

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



B-486

9/II-76

P4 - 9312

3.91/2-76

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, М.П.Файфман

АСИМПТОТИКА ЭФФЕКТИВНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ
ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

1975

P4 - 9312

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, М.П.Файфман

АСИМПТОТИКА ЭФФЕКТИВНЫХ ПОТЕНЦИАЛОВ
ЗАДАЧИ ТРЕХ ТЕЛ
В АДИАБАТИЧЕСКОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ

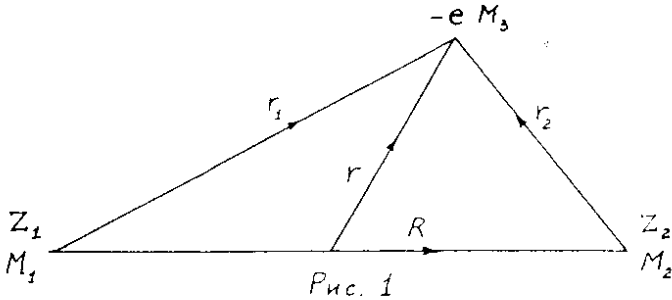
Направлено в Journal of Physics B

I. ВВЕДЕНИЕ

Последние адиабатические расчеты ^{/1,2/} простейших мезо-атомных систем (два ядра с зарядами Z_1 и Z_2 и M^- -мезон) выявили сильную зависимость сечений реакций и других физических характеристик от формы эффективных потенциалов системы трех тел

$U_{ij}(R)$, особенно в резонансных ситуациях.

Адиабатический базис $|i\rangle$ определяется как полный набор решений $\Phi_i(\vec{r}; R)$ и соответствующих им термов $E_i(R)$ задачи двух центров. В единицах $\hbar = m_a = e = 1$, $m_a^{-1} = M_3^{-1} + (M_1 + M_2)^{-1}$, соответствующие уравнения имеют вид ^{/3/}



$$H_0 \Phi_i(\vec{r}; R) = E_i(R) \Phi_i(\vec{r}; R),$$

$$H_0 = -\frac{1}{2} \Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2},$$

$$\Phi_i(\vec{r}; R) = \varphi_{i|ml}(\vec{r}; R) e^{im\varphi} (2\pi)^{-\frac{1}{2}} \text{Sgn}, \quad (I)$$

$$\text{Sgn} = \begin{cases} (-)^m & , m > 0, \\ 1 & , m < 0. \end{cases}$$

В этом базисе эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$ выражаются через матричные элементы $F_{ij}(R) / 4 / (\varphi_i(\vec{r}; R) \equiv \varphi_{i|ml}(\vec{r}; R))$,

$$F_{ij}(R) = \int d\vec{r} \varphi_i(\vec{r}; R) \hat{F} \varphi_j(\vec{r}; R), \quad (2)$$

от операторов кинетической энергии $\hat{F} = (2M)^{-1} \Delta_{\vec{R}}$, $M^{-1} = M_1^{-1} + M_2^{-1}$ и импульса $\hat{F} = -i \nabla_{\vec{R}}$ относительного движения ядер.

Известны численные решения задачи двух центров (I) и значения матричных элементов $F_{ij}(R)$, полученные при решении задачи (I) в эллипсоидальных координатах $\xi = (r_1 + r_2)R^{-1}$, $\eta = (r_1 - r_2)R^{-1}$ в области $0 < R < 60$ /3/.

Для уточнения формы эффективных потенциалов системы трех тел $U_{ij}(R)$ необходимо найти асимптотические разложения матричных элементов $F_{ij}(R)$ при $R \gg 1$ и $R \ll 1$.

В настоящей работе вычислены первые три коэффициента $F_{ij}^{(k)}$ в асимптотическом разложении $F_{ij}(R)$ по степеням R^{-1} при $R \gg 1$,

$$F_{ij}(R) = \sum_{k=0}^2 F_{ij}^{(k)} R^{-k}, \quad (3)$$

и ведущие члены $f_{ij}^{(k)}$ в разложении $F_{ij}(R)$ по степеням R при $R \ll 1$,

$$F_{ij}(R) = \sum_{k=-2}^0 f_{ij}^{(k)} R^k. \quad (4)$$

Для вычисления $F_{ij}^{(k)}$ были использованы асимптотические разложения решений (I) по обратным степеням R , построенные по теории возмущений в параболических и сферических координатах /5-9/. Те же результаты были получены с помощью асимптотических разложений решений задачи двух центров (I) по обратным степеням $\rho_i = R(-1/2 E_i(R))^{1/2}$ в эллипсоидальных координатах /10/. Кроме того, последний метод позволял вычислить экспоненциально малое расщепление $F_{ij}(R)$ для состояний $i = 1s\sigma_j$, $j = 2p\sigma_u$ в случае $Z_1 = Z_2 = 1$. Коэффициенты разло-

жения $f_{ij}^{(k)}$ были вычислены с помощью кулоновских волновых функций водородоподобного атома в сферических координатах с зарядом $Z = Z_1 + Z_2$, помещенным в центр зарядов ядер Z_1 и Z_2 (рис.1).

Коэффициенты $F_{ij}^{(k)}$ и $f_{ij}^{(k)}$ разложений матричных элементов $F_{ij}(R)$ в области больших и малых R представлены в виде аналитических выражений от наборов квантовых чисел: параболических $i, j = [n_1, n_2, m]$ и сферических $i, j = (N, \ell, m)$ соответственно.

Для случаев $n = n_1 + n_2 + m + 1 = 1, 2, 3$ численные значения коэффициентов $F_{ij}^{(k)}$ и $f_{ij}^{(k)}$ приведены в таблицах 2.1 - 2.7. Для компонент дипольного момента $\hat{F} = \left\{ (R/2) \xi \eta, - (R/2) [2^{-1}(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \right\}$ результаты наших вычислений совпадают с результатами Пика /11/.

2. Матричные элементы в адиабатическом представлении

Матричные элементы $F_{ij}(R) \equiv F(R) = H(R), Q(R), B(R)$, определенные в работе /4/,

$$H(R) = H^{(+)}(R) + \alpha H^{(-)}(R) + \alpha^2 H^{(*)}(R), \quad (5)$$

$$Q(R) = Q^{(+)}(R) + \alpha Q^{(-)}(R),$$

$$B(R) = B^{(+)}(R) + \alpha B^{(-)}(R),$$

$$B^{(+)}(R) = l_+(R) \lambda_- \delta_{m'm-1} + l_-(R) \lambda_+ \delta_{m'm+1},$$

$$B^{(-)}(R) = -\frac{R}{2} [p_+(R) \lambda_- \delta_{m'm-1} + p_-(R) \lambda_+ \delta_{m'm+1}],$$

$$\lambda_{\mp} = [(K \mp m + 1)(K \pm m)]^{1/2}, \quad \alpha = \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1},$$

связаны с матричными элементами

$$f \equiv f(R) = h^{(+)}(R), h^{(-)}(R), h^{(*)}(R), q^{(+)}(R), q^{(-)}(R),$$

$$l(R) \equiv l_{\pm}(R), p(R) \equiv p_{\pm}(R),$$

$$l(R) \equiv R^2 l^{(+)}(R), p(R) \equiv R p^{(-)}(R),$$

используемыми в настоящей работе, соотношениями

$$H^{(+)}(R) = h^{(+)}(R) + \gamma h^{(-)}(R) + \gamma^2 h^{(*)}(R),$$

$$H^{(-)}(R) = h^{(-)}(R) + 2\gamma h^{(*)}(R), H^{(*)}(R) = h^{(*)}(R),$$

$$Q^{(+)}(R) = q^{(+)}(R) + \gamma q^{(-)}(R), Q^{(-)}(R) = q^{(-)}(R),$$

$$l^{(+)}(R) = R^{-2} [\tilde{l}^{(+)}(R) + \gamma (-\frac{R}{2} \tilde{p}^{(-)}(R))], p^{(-)}(R) = R^{-1} \tilde{p}^{(-)}(R),$$

$$h^{(+)} = \bar{h}^{(+)} + R^{-2} \tilde{h}^{(+)}, \bar{h}^{(+)} = \int d\tau \hat{c} \varphi_i \hat{c} \varphi_j, \quad (6)$$

$$\tilde{h}^{(+)} = \int d\tau [\hat{a} \varphi_i \hat{a} \varphi_j + m^2 (\hat{b} \varphi_i \hat{b} \varphi_j + \varphi_i \varphi_j)],$$

$$h^{(-)} = \bar{h}^{(-)} + R^{-1} \tilde{h}^{(-)}, \bar{h}^{(-)} = \frac{1}{2} \int d\tau (\hat{c} \varphi_i \tilde{c} \varphi_j + \tilde{c} \varphi_i \hat{c} \varphi_j),$$

$$\tilde{h}^{(-)} = -\frac{1}{2} \int d\tau [\hat{a} \varphi_i \tilde{a} \varphi_j + \tilde{a} \varphi_i \hat{a} \varphi_j + m^2 (\tilde{b} \varphi_i \tilde{b} \varphi_j + \tilde{b} \varphi_i \tilde{b} \varphi_j)],$$

$$h^{(*)} = \frac{1}{4} \int d\tau (\tilde{c} \varphi_i \tilde{c} \varphi_j + \tilde{a} \varphi_i \tilde{a} \varphi_j + m^2 \tilde{b} \varphi_i \tilde{b} \varphi_j),$$

$$q^{(+)} = - \int d\tau \varphi_i \hat{c} \varphi_j, \quad q^{(-)} = -\frac{1}{2} \int d\tau \varphi_i \tilde{c} \varphi_j,$$

$$\tilde{l}^{(+)} = \int d\tau \varphi_i (\mp \hat{a} + m \hat{b}) \varphi_j \delta_{m' m \mp 1},$$

$$\tilde{p}^{(-)} = \int d\tau \varphi_i (\mp \tilde{a} + m \tilde{b}) \varphi_j \delta_{m' m \mp 1}.$$

