ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P4 - 3842

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Л.И.Пономарев

МЕТОД ВКБ В ЗАДАЧЕ О КОНФИГУРАЦИОННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ТЕРМОВ СИСТЕМЫ ZeZ'

1968

Р4 - 3842

Л.И.Пономарев

МЕТОД ВКБ В ЗАДАЧЕ О КОНФИГУРАЦИОННОМ ВЗАИМОДЕЙСТВИИ ТЕРМОВ СИСТЕМЫ ZeZ'

Направлено в ЖЭТФ

Пономарев Л.И. P4-3842

Метод ВКБ в задаче о конфигурационном взаимодействии термов системы ZeZ'

В работе изучается явление псевдопересечения термов в системе ZeZ', обнаруженное недавно /1/. С помощью метода ВКБ найдены формулы для величины расщепления уровней δE в точке псевдопересечения, расстояния R_0 между зарядами Z и Z', при которых псевдопересечения возникают, значения энергии E_0 в этой точке, а также функция, которая определяет общее число таких псевдопересечений в системе ZeZ' при заданных значениях зарядов Z и Z' и квантовых чисел n и n' взаимодействующих термов. Полученные формулы сравниваются с численными расчётами.

Препринт Объединенного института ядерных исследований.
Дубна, 1968.

Ponomarev L.I. P4-3842

The WKB Method of Solving the Problem of Configurational Interaction of Terms in the ZeZ' System

The phenomenon of the pseudointersection of the terms in the ZeZ' system, which was observed recently/1/, is being discussed. By means of the WKB method the formulae were obtained for the value of splitting the δE levels at the point of pseudointersection, as well as the R_0 distances between the charges Z and Z', at which these pseudointersections appear, the E_0 energy values in the point of pseudointersection and the function determining the total number of such pseudointersections in the system ZeZ' at given values of charges Z and Z' and guantum numbers n and n' of interacting terms. The formulae obtained are compared with the numerical calculations.

Preprint. Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1968

1. Недавно[1] в системе ZeZ' обнаружены псевдопересечения термов, то есть уровней энергии электрона e в поле двух фиксированных зарядов Z и Z', удаленных на расстояние R. Это своеобразное явление (конфигурационное взаимодействие термов) есть внутреннее свойство системы ZeZ' и не связано с какими-либо внешними динамическими возмущениями (в системе один электрон, а ядра фиксированы). Псевдопересечения возникают при больших, но конечных расстояниях R между ядрами и имеют вид, схематически представленный на рис. 1[1].

Во многих задачах атомной физики (например, в задаче о несимметричной перезарядке типа $p\mu^- + Z \to Z\mu^- + p$ [2,1]) именно они определяют ход процессов. Для вычисления сечений таких процессов необходимо знать расстояние R_0 между ядрами Z и Z', при котором происходит псевдопересечение термов E и E', и величину их расщепления δE в этой точке. Замечательно, что величины R_0 и δE удается выразить аналитически через квантовые числа уровней E и E', хотя вся задача в целом, как известно, может быть решена только численно. Ниже эти величины найдены с помощью метода ВКБ, и поэтому все дальнейшие вычисления представляют также самостоятельный интерес как нетривиальный пример использования квазиклассики[3].

2. В методе ВКБ задача двух центров квантовой механики сводится к задаче квантования в двойной яме типа изображенной на рис. 2а. Квазиклассические условия квантования в такой яме найдены в работе[4] и имеют вид ($Z' > Z$):

$$\operatorname{ctg}\omega_2 \cdot \operatorname{ctg}\omega'_2 = \operatorname{tg}^2 \frac{e^{-K}}{2}, \tag{1}$$

