объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

3478/82

2/VIII-82

Р2-82-249

Л.Г.Мардоян, Г.С.Погосян,
А.Н.Сисакян, В.М.Тер-Антонян

СФЕРОИДАЛЬНЫЙ АНАЛИЗ АТОМА ВОДОРОДА

Направлено в "Journal of Physics A"

1982

ВВЕДЕНИЕ

Сфероидальные координаты являются естественным средством исследования многих задач математической физики [1]. В квантовой механике эти координаты используются при описании поведения заряженной частицы в поле двух кулоновских центров. Расстояние R между центрами выбирается в качестве размерного параметра, характеризующего сфероидальные координаты, и имеет динамический смысл, то есть входит в выражение для спектра энергий. Если заряд одного из центров положить равным нулю, то задача переходит в одноцентровую и параметр R становится чисто кинематическим. Это значительно упрощает задачу. В то же время математическая структура сфероидальных уравнений во многом остается прежней, так как энергия входит как в радиальное, так и в угловое уравнение. В связи с последним сфероидальный анализ атома водорода преобретает смысл первого шага к исследованию двухцентровой кулоновской задачи.

Сфероидальные координаты при $R \to 0$ и $R \to \infty$ переходят в сферические и параболические, если положения кулоновского центра и заряженной частицы в процессе предельного перехода остаются фиксированными. Отсюда следует "принцип соответствия", утверждающий, что все формулы, получающиеся в сфероидальных координатах, должны в указанных пределах переходить в соответствующие сферические и параболические аналоги. Несмотря на естественность этого принципа, реализация самого предельного перехода оказывается не тривиальной, так как, с одной стороны, сфероидальные кулоновские функции выражаются через величины, подчиняющиеся трехчленным рекуррентным соотношениям, а с другой - сферические и параболические кулоновские волновые функции строятся на базе двухчленных рекуррентных соотношений. Поэтому прежде чем делать предельные переходы в волновых функциях, матричных элементах и т.д., необходимо выяснить, каким образом в этих пределах трехчленные рекуррентные соотношения переходят в двухчленные.

В настоящей работе, в отличие от посвященных аналогичным вопросам работ [2,3], процедуре предельных переходов уделяется значительное внимание. После краткого напоминания некоторых фактов и формул, касающихся атома водорода в сфероидальных координатах, исследуются предельные переходы $R \to 0$ и $R \to \infty$ в трехчленных рекуррентных соотношениях. Далее процедура предельных переходов проводится на уровне волновых функций и дока-

Объед... ядерн... ...ледований

зывается, что они удовлетворяют "принципу соответствия". В следующих разделах получены замкнутые выражения для трансформационных коэффициентов, задающих разложения сфероидальной волновой функции атома водорода по сферическому и параболическому базисам, и исследуются предельные переходы в них. Заключительная часть работы содержит некоторые частные результаты.

1. ВВОДНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Приведем здесь сведения, необходимые для дальнейшего описания. Сфероидальные координаты ξ, η и ϕ определяются следующим образом:

$$x = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\cos\phi,$$

$$y = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\sin\phi,$$

$$z = \frac{R}{2}(\xi\eta+1),$$

причем $1 \le \xi < \infty$; $-1 \le \eta \le 1$; $0 \le \phi \le 2\pi$.

При $R \to 0$

$$\xi \to \frac{2r}{R}, \quad \eta \to \cos\theta, \qquad /1.1а/$$

а при $R \to \infty$

$$\xi \to 1 + \frac{\mu}{R}, \quad \eta \to -1 + \frac{\nu}{R}, \qquad /1.1б/$$

где r и θ - сферические, ν и μ - параболические координаты: $\nu = r+z$, $\mu = r-z$. В обоих пределах точка (x,y,z) и координаты кулоновского центра считаются фиксированными.

Сфероидальная волновая функция атома водорода имеет вид

$$\psi_{nqm}(\xi,\eta,\phi;R) = C_{nqm}(R)\,\Pi_{nqm}(\xi,R)\,\Xi_{nqm}(r,R)\,\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}. \qquad /1.2/$$

Здесь $C_{nqm}(R)$ - нормировочный фактор, а смысл индексов n, q и m будет разъяснен ниже. Известно, что

$$\Pi_{nqm}(\xi,R) = e^{-R\xi/2n}(\xi^2-1)^{|m|/2} f(\xi,R), \qquad /1.3а/$$

$$\Xi_{nqm}(\eta,R) = e^{-R\eta/2n}(1-\eta^2)^{|m|/2} g(\eta,R), \qquad /1.3б/$$

причем $f(\xi,R)$ и $g(\eta,R)$ - полиномы $(n-|m|-1)$-й степени по ξ и η.

Функции Π и Ξ, которые принято называть радиальной и угловой функцией в кулоновской системе единиц, удовлетворяют уравнениям

$$\frac{d}{d\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{d\Pi}{d\xi}\right] + \left[R\xi + \frac{ER^2}{2}\xi^2 - \frac{m^2}{\xi^2-1} + A\right]\Pi = 0, \qquad /1.4а/$$

$$\frac{d}{d\eta}\left[(1-\eta^2)\frac{d\Xi}{d\eta}\right] + \left[-R\eta - \frac{ER^2}{2}\eta^2 - \frac{m^2}{1-\eta^2} - A\right]\Xi = 0, \qquad /1.4б/$$

A - это константа разделения в сфероидальных координатах; она зависит от R и квантовых чисел n, q и m, где n - главное квантовое число $(E=-1/2n^2)$, m - азимутальное квантовое число, а q изменяется в пределах $1 \le q \le n-|m|$ и нумерует $n-|m|$ значений константы разделения A, которые она может принимать при фиксированных n и $|m|$.

Имеют место условия ортогональности по q:

$$\int_1^\infty \Pi^*_{nq'm}(\xi,R)\,\Pi_{nqm}(\xi,R)\,d\xi = 0, \qquad /1.5а/$$

$$\int_{-1}^1 \Xi^*_{nq'm}(\eta,R)\,\Xi_{nqm}(\eta,R)\,d\eta = 0. \qquad /1.5б/$$

Как собственные функции гамильтониана и проекции орбитального момента на ось z волновые функции /1.2/ ортогональны и по остальным двум индексам.

2. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

В литературе используются различные типы разложений для функций $f(\xi, R)$ и $g(\eta,R)$: по степеням $(\xi-1)$ и $(\eta-1)$, по полиномам Лагерра от специальным образом подобранных комбинаций переменных ξ и η и др. Мы будем в дальнейшем придерживаться разложений

$$f(\xi,R) = \sum_{s=0}^{n-|m|-1} a_s(\xi-1)^s, \qquad /2.1а/$$

$$g(\eta,R) = \sum_{s=0}^{n-|m|-1} b_s(1+\eta)^s. \qquad /2.1б/$$

В разделе 4 будет показано, что именно эти разложения удовлетворяют принципу соответствия. Из /1.3/-/1.4/ и /2.1/ следуют трехчленные рекуррентные соотношения:

$$\alpha_s a_{s+1} + \beta_s a_s + R\gamma_s a_{s-1} = 0, \qquad /2.2а/$$

$$-\alpha_s b_{s+1} + \tilde{\beta}_s b_s + R\gamma_s b_{s-1} = 0, \qquad /2.2б/$$

где

$$\alpha_s = 2(s+1)(s+|m|+1), \qquad /2.3а/$$

$$\beta_s = (s+|m|)(s+|m|+1) + \frac{R}{n}(n-|m|-1-2s) - \frac{R^2}{4n^2} + A, \qquad /2.3б/$$

$$\tilde{\beta}_s = (s+|m|)(s+|m|+1) - \frac{R}{n}(n-|m|-1-2s) - \frac{R^2}{4n^2} + A, \qquad /2.3в/$$

$$\gamma_s = (n-|m|-s)/n. \qquad /2.3г/$$

Соблюдаются также "условия обрезания":

$$a_0 = 1, \quad a_{-1} = a_{n-|m|} = 0,$$

$$b_0 = 1, \quad b_{-1} = b_{n-|m|} = 0.$$

Подчиним волновую функцию условию нормировки

$$\int |\psi_{nqm}|^2\, dV = 1.$$

Как будет показано в дальнейшем, отсюда следует, что

$$C_{nqm}(R) \xrightarrow{R\to 0} e^{i\Phi_0}\sqrt{\frac{(\ell+|m|)!\,(n+\ell)!}{2(\ell-|m|)!\,(n-\ell-1)!\,(2\ell+1)}}\;\frac{\ell!\,R^{\ell}}{[(2\ell)!]^2(|m|!)^2}\;\frac{2^{\ell-2|m|+1}(\ell+|m|)!}{h^{\ell+2}}, \qquad /2.4а/$$

$$C_{nqm}(R) \xrightarrow{R\to\infty} e^{i\Phi_\infty}\frac{\sqrt{2}}{n^2}\;\frac{1}{(2n)^{|m|}(|m|!)^2}\sqrt{\frac{(n_1+|m|)!}{n_1!}\;\frac{(n_2+|m|)!}{n_2!}}\;R^{|m|}, \qquad /2.4б/$$

где ℓ, n_1 и n_2 - известные сферические и параболические квантовые числа, а фазы Φ_0 и Φ_∞ пока произвольны.

3. ПРЕДЕЛЬНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В РЕКУРРЕНТНЫХ СООТНОШЕНИЯХ

Рекуррентное соотношение /2.2а/ представляет собой систему линейных однородных уравнений относительно a_s, и поэтому соответствующий детерминант должен обращаться в нуль. В пределе $R\to\infty$ можно отбросить в этом детерминанте коэффициенты α_s "на фоне" бесконечно больших коэффициентов β_s и $R\gamma_s$ и записать его в виде произведения всех коэффициентов β_s. Условие равенства детерминанта нулю тогда приводит к требованию обращения в нуль одного из сомножителей β_s. Обозначая соответствующий этому сомножителю номер s через n_2, имеем

$$A(R) \xrightarrow{R\to\infty} -\frac{R}{n}(n-|m|-1-2n_2) + \frac{R^2}{4n^2}. \qquad /3.1а/$$

Рассуждая аналогично по отношению к рекуррентному соотношению /2.2б/, можно показать, что должно существовать такое n_1, для которого $\tilde{\beta}_{n_1}=0$ и, следовательно,

$$A(R) \xrightarrow{R\to\infty} \frac{R}{n}(n-|m|-1-2n_1) + \frac{R^2}{4n^2}. \qquad /3.1б/$$

Формулы /3.1а/ и /3.1б/ совместимы, если $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$, то есть если n_1 и n_2 - суть параболические квантовые числа. Из /3.1/, /2.3б/ и /2.3в/ следует, что при $s \neq n_1$, $s \neq n_2$

$$\beta_s \xrightarrow{R\to\infty} R\beta_s^{(1)}, \qquad /3.2а/$$

$$\tilde{\beta}_s \xrightarrow{R\to\infty} R\beta_s^{(2)}, \qquad /3.2б/$$

где величины $\beta_s^{(1)}$ и $\beta_s^{(2)}$ не зависят от R и имеют вид

$$\beta_s^{(1)} = 2\frac{n_2-s}{n}, \qquad \beta_s^{(2)} = -2\frac{n_1-s}{n}. \qquad /3.2в/$$

Эти формулы вместе с условиями обрезания $a_{-1}=0$ и $b_{-1}=0$ показывают, что в пределе $R\to\infty$ трехчленные рекуррентные соотношения /2.2/ переходят в следующие двухчленные:

$$\alpha_s a_{s+1} + R\beta_s^{(1)} a_s = 0, \qquad /3.3а/$$

$$-\alpha_s b_{s+1} + R\beta_s^{(2)} b_s = 0, \qquad /3.3б/$$

если $0 \le s \le n_1-1$ и $0 \le s \le n_2-1$. Аналогично, пользуясь формулами /3.2/ и условиями обрезания $a_{n-|m|}=0$ и $b_{n-|m|}=0$, видим, что в пределе $R\to\infty$ вместо /2.2/ имеем

$$\beta_s^{(1)} a_s + \gamma_s a_{s-1} = 0, \qquad /3.4а/$$

$$\beta_s^{(2)} b_s + \gamma_s b_{s-1} = 0, \qquad /3.4б/$$

если $n_1 + 1 \le s \le n-|m|-1$ либо $n_2 + 1 \le s \le n-|m|-1$.

Рассмотрим теперь случаи, когда $s=n_1$ и $s=n_2$. При $R\to\infty$ константа A может быть разложена по степеням $1/R$, причем согласно /3.1а/ и /3.1б/ в это разложение могут входить лишь члены со степенями $1/R$ не выше -2.

