

ЗАДАЧА ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ В КВАНТОВІЙ МЕХАНІЦІ: ВПЛИВ РОЗМІРНОСТІ

Д.І. Бондар, В.Ю. Лазур, І.М. Шваб

Ужгородський національний університет, 294000, Ужгород, вул.Волошина, 54

Отримано асимптотичний розв'язок рівняння Шредінгера з двома кулонівськими потенціалами в гіперсфероїдальній системі координат. Цей розв'язок представлено через нові спеціальні функції, частковим випадком яких є кулонівські сфероїдальні функції. Знайдено асимптотичний вираз і розглянуто основні властивості для енергії системи.

1. Вступ

Ще Еренфестом було показано [1], що узагальнення фізичних теорій на випадок простору з довільною розмірністю D часто приводить до нового і несподіваного погляду на суть розглядуваної проблеми. В останні роки такий підхід отримав значний розвиток і широко використовується в теоретичній фізиці. На ньому ґрунтується $1/D$ -розклад, або розмірний скейлінг (див., наприклад, [2,3]) - новий розрахунковий метод квантової механіки і теорії поля, котрий застосовувався, зокрема, для дослідження властивостей атомів в сильних електричних і магнітних полях [3-6], для задачі трьох тіл [7] і для багатьох інших питань. Обговорення сучасного стану цього методу, різних його варіантів і застосувань в теорії атомів і молекул, квантовій хімії і т.д. можна знайти в збірнику [2].

Та окрім цих (дуже важливих) чисто технічних можливостей D -вимірні квантово-механічні і квантово-польові моделі мають також безпосереднє відношення до конкретних задач теоретичної і математичної фізики. Зокрема, на рубежі 70-х і 80-х років у фізиці конденсованих середовищ були зроблені відкриття, що, очевидно, дотепер підігривають живий інтерес до моделей квантової теорії поля в просторах з пониженою розмірністю. Не будучи повноцінно реалістичними, ці моделі вже зарекомендували себе як дуже корисні інструменти при вивченні квазіодновимірних і квазідвовимірних середовищ. Так, наприклад, у 1979 р. з'явилася робота Су,

Шріффера і Хігера [8], у котрій досліджувалися лінійні полімери. Як виявилось, континуальна модель ряду полімерних ланцюжків в основних рисах збігається з уже вивченими раніше одновимірними моделями квантової теорії поля. Таким чином, було б невірним стверджувати, що малорозмірні теорії служать лише академічним цілям і відсторонені від реального світу. Навпаки, в даний час виявлений тісний зв'язок між передбаченнями квантової теорії поля в просторах з пониженою розмірністю і низкою незвичайних ефектів, експериментально виявлених у фізиці конденсованих середовищ. З часу відкриття в 1980 р. фон Клітцингом з співробітниками цілочислового квантового ефекту Холла [9] моделі квантової теорії поля в просторі розмірності $D=2+1$ стали особливо популярними.

На відміну від малорозмірних, квантово-механічні і квантово-польові моделі в просторах більшої розмірності вивчені доволі слабо. Дана праця присвячена узагальненню результатів асимптотичної теорії квантово-механічної задачі двох кулонівських центрів $Z_1 e Z_2$ (див., монографії [10,11]) на випадок простору з довільною розмірністю D . За допомогою методу еталонного рівняння (див., наприклад, [10, гл. I, §5]) побудовані асимптотичні розклади розв'язків рівняння Шредінгера D -вимірної двоцентрової задачі (скорочено, задачі $(Z_1 e Z_2)_D$) в гіперсфероїдальних системах координат, що відповідають

$$\left[-\frac{1}{2}\Delta - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right] \Psi(\vec{r}; R) = E(R)\Psi(\vec{r}; R) \quad (1.1)$$

(при $D \geq 3$) конфокальним еліпсоїдам і двопорожнинним гіперболоїдам обертання (тут r_1 і r_2 -відстані від електрона до зарядів Z_1 і Z_2 відповідно, R -відстань між зарядами, $\hbar=m_e=e=1$; інші позначення загальноприйняті [10]).