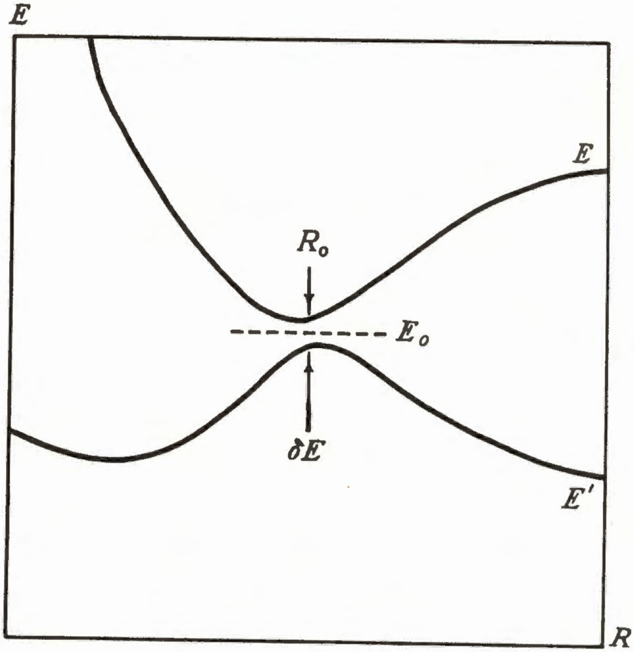

Рис. 1. Схема псевдопересечений: в точке R_0 термы E и E' расположены симметрично относительно значения $E_0 = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z'-Z}{n'-n}\right)^2$.

Величина расщепления δE определяется формулой (21).

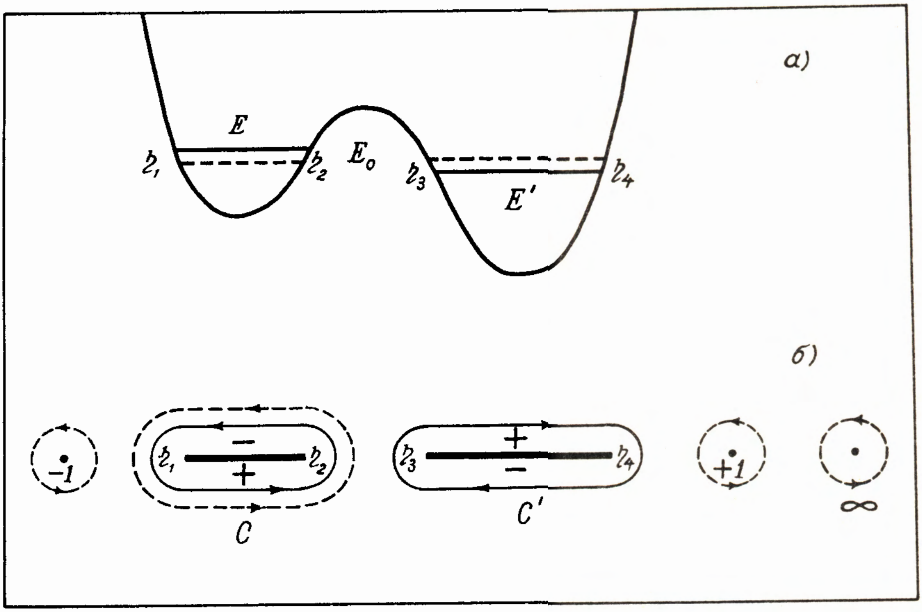

Рис. 2. Схема квантования в двойной яме вблизи точки псевдопересечения R_0 и картина комплексной плоскости для квазиимпульса $Q(\eta)$.

где

$$\omega_2 = \int_{\eta_1}^{\eta_2} Q(\eta)\,d\eta \; ; \qquad \omega_2' = \int_{\eta_3}^{\eta_4} Q(\eta)\,d\eta \; ; \; K = \int_{\eta_2}^{\eta_3} |\,Q(\eta)\,|\,d\eta \; ;$$

$$Q(\eta) = \left[\frac{-p^2(1-\eta^2) + b\eta - \lambda}{1-\eta^2} - \frac{m^2}{(1-\eta^2)^2} \right]^{1/2} \; ; \tag{2}$$

$$p^2 = -\frac{R^2}{2} E \; ; \quad b = R(Z' - Z) \; ; \quad p = \frac{R}{2}\kappa \; ; \quad \kappa = \sqrt{-2E} \, .$$

E и λ – энергия и константа разделения задачи двух центров. При $R \to \infty$ для eZ -термов (т.е. для термов, которые при $R \to \infty$ переходят в уровни изолированного атома eZ) справедливы разложения/4/ (все в атомных единицах $\hbar = m = e = 1$):

$$E = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z}{n}\right)^2 - \frac{Z'}{R} + \frac{3}{2} n (n_1 - n_2) \frac{Z'}{Z R^2} \; ;$$

(3)

$$\lambda + b = -4p\nu \left[1 - \frac{1}{2p}(\nu + a) - \frac{1}{8p^2}(2\nu^2 + 2a^2 + 3\nu a) \right] .$$

