжку D_-. Тому ми не будемо їх тут відтворювати, а перейдемо зразу ж до результатів. Обчислення $\omega(\xi)$ з точністю до p^{-1} дає

$$\omega(\xi) = 2(1-\alpha)^{1/2}k - \left[(1-2\alpha+\xi)(1+\xi)\right]^{1/2} + 2\alpha ln\left\{\frac{(1+\xi)^{1/2} + (1-2\alpha+\xi)^{1/2}}{2^{1/2}\left[1+(1-\alpha)^{1/2}\right]}\right\}. \qquad (48)$$

Використовуючи граничну умову при $\xi=1$, а також розв'язок вихідного рівняння (11), виражений через розв'язок еталонного рівняння за формулою (47), одержимо наступний вираз для власних значень задачі (11),(7):

$$\mu = 2(1-\alpha)^{1/2}k + \frac{1}{p}\left[k^2\left(1+\frac{3\alpha}{4(1-\alpha)}\right)+\frac{1-m^2}{4}\left(1+\frac{\alpha}{4(1-\alpha)}\right)\right]+O\left(\frac{1}{p^2}\right). \qquad (49)$$

Асимптотичне представлення для радіальних функцій $U(\xi)$, нормованих у відповідності з умовою проміжного нормування

$$\int_1^\infty (\xi^2-1)^{-1}U^2(\xi)d\xi = 1, \qquad (50)$$

має вигляд

$$U(\xi)\approx \frac{1}{m!}\left[\frac{2(n_1+m)!}{n_1!}\right]^{1/2} M_{n_1+\frac{(1+m)}{2},\frac{m}{2}}(2p\omega), \qquad (51)$$

де функція $\omega(\xi)$ визначається виразом (48). Закінчуючи даний розділ, відмітимо, що власні значення і власні функції задачі Штурма-Ліувілля (11), (7) визначаються формулами (48), (49) і (51), аналогічним формулам (17), (18) і (16), відповідно, що і слід було очікувати, так як заміни $\beta\to\alpha$, $\eta\to-\xi$, $p\to-p$ і $\chi\to k$ переводять кутове рівняння (12) в околі $\eta=-1$ з граничною умовою $V(-1)=0$ в радіальне рівняння (11) в околі $\xi=1$ з граничною умовою $U(1)=0$.

3. Асимптотичні розклади для енергетичних термів. Розщеплення термів

Виражаючи λ_η і λ_ξ через ν і μ відповідно і прирівнюючи потім λ_η і λ_ξ, одержимо з урахуванням степеневих розкладів (18) і (49) рівняння

$$k\left[-2E-\frac{2(Z_2+Z_1)}{R}\right]^{1/2}+\chi\left[\left[-2E-\frac{2(Z_2-Z_1)}{R}\right]\right]^{1/2}+\left(\frac{1}{2R}\right)\left[2k^2+\left(3k^2+\frac{1-m^2}{4}\right)\times\right.$$

$$\left.\frac{(Z_2+Z_1)/R}{-2E-\dfrac{2(Z_2+Z_1)}{R}}-2\chi^2-\left(3k^2+\frac{1-m^2}{4}\right)\frac{(Z_2-Z_1)/R}{-2E-\dfrac{2(Z_2-Z_1)}{R}}\right]+O\left(\frac{1}{p^2}\right)=Z_1, \qquad (52)$$

котре з точністю до членів порядку $O(p^{-2})$ визначає енергію системи в асимптотичній області, у якій одночасно великі R, Z_2 і n_2'. Це рівняння розв'язується ітераціями, що приводять до степеневого розкладу для енергії системи. Для eZ_1 - термів, які переходять у кулонівську серію системи eZ_1, одержуємо

$$E_1 = E_1^{(0)} + E_1^{(1)} + O\left(\frac{1}{p^2}\right), \qquad (53)$$

де

$$E_1^{(0)} = -\frac{Z_1^2}{2(k+\chi)^2}-\frac{Z_2}{R},\quad E_1^{(1)}=\frac{3Z_2(k^2-\chi^2)}{2Z_1R^2}. \qquad (54)$$

При виведенні формул (53), (54) припускалося, що $Z_2 \sim R \sim O(p)$ і $Z_1 \sim k \sim \chi \sim O(1)$.

