

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



A-161

30/x-78

P4 - 11729

Д.И.Абрамов, А.Я.Казаков, Л.И.Пономарев,
С.Ю.Славянов, Л.Н.Сомов

4756/2-78

ФАЗЫ РАССЕЯНИЯ В ЗАДАЧЕ
ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ

1978

P4 - 11729

Д.И.Абрамов, А.Я.Казаков, Л.И.Пономарев,
С.Ю.Славянов, Л.Н.Сомов

ФАЗЫ РАССЕЙЯНИЯ В ЗАДАЧЕ
ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ

Направлено в " Journal of Physics B "



Абрамов Д.И. и др.

P4 - 11729

Фазы рассеяния в задаче двух кулоновских центров

В задаче двух центров квантовой механики вычислены фазы рассеяния и найдены асимптотические разложения для них в пределе больших и малых межцентровых расстояний. Асимптотические разложения для фаз рассеяния сравниваются с результатами прямых численных расчетов. Исследованы связи между одноцентровыми и двухцентровыми фазами рассеяния.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Abramov D.I. et al.

P4-11729

Phase Shifts in the Coulomb Two-Center Problem

The phase shifts in the Coulomb two-center problem of quantum mechanics are calculated and the asymptotic expansions for them are found in the limit of large and small distances between the charges. The asymptotic expansions for the phase shifts are compared with the results of direct numerical calculations. The relations between the one- and two-center phase shifts are considered.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research.

Dubna 1978

I. ВВЕДЕНИЕ

При решении квантовомеханической задачи о взаимодействии трех заряженных частиц в последние годы интенсивно используются в качестве базиса кулоновские сферические функции (к.с.ф.), т.е. решения задачи двух кулоновских центров^{/1/}. Свойства этих функций в дискретном спектре достаточно хорошо изучены. В непрерывном спектре они исследованы значительно менее подробно.

В данной работе получены асимптотические разложения для фаз рассеяния радиальных кулоновских сферических функций при больших межцентровых расстояниях ($R \gg 1$) и в пределе объединенного атома ($R \ll 1$). Фазы, вычисленные по этим формулам, сравниваются с результатами прямых численных расчетов согласно алгоритму, предложенному в работе^{/2/}. С помощью того же алгоритма найдены фазы одноцентральной кулоновской задачи в сферических координатах и проведено сравнение с результатами вычислений фаз по формулам, которые следуют из работы^{/4/} в этом частном случае. Показано, что фазы двухцентральной задачи и фаз эквивалентной ей одноцентральной задачи с суммарным зарядом ядер близки между собой во всей области изменения R и импульса k . При определенном соотношении между R и k двухцентровые фазы точно равны одноцентровым фазам рассеяния на кулоновском потенциале с суммарным зарядом обоих центров.

Подробности вычислений в значительной мере опущены, часть из них приведена в работах^{/1-4/}.

2. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ФАЗ РАССЕЙНИЯ

Волновая функция $\phi_{mq}(\vec{r}; k, R)$ непрерывного спектра задачи двух кулоновских центров является решением уравнения Шредингера^{/1/}

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_F - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}\right)\phi_{mq}(\vec{r}; k, R) = \frac{k^2}{2}\phi_{mq}(\vec{r}; k, R), \quad (I)$$

где r_1 и r_2 - расстояния отрицательно заряженной частицы от центров 1 и 2 с положительными зарядами Z_1 и Z_2 , расположенных на расстоянии R друг от друга. После разделения переменных в вытянутых сферических координатах ξ, η, φ

$$\xi = (r_1 + r_2)/R, \quad \eta = (r_1 - r_2)/R \quad (2)$$

функция $\phi_{mq}(\vec{r}; k, R)$ представляется в виде произведения

$$\phi_{mq}(\vec{r}; k, R) = N_{mq}(c, a, \vartheta) \Pi_{mq}(c, a; \xi) \Sigma_{mq}(c, \vartheta; \eta) \cdot \frac{e^{+im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (3)$$

где $m = 0, 1, 2, \dots$ - магнитное квантовое число, $q = 0, 1, 2, \dots$ - число нулей функции $\Sigma_{mq}(c, \vartheta; \eta)$ на интервале $\eta \in (-1, 1)$, $c = kR/2$, $a = R(Z_2 + Z_1)$, $\vartheta = R(Z_2 - Z_1)$, $k = (2E)^{1/2}$ - импульс в задаче двух центров, $N_{mq}(c, a, \vartheta)$ - нормировочный коэффициент^{/1/}.

Угловая кулоновская сферическая функция (у.к.с.ф.)

$\Sigma_{mq}(c, \vartheta; \eta)$ определяется как решение краевой задачи на отрезке $[-1, 1]$ для уравнения

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{d}{d\eta}\Sigma(c, \vartheta; \eta) + \left[\lambda + c^2(1-\eta^2) + \vartheta\eta - \frac{m^2}{1-\eta^2}\right]\Sigma(c, \vartheta; \eta) = 0$$

$$|\Sigma(c, \vartheta; \pm 1)| < \infty. \quad (4)$$

Собственные значения константы разделения λ обозначим

$$\lambda = \lambda_{mq}(c, \vartheta).$$

Радиальная кулоновская сферическая функция (р.к.с.ф.)

$\Pi_{mq}(c, a; \xi)$ является конечным при $\xi = 1$ решением уравнения

$$\frac{d}{d\xi}(\xi^2-1)\frac{d}{d\xi}\Pi(c, a; \xi) + \left[-\lambda + c^2(\xi^2-1) + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2-1}\right]\Pi(c, a; \xi) = 0 \quad (5)$$

на полуоси $[1, \infty)$. При $\xi \rightarrow \infty$ асимптотика $\Pi_{mq}(c, a; \xi)$ имеет вид

$$\Pi_{mq}(c, a; \xi) = \frac{1}{c\xi} \sin(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{\pi\ell}{2} + \Delta_{mq}) + O\{(c\xi)^{-2}\}, \quad (6)$$

где $\ell = q + m$, а величину $\Delta_{mq} = \Delta_{mq}(c, a, \vartheta) = \Delta_{mq}(k, R)$ называют фазой рассеяния задачи двух кулоновских центров^{/1, 2/}. Численный метод расчета фаз $\Delta_{mq}(k, R)$ предложен и реализован в работе^{/2/}. Этот алгоритм позволяет найти фазу лишь с точностью до числа, кратного π . Чтобы устранить эту неоднозначность, естественно нормировать их условием

$$\Delta_{mq}(k, 0) = \sigma_\ell(k) = \arg \Gamma(\ell + 1 - i \frac{Z}{k}), \quad (7)$$

где $\sigma_\ell(k)$ - кулоновская фаза рассеяния на потенциале $-Z/r$ с зарядом $Z = Z_1 + Z_2$ в состоянии с орбитальным моментом ℓ . На рис. 1-8 приведены графики разности

$$\delta_{mq}(k, R) = \Delta_{mq}(k, R) - \Delta_{mq}(k, 0) \quad (8)$$

для систем с $Z_1 = Z_2 = 1$ и $Z_1 = 1, Z_2 = 2$ при различных наборах квантовых чисел m, q .

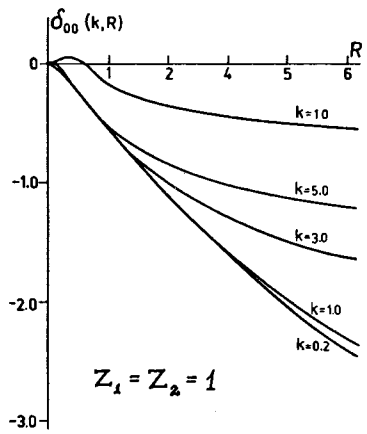


Рис. 1. Разность $\delta_{00} = \Delta_{00}(k, R) - \sigma_0(k)$ между двухцентровой фазой для зарядов $Z_1 = Z_2 = 1$ и кулоновской фазой для зарядов $Z = Z_1 + Z_2$.

