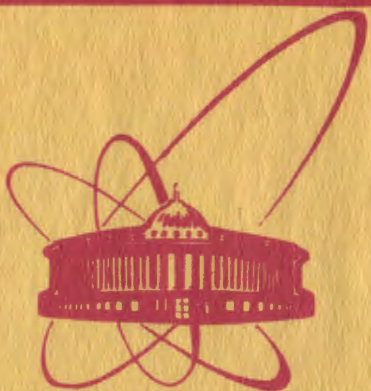


9/VI-80

+



объединенный  
институт  
ядерных  
исследований  
дубна

2423/2-80

P4-80-82

Д.И.Абрамов, С.Ю.Славянов, Л.Н.Сомов

**АСИМПТОТИКА  
НЕАДИАБАТИЧЕСКИХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ,  
СВЯЗЫВАЮЩИХ СОСТОЯНИЯ  
ДИСКРЕТНОГО И НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРОВ  
ЗАДАЧИ ДВУХ ЦЕНТРОВ**

Направлено в "Journal of Physics B: Atom. Molec. Phys."

**1980**

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Для решения квантовомеханических задач с тремя кулоновскими частицами, две из которых тяжелые, а одна легкая, с успехом применяется адиабатическое представление с использованием в качестве базиса решений задачи двух кулоновских центров<sup>/1/</sup>. После усреднения по такому базису трехчастичная задача сводится к решению бесконечной системы интегродифференциальных уравнений для функций  $\chi_{im}(R)$ , описывающих относительное движение тяжелых частиц

$$\left( \frac{d^2}{dR^2} - \frac{J(J+1) - 2m^2}{R^2} + 2M(E - E_{im}(R)) \right) \chi_{im}^J(R) = \quad /1/$$

$$= \sum_{jm'} U_{im,jm'}^J(R) \chi_{jm'}^J(R).$$

Здесь  $M = \frac{M_a M_b}{M_a + M_b} / (M_c^{-1} + (M_a + M_b)^{-1})^{-1}$  - эффективная масса;  $M_a$  и  $M_b$  - массы тяжелых частиц с зарядами  $Z_a$  и  $Z_b$ ;  $M_c$  - масса легкой частицы с отрицательным единичным зарядом;  $R$  - расстояние между тяжелыми частицами;  $J$  - полный орбитальный момент системы;  $E_{im}(R)$  - термы задачи двух кулоновских центров;  $(i,m)$  и  $(j,m')$  - наборы квантовых чисел. Функции  $U_{im,jm'}^J$  являются эффективными потенциалами взаимодействий состояний, отвечающих выбранному базису. Они определяются как матричные элементы оператора кинетической энергии относительного движения тяжелых частиц между состояниями задачи двух кулоновских центров. Явные выражения для них будут даны ниже. Сумма в правой части /1/ подразумевает как суммирование по всем состояниям дискретного спектра задачи двух кулоновских центров, так и интегрирование по состояниям непрерывного спектра.

Для правильного численного решения системы /1/ важно знать асимптотическое поведение потенциалов  $U_{im,jm'}^J(R)$  при  $R \rightarrow \infty$ . Асимптотика  $U_{im,jm'}^J(R)$  для состояний дискретного спектра изучалась в работах<sup>/3-5/</sup>. В настоящей работе получены асимпто-

тические формулы для матричных элементов  $U_{00,jm}(R)$  между основным состоянием дискретного спектра и состояниями непрерывного спектра задачи двух кулоновских центров. Для вычисления асимптотики  $U_{00,jm}(R)$  используется многомерный вариант метода перевала<sup>/6,7/</sup>. Показывается, что при  $R \rightarrow \infty$  потенциалы  $U_{00,jm}(R)$  экспоненциально убывают. Приводится сравнение расчетов по асимптотическим формулам с результатами численных расчетов по алгоритму<sup>/8/</sup>. Многие детали, касающиеся определения и свойств решений задачи двух кулоновских центров и вывода формул для  $U_{00,jm}(R)$ , опущены. Они содержатся в книге<sup>/1/</sup> и статье<sup>/9/</sup>.