Здесь n, n_1, n_2 – параболические квантовые числа eZ - уровня и введены обозначения:

$$\nu = n_2 + \frac{1}{2} \; ; \qquad a = \frac{b}{2p} \, . \tag{4}$$

Формулы для eZ'-термов получаются из (3) после замен $Z \to Z'$, $n_1 \to n_1'$, $n_2 \to n_2'$, $n \to n'$ и – как следствие их – замен $\nu \to \nu'$, $b \to -b$, $a \to -a$. (Условимся все величины в правой яме обозначать штрихом).

$$E' = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z'}{n'}\right)^2 - \frac{Z}{R} + \frac{3}{2} n'(n_1' - n_2') \frac{Z}{Z' R^2} ;$$

(3)

$$\lambda' - b = -4p\nu'\left[1 - \frac{1}{2p}(\nu' - a) - \frac{1}{8p^2}(2\nu'^2 + 2a^2 - 3\nu' a)\right] .$$

3. Разложения (3) и (3') получены из уравнений

$$\omega_2(p, \lambda) = \pi\nu , \quad \omega_2'(p', \lambda') = \pi\nu' , \tag{5}$$

т.е. в предположении, что в условии квантования (1) влиянием второй ямы можно пренебречь. Поскольку при $R \to \infty$ одновременно $K \to \infty$, такое пренебрежение вполне законно до тех пор, пока уровни E и E' сильно различаются между собой. Однако, если в некоторой точке R_0 (но под барьером!) эти уровни сближаются, то их уже нельзя квантовать независимо в каждой из ям. В этом случае следует решать трансцендентное уравнение (1), для чего необходимо найти еще одно условие, связывающее фазовые интегралы ω_2 и ω_2'.

Чтобы найти его, рассмотрим комплексную плоскость квазиимпульса $Q(\eta)$ (см. рис. 2б). Зафиксировав знаки на разрезах, получим непосредственно

$$2\omega_2 = \int_C Q(z)\,dz ; \qquad 2\omega_2' = \int_{C'} Q(z)\,dz . \tag{6}$$

Деформируя контур C', как показано на рисунке, найдем соотношение [3]

$$2\omega_2' = 2\omega_2 + 2\pi i\,[\,\mathrm{Res}(-1) + \mathrm{Res}(+1) - \mathrm{Res}(\infty)\,] \quad . \tag{7}$$

Вычеты в точках $z = \pm 1$ взаимно сокращаются, а $\mathrm{Res}(\infty) = i\,\dfrac{b}{2p}$.
Окончательно получим уравнение, справедливое при любых значениях p и λ:

$$\omega_2'(p,\lambda) - \omega_2(p,\lambda) = \pi\,\frac{b}{2p} \quad . \tag{8}$$

Найдем значения p_0 и λ_0 из условий:

$$\omega_2(p_0,\lambda_0) = \pi\nu \;; \quad \omega_2'(p_0,\lambda_0) = \pi\nu', \tag{9}$$

которые определяют фиктивную точку пересечения уровней E и E' (в действительности такой точки не существует, ибо условия (9) противоречат уравнению (1) при всех конечных значениях R). Подставляя их в уравнение (8), получим соотношение:

$$\frac{b}{2p_0} = \nu' - \nu = n_2' - n_2 = a \,. \tag{10}$$

Кроме того, из условий (9) следует, что в точке (p_0, λ_0) должны совпадать "радиальные" фазовые интегралы ω_1 и ω_1' , поскольку в этом случае потенциал "радиального" уравнения имеет вид простой осцилляторной ямы, одинаковой для обоих уровней E и E' [4]:

$$\omega_1(p_0, \lambda_0) = \pi(n_1 + \frac{1}{2}) = \omega_1'(p_0, \lambda_0) = \pi(n_1' + \frac{1}{2}). \qquad (11)$$

Отсюда сразу же заключаем, что возможны псевдопересечения только тех уровней, у которых равны радиальные квантовые числа: $n_1 = n_1'$ – в согласии с установленным ранее эмпирическим правилом/1/.

Учитывая это условие, а также определения (2) и равенства $n = n_1 + n_2 + m + 1$ и $n' = n_1' + n_2' + m + 1$, найдем энергию E_0 в точке псевдопересечения:

$$\kappa_0 = \frac{Z' - Z}{a} = \frac{Z' - Z}{n' - n}, \quad a = n' - n;$$

$$(12)$$

$$E_0 = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z' - Z}{n' - n}\right)^2.$$

Любопытно, что набор значений энергий E_0 в точках псевдопересечения образует кулоновскую серию водородоподобного атома с зарядом $Z' - Z$ и главным квантовым числом $n' - n$.