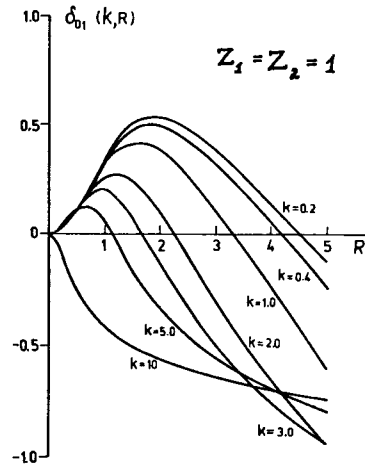


Рис. 2. Разность $\delta_{01} = \Delta_{01}(k, R) - \sigma_1(k)$, $Z_1 = Z_2 = 1$.

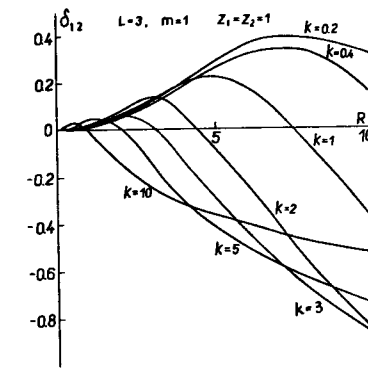


Рис. 5. Разность $\delta_{12} = \Delta_{12}(k, R) - \sigma_3(k)$.

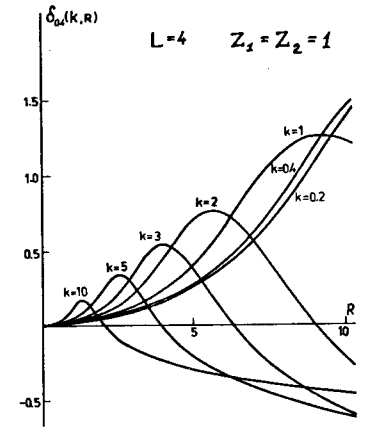


Рис. 6. Разность $\delta_{04} = \Delta_{04}(k, R) - \sigma_4(k)$.

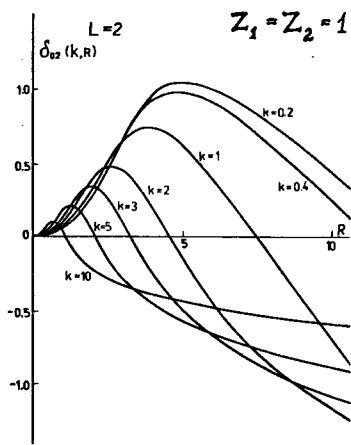


Рис. 3. Разность $\delta_{02} = \Delta_{02}(k, R) - \sigma_2(k)$.

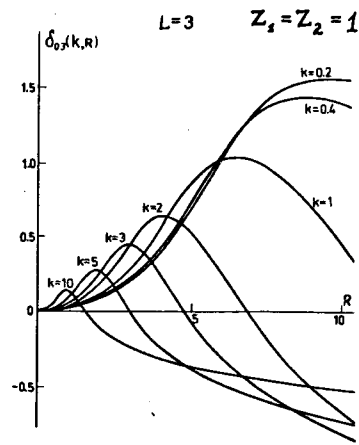


Рис. 4. Разность $\delta_{03} = \Delta_{03}(k, R) - \sigma_3(k)$.

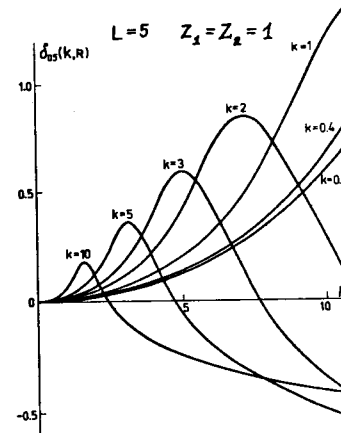


Рис. 7. Разность $\delta_{05} = \Delta_{05}(k, R) - \sigma_5(k)$.

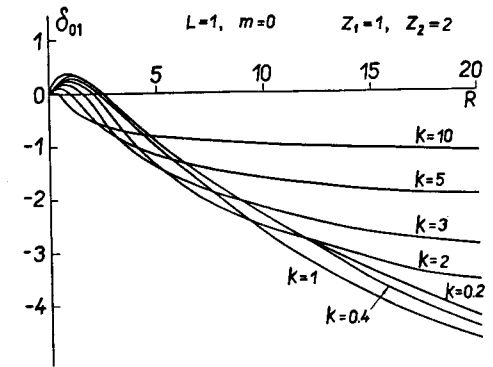


Рис. 8. Разность $\delta_{01} = \Delta_{01}(k, R) - \sigma_1(k)$ для случая $Z_1 = 1, Z_2 = 2$.

3. АСИМПТОТИКА ФАЗ ПРИ $R \rightarrow 0$.

Асимптотические разложения для фаз $\Delta_{mq}(c, a, \ell)$ в приближении объединенного атома, т.е. при выполнении условий

$$c \rightarrow 0, \quad \frac{a}{2c} = \frac{Z_2 + Z_1}{k} \equiv \gamma = O(1), \quad \frac{\ell}{2c} = \frac{Z_2 - Z_1}{k} = \delta = O(1) \quad (9)$$

получены методом, предложенным в работе /3/.

Собственные значения $\lambda_{mq}(c, \ell)$ представляются в виде асимптотического ряда /3/

$$\begin{aligned} \lambda_{mq}(c, 2c\delta) = & \ell(\ell+1) + c^2 \frac{2}{(2\ell-1)(2\ell+3)} \left[\delta^2 \left(1 - \frac{3m^2}{\ell(\ell+1)} \right) - \right. \\ & \left. - \ell(\ell+1) - m^2 + 1 \right] - c^4 \frac{2(\ell^2 - m^2)(\delta^2 + \ell^2)}{\ell^2(4\ell^2 - 1)} \left\{ \frac{(\ell^2 - m^2)(\delta^2 + \ell^2)}{\ell(4\ell^2 - 1)} - \right. \\ & \left. - \frac{[(\ell+1)^2 - m^2][\delta^2 + (\ell+1)^2]}{(\ell+1)(2\ell+1)(2\ell+3)} - \frac{[(\ell-1)^2 - m^2][\delta^2 + (\ell-1)^2]}{(2\ell-1)^2(2\ell-3)} \right\} - \\ & - c^4 \left\{ \ell \rightarrow -(\ell+1) \right\} + O(c^6), \end{aligned} \quad (10)$$

где символом $c^4 \left\{ \ell \rightarrow -(\ell+1) \right\}$ обозначено слагаемое порядка c^4 , отличающееся от приведенного слагаемого $\sim c^4$ заменой $\ell \rightarrow -(\ell+1)$.