## 2. ВЫЧИСЛЕНИЕ МАТРИЧНОГО ЭЛЕМЕНТА $\langle j|V|0 \rangle$

Вычисление асимптотики матричных элементов  $U_{00,jm}$  сводится к вычислению ряда более простых матричных элементов<sup>/9/</sup>. В соответствии с алгоритмом получения асимптотики нам удобно будет разбить матричные элементы на две группы. Представителем первой группы является матричный элемент потенциала взаимодействия легкой частицы с кулоновскими центрами  $\langle j|V|0 \rangle$ . Здесь  $|j\rangle = |k, q, m\rangle$  - состояние непрерывного спектра с импульсом  $k$ , числом нулей угловой функции  $q$  и магнитным числом  $m$ ;  $|0\rangle$  - основное состояние. Для рассматриваемых в настоящей работе аксиально-симметричных операторов отличны от нуля только матричные элементы с  $m=0$ .

В качестве характерного представителя второй группы выбран матричный элемент дипольного момента  $\langle j|z|0 \rangle$ . Остальные матричные элементы вычисляются аналогично указанным.

В дальнейшем ограничимся случаем одинаковых зарядов  $Z_a = Z_b = Z$ . При этом отличны от нуля только матричные элементы, в которых четность  $q$  совпадает с четностью оператора относительного отражения в плоскости симметрии. Переход к случаю разных зарядов не вносит дополнительных принципиальных трудностей.

В вытянутых сфероидальных координатах  $(\xi, \eta, \phi)$  оператор взаимодействия с кулоновскими центрами представляется в виде

$$V(r_a, r_b) = - \frac{4Z\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} \quad /2/$$

Учитывая независимость оператора  $V(r_a, r_b)$  от угловой координаты  $\phi$ , матричный элемент  $\langle j|V|0 \rangle$  можно записать в виде  $/q$  - четно/

$$\langle j | V | 0 \rangle = -N_0 N_j \int_{-1}^1 d\eta \int_1^\infty d\xi \phi_j(\xi, \eta; k, R) \times \\ \times \phi_0(\xi, \eta; R) \frac{4Z\xi}{R(\xi^2 - \eta^2)} \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2). \quad /3/$$

Здесь  $\phi_0(\xi, \eta; R)$  - функция основного состояния задачи двух кулоновских центров, а  $\phi_j(\xi, \eta; k, R)$  - функция состояния непрерывного спектра с импульсом  $k$ . Функции  $\phi_0(\xi, \eta; R)$  и  $\phi_j(\xi, \eta; k, R)$  представляются через кулоновские сфероидальные функции /КСФ/ <sup>1/</sup>

$$\phi_0(\xi, \eta; R) = \bar{\Pi}_{00}(p_0, a, \xi) \bar{\Xi}_{00}(p_0, 0, \eta), \quad /4/$$

$$\phi_j(\xi, \eta; k, R) = \Pi_{0q}(c, a, \xi) \Xi_{0q}(c, 0, \eta), \quad /5/$$

где  $p_0 = R \sqrt{-2E_{000}} / 2$ ;  $E_{000}$  - энергия основного состояния;  $a = 2RZ$ ;  $c = kR / 2$ ;  $q$  - импульс состояния;  $q$  - квантовое число, равное числу нулей функции  $\Xi_{0q}(c, 0, \eta)$ . Нормировочные положительные коэффициенты  $N_0$  и  $N_j$  отвечают переходу от одномерной нормировки кулоновских сфероидальных функций к нормировке по всему пространству:

$$N_0^2 \int_{-1}^1 \int_1^\infty \phi_0^2(\xi, \eta; R) \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta = 1, \quad /6/$$

$$N_j^2 \int_{-1}^1 \int_1^\infty \phi_j(\xi, \eta; k, R) \phi_j(\xi, \eta; k', R) \times \\ \times \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta = \delta(k - k'). \quad /7/$$