4. В точке псевдопересечения R_0 все три энергии (E, E' и E_0) близки между собой, и потому справедливы соотношения:

$$\omega_2(p, \lambda) = \pi\nu + \Delta\omega_2; \quad \omega_2(p', \lambda') = \pi\nu + \Delta\tilde{\omega}_2;$$

$$(13)$$

$$\omega_2'(p', \lambda') = \pi\nu' + \Delta\omega_2'; \quad \omega_2'(p, \lambda) = \pi\nu' + \Delta\tilde{\omega}_2'.$$

Здесь все приращения фазовых интегралов $\Delta\omega_2$, $\Delta\omega_2'$ и т.д. $\ll 1$. Из уравнений (1) и (8) нетрудно установить, что

$$-2\Delta\omega_2 = 2\Delta\tilde{\tilde{\omega}}_2 = \delta\omega_2 = \frac{\partial\omega_2}{\partial p}\delta p + \frac{\partial\omega_2}{\partial\lambda}\delta\lambda ,$$

$$2\Delta\omega_2' = -2\Delta\tilde{\tilde{\omega}}_2' = \delta\omega_2' = \frac{\partial\omega_2'}{\partial p}\delta p + \frac{\partial\omega_2'}{\partial\lambda}\delta\lambda \qquad (14)$$

В соотношениях (14) $\delta p = p' - p$, $\delta\lambda = \lambda' - \lambda$ – полные приращения параметров при переходе от терма E к терму E' и все величины взяты в точке (p_o, λ_o). (В дальнейшем индекс ноль опускаем).

Таким же способом нетрудно показать, что в точке K_o с точностью до экспоненциально малых поправок, энергия $E_o = \frac{E + E'}{2}$ т.е. расщепление термов E и E' симметрично относительно значения E_o.
С учётом соотношений (10), (13) и (14) условия (1) и (8) эквивалентны системе уравнений:

$$\delta\omega_2' \cdot \delta\omega_2 = e^{-2K} ,$$

$$\delta\omega_2' - \delta\omega_2 = -\frac{\pi a}{p}\delta p , \qquad (15)$$

$$a = n' - n ,$$

из которой легко видеть, что $\delta\omega_2$ и $\delta\omega_2'$ – корни квадратного уравнения, которые после замен

$$\delta p = \frac{1}{\sigma} e^{-K} , \qquad a = \frac{\pi a}{2p} \qquad (16)$$

принимают вид:

$$\delta\omega_2' = \frac{\sqrt{a^2+\sigma^2} - a}{\sigma} e^{-K};$$

$$\delta\omega_2 = \frac{\sqrt{a^2+\sigma^2} + a}{\sigma} e^{-K}. \tag{17}$$

С учётом определений (14) найдем отсюда уравнение для σ:

$$\left(\frac{\partial\omega_2'}{\partial p} + a\right)\frac{\partial\omega_2}{\partial\lambda} - \left(\frac{\partial\omega_2}{\partial p} - a\right)\frac{\partial\omega_2'}{\partial\lambda} = \sqrt{a^2+\sigma^2}\left(\frac{\partial\omega_2}{\partial\lambda} - \frac{\partial\omega_2'}{\partial\lambda}\right). \tag{18}$$

Вычисления, которые можно найти в Приложении, для случая псевдопересечения σ -термов ($m = 0$) приводят к результату:[x/]

$$\delta p = \frac{p}{2\pi\sqrt{s^2 - u^2}} e^{-K} f(p, s, \alpha). \tag{19}$$

Здесь $s = \nu' + \nu = n_2' + n_2 + 1$; $u = \frac{\alpha}{4} = \frac{n' - n}{4}$, а $f(p, s, \alpha)$ – функция ≈ 1, учитывающая поправки $\approx \frac{1}{p}$:

$$f(p, s, \alpha) = \left(1 + \frac{s+3\alpha}{6p}\right)\left[1 + \frac{s(23s^2 + 29\alpha^2) - 6\alpha^3}{96p(s^2 - u^2)}\right]^{-1/2}. \tag{20}$$

[x/] *Вывод формулы (19) не зависит от конкретной формы потенциала типа изображенного на рис. 2а. Поэтому она применима не только в задаче двух центров, но и во всех задачах квантовой механики, где изучаются системы из двух слабо связанных частей (например, при столкновении сложных атомов).*