В сферических (r, θ) , эллипсоидальных (ξ, η) и параболических (μ, ν) координатах элементы объема, волновые функции и операторы в выражениях (6) имеют вид:

$$d\tau = r \sin \theta dr d\theta = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta = \frac{1}{4} (\mu + \nu) d\mu d\nu,$$

$$\Psi_i = \Psi_{\{kq\}}(r, \theta) = \Psi_{\{kq\}}(\xi, \eta) = \Psi_{[n_1 n_2 m]}(\mu, \nu),$$

$$\hat{a} = \frac{\partial}{\partial \theta} = \frac{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}{\xi^2 - \eta^2} \left(\eta \frac{\partial}{\partial \xi} - \xi \frac{\partial}{\partial \eta} \right) = -(\mu\nu)^{1/2} \left(\frac{\partial}{\partial \mu} - \frac{\partial}{\partial \nu} \right),$$

$$\hat{b} = ctg \theta = \xi \eta [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{-1/2} = (\mu - \nu)(4\mu\nu)^{-1/2},$$

$$\hat{c} = \frac{\partial}{\partial R} - \frac{1}{R(\xi^2 - \eta^2)} \left[\xi(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \eta(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right],$$

$$\hat{c} = \frac{\partial}{\partial R} \text{ - в координатах } (r, \theta) \text{ и } (\mu, \nu),$$

$$\tilde{a} = \sin \theta \frac{\partial}{\partial r} + \frac{\cos \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} = \quad (7)$$

$$= \frac{2}{R} \frac{[(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}}{\xi^2 - \eta^2} \left(\xi \frac{\partial}{\partial \xi} - \eta \frac{\partial}{\partial \eta} \right) = \frac{2(\mu\nu)^{1/2}}{\mu + \nu} \left(\frac{\partial}{\partial \mu} + \frac{\partial}{\partial \nu} \right),$$

$$\tilde{b} = (r \sin \theta)^{-1} = \frac{2}{R} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{-1/2} = (\mu\nu)^{-1/2},$$

$$\tilde{c} = \cos \theta \frac{\partial}{\partial r} - \frac{\sin \theta}{r} \frac{\partial}{\partial \theta} =$$

$$= \frac{2}{R(\xi^2 - \eta^2)} \left[\eta(\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \xi(1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right] =$$

$$= \frac{2}{\mu + \nu} \left(\mu \frac{\partial}{\partial \mu} - \nu \frac{\partial}{\partial \nu} \right).$$

Соответствие между наборами квантовых чисел $i = (N \ell m)$, $\{k, q, m\}$, $[n_1, n_2, m]$ видно из таблицы I. Значение $\gamma = 0$ соответствует набору начала отсчета вектора \vec{r} (рис. I) в геометрическом центре ядер (г.ц.я.). В этом случае для вычисления $F_{ij}(R)$ при $R \gg 1$ были использованы двух-центровые волновые функции $\Psi_i(\vec{r}; R)$ /10/ в сферической системе координат $\vec{r} = \{\xi, \eta\}$, начало которой совпадает с г.ц.я. /4/. Значение $\gamma = +1$ соответствует набору начала отсчета вектора \vec{r} (рис. I) в центре Z_1 , а $\gamma = -1$ в центре Z_2 /4/, при этом для вычисления $F_{ij}(R)$ при $R \gg 1$ были использованы одноцентровые волновые функции $\Psi_i(\vec{r}_{i(2)}; R)$ в сферической $\vec{r}_{i(2)} = \{r, \theta\}$ /5-7/ и параболической $\vec{r}_{i(2)} = \{\mu, \nu\}$ /8/ системах координат с началом в центрах $Z_1, (Z_2)$ соответственно. Для $Z_1 = Z_2$ адиабатические матричные элементы $F_{ij}(R)$ при $R \gg 1$ были вычислены в системе координат с началом в центре Z_2 согласно определению, приведенному в работе /1/. Значение $\gamma = -(z_2 - z_1)/(z_2 + z_1)$ соответствует выбору начала отсчета вектора \vec{r} в центре зарядов ядер (ц.з.я.) /4/. В этом случае для вычисления матричных элементов $F_{ij}(R)$ при $R \ll 1$ были использованы волновые функции $\Psi_i^{(0)}(\vec{r})$ водородоподобного атома с зарядом $Z = Z_1 + Z_2$ в сферической системе координат с началом в ц.з.я. /12/.

3. Матричные элементы в представлении водородоподобного атома

Кулоновские волновые функции для водородоподобного атома с зарядом Z и масштабным множителем Z_i имеют вид /12/

$$\Psi_i^{(0)}(\vec{r}) = P_{\ell m}(\theta) R_{n\ell}(r),$$

$$P_{\ell m}(\theta) = \left[\frac{(2\ell+1)(\ell-m)!}{2(\ell+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_{\ell}^m(\cos\theta),$$

$$R_{n\ell}(r) = - \left[\frac{(N-\ell-1)!}{[(N+\ell)!]^3 \cdot 2N} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2Z_i Z}{N} \right)^{\frac{3}{2}} \times \\ \times \rho^{\ell} e^{-\rho/2} L_{N+\ell}^{2\ell+1}(\rho), \quad \rho = \frac{2Z_i Z}{N} r. \quad (7)$$

Рекуррентные соотношения /12-14/ между функциями $\Psi_i^{(0)}(\vec{r})$ и $\Psi_j^{(0)}(\vec{r})$ с разными масштабными множителями Z_i и Z_j соответственно позволяют представить матричные элементы (6)

следующим образом:

$$R^2 h_{ij}^{(+)}(R) = \tilde{h}_{ij}^{(+)} = \ell(\ell+1) R_{n\ell, n'\ell'}^{(+)} \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}, \\ R h_{ij}^{(-)}(R) = \tilde{h}_{ij}^{(-)} = -q_{ij}^{(-)} \Delta_{\ell, \ell'} \delta_{\ell\ell'+1} \delta_{mm'}, \quad (8)$$

$$\Delta_{\ell, \ell\pm 1} = \ell(\ell+1) - (\ell\pm 1)(\ell\pm 1+1),$$

$$h_{ij}^{(*)} = \frac{1}{4} [(E_N + E_{N'}) R_{n\ell, n'\ell'}^{(*)} + (Z_i + Z_j) Z R_{n\ell, n'\ell'}^{(0)}] \delta_{\ell\ell'} \delta_{mm'}, \\ q_{ij}^{(-)} = \frac{1}{2} [(E_N - E_{N'}) (r^1 \cos\theta)_{ij} + (Z_i - Z_j) Z (r^0 \cos\theta)_{ij}] \delta_{\ell\ell\pm 1} \delta_{mm'}, \\ \tilde{\ell}_{ij}^{(+)} = [(\ell \mp m + 1)(\ell \pm m)]^{\frac{1}{2}} R_{n\ell, n'\ell'}^{(+)} \delta_{\ell\ell'} \delta_{m'm \mp 1},$$

$$\tilde{p}_{ij}^{(-)} = \mp [(E_N - E_{N'}) (r^1 \sin\theta)_{ij} + (Z_i - Z_j) Z (r^0 \sin\theta)_{ij}] \delta_{\ell\ell\pm 1} \delta_{m'm \mp 1},$$

$$E_N = -\frac{1}{2} \frac{(Z_i Z)^2}{N^2}, \quad E_{N'} = -\frac{1}{2} \frac{(Z_j Z)^2}{(N')^2},$$

$$(r^s \cos\theta)_{ij} = R_{n\ell, n'\ell'}^{(s+1)} \cdot \Omega_{\ell, \ell'}^{m, m},$$

$$\Omega_{\ell, \ell'}^{m, m'} = \left[\frac{(\ell - m + 1)(\ell + m + 1)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)} \right]^{\frac{1}{2}} \delta_{\ell, \ell'} + \left[\frac{(\ell - m)(\ell + m)}{(2\ell - 1)(2\ell + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \delta_{\ell, \ell' - 1},$$

$$(r^s \sin \theta)_y = - \left[R_{N\ell, N'\ell'}^{(s+1)} \Omega_{\ell, \ell'}^{m, m'} \delta_{\ell, \ell'} + R_{N\ell, N'\ell'}^{(s+1)} \Omega_{\ell, \ell'}^{m, m'} \delta_{\ell, \ell' - 1} \right],$$

$$\Omega_{\ell, \ell'}^{m, m'} = \mp \left[\frac{(\ell \mp m + 1)(\ell \mp m + 2)}{(2\ell + 1)(2\ell + 3)} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$\Omega_{\ell, \ell'}^{m, m'} = \pm \left[\frac{(\ell \pm m - 1)(\ell \pm m)}{(2\ell - 1)(2\ell + 1)} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (9)$$

$$R_{N\ell, N'\ell'}^{(s)} = N_{N\ell}(Z, Z) N_{N'\ell'}(Z_j, Z) I_{N\ell, N'\ell'}^{(s)}(Z_i, Z_j, Z),$$

$$N_{N\ell}(Z, Z) = \left[\frac{(N - \ell - 1)!}{(N + \ell)! \cdot 2N} \right]^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2Z_i Z}{N} \right)^{\ell + \frac{3}{2}},$$

$$I_{N\ell, N'\ell'}^{(s)}(Z_i, Z_j, Z) = u^{\bar{s}+1} \sum_{\alpha=0}^{n_r} \sum_{\beta=0}^{n_r'} (-)^{\alpha+\beta} \frac{v^{\alpha+\beta}}{\alpha! \beta!} J_{\lambda, \mu+2; \lambda', \mu'+\beta}^{(\bar{s}+\alpha+\beta)}$$

$$\bar{s} = s + (\mu + \mu')/2, \quad u = \frac{Z}{\alpha + \beta}, \quad \alpha = \frac{2Z_i Z}{N},$$

$$n_r = N - \ell - 1, \quad v = \frac{\alpha - \beta}{\alpha + \beta}, \quad \beta = \frac{2Z_j Z}{N'},$$

$$n_r' = N' - \ell' - 1,$$

$$\lambda = N + \ell, \quad \mu = 2\ell + 1, \quad \lambda' = N' + \ell', \quad \mu' = 2\ell' + 1,$$

$$J_{\lambda, \mu, \lambda', \mu'}^{(\bar{s})} = (-)^{\lambda+\lambda'} (t - \mu)! (t - \mu')! \sum_{k=0}^{\bar{\lambda}} (k + t)! \cdot$$

$$\cdot [k! (\lambda - \mu - k)! (t - \lambda + k)! (\lambda' - \mu' - k)! (t - \lambda' + k)!]^{-1},$$

$$\bar{\lambda} = \min[(\lambda - \mu), (\lambda' - \mu')].$$

Для вычисления ведущих коэффициентов $f_{ij}^{(K)}$ разложения (4) матричных элементов $F_{ij}(R)$ (6) при $R \ll 1$ в определениях (8) следует положить $Z_i = Z_j = 1$, а $Z = Z_1 + Z_2$, где Z - заряд объединенного атома. Численные значения для коэффициентов разложения $f_{ij}^{(K)}$ при $R \ll 1$ для случая $Z_1 = Z_2 = 1$ приведены в таблицах 2.1 - 2.7.