Используя известные асимптотические представления для угловых кулоновских сфероидальных функций /УКСФ/ и радиальных кулоновских сфероидальных функций /РКСФ/, можно получить следующие асимптотические формулы для функций  $\phi_0(\xi, \eta; R)$ ,  $\phi_j(\xi, \eta; k, R)$  и нормировочных коэффициентов  $N_0$  и  $N_j$ :

$$\phi_0(\xi, \eta; R) = \frac{R \cdot Z}{\sqrt{2}} (\xi + 1) \left\{ \frac{e^{-RZ(\xi - \eta)/2}}{1 + \eta} \left[ 1 + o\left(\frac{1}{R}\right) \right] + \right. \\ \left. + \frac{e^{-RZ(\xi + \eta)/2}}{1 - \eta} \left[ 1 + o\left(\frac{1}{R}\right) \right] \right\}, \quad /8/$$

$$N_0 = \frac{\sqrt{2Z}}{R} [1 + o(\frac{1}{R})], \quad /9/$$

$$\begin{aligned} \phi_j(\xi, \eta; k, R) = & A_q c^{-q/2} 2^{-3q/2} e^{-c(1-\zeta)} \frac{1}{\zeta^{1/2}(1+\zeta)^{(q+1)/2}} \times \\ & \times H_q(\sqrt{2c(1-\zeta)}) \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} J_0(c\sqrt{\xi^2-1} + \frac{2Z}{k} \ln(\xi + \sqrt{\xi^2-1}) - \\ & - \frac{2q+1}{2} \operatorname{arctg} \sqrt{\xi^2-1}) [1 + o(\frac{1}{c})], \end{aligned} \quad /10/$$

где  $\zeta = \sqrt{1-\eta^2}$ ,  $c = kR/2$ ,

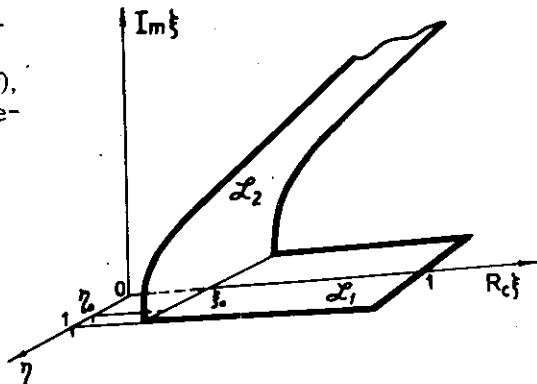
$$A_q = \frac{c}{\pi^{1/4} [\Gamma(q+1)]^{1/2}} 2^{(3q+1)/2} [1 + o(\frac{1}{c})], \quad /11/$$

$$N_j = k\sqrt{\frac{2}{\pi}}. \quad /12/$$

Здесь  $J_0(t)$  - функция Бесселя, а  $H_q(t)$  - полином Эрмита. Формулы /8/ и /10/ не годятся в малых полосках, прилегающих к значениям  $\eta = \pm 1$ , однако эти области не являются существенными при нахождении асимптотики. В дальнейшем будут важны два свойства формулы /10/, которые можно доказать, анализируя способ ее получения. Во-первых, формула /10/ допускает аналитическое продолжение по  $\xi$  в полуплоскости  $\operatorname{Re} \xi \geq \epsilon > 0$ . Во-вторых, особенности такого продолжения связаны только с точкой ветвления  $\xi=1$  в аргументе функции Бесселя. По оси  $\xi \in [1, \infty)$  проведем разрез и фиксируем арифметическое значение корня на верхнем берегу разреза.