В радиальном уравнении вместо λ удобно использовать в качестве независимого параметра показатель характеристической экспоненты ν , определяющий характер ветвления решений уравнения (5) при обходе точки $\xi = \infty$ /5/. А именно, существуют два линейно независимых решения $\Pi_\nu(c, a; \xi)$ и $\Pi_{-\nu-1}(c, a; \xi)$

которые при обходе точки $\xi = \infty$ удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} \Pi_\nu(e^{2\pi i} \xi) &= e^{2\pi i \nu} \Pi_\nu(\xi) \\ \Pi_{-\nu-1}(e^{2\pi i} \xi) &= e^{-2\pi i(\nu+1)} \Pi_{-\nu-1}(\xi). \end{aligned} \quad (11)$$

При $c \rightarrow 0$ в радиальном уравнении (5) λ выражается через ν с помощью асимптотического разложения, которое отличается от (10) формальной заменой $\ell \rightarrow \nu$, $\delta \rightarrow \gamma$ (см. /3/). Приравнявая это выражение для λ собственному значению $\lambda_{mq}(c, \ell)$ углового уравнения (10), можно представить функцию $\nu = \nu_{mq}(c, \gamma, \delta)$ в виде асимптотического ряда /3/ по степеням c , причем нулевой член разложения $\nu_{mq}(c, \gamma, \delta) = \ell = \nu + m$, т.е. показатель характеристической экспоненты в приближении объединенного атома равен орбитальному моменту.

Методом, изложенным в работе /3/, фазу $\Delta_{mq}(c, a, \ell)$ можно выразить через ν_{mq} следующим образом:

$$\begin{aligned} e^{2i\Delta_{mq}} = & \frac{\Gamma(-i\gamma + \nu + 1)}{\Gamma(i\gamma + \nu + 1)} \exp \left\{ i \left[\pi(\ell - \nu) + \right. \right. \\ & \left. \left. + 2\gamma \frac{\nu(\nu+1) - 3m^2}{\nu(\nu+1)(2\nu-1)(2\nu+3)} c^2 + O(c^4) \right] \right\} \times \\ & \times \frac{1 - i e^{i\pi\nu} \frac{\Gamma(i\gamma + \nu + 1)}{\Gamma(i\gamma - \nu)} \rho}{1 + i e^{-i\pi\nu} \frac{\Gamma(-i\gamma + \nu + 1)}{\Gamma(-i\gamma - \nu)} \rho} \end{aligned} \quad (12)$$

где

$$\rho = \left(\frac{c}{4}\right)^{2\nu+1} \frac{(-1)^m \pi^2}{(\nu+\frac{1}{2})^2 \cos^2 \pi \nu} \cdot \frac{\Gamma(\nu+m+1) \Gamma(\nu-m+1)}{\Gamma^4(\nu+\frac{1}{2}) \Gamma^2(\nu+1)} \times$$

$$\times \left\{ 1 - c^2 \frac{4(2\nu+1)}{(2\nu-1)^2(2\nu+3)^2} \left[\gamma^2 \left(1 - \frac{3m^2(8\nu(\nu+1)-3)}{4\nu^2(\nu+1)^2} \right) + \frac{1}{4} - m^2 \right] + O(c^4) \right\} \quad (I3)$$

Остаточные члены в формулах (I2), (I3) представляют собой асимптотические разложения по четным степеням c . С учетом этого факта из (I2), (I3) следует, что разложение для фазы

Δ_{mq} при малых c содержит лишь четные степени c вплоть до членов порядка $O(c^{2\ell+2})$, нечетные степени c начиная со слагаемого, пропорционального $c^{2\ell+3}$ (он определяется величиной $\rho \sim c^{2\ell+1}$) и логарифмические члены, старший из которых имеет порядок $O(c^{2\ell+5} \ln c)$. Наличие логарифмических членов свидетельствует о неаналитичности фаз

$\Delta_{mq}(c, a, \theta)$ в окрестности $c=0$.

Подставляя в (II) и (I2) асимптотическое выражение для γ_{mq} (см. /3/), в случае $\ell \geq 1$ получим разложение

$$\Delta_{mq}(k, R) = \sigma_\ell(k) + c^2 \gamma \cdot \frac{\ell(\ell+1) - 3m^2}{(2\ell+1)\ell(\ell+1)(2\ell-1)(2\ell+3)} \cdot$$

$$\cdot [2\gamma s \operatorname{Im} \Psi(i\gamma + \ell + 1) + \pi\gamma s + 2\ell + 1] + O(c^4), \quad (I4)$$

где $s = 4Z_1 Z_2 / (Z_1 + Z_2)^2$, а мнимая часть логарифмической производной гамма-функции $\Psi(t)$ может быть выражена

через элементарные функции

$$\operatorname{Im} \Psi(i\gamma + \ell + 1) = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{\gamma} - \pi \operatorname{cth} \pi \gamma + 2\gamma \sum_{j=1}^{\ell} (j^2 + \gamma^2)^{-1} \right]. \quad (I5)$$

Формула (I4) дает первую поправку к фазе р.к.с.ф. $\Delta_{mq}(k, R)$, совпадающей в главном члене с фазой $\sigma_\ell(k)$ обычной кулоновской функции в случае рассеяния на заряде $Z = Z_1 + Z_2$ в состоянии с моментом $\ell = q + m$. Видно, что величина этой поправки существенно уменьшается с ростом ℓ .

Для фазы $\Delta_{oo}(k, R)$ вычислено еще несколько членов асимптотического разложения:

$$\Delta_{oo}(k, R) = \sigma_0(k) - \frac{\gamma}{3} [\pi\gamma s (1 + \operatorname{cth} \pi\gamma) - s + 1] c^2 +$$

$$+ \frac{2\pi}{3} \gamma^3 s (1 + \operatorname{cth} \pi\gamma) c^3 -$$

$$- \frac{\gamma}{135} [\pi\gamma^3 s (108 - 19s)(1 + \operatorname{cth} \pi\gamma) + 30\gamma^3 s^2 \operatorname{Im} \Psi'(1 + i\gamma) +$$

$$+ 19\gamma^2 s^2 + 22\gamma^2 s - 11\gamma^2 - 5] c^4 + \quad (I6)$$

$$+ \frac{8\pi}{9} \gamma^5 s^2 (1 + \operatorname{cth} \pi\gamma) c^5 \ln c +$$

$$+ \frac{2\pi}{9} \gamma^3 s (1 + \operatorname{cth} \pi\gamma) [\gamma^2 s (4 \operatorname{Re} \Psi(1 + i\gamma) + 8 \ln 2C - \frac{139}{15}) +$$

$$+ \frac{43}{15} \gamma^2 - \frac{1}{3}] c^5 - \frac{16\pi}{9} \gamma^6 s^2 (1 + \operatorname{cth} \pi\gamma) c^6 \ln c + O(c^6).$$

Здесь $\ln C = 0,57722\dots$ - постоянная Эйлера, $\Psi'(t)$ - производная $\Psi(t)$. Формула (I6) не увеличивает существенно

образом пределы применимости асимптотики по сравнению с (I4), но дает возможность проследить структуру и вклад различных членов асимптотического разложения.

При рассеянии на диполе, т.е. для случая $Z_1 = -Z_2$ формула (I4) непосредственно неприменима. Однако, раскрывая неопределенность при $\gamma \rightarrow \infty$ и $S \rightarrow \infty$, из (I4) получим

$$\Delta_{mq}(k, R) = -4\pi \left(\frac{cZ_1}{k} \right)^2 \frac{l(l+1) - 3m^2}{(2l+1)(2l-1)(2l+3)l(l+1)} + O(c^4). \quad (I4a)$$

В таблицах I-2 приведено сравнение фаз, вычисленных по асимптотическим формулам (I4)-(I6), с данными численного расчета по методу^{/2/}. Видно, что в соответствии с видом разложений (I4)-(I6) согласие с численным расчетом тем лучше, чем меньше параметр $c = kR/2$ и чем больше орбитальный момент $l = q + m$. Асимптотическое разложение для фазы Δ_{oo} (I6) дает погрешность больше 5%, начиная с $R = 0.5$ - для $k = 0.5$ и при $R \geq 0.3$ - для $k \leq 5$.

4. АСИМПТОТИКА ФАЗ ПРИ $R \rightarrow \infty$.