Вычислив K, а также использовав соотношение $\delta E = -\frac{4p}{R^2}\delta p$, получим окончательно:

$$\delta E = \frac{\kappa^2}{\sqrt{s^2-u^2}} \cdot \frac{(4p)^s}{n_2!\, n'_2!} e^{-2p} f(p, s, \alpha) \qquad (21)$$

5. Сравним полученную формулу с результатами численных расчётов/1/ для термов $5g\sigma$ $(n=1, n_1=n_2=m=0)$ и $4f\sigma$ $(n'=4, n_1=0, n'_2=3, m=0)$ в системе $Z=1$, $Z'=5$. Для этого необходимо найти расстояние R_o, при котором происходит псевдопересечение термов $E(R)$ и $E'(R)$, причем одновременно должно быть

$$E_o = E(R_o) = E'(R_o). \qquad (22)$$

Однако легко проверить, что эти равенства противоречивы: первое из них приводит к результату

$$R_0 = 2Z'\left[\left(\frac{Z'-Z}{n'-n}\right)^2 - \left(\frac{Z}{n}\right)^2\right]^{-1}, \qquad (23)$$

что в нашем случае дает $R_o = 12{,}87$. Из второго условия, приравняв выражения (3) и (3'), найдем: $R_o = 13{,}26$. Результаты численного расчё- /1/ x/

$R_o = 12{,}960$; $\delta E = 4{,}246.10^{-3}$; $E_o = -0{,}888254$.

---

x/ Значение R_o определяется в точке, где расщепление термов δE минимально, что, конечно, является делом чистого соглашения: поскольку точка R_o фиктивна, возможны и другие определения. Реальный смысл имеет только величина расщепления δE.

Приняв значение $R_0 = 12,87$, по формуле (21) получим $\delta E = 4,24.10^{-3}$ (в данном случае $\kappa_0 = 4/3$, $E_0 = -0,88889$: $2p = 17,16$; $f(p,s,a) = 1,15$). При $R_0 = 12,96$ формула (21) дает $\delta E = 3,83.10^{-3}$.

6. Явление псевдопересечения - это своеобразный вид квантовомеханического обменного взаимодействия,[x] которое возникает даже в отсутствие спина и связано с приближенным вырождением уровней системы ZeZ' при некоторых значениях параметров в гамильтониане. Однако член, ответственный за это вырождение, из гамильтониана выделен быть не может - и в этом своеобразие явления в отличие от хорошо известного спинового вырождения.

В работе[1] установлено, что в системе ZeZ' при $Z=1$ псевдопересечения возникают только при значениях $Z' \geq 5$. Выведем общее условие, при выполнении которого в системе ZeZ' появляются псевдопересечения, а также формулу для общего числа таких псевдопересечений если они возможны.

Как и в задаче о молекулярном ионе водорода H_2^+, вырождение уровней E и E' возможно лишь в том случае, если они разделены потенциальным барьером, то есть при условии

$$U_{max}(R) > E_0 \quad , \tag{24}$$

где $U_{max}(R) = -\dfrac{(\sqrt{Z}+\sqrt{Z'})^2}{R}$ - высота потенциального барьера, разделяющего обе ямы - eZ и eZ' [1]. Учитывая равенства (22) и (12), получим отсюда ограничение на величину a :

$$a > n(x-1)\sqrt{1+2x} \quad , \qquad x = (Z'/Z)^{1/2} \quad . \tag{25}$$

[x] Это явление имеет точный классический аналог: взаимодействие двух резонаторов, соединенных узким каналом, при определенных соотношениях между их размерами.