Для вычисления интеграла /3/ используем двумерный вариант метода перевала, предложенный Нагелом<sup>6,7/</sup>. Представим функцию Бесселя  $J_0(t)$  в формуле /10/ как мнимую часть функции Ханкеля  $H_0(t)$ . Тогда, используя лемму Жордана, можно деформировать первоначальную полосу интегрирования /см. рис. 1/  $\{1 \leq \xi < \infty, -1 \leq \eta \leq 1\}$  в поверхность  $\mathcal{L}$  в трехмерном пространстве  $(\eta, \operatorname{Re} \xi, \operatorname{Im} \xi)$ , состоящую из прямоугольника  $\mathcal{L}_1 \{0 \leq \xi_0 \leq \operatorname{Re} \xi \leq 1, \operatorname{Im} \xi = 0, -1 \leq \eta \leq 1\}$  и криво-

Рис. 1. Двухмерная поверхность в трехмерном пространстве  $(\eta, \text{Re}\xi, \text{Im}\xi)$ , по которой ведется интегрирование.



линейной полосы  $L_2 \{ \xi_0 \leq \text{Re}\xi < \infty, \text{Im}\xi = \theta(\text{Re}\xi), -1 \leq \eta \leq 1 \}$ . Величину  $\xi_0$  выберем из условия, чтобы отрезок  $\{ \xi = \xi_0, -1 \leq \eta \leq 1 \}$  содержал седловые точки подынтегрального выражения, а поверхность  $\text{Im}\xi = 0(\text{Re}\xi)$  - из условия, чтобы она содержала линии наискорейшего спуска.

Исходный матричный элемент  $\langle j | V | 0 \rangle$ , таким образом, представляется в виде суммы интегралов

$$\langle j | V | 0 \rangle = \int_{L_1} \{ \dots \} d\tau + \int_{L_2} \{ \dots \} d\tau = I_1 + I_2. \quad /13/$$

Покажем, что  $I_1 \equiv 0$ . Из формул /3/ и /8/ - /12/ получаем

$$\begin{aligned}
 I_1 = & -N_0 N_j A_q \frac{Z^2 R^3}{2\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\pi}{kR}} c^{-q/2} 2^{-3q/2} \times \\
 & \times \text{Re} \int d\eta \int d\xi \xi (\xi+1) \left\{ \frac{\exp(-RZ(\xi-\eta)/2)}{1+\eta} \left[ 1 + o\left(\frac{1}{R}\right) \right] + \right. \\
 & \left. + \frac{\exp(-RZ(\xi+\eta)/2)}{1-\eta} \left[ 1 + o\left(\frac{1}{R}\right) \right] \right\} e^{-c(1-\xi)} \times \\
 & \times \frac{H_q(\sqrt{2c(1-\zeta)})}{\zeta^{1/2}(1+\zeta)^{(q+1)/2}} \frac{1}{\sqrt{\xi}} H_0^{(1)}\left( ic\sqrt{1-\xi^2} + \frac{2Z}{k} i \arccos \xi - \right. \\
 & \left. - \frac{2q+1}{4} i \ln \frac{1+\sqrt{1-\xi^2}}{1-\sqrt{1-\xi^2}} \right) \left[ 1 + o\left(\frac{1}{c}\right) \right]. \quad /14/
 \end{aligned}$$

Всюду в /14/ выбрано арифметическое значение корня  $\sqrt{1-\xi^2}$ . Функция  $H_0^{(1)}(it)$  принимает чисто мнимые значения, все остальные выражения в /14/, включая и поправочные члены, вещественны, отсюда интеграл  $I_1$  равен нулю. Отметим, что этот вывод связан не с асимптотическим представлением к.с.ф., а с их аналитическими свойствами.