Отсюда следует, что

$$A(R) \xrightarrow{R\to\infty} A_0 - \frac{R}{n}(n-|m|-1-2n_2) + \frac{R^2}{4n^2}, \qquad /3.5а/$$

$$A(R) \xrightarrow{R\to\infty} A_0 + \frac{R}{n}(n-|m|-1-2n_1) + \frac{R^2}{4n^2}, \qquad /3.5б/$$

так как должно соблюдаться условие $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$. Подставляя теперь эти формулы в /2.3б/ и /2.3в/, получим

$$\beta_{n_2} = (n_2 + |m|)(n_2 + |m| + 1) + A_0,$$

$$\beta_{n_1} = (n_1 + |m|)(n_1 + |m| + 1) + A_0.$$

Постоянная A_0 может быть определена из рекуррентного соотношения /2.2а/ при $s = n_2$:

$$\alpha_{n_2} a_{n_2+1} + \beta_{n_2} a_{n_2} + R\gamma_{n_2} a_{n_2-1} = 0,$$

если в него подставить выражения

$$a_{n_2-1} = -\frac{1}{R}\frac{\alpha_{n_2-1}}{\beta^{(1)}_{n_2-1}} a_{n_2},$$

$$a_{n_2+1} = -\frac{\gamma_{n_2+1}}{\beta^{(1)}_{n_2+1}} a_{n_2},$$

являющиеся следствием двухчленных рекуррентных соотношений /3.3а/ и /3.4а/. Результат таков:

$$A_0 = 2n_2^2 - 2n_2(n-|m|-1) - (|m|+1)(n-1).$$

Заметим, что эта формула была получена в работе [2] из анализа рекуррентных соотношений, получающихся в случае, когда функции $f(\xi;R)$ и $g(\eta;R)$ ищутся в виде разложений по полиномам Лагерра.

Аналогичным образом может исследоваться предел $R \to 0$. При этом /2.2/ переходят в двухчленные рекуррентные соотношения:

$$\alpha_s a_{s+1} + \bar\beta_s a_s = 0, \qquad /3.6а/$$

$$-\alpha_s b_{s+1} + \bar\beta_s b_s = 0, \qquad /3.6б/$$

если $0 \le s \le \ell - |m| - 1$ и

$$\bar\beta_s a_s + R\gamma_s a_{s-1} = 0, \qquad /3.7а/$$

$$\bar\beta_s b_s + R\gamma_s b_{s-1} = 0, \qquad /3.7б/$$

если $\ell - |m| + 1 \le s \le n - |m| - 1$. В этих соотношениях

$$\bar\beta_s = (s+|m|)(s+|m|+1) + A(0). \qquad /3.7в/$$

Рассмотрим еще случай, когда $s = \ell - |m|$. При малых R имеем

$$A(R) \xrightarrow{R\to 0} A(0) + A'(0)R + O(R^2).$$

В работе [2] было показано, что $A(0) = -\ell(\ell+1)$. Учитывая это, а также /2.3б/ и /2.3в/, получим

$$\beta_{\ell-|m|} \xrightarrow{R\to 0} \epsilon_{\ell-|m|} R + O(R^2), \qquad /3.8а/$$

$$\tilde\beta_{\ell-|m|} \xrightarrow{R\to 0} \tilde\epsilon_{\ell-|m|} R + O(R^2), \qquad /3.8б/$$

где

$$\epsilon_{\ell-|m|} = A'(0) + \frac{n+|m|-1-2\ell}{n},$$

$$\tilde\epsilon_{\ell-|m|} = A'(0) + \frac{n+|m|-1-2\ell}{n}.$$

Из этих формул следует, что рекуррентные соотношения /2.2/ при $s = \ell - |m|$ принимают вид

$$\alpha_{\ell-|m|} a_{\ell-|m|+1} + \epsilon_{\ell-|m|} R a_{\ell-|m|} + \gamma_{\ell-|m|} R a_{\ell-|m|-1} = 0, \qquad /3.9а/$$

$$-\alpha_{\ell-|m|} b_{\ell-|m|+1} + \tilde\epsilon_{\ell-|m|} R b_{\ell-|m|} + \gamma_{\ell-|m|} R b_{\ell-|m|-1} = 0. \qquad /3.9б/$$

Согласно /3.6/ и /3.7/ величины $a_{\ell-|m|+1}$, $a_{\ell-|m|-1}$, $b_{\ell-|m|+1}$ и $b_{\ell-|m|-1}$ выражаются соответственно через $a_{\ell-|m|}$ и $b_{\ell-|m|}$. Поэтому /3.9а/ и /3.9б/ должны приводить к ограничениям, при соблюдении которых условия обрезания при $s=-1$ и $s=n-|m|$ являются согласованными. Пользуясь /3.8а/ и /3.8б/, легко показать, что таким ограничением является условие $A'(0) = 0$.

4. ПРЕДЕЛЬНЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ

Функции $f(\xi, R)$ и $g(\eta, R)$ при $R \to \infty$ согласно /1.1б/ ведут себя следующим образом:

$$f(\xi,R) \xrightarrow{R\to\infty} \sum_{s=0}^{n_1+n_2} \frac{a_s}{R^s}\mu^s, \quad g(\eta,R) \xrightarrow{R\to\infty} \sum_{s=0}^{n_1+n_2} \frac{b_s}{R^s}\nu^s.$$

Из двухчленных рекуррентных соотношений /3.3а/ и /3.3б/ следует, что

$$a_s \xrightarrow{R\to\infty} (-1)^s \frac{\beta_0^{(1)} \ldots\ldots \beta^{(1)}_{s-1}}{\alpha_0 \ldots\ldots \alpha_{s-1}} R^s, \quad 1 \le s \le n_2, \qquad /4.1а/$$

$$b_s \xrightarrow{R\to\infty} \frac{\beta_0^{(2)} \ldots\ldots \beta^{(2)}_{s-1}}{\alpha_0 \ldots\ldots \alpha_{s-1}} R^s, \quad 1 \le s \le n_2, \qquad /4.1б/$$

$$a_s \xrightarrow{R\to\infty} (-1)^{s-n_2} \frac{\gamma_{n_2+1} \ldots\ldots \gamma_s}{\beta^{(1)}_{n_2+1} \ldots\ldots \beta^{(1)}_s} a_{n_2}, \quad n_2+1 \le s \le n_1+n_2, \qquad /4.1в/$$

$$b_s \xrightarrow{R\to\infty} (-1)^{s-n_1} \frac{\gamma_{n_1+1} \ldots\ldots \gamma_s}{\beta^{(2)}_{n_1+1} \ldots\ldots \beta^{(2)}_s} b_{n_1}, \quad n_1+1 \le s \le n_1+n_2, \qquad /4.1г/$$