4. Матричные элементы в представлении одноцентровых функций

Волновые функции задачи двух центров $\Psi_i(\vec{r}; R)$ при $R \gg 1$ переходят в одноцентровые функции $\Psi_i(\vec{r}_2; R)$ атома Z_2 (или $\Psi_i(\vec{r}_1; R)$ атома Z_1) в поле заряда Z_1 (или Z_2), удаленного на расстояние R . Для определенности выберем функции $\Psi_i(\vec{r}_2; R)$, которые являются решениями уравнения (I) с потенциалом

$$- \frac{Z_2}{r_2} - \sum_{\ell=0}^{\infty} \frac{Z_1 r_2^\ell P_\ell(\cos \theta_2)}{R^{\ell+1}}.$$

Для случая $Z_1 = Z_2 = 1$ функции $\Psi_i(\vec{r}_2; R)$ в параболических координатах $\vec{r}_2 = \{\mu, \nu\}$ были найдены по теории возмущений [8]:

$$\Psi_i(\vec{r}_2; R) = \Psi_{n_1, n_2, m}(x, y; R) = \sum_{k=0}^{\infty} \Psi_{n_1, n_2, m}^{(k)}(x, y) R^{-k}, \quad (10)$$

$$x = \mu Z_2 / n, \quad y = \nu Z_2 / n, \quad n = n_1 + n_2 + m + 1,$$

$$E_i(R) = E_{n_1, n_2, m}(R) = \sum_{k=0}^{\infty} E_{n_1, n_2, m}^{(k)} R^{-k},$$

причем в каждом порядке по степеням R^{-1} волновые функции:
(IO) нормированы условием /6, I5/

$$\sum_{S=0}^K \langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(K-S)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(S)} \rangle = \delta_{K,0} \quad (II)$$

Ниже приведены выражения для первых трех членов разложения волновой функции $\varphi_{n_1 n_2 m}(X, Y; R)$ (IO) в общем случае $Z_1 \neq Z_2$, которые были использованы при вычислении коэффициентов

$F_{ij}^{(K)}$ ($K=0,1,2$) разложения (3) матричных элементов $f_{ij}(R)$. (6)

$$\varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)}(X, Y) = C_{n_1 n_2 m} \varphi_{n_1 m}(X) \varphi_{n_2 m}(Y),$$

$$\varphi_{n_1 m}(X) = [(n_1+m)!]^{-1} e^{-\frac{X}{2}} X^{\frac{m}{2}} L_{n_1+m}^m(X),$$

$$C_{n_1 n_2 m} = \frac{2^{\frac{1}{2}}}{n^2} \left[\frac{n_1!}{(n_1+m)!} \frac{n_2!}{(n_2+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} (Z_2)^{\frac{3}{2}}, \quad (I2)$$

$$\varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} = \sum_{s,t=-1}^1 a_{s,t}^{n_1 n_2 m} \varphi_{n_1+s, n_2+t, m}^{(0)}, \quad n_1+s, n_2+t \geq 0,$$

$$\langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} \rangle = 0,$$

$$a_{1,-1}^{n_1 n_2 m} = -\frac{n}{2Z_2} (n_1+1)(n-n_1-1),$$

$$a_{-1,1}^{n_1 n_2 m} = \frac{n}{2Z_2} (n_2+1)(n-n_2-1),$$

$$\varphi_{n_1 n_2 m}^{(2)} = \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)} - \left[\frac{1}{2} \langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} \rangle + \langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(2)} \rangle \right] \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)},$$

$$\langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(2)} \rangle + \langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} \rangle + \langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(2)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)} \rangle = 0,$$

$$\varphi_{n_1 n_2 m}^{(2)} = \sum_{s,t=-2}^2 b_{s,t}^{n_1 n_2 m} \varphi_{n_1+s, n_2+t, m}^{(0)}, \quad n_1+s, n_2+t \geq 0,$$

$$E_{n_1 n_2 m}^{(2)} = 3C_0 (n_1 - n_2), \quad C_0 = \frac{n Z_1}{2 Z_2},$$

$$b_{2,0}^{n_1 n_2 m} = -c_1 B_2^{n_1}, \quad b_{1,0}^{n_1 n_2 m} = -2c_1 B_1^{n_1} + c_2 A_1^{n_1},$$

$$b_{0,2}^{n_1 n_2 m} = c_1 B_2^{n_2}, \quad b_{0,1}^{n_1 n_2 m} = 2c_1 B_1^{n_2} + c_2 A_1^{n_2},$$

$$b_{-2,0}^{n_1 n_2 m} = c_1 B_{-2}^{n_1}, \quad b_{-1,0}^{n_1 n_2 m} = 2c_1 B_{-1}^{n_1} - c_2 A_{-1}^{n_1},$$

$$b_{0,-2}^{n_1 n_2 m} = -c_1 B_{-2}^{n_2}, \quad b_{0,-1}^{n_1 n_2 m} = -2c_1 B_{-1}^{n_2} - c_2 A_{-1}^{n_2},$$

$$c_1 = \frac{n^3 Z_1}{8 Z_2^3}, \quad c_2 = \frac{n^2}{2 Z_2^2} E_{n_1 n_2 m}^{(2)},$$

$$A_i^K = F_{i,m}^{1,K}, \quad B_i^K = F_{i,m}^{2,K}, \quad C_i^K = F_{i,m}^{3,K},$$

$$F_{tm}^{s,K} = \frac{(K+t)!}{(K+t+m)!} J_{K+m, m; K+t+m, m}^{(s+m)}, \quad (9')$$

где $J_{\lambda, \mu; \lambda', \mu'}^{(t)}$ определены соотношением (9).

$$E_{n_1 n_2 m}^{(3)} = c_3 [n^2 - 6(n_1 - n_2)^2 - 1], \quad c_3 = \frac{n^2 Z_1}{2 Z_2^2},$$

$$b_{2,-2}^{n_1 n_2 m} = -[c_0 (B_0^{n_1+2} - B_0^{n_2-2}) - E_{n_1 n_2 m}^{(2)} (A_0^{n_1+2} + A_0^{n_2-2})]^{-1} \times$$

$$\times \frac{3}{2} c_3 a_{1,-1}^{n_1 n_2 m} (B_1^{n_1+1} A_{-1}^{n_2-1} + B_{-1}^{n_2-1} A_1^{n_1+1}),$$

$$\begin{aligned}
\beta_{-2,2}^{n_1, n_2, m} &= - \left[c_0 (B_0^{n_1-2} - B_0^{n_2+2}) - E_{n_1, n_2, m}^{(2)} (A_0^{n_1-2} + A_0^{n_2+2}) \right]^{-1} \\
&\quad * \frac{3}{2} c_3 \alpha_{-1,1}^{n_1, n_2, m} (B_{-1}^{n_1-1} A_1^{n_2+1} + B_1^{n_2+1} A_{-1}^{n_1-1}), \\
\beta_{1,-1}^{n_1, n_2, m} &= \left[c_0 (B_0^{n_1+1} - B_0^{n_2-1}) - E_{n_1, n_2, m}^{(2)} (A_0^{n_1+1} + A_0^{n_2-1}) \right]^{-1} \\
&\quad * \left\{ 8c_1 (C_1^{n_1} A_{-1}^{n_2} - C_{-1}^{n_2} A_1^{n_1}) + \right. \\
&\quad \quad \left. + \alpha_{1,-1}^{n_1, n_2, m} \left[E_{n_1, n_2, m}^{(3)} (A_0^{n_1+1} + A_0^{n_2-1}) + \right. \right. \\
&\quad \quad \left. \left. + \frac{C_3}{2} (C_0^{n_1+1} - 3B_0^{n_1+1, n_2-1} - 3B_0^{n_2-1, n_1+1} + C_0^{n_2-1}) \right] \right\}, \\
\beta_{-1,1}^{n_1, n_2, m} &= \left[c_0 (B_0^{n_1-1} - B_0^{n_2+1}) - E_{n_1, n_2, m}^{(2)} (A_0^{n_1-1} + A_0^{n_2+1}) \right]^{-1} \\
&\quad * \left\{ 8c_1 (C_{-1}^{n_1} A_1^{n_2} - C_1^{n_2} A_{-1}^{n_1}) + \right. \\
&\quad \quad \left. + \alpha_{-1,1}^{n_1, n_2, m} \left[E_{n_1, n_2, m}^{(3)} (A_0^{n_1-1} + A_0^{n_2+1}) + \right. \right. \\
&\quad \quad \left. \left. + \frac{C_3}{2} (C_0^{n_1-1} - 3B_0^{n_1-1, n_2+1} - 3B_0^{n_2+1, n_1-1} + C_0^{n_2+1}) \right] \right\}.
\end{aligned}$$

Волновые функции $\varphi_i(\vec{r}_i; R)$ получаются из выражений (I0) - (I2) заменой $\vec{r}_2 \rightarrow \vec{r}_1$, $\theta_2 \rightarrow \pi - \theta_1$, $Z_1 \leftrightarrow Z_2$, $n_1 \leftrightarrow n_2$, $s \leftrightarrow t$.