Для вычисления интеграла  $I_2 = \langle j | V | 0 \rangle$  перейдем от функции Ханкеля и полиномов Эрмита к их асимптотике. Кроме того, воспользуемся свойством симметрии подынтегральной функции по  $\eta$  при замене  $\eta \rightarrow -\eta$ ,

$$I_2 = \langle j | V | 0 \rangle = -\sqrt{2} N_0 N_j A_q \frac{Z^2 R^2}{k} \operatorname{Re} \int_0^1 d\eta \int_{\xi_0}^{\infty} d\xi (-i) e^{-RZ(\xi-\eta)/2} \left[1 + o\left(\frac{1}{R}\right)\right] \times \quad /15/ \\ \times e^{-i(1-\sqrt{1-\eta^2})-c\sqrt{1-\xi^2}} \cdot f(\xi, \eta) \left[1 + o\left(\frac{1}{c}\right)\right],$$

где

$$f(\xi, \eta) = e^{-\frac{2Z}{k} \arccos \xi} \frac{\xi+1}{\eta+1} [(1-\xi^2)(1-\eta^2)]^{-1/4} \times \quad /16/$$

$$\times \frac{(1+\sqrt{1-\xi^2})^{(q+1)/2}}{(1-\sqrt{1-\xi^2})^{q/2}} \times \frac{(1-\sqrt{1-\eta^2})^{q/2}}{(1+\sqrt{1-\eta^2})^{(q+1)/2}}.$$

Точка перевала  $(\xi_0, \eta_0)$  для подынтегрального выражения находится стандартным образом из условия, чтобы градиент показателя экспоненты в /15/ обращался в нуль:

$$\xi_0 = \eta_0 = \left(1 + \frac{k^2}{Z^2}\right)^{-1/2}. \quad /17/$$

Вычислив интеграл в /15/ по методу перевала и подставив выражения для коэффициентов  $N_0$ ,  $N_j$ ,  $A_q$ , получим

$$\langle j | V | 0 \rangle = -\frac{\pi^{1/4}}{[q!]^{1/2}} 2^{q+11/4} \cdot \frac{k^{q/2+5/4} Z^{5/2}}{k^2 + Z^2} \times$$

$$\times R^{q/2+1/4} \exp\left[-\frac{kR}{2} - \frac{2Z}{k} \arctg \frac{k}{Z}\right] \left[1 + o\left(\frac{1}{kR}\right)\right]. \quad /18/$$

Асимптотическая формула /18/ дает результаты тем точнее, чем больше  $R$  и  $kR/2$  и чем меньше индекс  $q$ . Конкретная область ее применимости обсуждается в пункте 5. Если рассматривать поведение модуля матричного элемента  $\langle j | V | 0 \rangle$  в зависимости от  $k$ , то видно, что он имеет максимум.

Любой матричный элемент вида  $\langle j | V g(\xi, \eta) | 0 \rangle$ , где функция  $g(\xi, \eta)$ , четная по  $\eta$ , не обращается в нуль в точке перевала  $(\xi_0, \eta_0)$ , может быть вычислен по формуле

$$\langle j | V g | 0 \rangle = g(\xi_0, \eta_0) \langle j | V | 0 \rangle \left[1 + o\left(\frac{1}{kR}\right)\right]. \quad /19/$$

### 3. ВЫЧИСЛЕНИЕ АСИМПТОТИКИ МАТРИЧНОГО ЭЛЕМЕНТА ДИПОЛЬНОГО МОМЕНТА

Матричный элемент дипольного момента  $\langle j | z | 0 \rangle$  представляется интегралом

$$\begin{aligned} \langle j | z | 0 \rangle &= \\ &= N_0 N_j \int_{-1}^1 \int_1^\infty d\eta d\xi \phi_j(\xi, \eta; k, R) \phi_0(\xi, \eta; R) \frac{R}{2} \xi \eta \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2). \end{aligned} \quad /20/$$

Далее тем же способом деформации исходной полосы интегрирования, что и в предыдущем пункте, и используя асимптотику КСФ, приведем интеграл /20/ при нечетных индексах  $q$  к виду

$$\begin{aligned} \langle j | z | 0 \rangle &= N_0 N_j A_q e^{-c} \operatorname{Re} \int_0^1 d\eta \int_{\xi_0}^\infty d\xi \times \\ &\times \exp\left[-ZR(\xi - \eta)/2 + c(\sqrt{1 - \eta^2} - \sqrt{1 - \xi^2})\right] h(\xi, \eta) \times \\ &\times \left[1 + o\left(\frac{1}{R}\right)\right] \left[1 + o\left(\frac{1}{k}\right)\right], \end{aligned} \quad /21/$$