Необхідність вивчення розв'язків рівняння (1) виникла у зв'язку із запропонованою в працях [12,13] релятивістською моделлю складених мезонів. Виявилось, що диференціальне рівняння, яке розв'язується в цій моделі, збігається з частковим випадком рівняння, котре можна одержати при відокремленні змінних в (1) у названих вище системах координат. Існує також тісний зв'язок між задачею двох кулонівських центрів $(Z_1 e Z_2)_D$ і розглянутою в працях [14,15] моделлю $SU(2)$ -монополя. А саме, п'ятивимірна зв'язана система "заряд-діон" з $SU(2)$ -монополем Янга [16] описується рівняннями, які отримуються при відокремленні змінних в рівнянні (1) у витягнутих гіперсфероїдальних координатах. Крім цього, рівняння (1) споріднені з добре відомими (в астрофізичних додатках загальної теорії відносності) рівняннями Тьюкольського [16], що описують збурення метрик Керра (див., наприклад, [18,19]).

Разом з цим різні частинні випадки розв'язків рівняння (1) у згаданих вище D -вимірних сфероїдальних системах координат можуть бути використані при розв'язуванні ординарної задачі двох кулонівських центрів $(Z_1 e Z_2)_3$ [10,11], задачі трьох тіл з кулонівською взаємодією [20], задач розсіювання і дифракції скалярних електромагнітних хвиль на витягнутих чи сплюснутих еліпсоїдах обертання [21], задач на власні коливання, що використовуються у лазерах відкритих резонаторів [10,22], і ряді інших [10,11].

2. Відокремлення змінних в рівнянні Шредінгера задачі двох кулонівських центрів у просторах довільної розмірності

Введемо в D -вимірному ($D=2,3,\dots$) евклідовому просторі E_D гіперсфероїдальну систему координат з початком у центрі відрізка R і фокусами на його кінцях:

$$\begin{aligned} x_1 &= \frac{R}{2} \operatorname{ch} u \cos v, \\ x_2 &= \frac{R}{2} \operatorname{sh} u \sin v \cos \beta_{D-2}, \\ x_3 &= \frac{R}{2} \operatorname{sh} u \sin v \sin \beta_{D-2} \cos \beta_{D-3}, \\ &\vdots \\ x_{D-1} &= \frac{R}{2} \operatorname{sh} u \sin v \sin \beta_{D-2} \dots \sin \beta_2 \cos \beta_1, \\ x_D &= \frac{R}{2} \operatorname{sh} u \sin v \sin \beta_{D-2} \dots \sin \beta_2 \sin \beta_1. \end{aligned} \quad (2.1)$$

При цьому змінні u, v, β_k змінюються в наступних межах:

$$\begin{aligned} 0 \leq v < 2\pi, \quad \text{якщо } D = 2, \\ 0 \leq v < \pi, \quad \text{якщо } D > 2, \\ 0 \leq u < \infty, \\ \beta_0 = 0, \quad 0 \leq \beta_1 < 2\pi, \\ 0 \leq \beta_k < \pi, \\ k = 2, 3, \dots, D-2. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Частковим випадком системи (2.1) є (при $D=3$) витягнута сфероїдальна система координат [10].

Поверхні, на котрих u або v постійні, є у випадку $D \geq 3$ конфокальними еліпсоїдами або гіперболоїдами обертання:

$$\begin{aligned} \frac{x_1^2}{(R/2)^2 \operatorname{ch}^2 u} + \frac{(x_2^2 + \dots + x_D^2)}{(R/2)^2 \operatorname{sh}^2 u} = 1, \\ \frac{x_1^2}{(R/2)^2 \cos^2 v} - \frac{(x_2^2 + \dots + x_D^2)}{(R/2)^2 \sin^2 v} = 1. \end{aligned} \quad (2.3)$$

У випадку $D=2$ ці поверхні вироджуються відповідно в конфокальні еліпси або гіперболи.

Диференціал довжини дуги в системі

$$ds^2 = h_u^2 du^2 + h_v^2 dv^2 + \sum_{k=1}^{D-2} h_{\beta_k}^2 d\beta_k^2 = \frac{R^2}{4} (ch^2 u - \cos^2 v) (du^2 + dv^2) + \frac{R^2}{4} sh^2 u \sin^2 v ds_{D-2}^2, \quad (2.4a)$$

де

$$h_u = h_v = \frac{R}{2} \sqrt{ch^2 u - \cos^2 v},$$

$$h_{\beta_k} = \frac{R}{2} shu \sin v \prod_{i=j+1}^{D-2} \sin \beta_i,$$

$$(2.4b) \quad h_{\beta_{D-2}} = \frac{R}{2} shu \sin v, \quad j = 1, 2, \dots, D-3,$$