Коэффициенты $F_{ij}^{(k)}$ разложения (3), вычисленные по одноцентровым функциям (I0) - (I2), просто выражаются через соответствующие коэффициенты $f \equiv f_{ij} = f_{n_1, n_2, m, n_1', n_2', m'}(z_i, z_j, z)$ с помощью матрицы преобразования $A_{n_1, n_2, m}^{n_1', n_2', m'}$,

связывающей кулоновские волновые функции в параболических $\varphi_{[n_1, n_2, m]}^{(0)}(M, \nu)$ и сферических $\varphi_{(n_1, m)}^{(0)}(r, \theta)$ координатах [16]. Определим величины

$$\hat{F}_{ij}^{(0)}[f] = \sum_{\ell=m}^{N-1} \sum_{\ell'=m'}^{N'-1} \bar{A}_{n_1, n_2, m}^{n_1+s, n_2+t} f_{n_1, n_2, m, n_1', n_2', m'}(z_i, z_j, z) \bar{A}_{n_1', n_2', m'}^{-1},$$

$$i = [n_1 + s, n_2 + t, m], \quad j = [n_1' + s', n_2' + t', m'], \quad Z = Z_2,$$

$$N = n_1 + s + t, \quad n = n_1 + n_2 + m + 1, \quad z_i = \frac{N}{n}, \quad (I3)$$

$$N' = n_1' + s' + t', \quad n' = n_1' + n_2' + m' + 1, \quad z_j = \frac{N'}{n'},$$

$$\bar{A}_{n_1, n_2, m}^{n_1+s, n_2+t} = D_{n_1, n_2, m}^{s, t} A_{n_1, n_2, m}^{n_1+s, n_2+t},$$

$$D_{n_1, n_2, m}^{s, t} = (-)^m \left[z_i \frac{n_1!}{(n_1+m)!} \frac{n_2!}{(n_2+m)!} \frac{(n_1+s+m)!}{(n_1+s)!} \frac{(n_2+t+m)!}{(n_2+t)!} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$A_{n_1, n_2, m}^{n_1, n_2} = C_{n_1, n_2, m}^{n_1, n_2} {}_3F_2 \left[\begin{matrix} m+\ell+1, -(\ell-m), -n_2; 1 \\ m+1, -(n-m+1) \end{matrix} \right],$$

$$C_{n_1, n_2, m}^{n_1, n_2} = (-)^{\ell-m} \frac{(N-m-1)!}{m!} \left[\frac{(2\ell+1)(\ell+m)! (n_1+m)! (n_2+m)!}{(N+\ell)! (\ell-m)! n_1! n_2! (N-\ell-1)!} \right]^{\frac{1}{2}},$$

$$P_q^r \left[\begin{matrix} \alpha_1, \dots, \alpha_p; x \\ \beta_1, \dots, \beta_q \end{matrix} \right] = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(\alpha_1)_k \dots (\alpha_p)_k}{(\beta_1)_k \dots (\beta_q)_k} \frac{x^k}{k!},$$

$$(\alpha)_0 = 1, \quad (\alpha)_k = \alpha(\alpha+1) \dots (\alpha+k-1),$$

$$f_{N^e m, N^e m'}(z_i, z_j, z) = \int d\tau \varphi_{N^e m}^{(0)}(\vec{r}) \hat{f} \varphi_{N^e m'}^{(0)}(\vec{r}),$$

$$\begin{aligned} \hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1 n'_2 m'}^{(1)}[f] &= \sum_{S=-1}^1 a_{S,-S}^{n_1 n_2 m} \hat{F}_{n_1+S, n_2-S, m, n'_1 n'_2 m'}^{(0)}[f] + \\ &+ \sum_{S=-1}^1 \hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1+S, n'_2-S, m}^{(0)}[f] a_{S,-S}^{n_1 n_2 m}, \end{aligned}$$

$$\hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1 n'_2 m'}^{(2)}[f] = \sum_{S,t=-2}^2 b_{S,t}^{n_1 n_2 m} \hat{F}_{n_1+S, n_2+t, m, n'_1 n'_2 m'}^{(0)}[f] +$$

$$+ \sum_{S,t=-2}^2 \hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1+S, n'_2+t, m}^{(0)}[f] b_{S,t}^{n'_1 n'_2 m'} + \quad (I4)$$

$$+ \hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1 n'_2 m'}^{(0)}[f] \hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1 n'_2 m'}^{(2N)}$$

$$+ \sum_{S,t=-1}^1 a_{S,-S}^{n_1 n_2 m} \hat{F}_{n_1+S, n_2-S, m, n'_1+t, n'_2-t, m'}^{(0)}[f] a_{t,-t}^{n'_1 n'_2 m'},$$

$$\hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1 n'_2 m'}^{(2N)} = -[\langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(2)} \rangle + \langle \varphi_{n'_1 n'_2 m'}^{(0)} | \varphi_{n'_1 n'_2 m'}^{(2)} \rangle +$$

$$+ \frac{1}{2} (\langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} \rangle + \langle \varphi_{n'_1 n'_2 m'}^{(1)} | \varphi_{n'_1 n'_2 m'}^{(1)} \rangle)],$$

$$\langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(0)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(2)} \rangle = \sum_{S,t=-2}^2 \hat{F}_{n_1 n_2 m, n_1+S, n_2+t, m}^{(0)} [T] b_{S,t}^{n_1 n_2 m},$$

$$\langle \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} | \varphi_{n_1 n_2 m}^{(1)} \rangle = \sum_{S,t=-1}^1 a_{S,-S}^{n_1 n_2 m} \hat{F}_{n_1+S, n_2-S, m, n_1+t, n_2-t, m}^{(0)} [T] a_{t,-t}^{n_1 n_2 m},$$

$$T = R_{N^e, N^e}^{(1)}(z_i, z_j, z) \delta_{e'e'} \delta_{m m'}.$$

Последнее равенство, где $R_{N^e, N^e}^{(1)}(z_i, z_j, z) = R_{N^e, N^e}^{(1)}$ определены соотношениями (9) и в случае равных масштабных множителей $z_i = z_j$ (I3), переходит в соотношение ортогональности для радиальных волновых функций (7). Для вычисления коэффициентов $F_{ij}^{(2)}$ разложения (3) матричных элементов $f_{ij}(R)$ (6) от операторов \hat{f} , содержащих производные $\frac{\partial}{\partial R}$, необходимы также следующие величины:

$$\hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1 n'_2 m'}^{(2d)}[f] = \sum_{S=-1}^1 \hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1+S, n'_2-S, m'}^{(0)}[f] a_{S,-S}^{n'_1 n'_2 m'},$$

$$\begin{aligned} \hat{F}_{n_1 n_2 m, n'_1 n'_2 m'}^{(2d)}[f] &= \sum_{S=-1}^1 a_{S,-S}^{n_1 n_2 m} \hat{F}_{n_1+S, n_2-S, m, n'_1 n'_2 m'}^{(0)}[f] + \\ &+ \sum_{S=-1}^1 a_{S,-S}^{n'_1 n'_2 m'} \hat{F}_{n'_1+S, n'_2-S, m', n_1 n_2 m}^{(0)}[f]. \end{aligned} \quad (I5)$$

Величины (I3) - (I5) позволяют записать выражения для коэффициентов $F_K \equiv F^{(K)} \equiv F_{ij}^{(K)}$ разложения (3) матричных элементов $F_{ij}(R)$ (6) в компактном виде:

$$F(R) = F_0 + F_1 R^{-1} + F_2 R^{-2} + F_3 R^{-3},$$

$$H_0^{(+)} = \hat{F}^{(0)}[\tilde{h}^{(+)}], H_1^{(+)} = -\hat{F}^{(0)}[\tilde{h}^{(+)}] + \hat{F}^{(1)}[\tilde{h}^{(+)}],$$

$$H_2^{(+)} = \hat{F}^{(0)}[\tilde{h}^{(+)}] - \hat{F}^{(1)}[\tilde{h}^{(+)}] - \hat{F}^{(2d)}[q^{(+)}] + \hat{F}^{(2)}[\tilde{h}^{(+)}], \quad (16)$$

$$H_0^{(-)} = -2\hat{F}^{(0)}[\tilde{h}^{(-)}], H_1^{(-)} = \hat{F}^{(0)}[\tilde{h}^{(-)}] - 2\hat{F}^{(1)}[\tilde{h}^{(-)}],$$

$$H_2^{(-)} = \hat{F}^{(1)}[\tilde{h}^{(-)}] + \hat{F}^{(2d)}[q^{(-)}] - 2\hat{F}^{(2)}[\tilde{h}^{(-)}],$$

$$H_0^{(*)} = \hat{F}^{(0)}[\tilde{h}^{(*)}], H_1^{(*)} = \hat{F}^{(1)}[\tilde{h}^{(*)}], H_2^{(*)} = \hat{F}^{(2)}[\tilde{h}^{(*)}],$$

$$Q_0^{(+)} = -\hat{F}^{(0)}[q^{(+)}], Q_1^{(+)} = -\hat{F}^{(1)}[q^{(+)}],$$

$$Q_2^{(+)} = \hat{F}^{(2d)}[T] - \hat{F}^{(2)}[q^{(+)}],$$

$$Q_0^{(-)} = \hat{F}^{(0)}[q^{(-)}], Q_1^{(-)} = \hat{F}^{(1)}[q^{(-)}], Q_2^{(-)} = \hat{F}^{(2)}[q^{(-)}],$$

$$l_1^{(+)} = \frac{1}{2} \hat{F}^{(0)}[\tilde{p}^{(+)}], l_2^{(+)} = \hat{F}^{(1)}[\tilde{p}^{(+)}] + \frac{1}{2} \hat{F}^{(1)}[\tilde{p}^{(+)}],$$

$$l_3^{(+)} = \hat{F}^{(1)}[\tilde{p}^{(+)}] + \frac{1}{2} \hat{F}^{(2)}[\tilde{p}^{(+)}],$$

$$p_1^{(-)} = \hat{F}^{(0)}[\tilde{p}^{(-)}], p_2^{(-)} = \hat{F}^{(1)}[\tilde{p}^{(-)}], p_3^{(-)} = \hat{F}^{(2)}[\tilde{p}^{(-)}].$$

Численные значения коэффициентов разложения $F_{ij}^{(k)}$, полученные из выражений (16) для случая $Z_1 = Z_2 = 1$, приведены в таблицах 2.1- 2.7.