где

$$h(\xi, \eta) = \eta (\xi^2 - \eta^2) \frac{\xi + 1}{\eta + 1} [(1 - \xi^2)(1 - \eta^2)]^{-1/4} \times \\ \times \frac{(1 + \sqrt{1 - \xi^2})^{(q+1)/2}}{(1 - \sqrt{1 - \xi^2})^{q/2}} \frac{(1 - \sqrt{1 - \eta^2})^{q/2}}{(1 + \sqrt{1 - \eta^2})^{(q+1)/2}} e^{-\frac{2Z}{k} \operatorname{arctg} \frac{k}{Z}} \quad /22/$$

При четных  $q$  матричный элемент  $\langle j | z | 0 \rangle$  равен нулю. Вычисление интеграла /20/ по методу перевала затруднено тем, что функция  $f(\xi, \eta)$  обращается в нуль в точке перевала  $(\xi_0, \eta_0)$ . Соответственно обращается в нуль и главное слагаемое в формуле для метода перевала. Интеграл в /20/ можно представить в виде

$$T = \operatorname{Re} \int_0^1 d\eta \int_{\xi_0}^{\infty} e^{cs(\xi, \eta)} \cdot h(\xi, \eta), \quad /23/$$

где

$$s(\xi, \eta) = [(\sqrt{1 - \eta^2} - \sqrt{1 - \xi^2}) - \frac{Z}{k} (\xi - \eta)]. \quad /24/$$

Тогда применение формулы метода перевала во втором порядке<sup>/6/</sup>, которая в нашем случае имеет вид

$$T = \operatorname{Re} \frac{2\pi}{c} \frac{1}{\sqrt{s_{\xi\xi} s_{\eta\eta}}} e^{cs(\xi_0, \eta_0)} \times \\ \times \left[ -\frac{1}{2} \left( \frac{h_{\xi\xi}}{s_{\xi\xi}} + \frac{h_{\eta\eta}}{s_{\eta\eta}} \right) + \frac{1}{2} \left( \frac{h_{\xi} s_{\xi\xi\xi}}{(s_{\xi\xi})^2} + \frac{h_{\eta} s_{\eta\eta\eta}}{(s_{\eta\eta})^2} \right) \right] \Big|_{\substack{\xi=\xi_0 \\ \eta=\eta_0}} \left[ 1 + o\left(\frac{1}{c}\right) \right], \quad /25/$$

приводит к результату

$$\langle j | z | 0 \rangle = - \frac{\pi^{1/4}}{[q!]^2} 2^{q+1/4} \frac{k^{q/2+13/4} Z^{5/2}}{(k^2 + Z^2)^3} R^{q/2+5/4} \times$$

$$\times \exp \left\{ -\frac{kR}{2} - \frac{2Z}{k} \arctg \frac{k}{Z} \right\} \left[ 1 + o\left(\frac{1}{kR}\right) \right]. \quad /26/$$

Тем же способом могут быть вычислены другие матричные элементы, не содержащие  $(\xi^2 - \eta^2)$  в знаменателе. Полная сводка их дана в следующем пункте.

#### 4. ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ $R \rightarrow \infty$

Асимптотика всех матричных элементов, входящих в эффективный потенциал  $U_{im, jm'}$ , вычисляется методом, описанным в п.п. 2, 3. В области больших  $R$  основной вклад в асимптотику  $U_{im, jm'}$  дают матричные элементы  $Q_{jo}^{(\pm)}$ ,  $H_{jo}^{(\pm)}$ , определенные в работе /9/. При  $R \rightarrow \infty$  они сводятся к выражениям

$$Q_{jo}^{(+)} = -\frac{k^2 + Z^2}{4R} \langle j | r^2 | o \rangle [1 + o(1/R)], \quad /27/$$