а ds_{D-2} - диференціал довжини дуги (D-2) - вимірної одиничної сфери (при D>3) або одиничного кола (при D=3):

$$ds_{D-2}^2 = d\beta_{D-2}^2 + \sin^2 \beta_{D-2} d\beta_{D-3}^2 + \dots + \sin^2 \beta_{D-2} \dots \sin^2 \beta_2 d\beta_1^2. \quad (2.4b)$$

Для майбутнього зручно зв'язати витягнуті гіперсфероїдальні координати (2.1)

координат (2.1) має вигляд:

з відстанями r_1 і r_2 від точки $\mathbf{r} = (x_1, x_2, \dots, x_D)$ до лівого і відповідно правого фокусів, що лежать на осі x_1 ; маємо:

$$r_1 = \left[\left(x_1 + \frac{R}{2} \right)^2 + \sum_{i=2}^D x_i^2 \right]^{1/2} = \frac{R}{2} (chu + \cos v) \quad (2.5a)$$

$$r_2 = \left[\left(x_1 - \frac{R}{2} \right)^2 + \sum_{i=2}^D x_i^2 \right]^{1/2} = \frac{R}{2} (chu - \cos v) \quad (2.5b)$$

Таким чином, система (2.1) є ортогональною системою координат, і при відокремленні змінних у рівнянні (1.1) можна користуватися коефіцієнтами Ламе (2.4б). Підставляючи їх у рівняння (1.1), отримуємо

$$\left\{ \frac{1}{ch^2 u - \cos^2 v} \left[\frac{1}{sh^{D-2} u} \frac{\partial}{\partial u} sh^{D-2} u \frac{\partial}{\partial u} + \frac{1}{\sin^{D-2} v} \frac{\partial}{\partial v} \sin^{D-2} v \frac{\partial}{\partial v} \right] + \frac{1}{sh^2 u \sin^2 v H_\beta} \sum_{k=1}^{D-2} \frac{\partial}{\partial \beta_k} \left(\frac{H_\beta}{H_{\beta_k}^2} \right) \frac{\partial}{\partial \beta_k} + R \left(\frac{Z_1}{chu + \cos v} + \frac{Z_2}{chu - \cos v} \right) + \frac{R^2 E}{2} \right\} \Psi = 0, \quad (2.6a)$$

де

$$H_\beta = \prod_{k=1}^{D-2} H_{\beta_k}, \quad H_{\beta_k} = \prod_{i=j+1}^{D-2} \sin \beta_i, \quad j = 1, 2, \dots, D-3, \quad H_{\beta_{D-2}} = 1. \quad (2.6b)$$

Представимо розв'язок $\Psi(u, v, \beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{D-2}; R)$ у вигляді

$$\Psi = \Xi(v) \Pi(u) F(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{D-2}), \quad (2.7a)$$

де

$$F(\beta_1, \dots, \beta_{D-2}) = \prod_{k=1}^{D-2} F_k(\beta_k). \quad (2.7b)$$

Змінні u, v, β_k в (2.6a) відокремлюються, і ми приходимо до необхідності розв'язувати в області (2.2) наступну систему рівнянь:

$$\left[\frac{1}{\sin^{D-2} v} \frac{\partial}{\partial v} \sin^{D-2} v \frac{\partial}{\partial v} - \frac{m_{D-2}(m_{D-2}+D-3)}{\sin^2 v} + b \cos v - p^2(1-\cos^2 v) + \lambda \right] \Xi = 0, \quad (2.8a)$$

$$\left[\frac{1}{sh^{D-2} u} \frac{\partial}{\partial u} sh^{D-2} u \frac{\partial}{\partial u} - \frac{m_{D-2}(m_{D-2}+D-3)}{sh^2 u} + a \cosh u + p^2(ch^2 u - 1) - \lambda \right] \Pi = 0, \quad (2.8б)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \beta_1^2} + m_1^2 \right] F_1(\beta_1) = 0, \quad (2.8в)$$

$$\left[\frac{1}{\sin^{k-1} \beta_k} \frac{\partial}{\partial \beta_k} \sin^{k-1} \beta_k \frac{\partial}{\partial \beta_k} - \frac{m_{k-1}(m_{k-1}+k-2)}{\sin^2 \beta_k} + m_k(m_k+k-1) \right] F_k(\beta_k) = 0,$$

$$k = 2, 3, \dots, D-2, \quad (2.8г)$$

де $\lambda, m_1, \dots, m_{D-2}$ – константи, що виникають при відокремленні змінних, а

$$p = \frac{R}{2} \sqrt{-2E}, \quad a = R(Z_2 + Z_1),$$

$$b = R(Z_2 - Z_1).$$

(2.8д)

Якщо $D=2$, то рівняння (2.8в), (2.8г) відсутні і $m_0 = 0$.