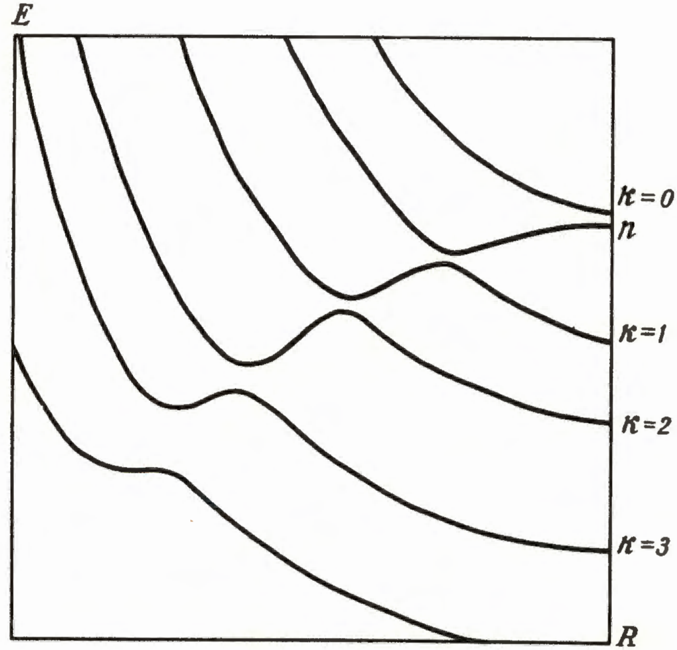

Рис. 3. Схема псевдопересечения eZ –терма (n, n_1, n_2, m) с eZ' – термами (n', n_1', n_2', m) : $n' = n\frac{Z'}{Z} - k$, $n_1 = n_1'$ При $k = 0$ $n' = n\frac{Z'}{Z}$ и при $R \to \infty$ eZ и eZ' – термы совпадают. Число k пробегает ряд значений : $k = 1, 2, .. k_{max}$

Далее, псевдопересечение eZ -терма возможно лишь с теми eZ'-термами, которые при $R \to \infty$ лежат глубже выбранного eZ -терма, то есть при условии $\frac{Z'}{n'} > \frac{Z}{n}$ (n и n' – параболические квантовые числа изолированных eZ – и eZ' – атомов соответственно). Полагая

$$n' = n \frac{Z'}{Z} - k ,$$

$$\alpha = n\left(\frac{Z'}{Z} - 1\right) - k = n(x^2 - 1) - k , \tag{26}$$

из неравенства (25) определим k_{max} , т.е. число eZ' -термов, которые псевдопересекаются с выбранным eZ -термом n (см. рис. 3).

$$k < n(x-1)(x+1-\sqrt{1+2x}) = n\,g(x),$$

$$k_{max} = \mathrm{Ent}\,[\,n\,g(x)\,] , \tag{27}$$

На рис. 4 представлен график функции $n\,g(x)$ при различных значениях n . Из него сразу же следует, что при $Z = 1$ для терма $n = 1$ (основное состояние eZ – атома) первое псевдопересечение ($k = 1$) в системе ZeZ' возникает только при $Z' = 5$ – в согласии с результатом работы/1/. С ростом значений n и Z' число таких псевдо-