$$Q_{jo}^{(-)} = \frac{k^2 + Z^2}{4} \langle j | z | o \rangle [1 + o(1/R)], \quad /28/$$

$$H_{jo}^{(+)} = -\frac{k^2 + Z^2}{R} \int \Lambda_{jo}^{(+)} r^2 dr [1 + o(1/R)], \quad /29/$$

$$H_{jo}^{(-)} = \frac{k^2 + Z^2}{4} \int \Lambda_{jo}^{(-)} z dr [1 + o(1/R)],$$

$$H_{jo}^{(*)} = -\frac{1}{2} V_{jo}, \quad /30/$$

где

$$\Lambda_{jo}^{(\pm)} = N_0 N_j \left[ \phi_j \frac{\partial}{\partial R} \phi_0 \pm \phi_0 \frac{\partial}{\partial R} \phi_j \right]. \quad /31/$$

Вычисление, аналогичное проведенному в п.п. 2, 3, показывает, что в интеграл, содержащий произведение  $\Lambda_{jo}^{(\pm)}$  на некоторую функцию координат  $f$  при  $R \rightarrow \infty$ , основной вклад дает член

$\pm \int f N_0 N_j \phi_0 \frac{\partial}{\partial R} \phi_j dr$ , который простым образом связан с матричным элементом  $\langle j | f | 0 \rangle$  :

$$\int \Lambda_{j0}^{(\pm)} f dr = \mp \frac{k}{2} \langle j | f | 0 \rangle [1 + o(\frac{1}{R})]. \quad /32/$$

Расчет асимптотики для  $\langle j | r^2 | 0 \rangle$ , входящего в  $Q_{j0}^{(+)}$  и  $H_{j0}^{(+)}$ , проводится так же, как и для  $\langle j | z | 0 \rangle$ , и приводит к выражению

$$\langle j | r^2 | 0 \rangle = R \langle j | z | 0 \rangle [1 + o(\frac{1}{R})]. \quad /33/$$

Комбинируя формулы /27/ - /32/ с учетом асимптотического разложения для  $\langle j | z | 0 \rangle$ , получаем для  $Q_{j0}^{(\pm)}$ ,  $H_{j0}^{(\pm)}$  окончательный результат:

$$Q_{j0}^{(+)} = I [1 + o(R^{-1})], \quad /34/$$

$$Q_{j0}^{(-)} = -I [1 + o(R^{-1})], \quad /35/$$

$$H_{j0}^{(+)} = 2kI [1 + o(R^{-1})], \quad /36/$$

$$H_{j0}^{(-)} = -\frac{k}{2} I [1 + o(R^{-1})], \quad /37/$$

$$H_{j0}^{(*)} = 2k^2 R I [1 + o(R^{-1})], \quad /38/$$

где

$$I = \frac{\pi^{1/4}}{[q!]^{1/2}} 2^{q+3/4} \frac{k^{q/2+13/4} Z^{5/2}}{(k^2 + Z^2)^2} R^{q/2+5/4} e^{-\frac{kR}{Z}} - \frac{2Z}{k} \arctg \frac{k}{Z}. \quad /39/$$

## 5. СРАВНЕНИЕ С РЕЗУЛЬТАТАМИ ЧИСЛЕННОГО РАСЧЕТА

В таблице представлены матричные элементы  $D = \langle j | z | 0 \rangle$ ,  $Q$ ,  $H$  между основным состоянием и состоянием  $|k, 1, 0\rangle$  непрерывного спектра для системы с зарядом  $Z = Z_a = Z_b = 1$ , рассчитан-

ные на ЭВМ по алгоритму работы /8/ и по асимптотическим формулам /26/, /28/, /30/. Видно, что результаты согласуются в области значений параметра  $c = 12 \div 15$ .