Для частного случая $i, j = 1, 5, 6, 9$, $2p, 6u$ в работе /9/ были вычислены семь коэффициентов $F_{ij}^{(k)}$ разложения (3) с помощью функций (10) - (11) в сферических координатах /7/. Принимая во внимание, что в работе /9/ вместо приведенной массы m_a ($m_a^{-1} = M_3^{-1} + (M_1 + M_2)^{-1}$) была принята масса электрона M_3 , а энергия измерялась в Ry , матричные элементы $f_{ij}(R)$ (6) для Z_2 -термов запишем в виде:

$$h_{Z_2}^{(+)} = \frac{Z_1^2}{Z_2^6} \frac{129}{4} \frac{1}{R^6}, h_{Z_2}^{(-)} = -\frac{Z_1^2}{Z_2^6} \frac{120}{4} \frac{1}{R^6},$$

$$h_{Z_2}^{(*)} = \frac{1}{4} \left[Z_2^2 - \frac{Z_1^2}{Z_2^4} \left(\frac{27}{2} \frac{1}{R^4} + \frac{75}{Z_2^2} \frac{1}{R^6} \right) \right]. \quad (17)$$

Для Z_1 -термов в выражениях (17) необходимо заменить $Z_2 \leftrightarrow Z_1$ и изменить знак $h_{Z_2}^{(-)}$ на обратный.

5. Матричные элементы в представлении двухцентровых функций

Волновая функция электрона $\Psi_i(\vec{r}; R)$ в поле двух фиксированных зарядов Z_1 и Z_2 в сфероидальных координатах $\vec{r} = \{\xi, \eta\}$ имеет вид

$$\Psi_{kqm}(\xi, \eta; R) = N_{kqm} \prod_{mk}(\xi; R) \sum_{m_q} m_q(\eta; R). \quad (18)$$

Функции \prod_{mk} и \sum_{m_q} являются регулярными решениями радиального и углового уравнений, следующих из уравнения Шредингера (1) после разделения переменных /3/

$$\frac{d}{d\xi}(\xi^2-1) \frac{d}{d\xi} \Pi_{mk} + [-\rho^2(\xi^2-1) + \alpha\xi + \lambda - \frac{m^2}{\xi^2-1}] \Pi_{mk} = 0,$$

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2) \frac{d}{d\eta} \Xi_{mq} + [-\rho^2(1-\eta^2) + \beta\eta - \lambda - \frac{m^2}{1-\eta^2}] \Xi_{mq} = 0.$$

где $\rho^2 = -\frac{R^2}{2} E$, $\alpha = R(Z_2 + Z_1)$, $\beta = R(Z_2 - Z_1)$,
 $1 \leq \xi < \infty$, $-1 \leq \eta \leq 1$.

Нормировка N_{kqm} определяется условием

$$\int d\tau \Psi_{kqm}(\xi, \eta; R) \Psi_{k'q'm'}(\xi, \eta; R) = \delta_{kk'} \delta_{qq'} \delta_{mm'} (I9)$$

Для вычисления матричных элементов $F_{ij}(R)$ при $R \gg 1$, $Z_1 = Z_2 = 1$, $m = 0$ были использованы асимптотические разложения функций Π_{mk} и Ξ_{mq} по ρ^{-1} , построенные методом, предложенным в работе [10].

Связь между сферическими квантовыми числами $\{k, q, m\}$ и параболическими квантовыми числами $[n_1, n_2, m]$, используемыми в дальнейших разложениях, приведена в таблице I.

Радиальная функция $X(\xi) = \Pi_{ok}(\xi; R)$ в окрестности точки $\xi = 1$ имеет вид

$$X(x) = e^{-\frac{x}{2}} \sum_{\ell=0}^{\infty} (4\rho)^{-\ell} \sum_{s=-\ell}^{\ell} b_s^{(\ell)} L_{n_1+s}(x), \quad (20)$$

где $x = 2\rho(\xi - 1)$.

В интервале $1 < \xi < \infty$ функция $X(\xi)$ представляется следующим образом:

$$X(\xi) = \Phi_0 e^{-\rho(\xi-1)} \sum_{\ell=0}^{\infty} (4\rho)^{-\ell} \sum_{s=-\ell}^{\ell} \frac{\Gamma(\phi - n_1 + 1)}{\Gamma(\phi - n_1 + s + 1)} x_{(2I)} \times \frac{\Gamma(n_1 + 1)}{\Gamma(n_1 + s + 1)} (-)^s a_s^{(i)} \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^s, \quad \phi = \frac{R}{\rho} - 1,$$

где $\Phi_0 = D(\xi-1)^{n_1} (\xi+1)^{\phi-n_1}$, $D = (-)^{n_1} \frac{(4\rho)^{n_1}}{2^{\phi} \Gamma(n_1+1)}$.

Представления (20) и (21) совпадают в области $1 \ll x \ll 2\rho$, а коэффициенты $b_s^{(i)}$ и $a_s^{(i)}$ при $s \neq 0$ удовлетворяют одному и тому же рекуррентному соотношению

$$s b_s^{(i)} = \{(\phi - n_1 - s)(2n_1 + 1 + 2s) + (n_1 + s)\} b_s^{(i-1)} - (\phi - n_1 + 1 - s)(n_1 + s) b_{s-1}^{(i-1)} - (\phi - n_1 - s)(n_1 + s + 1) b_{s+1}^{(i-1)} + \sum_{t=1}^{i-|s|} \beta_t b_s^{(i-t)}, \quad (22)$$

где $b_s^{(i)} = 0$ для $|s| > i$ и $\beta = \sum_{s=0}^{\infty} (4\rho)^{-s} \beta_s$, $\beta_0 = n_1$. Коэффициенты $b_0^{(i)}$ и $a_0^{(i)}$ связаны соотношением:

$$b_0^{(i)} - a_0^{(i)} = \sum_{t=1}^i \left\{ \frac{(-)^t \Gamma(n_1 + 1)}{\Gamma(t+1) \Gamma(n_1 - t + 1)} a_{-t}^{(i)} - \frac{\Gamma(n_1 + t + 1)}{\Gamma(t+1) \Gamma(n_1 + 1)} b_t^{(i)} \right\}, \quad (23)$$

при этом $b_0^{(i)}$ (или $a_0^{(i)}$) определяются из условия нормировки (I9).

Угловые функции $Y_{g,u}(\eta) = \Xi_{og}(\eta, R)$ в окрестности точки $\eta = +1$ имеют вид

$$Y_{g,u}(\eta) = e^{-\frac{\eta}{2}} \sum_{p=0}^{\ell} (4p)^{-\ell} \sum_{s=-\ell}^{\ell} c_s^{(\ell)}(\delta) F(-n_2-s-\delta, 1, \eta), \quad (24)$$

где $\eta = 2p(1-\eta)$. В окрестности точки $\eta = -1$ функции $Y_{g,u}(\eta)$ определяются выражением (24), где $\eta = 2p(1+\eta)$.

Величина δ определена соотношениями:

$$\delta = \delta_0 \sum_{i=0}^{\ell} \alpha_i (4p)^{-i}, \quad \alpha_0 = 1,$$

где $(\delta_0)_{g,u} = \frac{1}{2} (4p)^{2n_2+1} e^{-2p/n_2!n_2!},$

$$\alpha_i = \sum_{s=0}^{\ell} d_s^{(i)} \frac{\Gamma(n_2+s+1)}{\Gamma(n_2+1)\Gamma(s+1)} - \sum_{s=1}^{\ell} \alpha_{i-s} \sum_{t=0}^s (-)^t c_{-t}^{(s)} \frac{\Gamma(n_2+1)}{\Gamma(t+1)\Gamma(n_2-t+1)} \quad (25)$$

В интервале $-1 < \eta < 1$ функции $Y_{g,u}(\eta)$ представляются следующим образом:

$$Y_{g,u}(\eta) = D(\delta) \sum_{\ell=0}^{\ell} (4p)^{-\ell} \sum_{s=-\ell}^{\ell} (-)^{\ell} d_s^{(\ell)}(\delta) \times \left\{ e^{\frac{p(1+\eta)}{(1-\eta)} \frac{n_2+s+\delta}{(1+\eta)} \frac{-n_2-s-\delta-1}{(1+\eta)} \pm e^{\frac{p(1-\eta)}{(1+\eta)} \frac{n_2+s+\delta}{(1-\eta)} \frac{-n_2-s-\delta-1}{(1-\eta)}} \right\},$$

$$D(\delta) = (-)^{n_2} 2(4p)^{n_2+\delta} / \Gamma(n_2+\delta+1).$$

Коэффициенты $c_s^{(\ell)}$ и $d_s^{(\ell)}$ при $s \neq 0$ удовлетворяют одному и тому же рекуррентному соотношению:

$$s c_s^{(\ell)} = \left\{ (n_2+\delta+s+1)(2n_2+2\delta+2s+1) - (n_2+\delta+s) \right\} c_s^{(\ell-1)} - (n_2+\delta+s)^2 c_{s-1}^{(\ell-1)} - (n_2+\delta+s+1)^2 c_{s+1}^{(\ell-1)} + \sum_{t=1}^{\ell-|s|} \beta_t c_s^{(\ell-t)}, \quad (27)$$

где $c_s^{(\ell)} = 0$ для $|s| > \ell$,

$$\beta = \sum_{i=0}^{\ell} (4p)^{-i} \left\{ \beta_i^{(0)} + \delta_0 \sum_{s=0}^i \beta_s \alpha_{i-s} \right\},$$

$$\beta_i^{(0)} = \left\{ \beta_i(\delta) \right\}_{\delta=0}, \quad \beta_i = \left\{ \frac{\partial}{\partial \delta} \beta_i(\delta) \right\}_{\delta=0}$$

Коэффициенты $c_0^{(i)}$ и $d_0^{(i)}$ связаны соотношением

$$c_0^{(i)} - d_0^{(i)} = \sum_{t=1}^i \left\{ \frac{(-)^t \Gamma(n_2+\delta+1)}{\Gamma(t+1)\Gamma(n_2+\delta+t-t)} d_{-t}^{(i)} - \frac{\Gamma(n_2+\delta+t+1)}{\Gamma(t+1)\Gamma(n_2+\delta+1)} c_t^{(i)} \right\}. \quad (28)$$

При этом $c_0^{(i)}$ (или $d_0^{(i)}$) определяются из условия нормировки (19).