и поэтому функции $f(\xi, R)$ и $g(r, R)$ переходят в полиномы степени n_2 и n_1 соответственно. Согласно /4.1а/, /4.1б/, /2.3а/ и /3.2а/

$$a_s \xrightarrow{R\to\infty} \frac{(-1)^s}{n^s}\,\frac{n_2!}{(n_2-s)!}\,\frac{|m|!}{(s+|m|)!}\,\frac{R^s}{s!}, \quad 1\le s\le n_2, \qquad /4.2а/$$

$$b_s \xrightarrow{R\to\infty} \frac{(-1)^s}{n^s}\,\frac{n!}{(n_1-s)!}\,\frac{|m|!}{(s+|m|)!}\,\frac{R^s}{s!}, \quad 1\le s\le n_1, \qquad /4.2б/$$

и, следовательно,

$$f(\xi, R) \xrightarrow{R\to\infty} F(-n_2;\ |m|+1;\ \frac{\mu}{n}),$$

$$g(\eta, R) \xrightarrow{R\to\infty} F(-n_1;\ |m|+1;\ \frac{\nu}{n}).$$

Теперь, пользуясь /2.4б/, легко показать, что при $R\to\infty$ в самом деле /1.2/ переходит в нормированную волновую функцию в параболических координатах:

$$\psi_{n_1n_2m}(\nu,\mu,\phi) = \frac{\sqrt{2}}{n^2}\,\frac{1}{(|m|!)^2}\sqrt{\frac{(n_1+|m|)!}{n_1!}\,\frac{(n_2+|m|)!}{n_2!}}\,\left(\frac{\nu}{n}\right)^{|m|/2}\left(\frac{\nu}{n}\right)^{|m|/2}\times \qquad /4.3/$$

$$\times\,\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}}\cdot e^{-(\mu+\nu)/2n}\quad F(-n_1;\ |m|+1;\ \frac{\nu}{n})\,F(-n_2;\ |m|+1;\ \frac{\mu}{n}),$$

если $\Phi_\infty = 0$.

В пределе $R\to 0$ согласно /1.1а/

$$\Pi(\xi, R) \xrightarrow{R\to 0} e^{-r/h}\left(\frac{2r}{R}\right)^{|m|}\sum_{s=0}^{n-|m|-1}\frac{a_s}{R^s}(2r)^s, \qquad /4.4а/$$

$$\Xi(\eta, R) \xrightarrow{R\to 0} (\sin\theta)^{|m|}\sum_{s=0}^{n-|m|-1} b_s(1+\cos\theta)^s. \qquad /4.4б/$$

Из двучленных рекуррентных соотношений /3.6/ и /3.7/ следует, что

$$a_s \xrightarrow{R\to 0} (-1)^s\,\frac{\bar\beta_0\ \ldots\ \bar\beta_{s-1}}{\alpha_0\ \ldots\ \alpha_{s-1}}, \qquad /4.5а/$$

$$b_s \xrightarrow{R\to 0} \frac{\bar\beta_0\ \ldots\ \bar\beta_{s-1}}{\alpha_0\ \ldots\ \alpha_{s-1}}, \qquad /4.5б/$$

если $1\le s\le 1-|m|$, и

$$a_s \xrightarrow{R\to 0} (-1)^{s-\ell+|m|}\,\frac{\gamma_{\ell-|m|+1}\ \ldots\ \gamma_s}{\bar\beta_{\ell-|m|+1}\ \ldots\ \bar\beta_s}\,R^{s-\ell+|m|}\,a_{\ell-|m|}, \qquad /4.5в/$$

$$b_s \xrightarrow{R\to 0} (-1)^{s-\ell-|m|}\,\frac{\gamma_{\ell-|m|+1}\ \ldots\ \gamma_s}{\bar\beta_{\ell-|m|+1}\ \ldots\ \bar\beta_s}\,R^{s-\ell+|m|}\,b_{\ell-|m|}, \qquad /4.5г/$$

если $\ell-|m|+1\le s\le n-|m|-1$. Подставляя в /4.5в/ и /4.5г/ значения γ и $\bar\beta$ из /2.3г/ и /3.7в/, получим

$$a_{s+\ell-|m|} \xrightarrow{R\to 0} (-1)^s\,\frac{(n-\ell-1)!}{(n-\ell-s-1)!}\,\frac{(2\ell+1)!}{(2\ell+s+1)!}\,\frac{R^s}{n^s\,s!}\,a_{\ell-|m|}, \qquad /4.6а/$$

$$b_s \xrightarrow{R\to 0} (-1)^s\,\frac{(\ell-|m|)!}{(\ell-|m|-s)!}\,\frac{(\ell+|m|+s)!\,|m|!}{(\ell+|m|)!\,(|m|+s)!}\,\frac{1}{2^s s!}, \qquad /4.6б/$$

причем в первом случае $1\le s\le n-\ell-1$, во втором $1\le s\le \ell-|m|$.
Из этих формул следует, что

$$\Pi(\xi, R) \xrightarrow{R\to 0} a_{\ell-|m|}\,e^{-r/n}\left(\frac{2r}{R}\right)^{\ell} F(-n+\ell+1;\ 2\ell+2;\ \frac{2r}{n}), \qquad /4.7а/$$

$$\Xi(\eta, R) \xrightarrow{R\to 0} (\sin\theta)^{|m|}F(-\ell+|m|,\ \ell+|m|+1;\ |m|+1;\ \frac{1+\cos\theta}{2}). \qquad /4.7б/$$

Пользуясь /2.4а/, легко показать, что волновая функция /1.2/ переходит в нормированную волновую функцию в сферических координатах:

$$\Psi_{n\ell m}(r,\theta,\phi) = \frac{1}{n^{\ell+2}(2\ell+1)!}\sqrt{\frac{(n+\ell)!}{(n-\ell-1)!}}\,(2r)^{\ell}\ e^{-r/n}\quad\times \qquad /4.8/$$

$$\times\,F(-n+\ell+1;\ 2\ell+2;\ \frac{2r}{n})\,Y_{\ell m}(\theta,\phi),$$

если $\Phi_0 = \pi(\ell + \frac{m-|m|}{2})$. При этом нужно использовать формулу [4]

$$Y_{\ell m}(\theta,\phi) = (-1)^{\ell+(m-|m|)/2}\,e^{im\phi}\sqrt{\frac{2\ell+1}{4\pi}\,\frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}}\,\frac{(\sin\theta)^{|m|}}{2^{|m|}\,|m|!}\times$$

$$\times\,F(-\ell+|m|,\ \ell+|m|+1;\ |m|+1;\ \frac{1+\cos\theta}{2}).$$

Итак, доказано, что волновая функция /1.2/ удовлетворяет "принципу соответствия".

5. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО СФЕРИЧЕСКОМУ БАЗИСУ

Запишем интересующее нас разложение в виде

$$\Psi(\xi,\eta,\phi\,;R) = \sum_{\ell=|m|}^{n-1} W_{nq}^{\ell m}\Psi_{n\ell m}\ (r,\theta,\phi). \qquad /5.1/$$

Произведем в этом разложении следующие операции. Перейдем сначала в $\Psi_{n\ell m}$ от сферических координат к сфероидальным:

$$r = \frac{R}{2}(\xi+\eta), \quad \cos\theta = \frac{1+\xi\eta}{\xi+\eta},$$

и затем устремим в обеих частях /5.1/ ξ к бесконечности. Тогда

$$r \xrightarrow{\xi\to\infty} \frac{R}{2}\xi, \qquad \cos\theta \xrightarrow{\xi\to\infty} \eta$$

и зависимость от переменной ξ в /5.1/ выпадает. Пользуясь этим, умножим обе части /5.1/ на $P_\ell^{|m|}(\eta)$ и проинтегрируем по $d\eta$. Тогда условие ортогональности присоединенных полиномов Лежандра приведет к равенству

$$W_{nq}^{\ell m}(R) = D_n^{\ell m}\,\frac{C_{nqm}(R)}{R^{n-1}}\,a_{n-|m|-1}\ E_{nq}^{\ell m}(R),$$

в котором

$$D_n^{\ell m} = (-1)^{n-\ell-1}\frac{(n)^{n+1}}{2}\sqrt{\frac{2\ell+1}{2}\ \frac{(\ell-|m|)!}{(\ell+|m|)!}(n+\ell)!\,(n-\ell-1)!},$$

$$E_{nq}^{\ell m}(R) = \int_{-1}^{1}(1-\eta^2)^{|m|/2}P_\ell^{|m|}(\eta)\,g_{nqm}(\eta;R)\,d\eta.$$

Последний интеграл может быть выражен через коэффициенты b_s, если воспользоваться разложением /2.1б/:

$$E_{nq}^{\ell m}(R) = \sum_{s=0}^{n-|m|-1} b_s(R)\int_{-1}^{1}(1-\eta)^{|m|/2}(1+\eta)^s\ P_\ell^{|m|}(\eta)d\eta.$$

После интегрирования по частям убеждаемся, что интеграл под знаком суммы отличен от нуля лишь при $\ell-|m|\le s\le n-|m|-1$ и, следовательно, после переобозначения индекса суммирования получим

$$E_{nq}^{\ell m}(R) = (-1)^{(m+|m|)/2}\ \frac{(\ell+|m|)!}{(\ell-|m|)!}\ \frac{1}{2^\ell\,\ell!}\sum_{s=0}^{n-\ell-1} b_{s+\ell-|m|}\frac{(s+\ell-|m|)!}{s!}J^{\ell s},$$

где

$$J^{\ell s} = \int_{-1}^{1}(1-\eta^2)^\ell\,(1+\eta)^s d\eta = (2)^{2\ell+s+1}\ \frac{\ell!\,(s+\ell)!}{s!}.$$

В результате

$$W_{nq}^{\ell m}(R) = (-1)^{(m+|m|)/2}\,2^\ell\ \frac{C_{nqm}(R)}{R^{n-1}}a_{n-|m|-1}\ D^{\ell m}B_{\ell m}(R), \qquad /5.2/$$

где

$$B_{\ell m}(R) = \sum_{s=0}^{n-\ell-1} b_{s+\ell-|m|}\frac{2\ \ (s+\ell)!\,(s+\ell-|m|)!}{s!\,(s+2\ell+1)!}. \qquad /5.3/$$

Займемся теперь предельными переходами. При $R\to0$ константа разделения $A(R)\to-\ell'(\ell'+1)$, и поэтому согласно /2.3б/

$$\beta_s \xrightarrow{R\to0} \bar\beta_s \equiv (s+|m|-\ell')(s+|m|+\ell'+1).$$

Тогда из /4.5г/ получим

$$b_{s+\ell-|m|} \overset{R\to0}{\sim} \frac{R^{s+\ell-\ell'}}{\Gamma(\ell-\ell'+1)}.$$

Отсюда следует, что при $\ell>\ell'$ $b_{s+\ell-|m|}\to0$, так как $s\ge0$, а при $\ell<\ell'$ $b_{s+\ell-|m|}=0$ из-за гамма-функции в знаменателе. При $\ell=\ell'$ в сумме /5.3/ при $R\to0$ отличен от нуля только член с $s=0$, так что, учитывая /2.4а/ и /4.6б/, убеждаемся, что при $\ell=\ell'$ $W_{nq}^{\ell m}\to1$, и поэтому

$$W_{nq}^{\ell m}(R) \xrightarrow{R\to0} \delta_{\ell\ell'}.$$

Рассмотрим теперь предел $R\to\infty$. Из /2.4б/, /4.1а/ и /4.1в/ следует, что

$$\frac{C_{nqm}(R)}{R^{n-1}}a_{n-|m|-1} \overset{R\to\infty}{\sim} \frac{1}{R^{n_1}}.$$

Это значит, что в /5.3/ можно ограничиться суммированием, начинающимся с $s=n_1$, то есть

$$B_{\ell m}(R) \xrightarrow{R\to\infty} \sum_{s=0}^{n_2} b_{s+n_1}\frac{2^{s+n_1-\ell+|m|}(s+n_1+|m|)!\,(s+n_1)!}{(s+n_1-\ell+|m|)!\ (s+n_1+|m|+\ell+1)!}.$$

Из /3.2в/ и /4.1г/ следует, что

$$b_{s+n_1} \xrightarrow{R\to\infty} (-1)^s\ \frac{(n_2)!\,b_{n_1}}{2^s\,s!\,(n-s)!},$$

и поэтому $B_{\ell m}$ можно представить в виде

$$B_{\ell m}(R) \xrightarrow{R\to\infty} 2^{n_1-\ell+|m|}\frac{n_1!\,(n_1+|m|)!\,b_{n_1}}{(n_1-\ell+|m|)!\,(n_1+\ell+|m|+1)!}\,{}_3F_2\left\{\begin{matrix}-n_2,\ n-n_2,\ n-n_2-|m|\\ n-n_2+\ell+1,\ n-n_2-\ell\end{matrix}\Big|1\right\}.$$