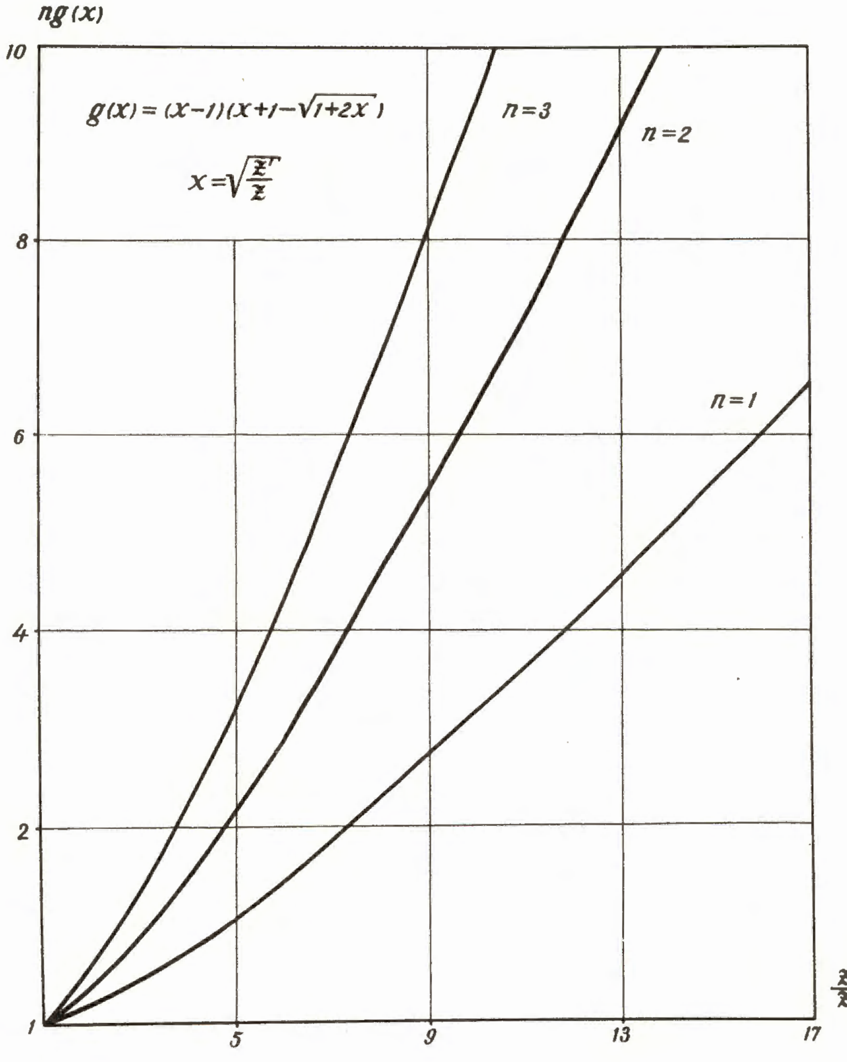

Рис. 4. График функции $ng(x)$, определяющей максимальное число псевдопересечений k_{max} при фиксированных значениях радиального квантового числа $n_1 = n'_1$ и различных значениях n –главного квантового числа eZ –терма. При фиксированных значениях n_1 и m $k_{max} = \mathrm{Ent}[ng(x)]$. Общее число псевдопересечений eZ –терма с eZ' –термами равно

$$r = \frac{n(n+1)}{2} k_{max},$$

$$g(x) = (x-1)(x+1-\sqrt{1+2x}), \quad x = \sqrt{Z'/Z}.$$

пересечений быстро растет[x/], и потому в процессах несимметричной перезарядки их необходимо учитывать.

7. Несколько общих замечаний о системе Z, Z'. Хотя существует разработанный алгоритм для вычисления любого терма этой системы[1,5], до сих пор не удалось выразить аналитически энергию $E = E(n_\xi, n_\eta, m; R)$ как функцию квантовых чисел n_ξ, n_η, m и межцентрового расстояния R (и неясно, существует ли такое выражение вообще). Однако существует четыре характерных значения R, при которых такие выражения имеют место, причем каждый раз при этом возникает кулоновская серия уровней:

при $R \to \infty$
$$E = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z}{n}\right)^2 ; \quad E' = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z'}{n'}\right)^2 ;$$

при $R \gg 1$, в точках псевдопересечения
$$E_0 = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z' - Z}{n' - n}\right)^2 ;$$

при $R \approx 1$ волновые функции системы выражаются через полиномы в точках, где энергия системы подчиняется условию[6] (N, L, n – целые числа)
$$E = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z' + Z}{N}\right)^2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z' - Z}{L}\right)^2 = \begin{cases} -\dfrac{1}{2n^2} \\ -\dfrac{2}{n^2} \end{cases} .$$

[x/] *В действительности оно даже больше, чем это следует из рис. 4: согласно условию (11) взаимодействуют только те термы, для которых $n_1 = n_1'$. Но при $m = 0$ и при заданном n число n_1 пробегает ряд значений $n_1 = 0, 1, 2, \ldots, n - 1$, поэтому общее число псевдопересечений уровня n равно: $r = n\,\mathrm{Ent}[n\,g(x)]$, где $\mathrm{Ent}[x]$ означает целую часть от x. Если же учесть и псевдопересечения термов с $m \neq 0$, то общее их число равно:*

$$r = \frac{n(n+1)}{2} k_{max} .$$

Наконец, при $R = 0$ задача вновь вырождается:

$$E_N = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z' + Z}{N}\right)^2.$$

Отмеченные закономерности слишком просты, чтобы быть случайными и потому должны иметь общую, более глубокую причину.

Данная работа возникла в результате стимулирующих бесед с И.В.Комаровым, и С.Ю.Славяновым, которые получили аналогичные формулы методом, предложенным ими ранее/7/. Считаю приятным долгом выразить свою благодарность им, а также С.П.Аллилуеву, С.С.Герштейну, Ю.Н.Демкову и Я.А.Смородинскому за плодотворные обсуждения.