При вычислении матричных элементов $F_{ij}(R)$ (6) интегрирование по переменной ξ с функцией $X(\xi)$, заданной в виде (20) и (21) на отрезках $1 \leq \xi \leq 1 + \varepsilon/2p$ и $1 + \varepsilon/2p \leq \xi < \infty$ соответственно, приводит к тому же результату, что и интегрирование с функцией $X(\xi)$, заданной в виде (20), в области $1 \leq \xi < \infty$.

Аналогично интегрирование по переменной η с функцией $Y_{g,u}(\eta)$ в виде (24) и (26) без учета экспоненциально малого расщепления ($\delta = 0$) на отрезках $0 \leq \eta \leq 1 - \varepsilon/2\rho$ и $1 - \varepsilon/2\rho \leq \eta \leq 1$ приводит к тому же результату, что и интегрирование с функцией $Y_{g,u}(\eta)$, заданной в виде (24) в области $-\infty < \eta \leq 1$.

Для вычисления матричных элементов $F_{ij}(R)$ (6) с учетом экспоненциально малого расщепления ($\delta \neq 0$) использовались оба представления (24), (26) функций $Y_{g,u}(\eta)$ (зависимость от ε в конечном результате исчезает).

В случае $i = 1s\phi_g, 2p\phi_u, j = N\ell\phi_{g,u}$ матричные элементы $F_{ij}(R)$ (6) были вычислены с точностью $o(R^{-3})$.

При этом использовались представления (20) и (24) функций

$X(\xi)$ и $Y_{g,u}(\eta)$ с точностью $o(\rho^{-3})$ и нормированным множителем N_{kg_0} (18) без учета экспоненциально малых членов ($\delta = 0$).

$$N_{kg_0} = \left(\frac{8\rho^3}{nR^3}\right)^{\frac{1}{2}} \left[1 - \frac{n+\Delta}{4\rho} - \frac{1}{8(4\rho)^2} \times \right. \quad (29)$$

$$\left. \times (5n^4 + 4n^3\Delta + 2n^2\Delta^2 - 4n\Delta^3 + \Delta^4 + 2n^2 - 52n\Delta - 18\Delta^2 - 3)\right],$$

где

$$n = n_1 + n_2 + 1, \quad \Delta = n_1 - n_2.$$

Коэффициенты $F_{ij}^{(2)}$ (3) при этом имеют весьма громоздкий вид, поэтому ниже приведены матричные элементы $F_{ij}(R)$ лишь с точностью $o(R^{-2})$

$$H_{1n}^{(+)} = \frac{2}{n^2-1} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \left[1 + \frac{n}{2R} \frac{2n^4\Delta + n^4 - 12n^2\Delta - 2n^2 + 10\Delta + 1}{(n^2-1)^2}\right],$$

$$H_{1n}^{(-)} = -\frac{4}{n^2-1} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \left[1 + \frac{n}{2R} \frac{2n^4\Delta + n^4 - 8n^2\Delta - 2n^2 + 6\Delta + 1}{(n^2-1)^2}\right],$$

$$H_{1n}^{(*)} = \frac{2}{n^2-1} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \left[1 + \frac{n}{2R} \frac{2n^4\Delta + n^4 - 4n^2\Delta - 2n^2 + 2\Delta + 1}{(n^2-1)^2}\right],$$

$$Q_{1n}^{(+)} = -Q_{1n}^{(-)} = -\frac{4}{(n^2-1)^2} \left(\frac{n-1}{n+1}\right)^n \times \quad (30)$$

$$\times \left[\Delta - \frac{n}{2R} (n^2 - 3\Delta^2 - \Delta - 1)\right].$$

В частном случае $i = 1s\phi_g, 2p\phi_u; j = 3d\phi_g, 4f\phi_u (n=2, \Delta=-1)$ матричные элементы $F_{ij}(R)$ с точностью до членов $o(R^{-3})$ имеют вид (переходы (I,3) см. таблицу I)

$$H_{13}^{(+)} = \frac{2}{27} \left(1 + \frac{5}{3} R^{-1} - \frac{133}{18} R^{-2}\right),$$

$$H_{13}^{(-)} = -\frac{4}{27} \left(1 + \frac{1}{3} R^{-1} - \frac{145}{18} R^{-2}\right),$$

$$H_{13}^{(*)} = \frac{2}{27} \left(1 - R^{-1} - \frac{157}{18} R^{-2}\right), \quad (31)$$

$$Q_{13}^{(+)} = -Q_{13}^{(-)} = \frac{8}{81} \left(1 + R^{-1} - 33 R^{-2}\right).$$

Численные значения коэффициентов разложений (30), (31) совпадают с соответствующими значениями (16), полученными с помощью одноцентровых функций (10)–(12) и представленными в таблицах 2.I – 2.7. При $i = 1s\phi_g \equiv g, j = 2p\phi_u \equiv u$

матричные элементы $F_{ij}(R)$ были вычислены с учетом экспоненциально малых членов с точностью $O(R^{-4})$.

Ниже приведены соответствующие выражения для нормировочного коэффициента (18) и волновых функций (20), (24) вблизи особых точек $\xi = 1$, $\eta = +1$.

$$\Psi_{g,u}(x,y) = N_{g,u} X(x) Y_{g,u}(y), \quad (32)$$

$$N_{g,u} = \left(\frac{2p}{R}\right)^{\frac{1}{2}} \left\{ 1 - \frac{3}{4p} - \frac{1}{2(4p)^2} + \frac{19}{2(4p)^3} + \frac{1}{4} (4p)^2 e^{-2p} \cdot \left[1 - \frac{1}{4p} (11 - 4 \ln 4p - 4c) + \frac{1}{2(4p)^2} (25 - 24 \ln 4p - 24c) \right] \right\},$$

$$X(x) = e^{-\frac{x}{2}} \left[1 + \frac{1}{4p} (x-1) - \frac{4}{(4p)^2} (x-1)^2 - \frac{1}{(4p)^3} (2x^2 - 3x - 1) \right],$$

$$Y_{g,u}(y) = e^{-\frac{y}{2}} \left\{ 1 + \frac{1}{4p} (y-1) + \frac{1}{(4p)^2} (y^2 - 2) + \frac{1}{(4p)^3} (y^3 + y^2 + y - 9) \mp 4p e^{-2p} \left[V(y) + \frac{1}{4p} (-3V(y) + 2y - 2 + \int_0^y V(t) dt) \right] \right\},$$

$$y = 2p(1-\eta),$$

где $C = 0,577$ - постоянная Эйлера,

$$V(y) = -\int_0^y \frac{e^t - 1}{t} dt, \quad p = p_{g,u}.$$

Функции $\Psi_{g,u}(x,y)$ представлены в виде ряда по степеням p^{-1} и ряда по степеням p^{-1} при e^{-2p} . Первые три члена степенного разложения (32) и первые два члена ряда по степеням p^{-1} при e^{-2p} совпадают с полученными ранее в работе /17/.

Вклад от волновой функции $Y_{g,u}(\eta)$ в интервале $-1 < \eta < 1$ экспоненциально мал, и чтобы его учесть с той же точностью, что и в выражении (32), достаточно ограничиться следующим разложением:

$$Y_{g,u}(\eta) = 2e^{-p(1-\eta)} \left\{ (1+\eta)^{-1} - \frac{2}{4p} \eta (1+\eta)^{-2} \right\} \pm 2e^{-p(1+\eta)} \left\{ (1-\eta)^{-1} + \frac{2}{4p} \eta (1-\eta)^{-2} \right\}, \quad (33)$$

которое следует из формулы (26).

Матричные элементы $F_{ij}(R)$ (6), вычисленные с помощью функций $\Psi_{g,u}(x,y)$ (32), (33) с учетом выражений (17), имеют вид:

$$H_{gg,uu}^{(+)} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{27}{2} R^{-4} + 174 R^{-6} \right) \mp 2R e^{-R-1},$$

$$H_{gu,ug}^{(-)} = -\frac{1}{2} \left(1 - \frac{27}{2} R^{-4} - 15 R^{-6} \right), \quad (34)$$

$$H_{gg,uu}^{(*)} = \frac{1}{4} \left(1 - \frac{27}{2} R^{-4} - 75 R^{-6} \right) \mp R^2 \left(1 - \frac{3}{2} R^{-1} \right) e^{-R-1},$$

$$Q_{gu,ug}^{(+)} = 0; \quad Q_{gu}^{(-)} = -Q_{ug}^{(-)} = -R^2 \left(1 + \frac{1}{2} R^{-1} - \frac{25}{8} R^{-2} - \frac{583}{48} R^{-3} \right) e^{-R-1}.$$

В таблице 3 матричные элементы (34) сравниваются с соответствующими численными расчетами /3/.

6. Заключение

Полученные результаты могут быть использованы для уточнения прежних и проведения новых адиабатических расчетов в системе трех тел, взаимодействующих по закону Кулона.

Сравнение найденных асимптотических разложений матричных элементов $H_{ij}(R)$, $Q_{ij}(R)$ и $B_{ij}(R)$, через которые выражаются эффективные потенциалы $U_{ij}(R)$ системы трех тел, с численными расчетами [3] показывает, что относительная точность разложений при $R = 0,1$ составляет 10^{-2} , а при $R=40$ не хуже чем 10^{-3} для оболочек с главными квантовыми числами $[i,j] \rightarrow n = 1, 2, 3$. В случае основного состояния $(i,j) = 1S6_3, 2p6_u \rightarrow n=1$ достигнуто чрезвычайно хорошее согласие (см. таблицу 3): при $R = 20$ совпадает пять знаков, при $R = 30$ - семь, а при $R = 40$ - девять знаков. Эти результаты убедительно свидетельствуют как о правильности аналитических выражений для $U_{ij}(R)$, так и о корректности существующих алгоритмов их численного нахождения на ЭВМ. Развита в данной работе техника вычислений может быть использована для нахождения асимптотики матричных элементов от широкого класса операторов по волновым функциям задачи двух центров. В частности, это важно для учета спиновых эффектов при медленных столкновениях в системе трех тел.

Авторам приятно поблагодарить Т.П.Пузынину и Л.Н.Сомова за помощь в работе и обсуждения результатов.