В даній роботі ми розглядаємо дискретний спектр значень енергії ($E < 0$), у цьому випадку параметр p дійсний і змінюється в межах $0 \leq p < \infty$. Надалі розв'язки рівнянь (2.8а) і (2.8б) будемо називати

розв'язками р-типу.

У випадку неперервного спектра ($E > 0$) параметр p уявний ($p = ic$), причому $0 \leq c < \infty$. У цьому випадку розв'язки рівнянь (2.8а) і (2.8б) будемо називати розв'язками с-типу.

В подальшому замість u і v будемо використовувати змінні ξ і η , що визначаються з допомогою тригонометричних підстановок:

$$\xi = \cosh u, \quad +1 \leq \xi < \infty,$$

$$\eta = \cos v, \quad -1 \leq \eta \leq +1,$$

В цих змінних рівняння (2.8а), (2.8б) зводяться до вигляду

$$\frac{1}{(1-\eta^2)^{\frac{D-3}{2}}} \frac{d}{d\eta} (1-\eta^2)^{\frac{D-1}{2}} \frac{d\Xi}{d\eta} + \left[\lambda - p^2(1-\eta^2) + b\eta - \frac{m(m+D-3)}{1-\eta^2} \right] \Xi = 0, \quad (2.9a)$$

$$\frac{1}{(\xi^2-1)^{\frac{D-3}{2}}} \frac{d}{d\xi} (\xi^2-1)^{\frac{D-1}{2}} \frac{d\Pi}{d\xi} + \left[-\lambda - p^2(\xi^2-1) + a\xi - \frac{m(m+D-3)}{\xi^2-1} \right] \Pi = 0, \quad (2.9б)$$

де $m = m_{D-2}$.

$$|\Xi(\pm 1)| < \infty, \quad (2.9в)$$

$$|\Pi(1)| < \infty, \quad \Pi(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0. \quad (2.9г)$$

Кутові кулонівські гіперсфероїдальні функції р-типу $\Xi_{mq}^{(D)}(p, b; \eta)$ визначимо як розв'язки задачі Штурма-Ліувілля (2.9а), (2.9в). Крайова задача (2.9а), (2.9в) має дискретний спектр. Функції $\Xi_{mq}^{(D)}(p, b; \eta)$ і відповідні їм власні значення $\lambda_{mq}^{(\eta)}$ при фіксованих b і цілих $m \geq 0$ нумеруються

числом нулів $q=0, 1, 2, \dots$, на інтервалі $-1 \leq \eta \leq +1$.

Радіальні кулонівські гіперсфероїдальні функції р-типу $\Pi_{mk}^{(D)}(p, a; \xi)$ визначимо як розв'язки задачі Штурма-Ліувілля (2.9б), (2.9г). При фіксованих a і цілих $m \geq 0$ спектр задачі (2.9б), (2.9г) дискретний.

Власні значення $\lambda_{mk}^{(\xi)}$ і власні функції $\Pi_{mk}^{(D)}(p, a; \xi)$ нумеруються індексом

$k=0,1,2,\dots$, рівним числу нулів на інтервалі $+1 \leq \xi < \infty$.