Представленные в этом разделе результаты получены методом, изложенным в § 5 гл. I работы^{/1/}. Асимптотическое разложение для собственных значений λ имеет вид:

$$\lambda = \lambda_{mq}(c, \beta) = -c^2 + c\beta + \frac{1}{8}(-\beta^2 + 8m^2 - 8\delta^2 - 5) + \frac{1}{64c} \{-5(\beta^2 - 32m^2 + 11) - 20\beta\delta^2\} + O(c^{-2}), \quad (I7)$$

где $\beta = (2q + 1)$.

Таблица I.

Фазы рассеяния $\Delta_{mq}(k, R)$ при $R \rightarrow 0$ для $Z_1 = Z_2 = 1$.

| R \ k | Δ_{oo} | | Δ_{o1} | |
|-------|-------------------------|-----------|---------------|-----------|
| | 0,5 | 5 | 0,5 | 5 |
| 0 | -2,309698 ^{a)} | 0,207156 | -3,635516 | -0,173351 |
| 0,025 | -2,310896 ^{b)} | 0,205801 | -3,635261 | -0,172885 |
| | -2,310943 ^{c)} | 0,205800 | -3,635253 | -0,172886 |
| 0,050 | -2,314428 | 0,201998 | -3,634472 | -0,171500 |
| | -2,314439 | 0,201997 | -3,634464 | -0,171493 |
| 0,1 | -2,326921 | 0,188427 | -3,631318 | -0,166049 |
| | -2,326918 | 0,188436 | -3,631301 | -0,165919 |
| 0,2 | -2,367306 | 0,144738 | -3,618769 | -0,145791 |
| | -2,366636 | 0,145478 | -3,618682 | -0,14362 |
| 0,3 | -2,419958 | 0,088451 | -3,598133 | -0,117386 |
| | -2,412442 | 0,096732 | -3,59764 | -0,1065 |
| 0,4 | -2,479047 | 0,026586 | -3,569970 | -0,087965 |
| | -2,4394 | 0,0700 | -3,5682 | -0,054 |
| 0,5 | -2,541370 | -0,036692 | -3,535229 | -0,064729 |
| | -2,404 | 0,1136 | -3,5303 | 0,01 |

а) Кулоновская фаза $\beta_{q+m}(k)$

в) Фаза, вычисленная согласно алгоритму работы^{/2/}

с) Фаза, вычисленная по асимптотическим формулам (I4) и (I6).

Асимптотика р.к.с.ф. $\Pi_{mq}(c, a, \lambda; \xi)$ имеет вид

$$\Pi_{mq}(c, a, \lambda; \xi) = \left(\frac{z}{z'} \right)^{1/2} J_m(cz), \quad z' = \frac{\partial z}{\partial \xi}, \quad (I8)$$

где $J_m(cz)$ - функция Бесселя, а аргумент функции

Таблица 2.

Фазы рассеяния $\Delta_{01}(k, R)$ при $R \rightarrow 0$ для случая $Z_1=1, Z_2=2$.

| R \ k | 0,2 | 0,4 | 1 | 5 |
|-------|--------------------------|-----------|-----------|-----------|
| 0 | -27,904823 ^{а)} | -9,824298 | -2,302397 | -0,267676 |
| 0,1 | -27,897167 ^{б)} | -9,815888 | -2,293780 | -0,255212 |
| | -27,904879 ^{с)} | -9,823567 | -2,310915 | -0,244266 |
| 0,2 | -27,872433 | -9,791048 | -2,268552 | -0,221393 |
| | -27,905048 | -9,821376 | -2,336472 | -0,174087 |
| 0,3 | -27,832940 | -9,751438 | -2,228488 | -0,176348 |
| | -27,905330 | -9,817725 | -2,379066 | -0,066988 |
| 0,4 | -27,781971 | -9,700424 | -2,177539 | -0,133878 |
| | -27,905725 | -9,812612 | -2,438698 | 0,106880 |
| 0,5 | -27,722986 | -9,643044 | -2,121190 | -0,105691 |
| | -27,906232 | -9,806039 | -2,516367 | 0,317568 |

а) Кулоновская фаза. $\sigma_{q+m}(k)$.б) Фаза, вычисленная согласно алгоритму работы^{/2/}.

с) Фаза, вычисленная по асимптотической формуле (14).

$z = z(c, \xi)$ представляется в виде асимптотического разложения

$$z = \sqrt{\xi^2 - 1} + \frac{1}{c} \left\{ \gamma \ln(\xi + \sqrt{\xi^2 - 1}) - \frac{\sigma}{2} \arctg \sqrt{\xi^2 - 1} \right\} +$$

$$+ \frac{1}{c^2} \left\{ \frac{\delta^2 - \sigma^2}{2} \arctg \sqrt{\xi^2 - 1} + \frac{\sqrt{\xi^2 - 1}}{2\xi} \left(\gamma \sigma - \frac{\sigma^2 + 3}{8\xi} \right) \right\} +$$

$$+ O(c^{-3}). \quad (19)$$

Таблица 3.

Фазы рассеяния $\Delta_{mq}(k, R)$ при $k \rightarrow \infty, R \rightarrow \infty$ для случая $Z_1=1, Z_2=3$.

| R | k | Δ_{00} | Δ_{01} | Δ_{05} |
|------|------|-----------------------|---------------|---------------|
| 1,0 | 5,0 | -0,6770 ^{а)} | -0,3578 | -1,3137 |
| | | -0,7638 ^{б)} | -0,4038 | 0,8762 |
| | 10,0 | -0,6164 | -0,4989 | -0,5591 |
| | | -0,6226 | -0,5426 | -0,2226 |
| | 20,0 | -0,4522 | -0,4287 | -0,2255 |
| | | -0,4529 | -0,4329 | -0,3529 |
| 5,0 | 1,0 | -5,3690 | -4,9771 | -6,5167 |
| | | -6,6351 | -5,0351 | 1,3649 |
| | 2,0 | -3,4165 | -2,9690 | -2,4267 |
| | | -3,4901 | -3,0901 | -1,4901 |
| | 5,0 | -2,0173 | -1,9482 | -1,4998 |
| | | -2,0188 | -1,9548 | -1,6988 |
| | 10,0 | -1,2831 | -1,2663 | -1,1858 |
| | | -1,2834 | -1,2674 | -1,2034 |
| | 20,0 | -0,7809 | -0,7768 | -0,7588 |
| | | -0,7809 | -0,7769 | -0,7609 |
| 10,0 | 0,4 | -17,8898 | -17,9216 | -18,2684 |
| | | -33,8838 | -28,8838 | -8,8838 |
| | 1,0 | -7,4223 | -6,7355 | -5,6292 |
| | | -7,9227 | -7,1228 | -3,9228 |
| | 2,0 | -4,7224 | -4,5210 | -3,1336 |
| | | -4,7408 | -4,5408 | -3,7408 |
| | 5,0 | -2,5738 | -2,5407 | -2,3825 |
| | | -2,5762 | -2,5442 | -2,4142 |
| | 10,0 | -1,5627 | -1,5544 | -1,5189 |
| | | -1,5627 | -1,5547 | -1,5227 |

а) фаза, вычисленная согласно алгоритму работы^{/2/}.

б) фаза, вычисленная по асимптотической формуле (20).