ПОЯСНЕНИЯ К ТАБЛИЦАМ

При $R \ll 1$ ведущие члены в разложениях (4) матричных элементов $H(R)$, $Q(R)$, $B(R)$, заданных формулами (5), имеют вид

$$H_{ij}^{(+)}(R) = H_{-2}^{(+)}(g,g) R^{-2}, \quad (4')$$

$$H_{ij}^{(-)}(R) = H_{-1}^{(-)}(g,u) R^{-1},$$

$$H_{ij}^{(*)}(0) = H_0^{(*)}(g,g),$$

$$Q_{ij}^{(-)}(0) = Q_0^{(-)}(g,u), \quad O_{ij}^{(+)}(0) \equiv 0,$$

$$\frac{1}{R^2} B_{im,jm}^{(+)}(R) = \frac{1}{R^2} [l_{-2}^{(+)}(g,g) \lambda_- \delta_{m'm-1} + l_{-2}^{(+)}(g,g) \lambda_+ \delta_{m'm+1}],$$

$$\frac{1}{R^2} B_{im,jm}^{(-)}(R) = -\frac{1}{2R} [p_{-1}^{(-)}(g,u) \lambda_- \delta_{m'm-1} + p_{-1}^{(-)}(g,u) \lambda_+ \delta_{m'm+1}],$$

$$\lambda_{\mp} = [(K \mp m + 1)(K \pm m)]^{\frac{1}{2}}.$$

Численные значения коэффициентов разложений (4) представлены во вторых столбцах таблиц 2.1 - 2.5 - 2.7. В третьих столбцах представлены коэффициенты (4') с заменой $g \leftrightarrow u$.

Асимптотические разложения (3) матричных элементов $H(R)$, $Q(R)$, $B(R)$ по степеням R^{-1} при $R \gg 1$ имеют

вид

$$H(R) = H_0 + H_1 R^{-1} + H_2 R^{-2}, \quad (3')$$

$$H_k = H_k^{(+)} + \alpha H_k^{(-)} + \alpha^2 H_k^{(*)}, \quad k=0,1,2,$$

$$Q(R) = Q_0 + Q_1 R^{-1} + Q_2 R^{-2},$$

$$Q_k = Q_k^{(+)} + \alpha Q_k^{(-)}, \quad k=0,1,2,$$

$$\frac{1}{R^2} B(R) = B_1 R^{-1} + B_2 R^{-2} + B_3 R^{-3},$$

$$B_k = B_k^{(+)} + \alpha B_k^{(-)}, \quad k=1,2,3,$$

$$B_k^{(+)} = l_k^{(+)} \lambda - \delta_{m'm-1} + l_k^{(+)} \lambda + \delta_{m'm+1},$$

$$B_k^{(-)} = -\frac{1}{2} (p_k^{(-)} \lambda - \delta_{m'm-1} + p_k^{(-)} \lambda + \delta_{m'm+1}).$$

Численные значения коэффициентов асимптотических разложений (3') представлены в таблицах 2.1-2.7.

В первом столбце таблицы 2 приведены номера состояний, между которыми вычисляются матричные элементы (5), в соответствии с нумерацией, представленной в таблице 1. Каждому номеру соответствует два состояния объединенного атома с различной четностью: четное (g) и нечетное (u). Например, в таблице 2.2 для разложений (4'), соответствующих переходам (1,5) при $R \ll 1$ коэффициент $H_{-1}^{(+)}(g,u) = -0,164861$ соответствует переходу $1s\sigma_g - 4p\sigma_u$, а коэффициент $H_{-1}^{(+)}(u,g) = 0,075248$ - переходу $2p\sigma_u - 3s\sigma_g$.

При $R \gg 1$ коэффициенты разложений (3) для пар состояний, различающихся только четностью, отличаются друг от друга экспоненциально малыми членами, влиянием которых можно пренебречь.

Суммы коэффициентов разложений матричных элементов $H_{ij}(R), Q_{ij}(R), B_{ij}(R)$ в области $R \gg 1$ равны нулю при суммировании по квантовым числами (n_2, m) и (n'_2, m') оболочек i и j с главными квантовыми числами n и n' .

$$\sum_{i,j} H_{ij} = \sum_{i,j} Q_{ij} = \sum_{i,j} B_{ij} = 0.$$

Эти свойства важны при рассмотрении непрерывного спектра системы трех тел в адиабатическом представлении.

Таблица I

№ <i>i</i>	Объединенный атом		Разъединенный атом			
	$\ell = 2n_2 + m$	$\ell = 2n_2 + m + 1$	n_1	n_2	m	n
1	1s _g	2p _u	0	0	0	1
2	2s _g	3p _u	1	0	0	2
3	3d _g	4f _u	0	1	0	2
4	2p _u	3d _g	0	0	1	2
5	3s _g	4p _u	2	0	0	3
6	4d _g	5f _u	1	1	0	3
7	5g _g	6h _u	0	2	0	3
8	3p _u	4d _g	1	0	1	3
9	4f _u	5g _g	0	1	1	3
10	3d _g	4f _u	0	0	2	3

Наборы сферических $(N\ell m)$, сфероидальных $\{kqm\}$ и параболических $[n_1 n_2 m]$ квантовых чисел состояний системы $Z_1 \in Z_2$ при $Z_1 = Z_2 = 1$ связаны между собой соотношениями

$$k = n_1 = n_2 = N - \ell - 1,$$

$$\ell = q + m.$$

В зависимости от симметрии волновых функций $\Psi_{kqm}(\xi, \eta, R)$ по отношению к замене $\eta \rightarrow -\eta$:

$$q = \begin{cases} 2n_2 & \text{— для симметричных состояний,} \\ 2n_2 + 1 & \text{— для антисимметричных состояний.} \end{cases}$$

Четность состояния определяется величиной

$$P_{g,u} = (-)^{\ell} = \begin{cases} P_g = 1 & \text{для четных состояний (g),} \\ P_u = -1 & \text{для нечетных состояний (u).} \end{cases}$$

Таблица 2.1

<i>i, j</i>	$H_{-2}^{(+)}(g, g)$	$H_{-2}^{(+)}(u, u)$	$H_0^{(+)}$	$H_1^{(+)}$	$H_2^{(+)}$
1,1	0	2	0,250000	0	0
1,2	0	0	0,074074	-0,123457	0,670782
1,3	0	0	0,074074	0,123457	-0,547325
1,5	0	0	0,031250	0	0,925781
1,6	0	0	0,031250	0	0,562500
1,7	0	0	0,031250	0	-1,488281
2,2	0	2	0,062500	0	2,500000
2,3	0	0	0	0	-1
2,5	0	0	0,030080	-0,100864	2,666086
2,6	0	0	0,014720	0,134528	0,878835
2,7	0	0	-0,000640	-0,035584	-0,015386
3,3	6	12	0,062500	0	-0,500000
3,5	0	0	-0,000640	0,035584	-0,669030
3,6	0	0	0,014720	-0,134528	-0,582515
3,7	0	0	0,030080	0,100864	-2,080230
4,4	6	2	0,062500	0	2
4,8	0	0	0,021722	-0,143367	0,809374
4,9	0	0	0,021722	0,143367	-0,066470
5,5	0	2	0,027778	0	6,500000
5,6	0	0	0	0	-2
5,7	0	0	0	0	0
6,6	6	12	0,027778	0	4
6,7	0	0	0	0	-2
7,7	20	30	0,027778	0	-2,500000
8,8	6	2	0,027778	0	6,250000
8,9	0	0	0	0	-2
9,9	20	12	0,027778	0	1,750000
10,10	6	12	0,027778	0	6

Таблица 2.2

i, j	$H_{-j}^{(-)}(g, u)$	$H_{-j}^{(-)}(u, g)$	$H_0^{(-)}$	$H_1^{(-)}$	$H_2^{(-)}$
I, I	-0,558702	-0,558702	-0,500000	0	0
I, 2	-0,265165	0	-0,148148	0,049383	-1,242798
I, 3	0	-0,681070	-0,148148	-0,049383	1,193416
I, 5	-0,164861	0,075248	-0,062500	-0,093750	-1,851562
I, 6	0	-0,331082	-0,062500	0	-0,843750
I, 7	0	0	-0,062500	0,093750	2,976562
2, 2	-0,245760	-0,245760	-0,125000	0	-3
2, 3	0	0	0	0	0
2, 5	-0,138810	0	-0,060160	0,057344	-4,797645
2, 6	0	-0,379824	-0,029440	-0,057088	-1,826790
2, 7	0	0	0,001280	0,049664	-0,273357
3, 3	-0,756541	-0,756541	-0,125000	0	3
3, 5	0,065380	0	0,001280	-0,049664	1,033933
3, 6	-0,359014	0	-0,029440	0,057088	1,095910
3, 7	0	-0,803731	-0,060160	-0,057344	4,694989
4, 4	-0,589824	-0,589824	-0,125000	0	0
4, 8	0	-0,286726	-0,043445	0,078200	-1,149545
4, 9	-0,713274	0	-0,043445	-0,078200	0,602143
5, 5	-0,153500	-0,153500	-0,055556	0	-9
5, 6	0	0	0	0	0
5, 7	0	0	0	0	0
6, 6	-0,481437	-0,481437	-0,055556	0	0
6, 7	0	0	0	0	0
7, 7	-0,835743	-0,835743	-0,055556	0	9
8, 8	-0,328937	-0,328937	-0,055556	0	-4,500000
8, 9	0	0	0	0	0
9, 9	-0,778209	-0,778209	-0,055556	0	4,500000
10, 10	-0,563892	-0,563892	-0,055556	0	0