За допомогою перетворень

$$\Xi_{mq}^{(D)}(p, b; \eta) = \frac{V(\eta)}{(1-\eta^2)^{\frac{D-1}{4}}}, \quad (2.10a)$$

$$\Pi_{mk}^{(D)}(p, a; \xi) = \frac{U(\xi)}{(\xi^2-1)^{\frac{D-1}{4}}}. \quad (2.10б)$$

рівняння (2.9а), (2.9б) приводяться до нормального виду, необхідного для побудови асимптотичних розкладів

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \eta^2} - p^2 + \frac{b\eta + \lambda'}{1-\eta^2} + \frac{1-\mu^2}{(1-\eta^2)^2} \right] V(\eta) = 0, \quad (2.11a)$$

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} - p^2 + \frac{a\xi - \lambda'}{\xi^2-1} + \frac{1-\mu^2}{(\xi^2-1)^2} \right] U(\xi) = 0, \quad (2.11б)$$

де

$$\lambda' = \lambda + \frac{(D-1)(D-3)}{4}, \quad \mu = m + \frac{D-3}{2}. \quad (2.11в)$$

Перш ніж перейти до безпосереднього знаходження власних функцій і власних значень рівнянь (2.9), звернемо увагу на той факт, що при $R \rightarrow 0$ ($R \rightarrow \infty$) гіперсфероїдальні координати переходять у гіперсферичні (D-вимірні параболічні) системи координат.

Скористаємося зв'язком між цими системами координат для знаходження D-вимірних рівнянь Шредінгера для випадку об'єднаного атома (при $R \rightarrow 0$) і для випадку роз'єданого атома (eZ_1 і eZ_2 при $R \rightarrow \infty$).

При $R \rightarrow 0$

$$\xi \rightarrow \frac{2r}{R}, \quad \eta \rightarrow \cos \theta, \quad (2.12)$$

де r і θ – гіперсферичні координати, рівняння (2.9б) переходить у радіальне рівняння для водневоподібного атома з зарядом ядра $Z = Z_1 + Z_2$:

$$\left[r^{1-D} \frac{d}{dr} r^{D-1} \frac{d}{dr} - \frac{l(l+D-2)}{r^2} + 2\left(\frac{Z}{r} + E\right) \right] R(r) = 0. \quad (2.13)$$

Радіальна хвильова функція $R(r)$ також може бути отримана тією ж процедурою граничного переходу $R \rightarrow 0$ з розв'язків рівняння (2.9б).

При $R \rightarrow \infty$

$$\xi \rightarrow 1 + \frac{\zeta}{R}, \quad \eta \rightarrow \frac{\tau}{R} - 1, \quad (2.14)$$

де ζ і τ – D-вимірні параболічні координати і, рівняння (2.9а) і (2.9б) переходять у відповідні рівняння для атома eZ_1 в D-вимірних параболічних координатах:

$$\left[\frac{1}{\zeta^{\frac{D-1}{2}}} \frac{\partial}{\partial \zeta} \zeta^{\frac{D-1}{2}} \frac{\partial}{\partial \zeta} + \frac{E}{2} + \frac{\lambda_1}{\zeta} - \frac{m(m+D-3)}{4\zeta^2} \right] f_1(\zeta) = 0, \quad (2.15a)$$

$$\left[\frac{1}{\tau^{\frac{D-1}{2}}} \frac{\partial}{\partial \tau} \tau^{\frac{D-1}{2}} \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{E}{2} + \frac{\lambda_2}{\tau} - \frac{m(m+D-3)}{4\tau^2} \right] f_2(\tau) = 0, \quad (2.15б)$$

де $\lambda_1 + \lambda_2 = Z_1$.

Для атома eZ_2 зв'язок між координатами такий:

$$\xi \rightarrow \frac{\zeta}{R} + 1, \quad \eta \rightarrow 1 - \frac{\tau}{R}. \quad (2.16)$$

Розв'язки рівнянь (2.15), можуть бути отримані після аналогічної процедури граничного переходу $R \rightarrow \infty$ з розв'язків рівнянь (2.9).

3. Асимптотичні розклади

$\Pi_{mk}^{(D)}(p, 2p\alpha; \xi)$ і $\Xi_{mq}^{(D)}(p, 2p\beta; \eta)$ і відповідних їм власних значень λ'