Предельный переход $\xi \rightarrow \infty$ в формуле (19) с учетом асимптотического поведения функций Бесселя приводит к следующему выражению для фазы $\Delta_{mq}(k, R)$

$$\begin{aligned} \Delta_{mq}(c, a, \theta) &= -\gamma \ln c + \frac{1}{c} \left\{ \frac{\gamma \delta}{2} + \frac{\pi}{4} (\delta^2 - \gamma^2) \right\} + O(c^{-2}) = \\ &= -\frac{Z_1 + Z_2}{k} \ln \frac{kR}{2} + \frac{1}{kR} \left\{ \frac{Z_1 + Z_2}{k} (2q+1) - \frac{2\pi Z_1 Z_2}{k^2} \right\} + O(c^{-2}) \end{aligned} \quad (20)$$

Из формулы (20) следует, что при $c \gg 1$ с точностью до членов $\sim c^{-1}$ двухцентровая фаза рассеяния равна сумме одноцентровых фаз. В табл. 3 сравниваются результаты численного расчета фаз $\Delta_{mq}(k, R)$ согласно алгоритму^{/2/} и по асимптотической формуле (20). Легко видеть, что согласие обоих значений зависит не только от величины c , но также от значений k и R .

5. ФАЗЫ ОДНОЦЕНТРОВОЙ КУЛОНОВСКОЙ ЗАДАЧИ В СФЕРОИДАЛЬНЫХ КООРДИНАТАХ

Фазы одноцентровой кулоновской задачи в сфероидальных координатах являются частным случаем двухцентровой задачи при условии $Z_1 = 0$, $\theta = a$ или $Z_2 = 0$, $\theta = -a$ и для их вычисления полностью применим алгоритм работы^{/2/}. Однако в этом случае существует другой метод, позволяющий вырезать все характеристики задачи только через параметры угловой функции^{/4/}, поскольку для одноцентровой задачи р.к.с.ф. являются аналитическим продолжением у.к.с.ф. с отрезка $[-1, 1]$ на луч $[1, \infty)$.

Если для у.к.с.ф. использовать разложение по присоединенным полиномам Лежандра с выделенной экспонентой

$$\sum_{m_q} (c, -a; z) = e^{icz} \sum_{s=0}^N d_s P_{s+m}^m(z) \quad (21)$$

$$d_{-1} = 0, \quad d_0 = 1,$$

то одноцентровая кулоновская сфероидальная фаза

$$\Delta_{mq}^{\circ}(k, R) \equiv \Delta_{mq}(c, a, -a) = \Delta_{mq}(c, a, a)$$

выражается через фазы коэффициентов d_s формулой^{/4/}:

$$\Delta_{mq}^{\circ}(k, R) = \sigma_{s+m}(k) + \pi m + \frac{\pi}{2}(s \mp q) - \arg d_s + \arg g_{mq}^{(\pm)} \quad (22)$$

где $\sigma_e(k)$ — обычная кулоновская фаза при рассеянии на потенциале $-Z/r$, $Z = Z_1$ (см. (?)), а величина $g_{mq}^{(\pm)}$ определяется равенством

$$g_{mq}^{(\pm)} = \lim_{z \rightarrow \pm 1} (1-z^2)^{-m/2} \sum_{m_q} (c, -a; z). \quad (23)$$

Формулу (22) можно упростить, если воспользоваться рекуррентными соотношениями для коэффициентов d_s ^{/1/}. Из этих соотношений следует, что, выбрав $d_0 = 1$, коэффициенты d_s можно представить в виде

$$d_s = h_s e^{i \frac{\pi s}{2}} \frac{\Gamma(i\gamma + m + 1)}{\Gamma(i\gamma + m + s + 1)}, \quad (24)$$

где h_s — вещественно. Комбинируя формулы (22), (24) и нормируя фазу Δ_{mq}° условием (?), получим окончательно

$$\Delta_{mq}^{\circ}(k, R) = \sigma_m(k) + \pi m + \frac{\pi q}{2} + \arg g_{mq}^{(\pm)} \quad (25)$$

т.е. задача о вычислении сфероидальной фазы рассеяния на одном кулоновском центре сводится к нахождению $\arg g_{mq}^{(\pm)}$.

Таблица 4.

Фазы рассеяния $\Delta_{01}(k, R)$ одноцентрковой задачи с $Z_1 = 0, Z_2 = R$.

| R | k = 0, 2 | N | k = 0, 4 | N | k = 1, 0 | N | k = 2, 0 | N | k = 10 | N |
|-------|--|----|--------------------------|----|--------------------------|----|--------------------------|----|--------------------------|----|
| 0 | -15, 274041 ^{a)} | | -5, 139399 | | -1, 236795 | | -0, 483758 | | -0, 065093 | |
| 0, 1 | -15, 273828 ^{b)} -15, 273846 ^{c)} | 3 | -5, 188897 -5, 188902 | 4 | -1, 235798 -1, 235800 | 4 | -0, 481769 -0, 481771 | 4 | -0, 075645 -0, 075647 | 6 |
| 0, 5 | -15, 269511 -15, 269509 | 4 | -5, 180238 -5, 180242 | 4 | -1, 214367 -1, 214377 | 5 | -0, 440519 -0, 440523 | 6 | -0, 037207 -0, 037207 | 12 |
| 1, 0 | -15, 259727 -15, 259709 | 5 | -5, 160767 -5, 160768 | 5 | -1, 167904 -1, 167890 | 6 | -0, 362744 -0, 362747 | 8 | -0, 231472 -0, 231486 | 19 |
| 2, 0 | -15, 244146 -15, 244086 | 6 | -5, 130323 -5, 130340 | 6 | -1, 105957 -1, 105960 | 8 | -0, 333359 -0, 333365 | 10 | - | |
| 3, 0 | -15, 245011 -15, 245024 | 7 | -5, 133330 -5, 133317 | 7 | -1, 132591 -1, 132654 | 9 | -0, 517939 -0, 517939 | 13 | - | |
| 5, 0 | -15, 288229 -15, 288245 | 8 | -5, 219987 -5, 220021 | 9 | -1, 368085 -1, 368095 | 12 | -1, 159101 -1, 159101 | 28 | - | |
| 10, 0 | -15, 504063 -15, 504076 | 10 | -5, 638679 -5, 638675 | 11 | -2, 399416 -2, 399434 | 13 | -2, 127517 -2, 127542 | 32 | - | |
| 20, 0 | -16, 096205 -16, 096223 | 12 | -6, 747916 -6, 747937 | 16 | -4, 250404 -4, 250415 | 31 | - | - | - | |

18

а) Кулоновская фаза $b_1(k)$.в) фаза вычисленная согласно алгоритму работы^{/2/}

с) фаза вычисленная согласно формуле (25)

N-число коэффициентов, участвующих в разложении (21).

В таблице 4 сравниваются значения одноцентрковых фаз, вычисленных согласно алгоритму работы^{/2/} и по формуле (25).

В приведенных примерах расхождение наблюдается в 5-7 знаке, что свидетельствует о высокой точности алгоритма, реализованного в работе^{/2/}. В таблице 4 указано также число членов N , в разложении (21), используемых при расчете фаз по формуле (25). Это число определяется из условия отбрасывания первого растущего коэффициента d_s и различно при разных k и R . Отметим, что представление угловой функции в виде ряда (21) может быть использовано для численных расчетов только при $c \leq 5$, поскольку при $c > 5$ последовательные члены ряда (21) сильно осциллируют и резко возрастают по амплитуде, что приводит к потере точности вычислений.