Розклад (53), (54) збігається з отриманим раніше [2] асимптотичним розкладом енергії E_1 за великою між'ядерною відстанню R. Із (53) та (54) видно, що перші дві ітерації рівняння (52) дають перші три члени стандартного асимптотичного розкладу енергії за оберненими степенями R.

Для серії термів, що відповідають атому eZ_2, ситуація більш складна, так як в задачі наявні три великі параметри одного порядку: $Z_2 \sim R \sim \chi' \sim O(p)$. Підставляючи розклад

$$E_2 = E_2^{(0)} + E_2^{(1)} + E_2^{(2)} + O\left(\frac{1}{p^3}\right) \qquad (55)$$

у рівняння (52), після ряду алгебраїчних перетворень, знаходимо

$$E_2^{(0)} = -\frac{\varepsilon^2}{2}, \qquad (56)$$

$$E_2^{(1)} = \frac{\varepsilon^2\left(\varepsilon \cdot k + Z_1 - \dfrac{Z_2}{\gamma}\right)}{Z_2}, \qquad (57)$$

$$E_2^{(2)} = \frac{\varepsilon^3}{Z_2}\left[-\frac{3\varepsilon \cdot k^2}{2Z_2} + \frac{Z_1 k}{Z_2}\left(-2 + \frac{3}{\gamma} - \frac{1}{\gamma^3}\right) + \frac{Z_1^2}{\varepsilon Z_2}\left(-\frac{1}{2} + \right.\right.$$
$$\left.\left. + \frac{2}{\gamma} - \frac{3}{2\gamma^2} - \frac{1}{\gamma^3} + \frac{1}{\gamma^4}\right) + \frac{3kZ_1Z_2}{\varepsilon^4\gamma^4R^2} - \frac{3Z_1^2Z_2}{2\varepsilon^5\gamma^5R^2}\right], \qquad (58)$$

де

$$\varepsilon = \frac{Z_2}{\chi'}, \qquad \gamma = \left(1 - \frac{2Z_2}{\varepsilon^2 R}\right)^{-1/2}. \qquad (59)$$

Перші члени у правих частинах рівностей (56) - (58) представляють відповідні члени в асимптотичному розкладі для енергії eZ_2 - терму за оберненими степенями χ'. Інші ж члени вказаних рівностей представляють суми нескінченних частинних рядів, що з'являються при асимптотичному розкладанні енергії E_2 за оберненими степенями R. Останнє твердження легко перевірити формальним розкладом усіх γ- залежних членів у ряди за степенями R^{-1} і порівнянням отриманих таким чином рядів з асимптотичним розкладом [2] енергії E_2 за оберненими степенями R.

Дві серії степеневих розкладів (типу (55), (53)) для eZ_1 і eZ_2 - термів, відповідають переважній локалізації електрона тільки у одного із двох зарядів. Врахування експоненційно малих по R поправок до E_1 і E_2 в цьому випадку є перевищенням точності. Проте, експоненційні поправки відіграють вирішальну роль у точках квазіперетину (43), де стани системи, що характеризуються параболічними квантовими числами з $n_1 = n_1'$ та $m = m'$, енергетично нерозрізнені (якщо не враховувати експоненційно малих поправок):

$$E_1(R_c) = E_2(R_c) = E_c = -\frac{(Z_2 - Z_1)^2}{2(\chi' - \chi)^2}, \qquad (60)$$

$$E_1 \equiv E_{[n_1 n_2 m]}, \quad E_2 \equiv E_{[n_2 n_2' m]},$$

де E_1 і E_2 визначенні асимптотичними рядами (53) і (55). Останнє співвідношення прямо випливає з умови квазіперетину (43). Врахування експоненційних поправок призводить, як і повинно бути, до розщеплення термів E_1 і E_2 на два близьких терми E_1' і E_2', що відповідають станам, в котрих електрон рухається одночасно в обох ямах. Мінімальна відстань між термами (розщеплення) $\Delta E(R_c)$ визначається в цьому випадку підбар'єрною резонансною взаємодією і оцінюється за формулою вигляду [2,20]

$$\Delta E(R_c) = \delta E_1(R_c) + \delta E_2(R_c) = T\delta(R_c), \quad (61)$$

де δ визначено рівністю (25).