Для побудови асимптотичних розкладів розв'язків задачі $(Z_1 eZ_2)_D$ за вели-

ким параметром R необхідні наступні асимптотичні розклади для $\Pi_{mk}^{(D)}(p, 2p\alpha; \xi)$ і $\Xi_{mq}^{(D)}(p, 2p\beta; \eta)$ за великим параметром p

$$\Pi_{mk}^{(D)}(p, 2p\alpha; \xi), \quad p \rightarrow \infty, \quad \mu = O(1),$$

$$k = O(1), \quad \alpha = O(1), \quad (3.1a)$$

$$\Xi_{mq}^{(D)}(p, 2p\beta; \eta), \quad p \rightarrow \infty, \quad \mu = O(1),$$

$$q = O(1), \quad \beta = O(1), \quad (3.1b)$$

де

$$v = \lambda'/(2p), \quad \beta = \frac{b}{2p} = \frac{Z_2 - Z_1}{\sqrt{(-2E)}},$$

$$\alpha = \frac{a}{2p} = \frac{Z_2 + Z_1}{\sqrt{(-2E)}}. \quad (3.1в)$$

При виконанні умов (3.1) справедлива оцінка $\nu = O(1)$.

$$\frac{d^2 U}{d\xi^2} + \left[-p^2 + \frac{2p(\alpha\xi - \nu)}{\xi^2 - 1} + \frac{1 - \mu^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right] U(\xi) = 0, \quad (3.2a)$$

Скористаємося методом еталонного рівняння. Перепишемо рівняння (2.11) у позначеннях (3.1в)

$$(3.2б)$$

На границях інтервалів визначення функції $U(\xi)$, $V(\eta)$ перетворюються в нуль

$$U(\xi) \Big|_{\xi=1} = 0, \quad U(\xi) \Big|_{\xi \rightarrow \infty} = 0, \quad (3.3a)$$

$$V(\eta) \Big|_{\eta = \pm 1} = 0. \quad (3.3б)$$

Нормування функцій $U(\xi)$, $V(\eta)$ впливає з нормування відповідних кулонівських гіперсфероїдальних функцій

$$\int_1^\infty (\xi^2 - 1)^{\frac{1-D}{2}} U^2(\xi) d\xi = 1, \quad (3.4a)$$

$$\int_{-1}^1 (1 - \eta^2)^{\frac{1-D}{2}} V^2(\eta) d\eta = 1. \quad (3.4б)$$

Розглянемо кутове рівняння (3.2б). Асимптотичний розв'язок будується в двох інтервалах зміни η , що перекриваються:

$$\Omega_- = [-1, \eta_1], \quad \Omega_+ = [\eta_2, 1],$$

$$\eta_- < \eta_2 < \eta_1 < \eta_+,$$

$$\text{де } \eta_- = -1 + \frac{1}{p}(-\beta + \nu), \quad \eta_+ = 1 - \frac{1}{p}(\beta + \nu)$$

– точки звороту.

Еталонним рівнянням поблизу кожного полюса є рівняння Уіттекера. На проміжку Ω_- розв'язок рівняння (3.2б) представимо у вигляді:

$$V_-(\eta) = N_- [u'_-(\eta)]^{-\frac{1}{2}} M_{\chi, \frac{\mu}{2}} \left[2p u_-(\eta) \right], \quad (3.5)$$

де N_- – постійна нормування, $M_{\chi, \frac{\mu}{2}}(z)$ – регулярний в нулі розв'язок рівняння Уіттекера, а індекс χ залишається поки невідзначеним. Для виконання граничної умови (3.3б) при $\eta = -1$ достатньо покласти $u_-(\eta) \Big|_{\eta=-1} = 0$.

Припустимо, що функція $u_-(\eta)$ і спектральний параметр $\lambda'_{mq}(\eta)$ розкладаються в асимптотичні ряди по оберненим степеням p

$$u_-(\eta) = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{u_i}{p^i}, \quad (3.6a)$$

$$\lambda'_{mq}(\eta)(p) = 2p\nu(p) = 2p \sum_{i=0}^{\infty} \frac{V_i}{p^i}. \quad (3.6б)$$

Застосовуючи рекурентну процедуру, описану в [10], з врахуванням (2.11в), знаходимо масштабне перетворення $u_-(\eta)$:

$$\begin{aligned}
 u_-(p, \beta, \chi; \eta) = & 1 + \eta + \frac{1}{p} \left\{ (\chi + \beta) \ln \left(\frac{1-\eta}{2} \right) \right\} + \\
 & + \frac{1}{p^2} \left\{ \frac{\chi(\chi + \beta)}{1+\eta} \ln \left(\frac{1-\eta}{2} \right) - \frac{(\chi + \beta)^2 + \tau}{2(1-\eta)} + \frac{1}{4} [(\chi + \beta)^2 + \tau] + \right. \\
 & \left. \frac{1}{2} \chi(\chi + \beta) \right\} + \frac{1}{p^3} \left\{ -\frac{\chi(\chi + \beta)^2}{(1+\eta)^2} \ln^2 \left(\frac{1-\eta}{2} \right) + \frac{(3\chi^2 + \tau)(\chi + \beta)}{2(1+\eta)^2} \ln \left(\frac{1-\eta}{2} \right) \right. \\
 & \left. - \frac{\chi[(\chi + \beta)^2 + \tau]}{2(1-\eta)} - \frac{(\chi + \beta)((\chi + \beta)^2 + \tau + 1)}{4(1-\eta)^2} + \frac{(3\chi^2 + \tau)(\chi + \beta)}{4(1+\eta)} + \right. \\
 & \left. \frac{1}{16} (10\chi^3 + 18\chi^2\beta + 9\chi\beta^2 + 2\tau\beta + \beta^3 + 6\chi\tau + \chi + \beta) \right\} + O\left(\frac{1}{p^4}\right), \quad (3.7)
 \end{aligned}$$

$$\text{де } \tau = \left(1 - \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 \right) / 4.$$

З умов розв'язності рекурентного процесу знаходиться асимптотичний розклад для власного значення $\lambda'_{mq}(\eta)$:

$$\begin{aligned}
 \lambda'_{mq}(\eta)(p, 2p\beta; -1, \chi) = & 2p(2\chi + \beta) - \left\{ 2\chi\beta + \frac{1}{2} \left(4\chi^2 + 1 - \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 \right) \right\} - \\
 & - \frac{1}{8p} \left\{ 2\chi \left(4\chi^2 + 1 - \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 \right) + \left(12\chi^2 + 1 - \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 \right) \beta + 4\chi\beta^2 \right\} + \\
 & \frac{1}{64p^2} \left\{ -80\chi^4 - 40\chi^2 + 24\chi^2 \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 - \left(1 - \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 \right)^2 - \right. \\
 & \left. - \left(80\chi^2 + 20 - 12 \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 \right) 2\chi\beta - \left(96\chi^2 + 8 \left(1 - \left(m + \frac{D-3}{2} \right)^2 \right) \right) \beta^2 - 16\chi\beta^3 \right\} + \\
 & + O(p^{-3}). \quad (3.8)
 \end{aligned}$$

В околі правого центра розв'язок кутового рівняння (3.2б) $V_+(\eta)$ має вигляд, аналогічний (3.5), але з іншим параметром χ' і з іншим масштабним перетворенням $u_+(\eta)$. Перехід від лівого центра до правого в розкладах (3.7) і (3.8) здійснюється замінами $\eta \rightarrow -\eta$, $\beta \rightarrow -\beta$, $\chi \rightarrow \chi'$,

$$u_+(p, \beta, \chi'; \eta) = u_-(p, -\beta, \chi; -\eta), \quad (3.9)$$

$$\lambda'_{mq}(\eta)(p, 2p\beta; 1, \chi') = \lambda'_{mq}(\eta)(p, -2p\beta; -1, \chi).$$

Таким чином, побудовані для власних значень $\lambda'(\eta)$ асимптотичні розв'язки залежать від χ і χ' . Прирівнюючи ці розклади знаходимо зв'язок між індексами $\chi' = \chi + \beta$. (3.10)

Покладемо вимогу, щоб функції $V_-(\eta)$ і $V_+(\eta)$ збігалися в інтервалі перекривання $\Omega_- \cap \Omega_+$, тобто при $\eta_2 < \eta < \eta_1$,

$$V_-(\eta) = CV_+(\eta), \quad (C = const). \quad (3.11)$$

Рівність (3.11) еквівалентна перетворенню в нуль Вронскіана функцій $V_-(\eta)$ і $V_+(\eta)$

$$V'_-(\eta)V_+(\eta) - V_-(\eta)V'_+(\eta) = 0. \quad (3.12)$$

Підставляючи в умову (3.12) знайдені розклади для функцій $V_-(\eta)$ і $V_+(\eta)$ та використовуючи асимптотику функцій Уїттекера за великим аргументом, одержуємо трансцендентне рівняння, що зв'язує індекси χ і χ'