6. СВЯЗЬ МЕЖДУ ФАЗАМИ ДВУХЦЕНТРОВОЙ И ОДНОЦЕНТРОВОЙ КУЛОНОВСКИХ ЗАДАЧ

Как известно^{/6/}, в дискретном спектре задачи двух центров при некоторых значениях R р.к.с.ф. и у.к.с.ф. совпадают с одноцентрковыми кулоновскими функциями в сферических координатах и могут быть представлены полиномами. Очевидно, что в непрерывном спектре у.к.с.ф. всегда совпадает с одноцентрковой угловой функцией для заряда $Z = Z_2 - Z_1$. Кроме того, как следует из анализа результатов численных расчетов, в непрерывном спектре задачи двух центров существуют некоторые комбинации значений k и R , при которых р.к.с.ф. совпадают с одноцентрковыми кулоновскими функциями в сферических координатах для заряда $Z = Z_1 + Z_2$. Пара таких значений (k_0, R_0) определяется из условия

$$\lambda_{mq}(c, a, b) = \lambda_{mq}(c, a, a), \quad (26)$$

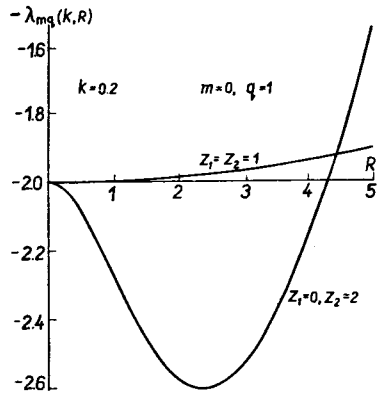


Рис. 9

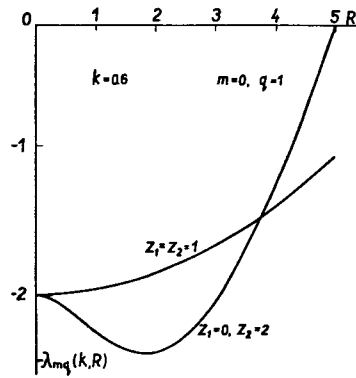


Рис. 10

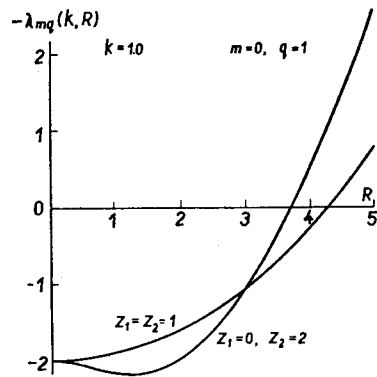


Рис. 11

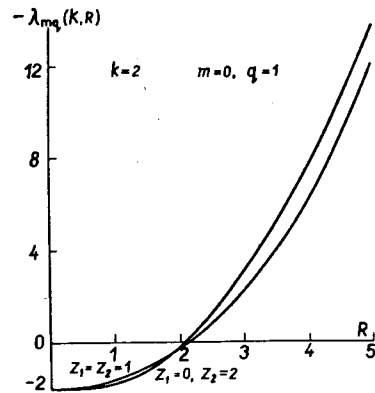


Рис. 12

Рис. 9-12. Собственные значения $-\lambda_{o1}(k, R)$ двухцентр-
вой ($Z_1 = Z_2 = 1$) и одноцентр-
вой ($Z_1 = 0, Z_2 = 2$)
задач при $k = 0, 2; 0, 6; 1, 0; 2, 0$.

т.е. в точках (k_0, R_0) двухцентр-
вой фазы $\Delta_{mq}(k, R)$
может быть вычислена по формуле
(25) для од-
ноцентр-
ных фаз $\Delta_{o1}^0(k, R)$.

На рис. 9-12 представлены собственные значения $\lambda_{o1}(k, R)$
как функции R при фиксированных значениях k для двух
случаев: $\lambda_{o1}(k, R)$ двухцентр-
вой задачи при $Z_1 = Z_2 = 1$
и $\lambda_{o1}^0(k, R)$ одноцентр-
вой задачи при $Z_1 = 0, Z_2 = 2$.
При значениях $R \sim 3+4$ кривые $\lambda_{o1}(k, R)$ и $\lambda_{o1}^0(k, R)$
пересекаются. Это означает, что при этих значениях пары (k_0, R_0)
фазы $\Delta_{mq}(k_0, R_0)$ двухцентр-
вой задачи с зарядами Z_1
и Z_2 совпадают с фазой одноцентр-
ной кулоновской задачи для
заряда $Z = Z_1 + Z_2$. На рис. 13 и 14 представлены так-
же поверхности $\lambda_{o1}^0(k, R)$ и $\lambda_{o1}(k, R)$ на плос-
кости (k, R) . Линия пересечения этих двух поверхностей

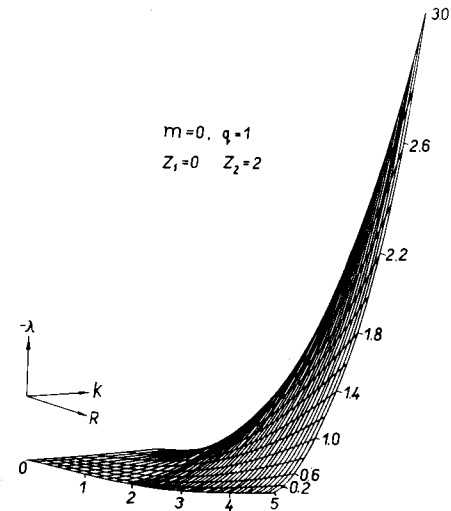


Рис. 13. Поверхность $-\lambda_{o1}^0(k, R)$ собственных значений
одноцентр-
ной задачи ($Z_1 = 0, Z_2 = 2$) в сфероидаль-
ных координатах на плоскости (k, R) .

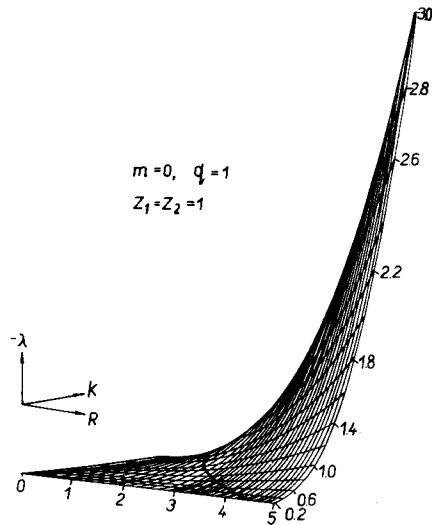


Рис. 14. Поверхность $-\lambda_{01}(k, R)$ собственных значений двухцентральной задачи ($Z_1 = Z_2 = 1$) на плоскости (k, R) . На рисунке указана также линия (k_0, R_0) пересечения поверхностей $-\lambda_{01}(k, R)$ и $\lambda_{01}^0(k, R)$.

определяет кривую (k_0, R_0) , на которой фазы $\Delta_{mq}(k, R)$ двухцентральной задачи могут быть вычислены в виде рядов (22), (25), представляющих фазу $\Delta_{mq}^0(k, R)$ одноцентральной задачи.

В таблицах 5 и 6 приведены результаты вычислений одноцентральных фаз в сферических координатах для зарядов $Z_1 = 0, Z_2 = 1$; $Z_1 = 0, Z_2 = 3$ и $Z_1 = 0, Z_2 = 4$ и двухцентральных фаз для случая $Z_1 = 1, Z_2 = 3$, а также разность ϵ между двухцентральной фазой Δ_{mq} для зарядов $Z_1 = 1, Z_2 = 3$ и суммой одноцентральных фаз Δ_{mq}^0 с зарядами $Z_1 = 0, Z_2 = 1$ и $Z_1 = 0, Z_2 = 3$ соответственно.