Таблица

Сравнение расчета матричных элементов  $D$ ,  $Q^{(-)}$  и  $H^{(-)}$ , вычисленных по алгоритму работы /8/, с расчетами, выполненными по асимптотическим формулам /26/, /28/, /30/

k	R	D		$Q^{(-)}$		$H^{(-)}$	
		Числ.расч.	Ас. ф-ла	Числ.расч.	Ас. ф-ла	Числ.расч.	Ас. ф-ла
3	6	-0,0009	-0,0014	-0,0223	-0,0034	-0,0041	-0,0051
	7	-0,0003	-0,0004	-0,0007	-0,0009	-0,0012	-0,0014
	8	-0,0001	-0,0001	-0,0002	-0,0003	-0,0003	-0,0004
	9	-0,00003	-0,00003	-0,0001	-0,0001	-0,0001	-0,0001
4	5	-0,0002	-0,0003	-0,0007	-0,0011	-0,0017	-0,0022
	6	-0,00004	-0,00005	-0,0002	-0,0002	-0,0003	-0,0004
	7	-0,00001	-0,00001	-0,00006	-0,00003	-0,00051	-0,00007
5	4	-0,0001	-0,0001	-0,0006	-0,0008	-0,0016	-0,0021
	5	-0,000016	-0,000015	-0,0001	-0,0001	-0,0002	-0,0002
	6	-0,000007	-0,000001	-0,000049	-0,000011	-0,00009	-0,00003
6	4	-0,000013	-0,000013	-0,00012	-0,00012	-0,0003	-0,0003
	5	-0,000006	-0,000001	-0,000052	-0,000009	-0,000031	-0,000026
	5.4	-0,000005	-0,000001	-0,000051	-0,000003	-0,000011	-0,000009
7	3	-0,000022	-0,000027	-0,0003	-0,0003	-0,0010	-0,0012
	4	-0,000004	-0,000001	-0,000056	-0,000017	-0,000026	-0,000058

При значениях  $c \geq 15$ , как видно из рис. 2, наблюдается различие между асимптотическими значениями матричных элементов и значениями, вычисленными согласно алгоритму работы /8/. Это связано с тем, что абсолютная точность вычислений матричных элементов  $\sim 10^{-5}$ .

Авторы глубоко благодарны Л.И.Пономареву за постановку задачи и полезные консультации и обсуждения. Один из авторов /С.Ю.Славянов/ благодарен Бенгту Нагелу за то, что он ознакомил его с многомерным методом перевала.

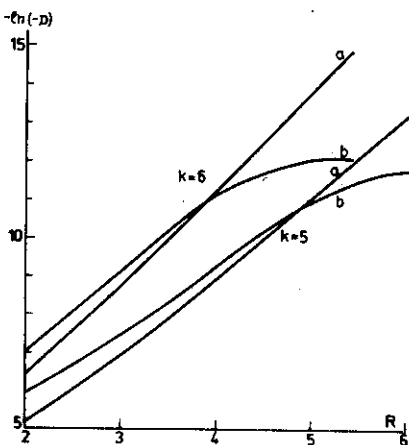


Рис. 2. Зависимость  $D(R)$  в логарифмическом масштабе для  $k=5$  и  $6$ . Кривая  $a$  вычислена по асимптотической формуле /26/, кривая  $b$  - согласно алгоритму работы /8/.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., Наука, 1976.
2. Виноцкий С.И., Пономарев Л.И. ЯФ, 1974, 20, с. 576-588.
3. Ramaker D.E., Peek J.M. J.Phys., 1972, B5, p. 2175-2182.
4. Bates D.R., McCarroll R. Adv.Phys., 1962, 11, p. 41, p. 39-81.
5. Faifman M.P., Ponomarev L.I., Vinitsky S.I. J.Phys., 1976, B9, p. 2255-2268.
6. Nagel B. Ark.f.Fysik, 1964, 27, p. 181-192.
7. Федорюк М.В. Метод перевала. М., Наука, 1977.
8. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Somov L.N. J.Phys., 1977, B10, p. 1335.
9. Ponomarev L.I., Puzynina T.P., Truskova N.F. J.Phys., 1978, B11, p. 3861-3873.

Рукопись поступила в издательский отдел  
5 февраля 1980 года.