Воспользуемся теперь двумя формулами:

$$ {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} c, & b, & \ell - a \\ \ell, & 1+b-c-f & \end{matrix} \Big| 1 \right\} = \frac{\Gamma(1-f+a)\Gamma(1+b+c-f)}{\Gamma(1+\ell-f)\Gamma(1-\ell-f+a+b+c)} \, {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -n, & n-n, & n-n-|m| \\ n-n+1, & n-n-\ell & \end{matrix} \Big| 1 \right\} \qquad /5.4/ $$

$$ {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} s, & s', & -N \\ t', & 1-N-t & \end{matrix} \Big| 1 \right\} = \frac{\Gamma(t+s+N)}{\Gamma(t+s)} \, \frac{\Gamma(t)}{\Gamma(t+N)} \, {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} s, & t'-s', & -N \\ t', & t+s & \end{matrix} \Big| 1 \right\}, \qquad /5.5/ $$

первая из которых взята из работы [5], вторая - из монографии [6]. Последовательно применяя эти формулы, получим

$$ B_{\ell m}(R) \xrightarrow{R\to\infty} 2^{n_1-\ell+|m|} \frac{(n_1+|m|)!\,(n_2+|m|)!}{(|m|)!\,(n+\ell)!} \, \frac{(n-|m|-1)!}{(n-\ell-1)!} \, b_{n_1} \times $$

$$ \times \, {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -n_2, & -\ell+|m|, & \ell+|m|+1 \\ |m|+1, & |m|+1-n & \end{matrix} \Big| 1 \right\}. $$

Далее, согласно /4.1в/, /4.2а/ и /4.2б/

$$ a_{n-|m|-1} = \frac{(-1)^{n_2}}{(n)^{n_2}} \, \frac{|m|!}{(n_2+|m|)!} \, \frac{R^{n_2}}{2^{n_2}}, $$

$$ b_{n_1} = \frac{(-1)^{n_1}}{(n)^{n_1}} \, \frac{|m|!}{(n_1+|m|)!} R^{n_1}, $$

и поэтому с учетом /2.4б/ при $\Phi_\infty = 0$ имеем

$$ W^{\ell m}_{nq}(R) \xrightarrow{R\to\infty} (-1)^{\ell+\frac{m-|m|}{2}+1} \frac{(n-|m|-1)!}{|m|!} \sqrt{\frac{(2\ell+1)(n_1+|m|)!(n_2+|m|)!\,(\ell+|m|)!}{(n\ )!(n\ )!(n+\ell)!\,(n-\ell-1)!(\ell-|m|)!}} \times \qquad /5.6/ $$

$$ \times \, {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -\ell+|m|, & \ell+|m|+1, & -n_2 \\ |m|+1, & |m|+1-n & \end{matrix} \Big| 1 \right\}. $$

Полученное предельное выражение совпадает с результатом, приведенным в работе [7]. Таким образом, в обоих пределах получаются нужные формулы.

6. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО ПАРАБОЛИЧЕСКОМУ БАЗИСУ

Представим искомое разложение в виде

$$ \Psi_{nqm}(\xi,\eta,\phi;R) = \sum_{n_1+n_2=n-|m|-1} U^{n_1 n_2}_{qm}(R)\,\Psi_{n_1 n_2 m}(\nu,\mu,\phi). \qquad /6.1/ $$

Согласно /4.3/ параболическая волновая функция выражается через полиномы Лагерра от переменных

$$ \mu = \frac{R}{2}(\xi-1)(1-\eta) $$

и

$$ \nu = \frac{R}{2}(\xi+1)(1+\eta). $$

Если в /6.1/ положить $\eta = -1$, перейти к новой переменной $t = \xi - 1$ и воспользоваться свойством ортогональности:

$$ \int_0^\infty e^{-Rt/n} \left(\frac{Rt}{n}\right)^{|m|} F\left(-n_2;\, |m|+1;\, \frac{Rt}{n}\right) F\left(-n_2';\, |m|+1;\, \frac{Rt}{n}\right) dt = $$

$$ = \frac{n}{R} \, \frac{(|m|!)^2 (n_2)!}{(n_2+|m|)!} \, \delta_{n_2 n_2'} , $$

то получим

$$ U^{n_1 n_2}_{qm}(R) = C_{nqm}(R) \cdot \frac{Rn}{\sqrt{2}} 2^{|m|} \sqrt{\frac{(n_2+|m|)!}{(n_1+|m|)!} \, \frac{n_1!}{n_2!}} \times $$

$$ \times \sum_{s=0}^{n-|m|-1} a_s \int_0^\infty t^{|m|+s} e^{-Rt/n} F\left(-n_2;\, |m|+1;\, \frac{Rt}{n}\right) dt. $$

Далее, так как

$$ \int_0^\infty t^{s+|m|} e^{-Rt/n} F\left(-n_2;\, |m|+1;\, \frac{Rt}{n}\right) dt = $$

$$ + \left(\frac{n}{R}\right)^{s+|m|+1} (-1)^{n_2} \frac{(|m|+s)!}{\Gamma(n_2+|m|+1)} \, \frac{\Gamma(s+1)(|m|)!}{\Gamma(s-n_2+1)}, $$

то

$$ U^{n_1 n_2}_{qm}(R) = (-1)^{n_2} C_{nqm}(R) \sqrt{\frac{(n_1)!}{(n_2)!}} \, \frac{n^2}{\sqrt{2}} \, \frac{|m|!}{\sqrt{(n_1+|m|)!\,(n_2+|m|)!}} \times $$

$$ \times \left(\frac{2n}{R}\right)^{|m|} \sum_{s=0}^{n_1+n_2} \frac{a_s}{R^s} (n)^s \, \frac{\Gamma(m+s+1)\,\Gamma(s+1)}{\Gamma(s+1-n_2)}. \qquad /6.2/ $$

Исследуем теперь предельные случаи. При $R\to\infty$, как это уже отмечалось выше, существует такое значение $s = n_2'$, для которого $\beta_{n_2'} = 0$. Согласно /4.1а/ и /4.1в/ отношение a_s/R^s в этом пределе отлично от нуля, если $0 \le s \le n_2'$, так что в сумме /6.2/ максимальное значение s можно заменить на n_2'. Поэтому, пользуясь /4.1а/ и /2.4б/, видим, что при $n_2' < n_2$ сумма в /6.2/ обращается в нуль, а при $n_2' \ge n_2$ имеет место равенство /в пределе $R\to\infty$/.