Комаров і Славянов [14,16] запропонували визначати T, диференціюючи за індексами вираз

$$E_c = -\frac{(Z_2 - Z_1)^2}{2\tilde{\beta}^2},$$

$$\tilde{\beta} = \beta \cdot p = (Z_2 - Z_1)(-2E)^{-1/2} = n_2' - n_2,$$

що дає

$$T_{\hat{E}\tilde{N}} = 2\frac{(Z_2 - Z_1)^2}{(n_2' - n_2)^3}. \qquad (62)$$

Пауер [19] піддав критиці цей вираз, відзначаючи, що він не дає правильного результату в симетричному випадку $Z_1 = Z_2$, $n_2 = n_2'$, і запропонував диференціювати за індексами півсуму E_1 і E_2:

$$T_p = \frac{\partial E_1}{\partial n_2} + \frac{\partial E_2}{\partial n_2'}. \qquad (63)$$

Пономарьов [25] звернув увагу, що при диференціюванні E_1 та E_2 за індексами потрібно враховувати залежність $\tilde{\beta}(E)$. Слідуючи його ідеї, Комаров і Соловйов одержали [20]

$$T_{\ddot{I}\hat{E}\tilde{N}} = \frac{\partial E_1/\partial n_2}{\sqrt{1 + \dfrac{\partial\tilde{\beta}}{\partial E_1}\dfrac{\partial E_1}{\partial n_2}}} + \frac{\partial E_2/\partial n_2'}{\sqrt{1 + \dfrac{\partial\tilde{\beta}}{\partial E_2}\dfrac{\partial E_2}{\partial n_2'}}}. \qquad (64)$$

Числові значення передекспоненти, що даються цими формулами, відрізняються між собою несуттєво. Найбільш послідовною ми вважаємо формулу (64), яку і використовуємо у наших подальших обчисленнях. Всі величини, що входять у вираз (64), можна обчислювати за допомогою асимптотичних розкладів (53) і (55), однак простіше скористатися стандартними розкладами E_1 і E_2 за оберненими степенями R [2], формула (54). Тоді для різниці термів у точках квазіперетину R_c одержуємо

$$\Delta E(R_c) = \left\{ \frac{Z_1^2}{n^3} \left[1 + \frac{Z_1^2 (Z_2 - Z_1)}{n^3 (-2E_c)^{3/2}} \right]^{-1/2} + \frac{Z_2^2}{(n')^3} \left[1 - \frac{Z_2^2 (Z_2 - Z_1)}{(n')^3 (-2E_c)^{3/2}} \right]^{-1/2} \right\} \delta_c , \qquad (65)$$

де $n = \chi + k$, $n' = \chi' + k$, а $\delta_c = \delta(R_c)$ визначено в (25). Значення параметра p визначаються співвідношенням

$$p_c = \frac{1}{2} \frac{Z_2 - Z_1}{n_2' - n_2} R_c , \qquad (66)$$

котре випливає з означення p та рівності (60) для E_c.

Оскільки розклади (53), (55) для E_1 і E_2 є асимптотичними, координата квазіперетину R_c вводиться формулами (60) наближено. Можливі способи знаходження R_c з рівностей (60) досить докладно описані в [2]. Нижче ΔE обчислюються в точках квазіперетину R_c, котрі визначались в [26,27] з умов мінімальності різниці термів $E_1' - E_2'$, отриманих чисельно на ЕОМ.

4. Обговорення результатів

Таким чином, в даній роботі методом еталонного рівняння докладно вивчена асимптотика дискретного спектра задачі двох кулонівських центрів з сильно відрізняючимися зарядами. Побудовані рівномірні асимптотичні розклади кутових і радіальних кулонівських сфероїдальних функцій та обчислені дві степеневі поправки до енергії.