Приложение

Для σ-термов $m = 0$, $\eta_1 = -1$, $\eta_4 = 1$, $\eta_2 = -q = -(1-\beta)$, $\eta_3 = q' = 1-\beta'$, причём при $p \gg 1$ $\beta \ll 1$ и $\beta' \ll 1$.

$$\beta \approx -\frac{\lambda + b}{2p^2 - b} = \frac{2\nu}{p}\left[1 - \frac{1}{2p}(\nu - a) - \frac{1}{8p^2}(2\nu^2 - 2a^2 + 7\nu a)\right];$$

$$\beta'(\nu', a) = \beta(\nu', -a). \tag{П.1}$$

Все интегралы задачи вычисляются либо через B-интегралы Эйлера, либо через полные эллиптические. Например,

$$\frac{\partial \omega_2}{\partial p} = -p(2p^2 - b)^{-1/2}\int_0^\beta \left[\frac{\mu(2-\mu)}{\beta - \mu}\right]^{1/2} d\mu \approx -\frac{\pi}{2}\, p\beta \left(\frac{2}{2p^2 - b}\right)^{1/2}\left(1 - \frac{3}{16}\beta\right).$$

Окончательно получим:

$$\frac{\partial \omega_2}{\partial p} = -\frac{\pi\nu}{p}\left[1 - \frac{1}{8p}(7\nu - 8a) - \frac{1}{16p^2}(\nu^2 - 14a^2 + 21\nu a)\right],$$

$$\frac{\partial \omega_2}{\partial \lambda} = -\frac{\pi}{4p}\left[1 + \frac{1}{4p}(\nu + 2a) - \frac{1}{8p^2}(\nu^2 - 3a^2 - 2\nu a)\right] \tag{П.2}$$

и аналогично – для $\frac{\partial \omega_2'}{\partial p}$ и $\frac{\partial \omega_2'}{\partial \lambda}$ после замен $\nu \to \nu'$, $a \to -a$.

После подстановки в уравнение (18) получим соотношение

$$s + \frac{23 s^2 + 41 a^2}{192 p} = \frac{p}{2\pi}\left(1 + \frac{s + 3a}{6p}\right)\sqrt{a^2 + \sigma^2}\,, \qquad (\text{П.3})$$

из которого формула (19) легко получается.

Интеграл K после разбиения области интегрирования $(-q, q')$ на две, $(-q, 0)$ и $(0, q')$, просто вычисляется через полные эллиптические B-интегралы /8/:

$$K \approx p\,[\,q^2 B(q) + (q')^2 B(q')\,] + O\left(\frac{1}{p}\right);$$

$$B(q) = \int_0^{\pi/2} \frac{\cos^2\phi}{\sqrt{1 - q^2 \sin^2\phi}} \cdot d\phi \;. \qquad (\text{П.4})$$

При $q \to 1$ справедлива асимптотика /8/

$$q^2 B(q) \approx q^2\left[1 - \frac{1}{2}\left(\ell n \frac{4}{\sqrt{1-q^2}} - \frac{3}{2}\right)(1 - q^2)\right] \approx$$

$$\approx 1 - \nu\, \ell n \frac{4e}{\nu} \;. \qquad (\text{П.5})$$

Используя формулу Стирлинга

$$n! = \sqrt{2\pi}\left(\frac{n + \frac{1}{2}}{e}\right)^{n + \frac{1}{2}},$$

получим соотношение

$$e^{-K} = 2\pi \frac{(4p)^{n}}{n_2!\, n'_2!} e^{-2p} . \qquad (\text{П.6})$$

которое и приводит к окончательной формуле (21).

На этом примере можно проследить обычную особенность квазиклассики: формула (П.6) выведена в предположении $n_2 \gg 1$, $n'_2 \gg 1$, однако остается справедливой вплоть до значений $n_2 = 0$. Преимущества квазиклассического рассмотрения задачи сказываются также в том, что вывод формулы (19) не зависит от конкретной форму потенциала.

Литература

1. *Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ, 52, 1273 (1967); Препринты ОИЯИ Р2-3009, Р2-3012, Дубна, 1966; Р4-3175, Р4-3405, Дубна, 1967.*
2. *С.С.Герштейн. ЖЭТФ, 43, 706 (1962).*
3. *Л.И.Пономарев. Лекции по квазиклассике. Препринт ИТФ-67-53, Киев, 1967.*
4. *С.С.Герштейн, Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ, 48, 632 (1965).*
5. *D.R.Bates, K.Ledsham, A.L.Stewart. Phyl.Trans.Roy.Soc., A246, 215 (1953); D.R.Bates, T.R.Carson. Proc. Roy. Soc., A234, 207 (1954).*
6. *Ю.Н.Демков. Письма ЖЭТФ, 7, в.3, 101 (1968).*
7. *И.В.Комаров. С.Ю.Славянов, ЖЭТФ, 52, 1368 (1967).*
8. *Е.Янке, Ф.Эмде. Таблицы функций. М., 1959.*

Рукопись поступила в издательский отдел
24 апреля 1968 года.