Таблица 2.3

i, j	$H_0^{(*)}(g, g)$	$H_0^{(*)}(u, u)$	$H_0^{(*)}$	$H_1^{(*)}$	$H_2^{(*)}$
I, I	I	0,250000	0,250000	0	0
I, 2	0,419026	0,122880	0,074074	0,074074	0,572016
I, 3	0	0	0,074074	-0,074074	-0,646091
I, 5	0,216506	0,069405	0,031250	0,093750	0,925781
I, 6	0	0	0,031250	0	0,281250
I, 7	0	0	0,031250	-0,093750	-1,488281
2, 2	0,250000	0,111111	0,062500	0	1,500000
2, 3	0	0	0	0	0
2, 5	0,144226	0,067827	0,030080	0,043520	2,131558
2, 6	0	0	0,014720	-0,077440	0,947955
2, 7	0	0	-0,000640	-0,014080	0,288742
3, 3	0,111111	0,062500	0,062500	0	-1,500000
3, 5	0	0	-0,000640	0,014080	-0,364502
3, 6	0,054823	0,029904	0,014720	0,077440	-0,513395
3, 7	0	0	0,030080	-0,043520	-2,614758
4, 4	0,111111	0,250000	0,062500	0	0
4, 8	0,054823	0,122880	0,021722	0,065167	0,340172
4, 9	0	0	0,021722	-0,065167	-0,535672
5, 5	0,111111	0,062500	0,027778	0	4,500000
5, 6	0	0	0	0	0
5, 7	0	0	0	0	0
6, 6	0,062500	0,040000	0,027778	0	0
6, 7	0	0	0	0	0
7, 7	0,040000	0,027778	0,027778	0	-4,500000
8, 8	0,062500	0,111111	0,027778	0	2,250000
8, 9	0	0	0	0	0
9, 9	0,040000	0,062500	0,027778	0	-2,250000
10, 10	0,111111	0,062500	0,027778	0	0

Таблица 2.4

i, j	$Q_0^{(+)}$	$Q_1^{(+)}$	$Q_2^{(+)}$
I, I	0	0	0
I, 2	-0,098765	0,098765	-I,530864
I, 3	0,098765	0,098765	-I,629630
I, 5	-0,046875	0	-2,777344
I, 6	0	0,281250	-4,429687
I, 7	0,046875	0	-3,621094
2, 2	0	0	0
2, 3	0	0	-I
2, 5	-0,062976	0,125952	-6,727066
2, 6	0,041472	0,142848	-I,155226
2, 7	-0,001536	-0,061440	-0,387379
3, 3	0	0	0
3, 5	0,001536	-0,061440	I,436467
3, 6	-0,041472	0,142848	0,425318
3, 7	0,062976	0,125952	-6,347674
4, 4	0	0	0
4, 8	-0,052134	0,156401	-2,955973
4, 9	0,052134	0,156401	-3,425175
5, 5	0	0	0
5, 6	0	0	-3
5, 7	0	0	0
6, 6	0	0	0
6, 7	0	0	-3
7, 7	0	0	0
8, 8	0	0	0
8, 9	0	0	-3
9, 9	0	0	0
10, 10	0	0	0

Таблица 2.5

i, j	$Q_0^{(-)}(g, u)$	$Q_0^{(-)}(u, g)$	$Q_0^{(-)}$	$Q_1^{(-)}$	$Q_2^{(-)}$
I, I	-0,279351	0,279351	0	0	0
I, 2	-0,132583	0	0,098765	-0,098765	I,530864
I, 3	0	-0,170268	-0,098765	-0,098765	I,629630
I, 5	-0,082430	-0,037624	0,046875	0	2,777344
I, 6	0	-0,082771	0	-0,281250	4,429687
I, 7	0	0	-0,046875	0	3,621094
2, 2	-0,122880	0,122880	0	0	0
2, 3	0	0	0	0	0
2, 5	-0,069405	0	0,062976	-0,125952	6,727066
2, 6	0	-0,094956	-0,041472	-0,142848	I,155226
2, 7	0	0	0,001536	0,061440	-0,387379
3, 3	-0,126090	0,126090	0	0	0
3, 5	-0,016345	0	-0,001536	0,061440	-I,436467
3, 6	-0,059836	0	0,041472	-0,142848	-0,425318
3, 7	0	-0,100466	-0,062976	-0,125952	6,347674
4, 4	0,147456	0,147456	0	0	0
4, 8	0	-0,071681	0,052134	-0,156401	2,955973
4, 9	-0,118879	0	-0,052134	-0,156401	3,425175
5, 5	-0,076750	0,076750	0	0	0
5, 6	0	0	0	0	0
5, 7	0	0	0	0	0
6, 6	-0,080240	0,080240	0	0	0
6, 7	0	0	0	0	0
7, 7	-0,083574	0,083574	0	0	0
8, 8	0,082234	-0,082234	0	0	0
8, 9	0	0	0	0	0
9, 9	0,097276	-0,097276	0	0	0
10, 10	-0,093982	0,093982	0	0	0

Таблица 2.6

i, j	$l_{-2}^{(+)}(g, g)$	$l_{-2}^{(+)}(u, u)$	$l_1^{(+)}$	$l_2^{(+)}$	$l_3^{(+)}$
1,4	0	1,414214	-0,197531	0	0
1,8	0	0	-0,066291	-0,198874	1,168383
1,9	0	0	-0,066291	0,198874	-0,571762
2,4	0	0	0	I	-5,500000
2,8	0	1,414214	-0,095578	0,034756	-5,616523
2,9	0	0	0,008689	0,191156	-2,415522
3,4	2,449490	0	0	-I	3,500000
3,8	0	0	0,008689	-0,191156	2,276499
3,9	0	3,464102	-0,095578	-0,034756	5,998836
4,5	0	0	-0,009216	0,193536	-3,408998
4,6	0	0	0,064512	0	-0,746496
4,7	0	0	-0,009216	-0,193536	2,247782
4,10	2,449490	0	-0,147456	0	0
5,8	0	0	0	1,414214	-18,56155
5,9	0	0	0	0	0
6,8	2,449490	0	0	-1,414214	14,31891
6,9	0	0	0	1,414214	-14,31891
7,8	0	0	0	0	0
7,9	4,472136	0	0	-1,414214	10,07627
8,10	0	0	0	1,732051	-19,51506
9,10	0	3,464102	0	-1,732051	9,122760

Таблица 2.7

i, j	$P_{-1}^{(-)}(g, u)$	$P_{-1}^{(-)}(u, g)$	$P_1^{(-)}$	$P_2^{(-)}$	$P_3^{(-)}$
1,4	0,790123	0,417069	-0,395062	0	0
1,8	0,375000	0,202746	-0,132583	-0,397748	2,336767
1,9	0	0	-0,132583	0,397748	-1,143524
2,4	0	0	0	0	-9
2,8	0,347557	0,232594	-0,191156	0,069511	-11,23305
2,9	0	0	0,017378	0,382313	-4,831044
3,4	0,240795	0,205904	0	0	9
3,8	0	0	0,017378	-0,382313	4,552998
3,9	0,291193	0,224650	-0,191156	-0,069511	11,99767
4,5	-0,040037	-0,106417	-0,018432	0,387072	-6,817997
4,6	0,097711	0,117055	0,129024	0	-1,492992
4,7	0	0	-0,018432	-0,387072	4,495565
4,10	0,375928	0,589824	-0,294912	0	0
5,8	0	0	0	0	-28,63782
5,9	0	0	0	0	0
6,8	0,134288	0,131031	0	0	28,63782
6,9	0	0	0	0	-28,63782
7,8	0	0	0	0	0
7,9	0,174013	0,149502	0	0	28,63782
8,10	0	0	0	0	-28,63782
9,10	0,123046	0,118879	0	0	28,63782

Таблица 3

R	$H_{g_i}^{(+)}(R)$		$H_{g_u}^{(-)}(R)$		$Q_{g_u}^{(-)}(R)$	
	Численный расчет/3/	Данная работа	Численный расчет/3/	Данная работа	Численный расчет/3/	Данная работа
10	0,249356482	0,249371966	-0,499279054	-0,499317500	-0,001678898	-0,001687896
15	0,249933381	0,249933776	-0,499864200	-0,499866008	-0,000025716	-0,000025725
20	0,249979508	0,249979556	-0,499957471	-0,499957695	-0,000000308	-0,000000308
30	0,249995889	0,249995893	-0,499991644	-0,499991656	-0,2 x 10 ⁻¹⁰	-0,2 x 10 ⁻¹⁰
40	0,249998692	0,249998692	-0,499997361	-0,499997361	0	-0,2 x 10 ⁻¹⁴

ЛИТЕРАТУРА

1. А.В.Матвеевко, Л.И.Пономарев, М.П.Файнман. ЖЭТФ, 68, 437, 1975.
2. Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ, 65, 24, 1975.
3. D.R.Bates, R.H.G.Reid. In "Advances in Atomic and Molecular Physics", vol.IV, Academic Press, New York, London, 1958.
G.Hunter, B.F.Gray, H.O.Prichard. J.Chem.Phys., 45, 3806, 1966;
G.Hunter, H.O.Prichard. J.Chem.Phys., 46, 2146, 2153, 1967;
Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. ЖЭТФ, 52, 1273, 1967;
Препринты ОИАИ Р2-3009, Дубна, 1966; Р4-3405, Дубна, 1967;
Р4-5040, Дубна, 1970.
4. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев. ЯФ, 20, 576, 1974.
5. C.A.Coulson. Proc.Roy.Soc., A61, 20, 1941.
6. M.K.Krogdahl. Astrophys. J., 100, 311, 1944.
7. A.Dalgarno and A.L.Stewart. Proc.Roy.Soc. A238, 276, 1956.
8. C.A.Coulson and C.M.Gillam. Proc.Roy.Soc., A62, 360, 1948.
9. A.Dalgarno and R.Mc.Carroll. Proc.Roy.Soc., 237, 383, 1956.
10. R.J.Damburg and R.Kh.Propin. J.Phys.B: Atom.molec.Phys., 1, 681, 1968.
11. D.E.Ramaker and J.M.Peek. J.Phys.B: Atom.molec.Phys., 5, 2175, 1972.
12. Г.Бете и А.Солпитер. Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами, Физматгиз, 1960.
13. P.A.Blanchard. J.Phys.B: Atom.molec.Phys., 7, 993, 1974.
14. E.Schrödinger. Ann.d.Phys. LXXX, 437, 1926.
15. J.O.Hirshfelder and P.R.Certain. J.Chem.Phys., 60, 1118, 1974.
16. C.E.Tarter. J.Math.Phys., 11, 3192, 1970.
17. А.А.Овчинников, А.Д.Суханов, ДАН СССР, 157, 1092, 1964.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 ноября 1975 года.