При отриманні асимптотичних формул (65), (25) для ΔE істотно використовувалося припущення, що електрон переходить від одного ядра до іншого під бар'єром. Для взаємодії атома водню ($Z_1 = p = 1$) з голими ядрами заряду $Z = Z_2$ (так звана задача peZ) це справедливо при виконанні нерівності
$R_c > R_0 = 2n\left[(n-\Delta)(2nZ - n - \Delta)^{1/2} - \Delta\right]$,
де $\Delta = (n_1 - n_2)$ - електричне квантове число, а R_0 - відстань між ядрами, при якій рівень енергії торкається вершини одновимірного бар'єру в кутовому рівнянні (6). На відстанях між центрами $R < R_0$ електрон рухається по узагальненій орбіті, що охоплює відразу два ядра, так що розділяти рух електрона по різним потенціальним ямам у цьому випадку не можна і говорити про енергію обмінної взаємодії на цих відстанях немає змісту.

Як уже зазначалося, асимптотичний по своїй природі метод еталонного рівняння забезпечує високу точність при достатньо великих R. Якісно правильний опис спектра системи Z_1eZ_2 при не надто великих міжцентрових відстанях можливий лише при вдалому виборі еталонних рівнянь. Тому має зміст оцінити межі застосовності і практичну точність знайдених асимптотичних розкладів і наближених формул шляхом порівняння з результатами інтегрування задачі Z_1eZ_2 на ЕОМ. У табл. порівнюються точні числові [26,27] значення $\Delta E(R_c)$ в системі peZ ($5 \le Z \le 26$) і значення, що даються формулами Грінланда [28] та нашими формулами (65), (25). Числа в круглих дужках табл. означають степені десяти, на котрі слід домножити величини, що стоять перед ними; Nlm - сферичні квантові числа в границі об'єднаного атома ($R = 0$).

Як видно з цієї таблиці, значення $\Delta E(R_c)$, що даються нашими формулами (65), (25), вельми близькі до точних. Близькість цих результатів досить переконливо говорить на користь методу еталонного рівняння.

Таблиця. Значення розщеплення термів $\Delta E(R_c)$ при квазіперетинах R_c в системі peZ ($5 \le Z \le 26$).

Z	Молекулярні стани (Nlm)-($N'l'm'$)	R_c	$\Delta E(R_c)$, формули (65), (25)	$\Delta E(R_c)$ [109]	$\Delta E(R_c)$ точне [107, 108]
5	(5,4,0)-(4,3,0)	13,0	5,1 (-3)	5,4 (-3)	4,2 (-3)
6	(5,4,0)-(4,3,0)	8,1	8,7 (-2)	9,8 (-2)	1,0 (-1)
7	(6,5,0)-(5,4,0)	11,6	2,9 (-2)	3,1 (-2)	2,4 (-2)
7	(5,4,0)-(4,3,0)	6,4	0,16	0,21	0,24
8	(7,6,0)-(6,5,0)	16,8	2,3 (-3)	2,5 (-3)	2,0 (-3)
8	(6,5,0)-(5,4,0)	8,9	0,11	0,12	0,10
8	(5,4,0)-(4,3,0)	5,4	0,22	0,32	0,38
10	(8,7,0)-(7,6,0)	16,1	8,0 (-3)	9,8 (-3)	6,0 (-3)
10	(7,6,0)-(6,5,0)	10,0	0,10	0,12	0,92 (-1)
10	(6,5,0)-(5,4,0)	6,5	0,24	0,32	0,3
14	(10,9,0)-(9,8,0)	17,2	1,5 (-2)	3,7 (-2)	1,1 (-2)
14	(9,8,0)-(8,7,0)	12,2	9,3 (-2)	0,22	7,0 (-2)
14	(8,7,0)-(7,6,0)	8,9	0,20	0,39	0,2

Література:

1. Cherry T.M. Trans.Amer.Math.Soc.-1950.-vol.68,N 4.-p.224-257.
2. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции.-М.:Наука,1976.-319с.
3. Виницкий С.И., Пономарев Л.И. ЭЧАЯ.- 1982.- т.13, вып.6.- с.1336-1418.
4. Виницкий С.И., Кадомцев М.В. Препринт ОИЯИ-Р4-85-250, Дубна, 1985.- 8с.
5. Герштейн С.С., Кривченков В.Д. ЖЭТФ.- 1961.- т.40, вып.5.- с.1491-1502.
6. Аллилуев С.П., Матвеенко А.В. ЖЭТФ.- 1966.- т.51, вып.6.- с.1873-1879.
7. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖЭТФ.- 1967.- т.52, вып.5.- с.1273-1282.
8. Соловьев Е.А. // УФН.- 1989.- т.157, вып.3.- с.437-476.
9. Соловьев У.А // ЖЭТФ.- 1981.- т.81, вып.7.- с.1681-1692.
10. Coulson C.A., Giliam C.M. Proc.Roy.Soc. Edinburgh A.- 1946-1948.- vol.62, N 3.- p.360-268/
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика.- М.:Наука, 1974.- 752с.

12. Смирнов Б.М ЖЭТФ.- 1964.- т.46,вып.3.- с.1017-1024.
13. Овчинников А.А., Суханов А.Д. ДАН СССР.- 1964.- т.157,№5.- с.1092-1095.
14. Комаров И.В., Славянов С.Ю ЖЭТФ.- 1967.- т.52, вып.5.- с.1367-1377.
15. Комаров И.В., Славянов С.Ю. Вестник ЛГУ.- 1969.- вып.16.- с.30-38.
16. Komarov I.V., Slavjanov S.Yu. J.Phys.B.- 1968.- vol.1.,N 2.- p.1066-1072.
17. Дамбург Р.Я., Пропин Р.Х. Изв.АН Латв.ССР, сер.физич. и техн.- 1968.- вып.1.- с.50-59.
18. Дамбург Р.Я., Пропин Р.Х. Изв. АН Латв.ССР, сер. Физич. и техн.- 1971.- вып.1.- с.19-23.
19. Power J.D. Phil. Trans.Roy.Soc.London A.- 1973.- vol.274, N 1246.- p.663-702.
20. Комаров И.В., Соловьев Е.А ТМФ.- 1979.- т.40, №1.- с.130-136.
21. Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю., Янев Р.К., Грозданов Т.П. ТМФ.- 1991.- т.87, № 1.- с.97-109.
22. Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю. УФЖ.- 1990.- т.35, № 10.- с.1457-1463.
23. Лазур В.Ю., Машика Ю.Ю. УФЖ.- 1988.- т.33, №7.- с.1000-1007.
24. Бейтман Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции: Пер. с англ. В 2 т.- М.:Наука, 1974.- Т.2.- 295с.
25. Пономарев Л.И. ЖЭТФ.- 1968.- т.55, вып.5.- с.1836-1844.
26. Olson R.E., Salop A. Phys.Rev.A.- 1976.- vol.14, N 3.- p.579-585.
27. Комаров И.В., Трускова Н.Ф. Препринт ОИЯИ-Р4-11-445, Дубна, 1978.- 30с.
28. Greenland P.T. Phys.Rep.- 1982.- vol.81, N 2.- p.131-237.

THE ASYMPTOTIC APPROACH TO THE TWO-COULOMB-CENTRE PROBLEM WITH STRONGLY DISTINGUISHED CHARGES

V.Yu. Lazur, Yu.Yu. Mashika

Uzhgorod National University, Department of Theoretical Physics,88000, Uzhgorod, Voloshin str., 32

The asymptotics of the discrete spectrum of the two-Coulomb-centre problem with strongly distinguished charges is studies by the etalon equation method in details. The uniform asymptotic expansions of angular and radial Coulomb spheroidal functions are constructed and two power corrections to energy are calculated. The applicability criterions of the obtained formulas and comparison with numerical calculations are given