Таблица 5.
Сравнение двухцентральных $\Delta_{01}(k, R)$ и одноцентральных $\Delta_{01}^0(k, R)$ кулоновских фаз

| R | k | $Z_1 = 1$ $Z_2 = 0$ | $Z_1 = 0$ $Z_2 = 3$ | $Z_1 = 0$ $Z_2 = 4$ | $Z_1 = 1$ $Z_2 = 3$ | ϵ |
|------|---------|------------------------|------------------------|------------------------|------------------------|------------|
| 0,1 | 0,2 | -5,1892 | -27,9053 | -42,2169 | -42,2048 | 9,1103 |
| | 0,4 | -1,7327 | -9,8237 | -15,2733 | -15,2614 | 3,7050 |
| | 1,0 | -0,4833 | -2,3009 | -3,6336 | -3,6225 | 0,8383 |
| | 2,0 | -0,2186 | -0,8169 | -1,2329 | -1,2230 | 0,1875 |
| | 5,0 | -0,0851 | -0,2603 | -0,3608 | -0,3528 | 0,0074 |
| | 10,0 | -0,0376 | -0,1145 | -0,1547 | -0,1480 | -0,0041 |
| 20,0 | -0,0131 | -0,0396 | -0,0527 | -0,0489 | -0,0038 | |
| 0,5 | 0,2 | -5,1869 | -27,8999 | -42,2104 | -41,9965 | 8,9097 |
| | 0,4 | -1,7280 | -9,8121 | -15,2597 | -15,0509 | 3,5108 |
| | 1,0 | -0,4717 | -2,2721 | -3,6000 | -3,4099 | 0,6660 |
| | 2,0 | -0,1964 | -0,7613 | -1,1679 | -1,0116 | 0,0539 |
| | 5,0 | -0,0415 | -0,1537 | -0,2342 | -0,1740 | -0,0212 |
| | 10,0 | -0,0176 | -0,0607 | -0,0894 | -0,1160 | 0,0377 |
| 20,0 | -0,0079 | -0,1736 | -0,2315 | -0,2410 | 0,0095 | |
| 1,0 | 0,2 | -5,1802 | -27,8881 | -42,2028 | -41,9409 | 8,8726 |
| | 0,4 | -1,7149 | -9,7927 | -15,2441 | -14,9930 | 3,4854 |
| | 1,0 | -0,4405 | -2,2255 | -3,5627 | -3,3555 | 0,6894 |
| | 2,0 | -0,1452 | -0,6829 | -1,1060 | -0,9891 | 0,1610 |
| | 5,0 | -0,0372 | -0,1664 | -0,2714 | -0,3578 | 0,1542 |
| | 10,0 | -0,1158 | -0,3471 | -0,4628 | -0,4989 | 0,0360 |
| 20,0 | -0,1064 | -0,3192 | -0,4256 | -0,4287 | 0,0031 | |
| 2,0 | 0,2 | -5,1608 | -27,8836 | -42,2118 | -42,3824 | 9,3380 |
| | 0,4 | -1,6769 | -9,7859 | -15,2613 | -15,4283 | 3,9654 |
| | 1,0 | -0,4405 | -2,2171 | -3,6094 | -3,7786 | 1,1209 |
| | 2,0 | -0,0912 | -0,7250 | -1,2286 | -1,4369 | 0,6208 |
| | 5,0 | -0,2315 | -0,6941 | -0,9259 | -1,0564 | 0,1308 |
| | 10,0 | -0,2128 | -0,6385 | -0,8513 | -0,8633 | 0,0120 |
| 20,0 | -0,1458 | -0,4373 | -0,5834 | -0,5844 | 0,0013 | |

Таблица 5. (Продолжение)

| R | k | $Z_1=1$ $Z_2=0$ | $Z_1=0$ $Z_2=3$ | $Z_1=0$ $Z_2=4$ | $Z_1=1$ $Z_2=3$ | ϵ |
|------|------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|------------|
| 5,0 | 0,2 | -5,1274 | -27,9783 | -42,3324 | -43,5075 | 10,4018 |
| | 0,4 | -1,6214 | -9,9705 | -15,5041 | -16,5705 | 4,9786 |
| | 1,0 | -0,4034 | -2,6653 | -4,1893 | -4,9771 | 1,9085 |
| | 2,0 | -0,5785 | -1,7582 | -2,3994 | -2,9690 | 0,6324 |
| | 5,0 | -0,4782 | -1,4346 | -1,9128 | -1,9482 | 0,0354 |
| | 10,0 | -0,3155 | -0,9467 | -1,2622 | -1,2663 | 0,0041 |
| | 20,0 | -0,1939 | -0,5822 | -0,7761 | -0,7768 | 0,0007 |
| 10,0 | 0,2 | -5,2200 | -28,2477 | -42,6334 | -44,7429 | 11,2752 |
| | 0,4 | -1,8168 | -10,4974 | -16,0962 | -17,9216 | 5,6075 |
| | 1,0 | -1,1591 | -3,8556 | -5,5224 | -6,7355 | 1,7208 |
| | 2,0 | -1,0518 | -3,1899 | -4,2504 | -4,5210 | 0,2793 |
| | 5,0 | -0,6311 | -1,8933 | -2,5244 | -2,5407 | 0,0163 |
| | 10,0 | -0,3882 | -1,1645 | -1,5524 | -1,5544 | 0,0017 |

Таблица 6

Сравнение двухцентровых $\Delta_{05}(k,R)$ и одноцентровых $\Delta_{05}^{\circ}(k,R)$ кулоновских фаз рассеяния

| R | k | $Z_1=1$ $Z_2=0$ | $Z_1=0$ $Z_2=3$ | $Z_1=0$ $Z_2=4$ | $Z_1=1$ $Z_2=3$ | ϵ |
|-----|------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|------------|
| 0,1 | 0,2 | -9,0915 | -33,2777 | -47,8109 | -47,8108 | 5,4416 |
| | 0,4 | -4,3460 | -14,3885 | -20,2243 | -20,2242 | 1,4897 |
| | 1,0 | -1,7115 | -5,2545 | -7,1300 | -7,1299 | 0,1639 |
| | 2,0 | -0,8537 | -2,5771 | -3,4542 | -3,4541 | 0,0233 |
| | 3,0 | -0,5688 | -1,7113 | -2,2873 | -2,2872 | 0,0070 |
| | 5,0 | -0,3411 | -1,0245 | -1,3672 | -1,3672 | 0,0016 |
| | 10,0 | -0,1704 | -0,5113 | -0,6819 | -0,6818 | 0,0001 |
| 0,5 | 0,2 | -9,0849 | -33,2766 | -47,8100 | -47,8066 | 5,4386 |
| | 0,4 | -4,3457 | -14,3879 | -20,2234 | -20,2203 | 1,4867 |
| | 1,0 | -1,7110 | -5,2529 | -7,1279 | -7,1254 | 0,1615 |
| | 2,0 | -0,8527 | -2,5740 | -3,4501 | -3,4448 | 0,0181 |