$$U_{qm}^{n_1 n_2}(R) \xrightarrow{R\to\infty} \sqrt{\frac{(n_1)!(n_2)!(n_1'+|m|)!(n_2'+|m|)!}{(n_1')!(n_2')!(n_1+|m|)!(n_2+|m|)!}}\,(-1)^{n_2}\times$$

$$\times\sum_{s=0}^{n_2'-n_2}(-1)^s\frac{1}{s!(n_2'-n_2-s)!}.$$

Легко показать, что последнее выражение может принимать всего два значения - нуль и единицу, в зависимости от того, $n_2'>n_2$ или $n_2'=n_2$. Поэтому

$$U_{qm}^{n_1 n_2}(R) \xrightarrow{R\to\infty} \delta_{n_2' n_2}.$$

Рассмотрим предел $R\to 0$. Из /4.5а/, /4.6а/ и /2.4б/ следует, что в этом пределе

$$U_{qm}^{n_1 n_2}(R) \xrightarrow{R\to 0} (-1)^{n_2+\ell+(m-|m|)/2}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+|m|)!(\ell-|m|)!(n+\ell)!n_1!}{(n_1+|m|)!(n_2+|m|)!(n-\ell-1)!n_2!}}\times$$

$$\times\frac{\ell!}{(2\ell+1)!(\ell-|m|-n_2)!}\,{}_3F_2\left\{\begin{matrix}-n+\ell+1, & \ell+1, & \ell-|m|+1\\ \ell-|m|-n_2+1, & 2\ell+2 & \end{matrix}\Big|\,1\right\}.$$

Далее, пользуясь формулами /5.4/ и /5.5/, получаем

$$U_{qm}^{n_1 n_2}(R) \xrightarrow{R\to 0} (-1)^{\ell+1+(m-|m|)/2}\frac{(n-|m|-1)!}{|m|!}\sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell+|m|)!(n+|m|)!(n_2+|m|)!}{n_1!n_2!(\ell-|m|)!(n+\ell)!(n-\ell-1)!}}$$

$$\times{}_3F_2\left\{\begin{matrix}-\ell+|m|, & \ell+|m|+1, & -n_2\\ |m|+1, & -n+|m|+1 & \end{matrix}\Big|\,1\right\},$$

то есть результат работы [7].

При исследовании предельных переходов в волновой функции /1.2/ и трансформационных коэффициентов существенно использовались формулы /2.4а/ и /2.4б/. Приведем их вывод. Подставляя в условие нормировки волновой функции /1.2/ разложения /2.1а/ и /2.1б/, получим

$$2^{4m+1}R^3|C_{nqm}(R)|^2\sum_{s,s',t,t'}2^{s+s'+t+t'}a_s a_{s'} b_t b_{t'}\times$$

$$\times(I_{ss'}^{|m|}J_{tt'}^{|m|+1}+I_{ss'}^{|m|+1}J_{tt'}^{|m|})=1,$$

где по всем индексам суммирование ведется в пределах $(0,n-|m|-1)$, $(0,n-|m|-1)$, а $I_{ss'}^{|m|}$ и $J_{tt'}^{|m|}$ выражаются через вырожденные гипергеометрические функции [8]:

$$I_{ss'}^{|m|}=\Gamma(|m|+s+s'+1)\,\psi(|m|+s+s'+1;\,2|m|+s+s'+2;\,\frac{2R}{n}),$$

$$J_{tt'}^{|m|}=\frac{\Gamma(|m|+1)\Gamma(|m|+t+t'+1)}{\Gamma(2|m|+t+t'+2)}\,F(|m|+t+t'+1;\,2|m|+t+t'+2;\,-\frac{2R}{n}).$$

Пользуясь асимптотиками этих функций при $R\to 0$ и $R\to\infty$ и формулами /4.1/ и /4.5/, приходим к искомым результатам /2.4а/ и /2.4б/.

7. ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ И ТАБЛИЦЫ

Введем обозначение

$$\tilde W_{nq}^{\ell m}(R)=W_{nq}^{\ell m}(R)/C_{nqm}(R).$$

Так как трансформационные коэффициенты $W_{nq}^{\ell m}(R)$ удовлетворяют условию

$$\sum_{\ell=|m|}^{n-1}(W_{nq}^{\ell m})^2=1,$$

то отсюда получаем удобную для вычисления нормировочной постоянной формулу

$$C_{nqm}(R)=\left\{\sum_{\ell=|m|}^{n-1}(\tilde W_{nq}^{\ell m})^2\right\}^{-1/2}.$$

Приведем некоторые частные результаты:

$$C_{1q0}=\sqrt{2},\qquad C_{3q2}=\frac{\sqrt{2}}{648}R^2,$$

$$C_{2q1}=\frac{\sqrt{2}}{16}R,\qquad C_{3q1}=\frac{R}{27}\left(\frac{A'+6}{A'+4}\right),$$

$$C_{2q0}=\frac{1}{2\sqrt{2}}\left(\frac{A'+2}{A'+1}\right)^{1/2},\quad C_{3q0}=\sqrt{\frac{2}{27}}\left[1+\frac{27}{8}\frac{A'^2}{R}+\frac{1}{2}\frac{A'^2}{(A'+6)^2}\right]^{-1/2}.$$

Здесь $A'=A-\dfrac{R^2}{4n^2}$. Дозволенные значения A и нормированные сфероидальные волновые функции имеют вид

$$\Psi_{1q0}=\frac{1}{\sqrt{\pi}}e^{-\frac{R}{2}(\xi+\eta)},\qquad A'=0,$$

$$\Psi_{2q1}=\frac{R}{16}e^{-\frac{R}{4}(\xi+\eta)}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\,\frac{e^{i\phi}}{\sqrt{\pi}},\quad A'+2=0,$$

$$\Psi_{2q0}=\frac{1}{4\sqrt{\pi}}\left(\frac{A'+2}{A'+1}\right)^{1/2}e^{-\frac{R}{4}(\xi+\eta)}\left[1+\frac{A'}{2}(1+\xi\eta)-\frac{R}{4}(\xi+\eta)\right],\ A'(A'+2)+\frac{R^2}{4},$$

Таблица 1

n	m	L	$W_{nq}^{Lm}(R)$	A'
1	0	0	1	$A'=0$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{A'+2}{A'+1}\right)^{1/2}$	$A'(A'+2)=\frac{R^2}{4}$
2	0	1	$\frac{A'\sqrt{2}}{R}\left(\frac{A'+2}{A'+1}\right)^{1/2}$	
2	1	1	-1	$A'+2=0$
3	0	0	$\left\{1+\frac{27}{8}\frac{A'^2}{R^2}+\frac{A'^2}{2(A'+6)^2}\right\}^{-1/2}$	$A'(A'+2)(A'+6)=$ $=\frac{4R^2}{9}(A'+4)$
3	0	1	$\frac{A'}{R}\sqrt{\frac{27}{8}}\left\{1+\frac{27}{8}\frac{A'^2}{R^2}+\frac{A'^2}{2(A'+6)^2}\right\}^{-1/2}$	
3	0	2	$\frac{A'}{\sqrt{2}(A'+6)}\left\{1+\frac{27}{8}\frac{A'^2}{R^2}+\frac{A'^2}{2(A'+6)^2}\right\}^{-1/2}$	
3	1	1	$-\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\frac{A'+6}{A'+4}\right)^{1/2}$	$(A'+2)(A'+6)=$ $=\frac{R^2}{9}$
3	1	2	$-\frac{\sqrt{2}\,R}{6(A'+4)^{1/2}(A'+6)^{1/2}}$	
3	2	2	1	$A'+6=0$

$$\Psi_{3q2}=\frac{R^2}{648}e^{-\frac{R}{6}(\xi+\eta)}(\xi^2-1)(1-\eta^2)\frac{e^{2i\phi}}{\sqrt{\pi}},\quad A'+6=0,$$

$$\Psi_{3q1}=\frac{R}{27}\left(\frac{A'+6}{A'+4}\right)^{1/2}e^{-\frac{R}{6}(\xi+\eta)}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\times$$

$$\times\left[1+\frac{A'+2}{4}(1+\xi\eta)-\frac{R}{12}(\xi+\eta)\right]\frac{e^{i\phi}}{\sqrt{2\pi}}.\quad (A'+2)(A'+6)=\frac{R^2}{9},$$

Таблица 2

n	m	n_2	$U_{qm}^{n_1 n_2}$	A'
1	0	0	1	$A'=0$
2	0	0	$-\left(\frac{A'}{R}-\frac{1}{2}\right)\left(\frac{A'+2}{A'+1}\right)^{1/2}$	$A'(A'+2)=R^2$
2	0	1	$\left(\frac{A'}{R}+\frac{1}{2}\right)\left(\frac{A'+2}{A'+1}\right)^{1/2}$	
2	1	0	1	$A'+2=0$
3	0	0	$\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{A'+4}{A'+6}-\frac{3A'}{2R}\right)\left\{1+\frac{27}{8}\frac{A'^2}{R^2}+\frac{A'^2}{2(A'+6)^2}\right\}^{-1/2}$	$A'(A'+2)(A'+6)=$ $=\frac{4R^2}{9}(A'+4)$
3	0	0	$\frac{2\sqrt{3}}{A'+6}\left\{1+\frac{27}{8}\frac{A'^2}{R^2}+\frac{A'^2}{2(A'+6)^2}\right\}^{-1/2}$	
3	0	2	$\frac{\sqrt{3}}{2}\left(\frac{A'+4}{A'+6}+\frac{3A'}{2R}\right)\left\{1+\frac{27}{8}\frac{A'^2}{R^2}+\frac{A'^2}{2(A'+6)^2}\right\}^{-1/2}$	
3	1	0	$-\frac{3}{2R}\left(A'+2-\frac{R}{3}\right)\left(\frac{A'+6}{A'+4}\right)^{1/2}$	$(A'+2)(A'+6)=$ $=\frac{R^2}{9}$
3	1	1	$\frac{3}{2R}\left(A'+2+\frac{R}{3}\right)\left(\frac{A'+6}{A'+4}\right)^{1/2}$	
3	2	0	1	$A'+6=0$

$$\Psi_{3q0}=\frac{1}{\sqrt{27\pi}}e^{-\frac{R}{6}(\xi+\eta)}\left[1+\frac{27}{8}\cdot\frac{A'^2}{R^2}+\frac{1}{2}\frac{A'^2}{(A'+6)^2}\right]^{-1/2}\times$$

$$\times\left[1-\frac{R}{3}(\xi+\eta)+\frac{A'}{2}(1+\xi\eta)-\frac{A'R}{24}(1+\xi\eta)(\xi+\eta)+\frac{R^2}{27}\frac{(A'+8)}{(A'+6)}(\xi+\eta)^2+\right.$$

$$\left.+\frac{A'R^2}{72(A'+6)}(1+\xi\eta)^2\right],\quad A'(A'+2)(A'+6)=\frac{4R^2}{9}(A'+4).$$

Напомним, что индекс q нумерует собственные значения константы разделения A и пробегает значения $1 \le q \le n - |m|$. Эти собственные значения определяются из уравнений, выписанных вместе с волновыми функциями. Приведем для наглядности вид трансформационных коэффициентов $W_{nq}^{\ell m}$ и $U_{qm}^{n_1 n_2}$ в тех же частных случаях /см. табл.1 и 2/.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подведем теперь итоги. В работе развита такая форма сфероидального анализа атома водорода, при которой соблюдаются условия, диктуемые "принципом соответствия" на всех этапах: уравнения, рекуррентные соотношения, волновые функции, трансформационные коэффициенты и т.д. Получена экономная в смысле конкретного счета формула для нормировочной константы и выведены разложения сфероидальной волновой функции по сферическому и параболическому базисам.

Систематический сфероидальный анализ кулоновской задачи должен заключать в себе целый комплекс дополнительных вопросов. В настоящей работе в этом смысле сделан лишь первый шаг. Следующим этапом должен быть непрерывный спектр.

В заключение нам приятно выразить искреннюю признательность сотрудникам ОИЯИ, с которыми обсуждались затронутые в этой работе вопросы. Мы особо благодарны Л.И.Пономареву, А.В.Матвеенко, С.И.Виницкому и Л.Н.Сомову за интерес к дискуссии и замечания. Мы также признательны И.В.Комарову, с которым эта работа обсуждалась на ранних ее этапах.

ЛИТЕРАТУРА

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
2. Coulson C.A., Robinson P.D. Proc.Phys.Soc.,1958,71, 5,p.815.
3. Coulson C.A., Joseph A. Proc.Phys.Soc., 1967, 90, p. 887.
4. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. "Наука", Л., 1975.
5. Смородинский Я.А., Шепелев Г.И. ЯФ, 1971, 3, вып.2, с.441.
6. Bailey W.N. Ceneralized Hypergeometric Series. Cambridge Tracts No.32, Cambridge, 1935.
7. Tarter C.B. J.Math.Phys., 1970, 11, p. 3192.
8. Бейтман Г., Эрден А. Высшие трансцендентные функции."Наука", М., 1973, т. 1.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 апреля 1982 года.