Таблица 6 (продолжение)

| R | k | $Z_1=1$ $Z_2=0$ | $Z_1=0$ $Z_2=3$ | $Z_1=0$ $Z_2=4$ | $Z_1=1$ $Z_2=3$ | ϵ |
|------|------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|------------|
| I.0 | 3,0 | -0,5673 | -1,7067 | -2,2811 | -2,2790 | 0,0050 |
| | 5,0 | -0,3386 | -1,0167 | -1,3568 | -1,3548 | -0,0005 |
| | 10,0 | -0,1650 | -0,4951 | -0,6604 | -0,6582 | -0,0019 |
| | 20,0 | -0,0716 | -0,2130 | -0,2846 | -0,2832 | -0,0014 |
| | 0,2 | -9,0910 | -33,2755 | -47,8069 | -47,7930 | 5,4265 |
| | 0,4 | -4,3451 | -14,3859 | -20,2213 | -20,2089 | 1,4779 |
| | 1,0 | -1,7094 | -5,2481 | -7,1215 | -7,1111 | 0,1537 |
| 2,0 | 2,0 | -0,8494 | -2,5643 | -3,4371 | -3,4279 | 0,0142 |
| | 3,0 | -0,5624 | -1,6919 | -2,2614 | -2,2526 | -0,0017 |
| | 5,0 | -0,3300 | -0,9912 | -1,3227 | -1,3137 | -0,0075 |
| | 10,0 | -0,1433 | -0,4298 | -0,5730 | -0,5591 | -0,0140 |
| | 20,0 | -0,0532 | -0,1602 | -0,2134 | -0,2255 | -0,0120 |
| | 0,2 | -9,0897 | -33,2712 | -47,8079 | -47,7529 | 5,3920 |
| | 0,4 | -4,3425 | -14,3781 | -20,2104 | -20,1600 | 1,4394 |
| 5,0 | 1,0 | -1,7029 | -5,2286 | -7,0954 | -7,0526 | 0,1211 |
| | 2,0 | -0,8361 | -2,5241 | -3,3832 | -3,3436 | -0,0166 |
| | 3,0 | -0,5413 | -1,6283 | -2,1761 | -2,1344 | -0,0353 |
| | 5,0 | -0,2866 | -0,8594 | -1,1456 | -1,0836 | -0,0623 |
| | 10,0 | -0,1066 | -0,3234 | -0,4352 | -0,4761 | 0,0460 |
| | 20,0 | -0,1319 | -0,3956 | -0,5275 | -0,5296 | 0,0021 |
| | 0,2 | -9,0807 | -33,2427 | -47,7637 | -47,3657 | 5,0423 |
| 10,0 | 0,4 | -4,3243 | -14,3219 | -20,1331 | -19,7573 | 1,1110 |
| | 1,0 | -1,6553 | -5,0798 | -6,8893 | -6,5167 | -0,2183 |
| | 2,0 | -0,7162 | -2,1513 | -2,8868 | -2,4267 | -0,4408 |
| | 3,0 | -0,3053 | -1,0419 | -1,4931 | -1,3700 | 0,0228 |
| | 5,0 | -0,3516 | -1,0520 | -1,3998 | -1,4998 | 0,0962 |
| | 10,0 | -0,2950 | -0,8851 | -1,1801 | -1,1858 | 0,0056 |
| | 20,0 | -0,1895 | -0,5686 | -0,7580 | -0,7588 | 0,0008 |
| I0,0 | 0,2 | -9,0460 | -33,1274 | -47,6118 | -45,8145 | 3,6410 |
| | 0,4 | -4,2566 | -14,0850 | -19,8332 | -18,2684 | -0,0732 |
| | 1,0 | -1,4320 | -4,4773 | -6,2793 | -5,6292 | -0,2801 |
| | 2,0 | -0,5501 | -1,9388 | -2,7897 | -3,1336 | 0,6447 |
| | 3,0 | -0,7203 | -2,1572 | -2,8716 | -3,0274 | 0,1499 |
| | 5,0 | -0,5901 | -1,7702 | -2,3602 | -2,3825 | 0,0222 |
| | 10,0 | -0,3791 | -1,1374 | -1,5166 | -1,5189 | 0,0024 |

Из этих таблиц видно, что:

- а) при $k \rightarrow 0$ при всех значениях R двухцентровая фаза Δ_{mq} ближе к соответствующей ей одноцентральной фазе с суммарным зарядом $Z = Z_1 + Z_2$, чем к сумме одноцентральных фаз с зарядами $Z = Z_1$ и $Z = Z_2$. Это и естественно, так как при $k \rightarrow 0$ длина волны существенно больше R - характерного размера системы, и величина фазы нечувствительна к структуре системы^{7/};
- б) при $k \rightarrow \infty$, $\epsilon \rightarrow 0$ т.е. двухцентровая фаза $\Delta_{mq}(Z_1=1, Z_2=3)$ становится ближе к сумме $\Delta_{mq}^{\circ}(Z_1=0, Z_2=1) + \Delta_{mq}^{\circ}(Z_1=0, Z_2=3)$, чем к $\Delta_{mq}^{\circ}(Z_1=0, Z_2=4)$. Этот факт также естественен, поскольку при $k \rightarrow \infty$ рассеяние на составной системе можно рассматривать как последовательное независимое рассеяние на каждом из центров системы^{8,9/};
- в) при всех k и R двухцентровая фаза Δ_{mq} близка к соответствующей ей одноцентральной фазе Δ_{mq}° с суммарным зарядом $Z = Z_1 + Z_2$.
- г) разность $\Delta_{mq}^{\circ}(Z_1=0, Z_2=4) - [\Delta_{mq}^{\circ}(Z_1=0, Z_2=3) + \Delta_{mq}^{\circ}(Z_1=0, Z_2=1)]$ слабо зависит от R и определяется в основном параметром k , причем при $k \rightarrow \infty$ указанная разность стремится к нулю.

На рис. 15 приведены графики двухцентровых фаз $\Delta_{mq}(k, R)$ для системы $Z_1 = Z_2 = 1$ как функции R при фиксированном значении $k = 1$ и различных наборах квантовых чисел m и q . На этом рисунке прослеживаются основные особенности поведения фаз рассеяния. Из графика легко также видеть, что при $m \leq q$ фазы $\Delta_{mq}(k, R)$, хотя бы в одной точке при конечных R совпадают с кулоновскими фазами $\mathcal{B}_\ell(k)$ для заряда $Z = Z_1 + Z_2$, т.е. со своим значением $\Delta_{mq}(k, 0)$ при $R = 0$.

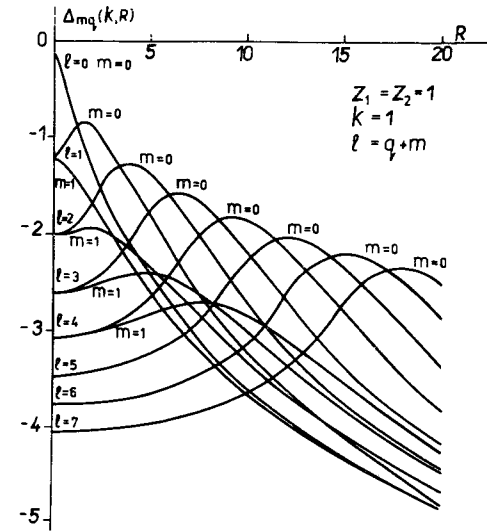


Рис. 15. Двухцентровые фазы $\Delta_{mq}(k, R)$ для системы $Z_1 = Z_2 = 1$ при значении $k=1$; $\ell = m+q$.

В заключение авторы приносят глубокую благодарность И.В.Комарову за ценные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. И.В.Комаров, Л.И.Пономарев, С.Ю.Славянов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., Наука, 1976.
2. L.I.Ponomarev and L.N.Somov, J. Comp. Phys., 20, 183, (1976).
3. D.I.Abramov, S.Yu.Slavyanov, J. Phys. B11, 238 (1978).
4. Д.И.Абрамов, И.В.Комаров. ТМФ, 29, 235 (1976).
5. P.Th.Greenland, W.Greiner. Theoret. Chim. Acta (Berl), 42, 27 (1976).
6. Ю.Н.Демков. Письма в ЖЭТФ, 7, 101 (1968).

7. Д.Н.Демков, В.С.Рудаков, *ЖЭТФ*, 59, 2035, 1970.
8. R.J.Glauber, High-Energy collision theory, Lectures in theoretical physics, Boulder, 1958 (Interscience, New York, 1959).
9. H.Fauchiotti and T.A.Osborn, *Nucl. Phys.* A177 (1971), 273-288.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 июля 1978 года.