$$\begin{aligned} & \left[\frac{1}{\pi} \operatorname{tg} \left(\pi \left(\chi - \frac{m+1}{2} + \frac{3-D}{4} \right) \right) \right] \left[\frac{1}{\pi} \operatorname{tg} \left(\pi \left(\chi' - \frac{m+1}{2} + \frac{3-D}{4} \right) \right) \right] = \\ & \frac{(4p)^{2(\chi + \chi')} e^{-4p}}{\left[\Gamma \left(\chi + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4} \right) \Gamma \left(\chi + \frac{1-m}{2} + \frac{3-D}{4} \right) \right]} \times \\ & \frac{1}{\left[\Gamma \left(\chi' + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4} \right) \Gamma \left(\chi' + \frac{1-m}{2} + \frac{3-D}{4} \right) \right]} \left[1 + O\left(\frac{1}{p}\right) \right]. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Позначимо праву частину рівняння (3.13) через δ^2 . Оскільки δ^2 експоненціально прямує до нуля при $p \rightarrow \infty$, то систему (3.10), (3.13) розв'язуємо методом ітерацій відносно χ і χ' . Нехтуючи δ^2 , одержуємо дві серії розв'язків, що відповідають оберненню в нуль одного з тангенсів в (3.13); або

$$\chi_0 = n_2 + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4}, \quad (3.14a),$$

$$\chi'_0 = n_2 + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4} + \beta$$

або

$$\chi'_0 = n'_2 + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4}, \quad (3.14б)$$

$$\chi'_0 = n'_2 + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4} - \beta,$$

$$\chi = \chi_0 + \delta\chi, \quad \chi' = \chi'_0 + \delta\chi',$$

де n_2, n'_2 цілі невід'ємні числа.

Спосіб обчислення першої ітерації системи (3.10), (3.13) залежить від того, чи близьке β до цілого числа. Коли значення β не потрапляють у малі околиці цілих чисел, поправки $\delta\chi$ і $\delta\chi'$ знаходяться незалежно. Коли значення β близькі до цілих чисел $\beta \approx n'_2 - n_2$, $\delta\chi$ знаходимо з рівняння (3.13)

$$\delta\chi = -\frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \pm \left[\left(\frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \right)^2 + \delta^2(n_2, n'_2, m, p) \right]^{1/2}, \quad (3.15a)$$

$$\delta\chi' = \frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \pm \left[\left(\frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \right)^2 + \delta^2(n_2, n'_2, m, p) \right]^{1/2}. \quad (3.15b)$$

У формулах (3.15) $\delta(n_2, n'_2, m, p)$ дорівнює

$$\delta(n_2, n'_2, m, p) = \frac{(4p)^{n_2 + n'_2 + m + (D-3)/2 + 1} e^{-2p}}{\left[n_2! \Gamma\left(n_2 + m + \frac{D-3}{2} + 1\right) n'_2! \Gamma\left(n'_2 + m + \frac{D-3}{2}\right) \right]^{1/2}} \times$$

$$\times \left\{ 1 - \frac{1}{4p} \left[\chi_0^2 + \chi_0'^2 + 4\chi_0\chi_0' + \frac{1 - \left(m + \frac{D-3}{2}\right)^2}{2} \right] + O\left(\frac{1}{p^2}\right) \right\}. \quad (3.16)$$

Асимптотика кутової кулонівської гіперсфероїдальної функції $\Xi_{mq}^{(D)}(p, 2p\beta; \eta)$,

що задовольняє в першому порядку по p умові неперервності (3.11) і нормування (3.4б), в області Ω_- має вигляд

$$\Xi_{mq}^{(D)}(p, 2p\beta; \eta) = d_- N_- \left[\frac{M_{\chi, \frac{m-D-3}{2} + \frac{D-3}{4}} \left(2p(1+\eta) + 2(\chi + \beta) \ln \frac{1-\eta}{2} \right)}{(1-\eta^2)^{\frac{D-1}{4}}} \left(1 + O\left(\frac{1}{p}\right) \right) \right], \eta \in \Omega_-, \quad (3.17a)$$

де

$$\frac{1}{N_-^2} = \frac{p^{\frac{D-3}{2}}}{2} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{3-D}{2} + 1\right) \Gamma\left(m + \frac{D-3}{2} + 1\right) \Gamma\left(\chi + \frac{1-m}{2} - \frac{D-3}{4}\right)}{\Gamma\left(\chi + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4}\right)} \right]^2 \times$$

$$\sum_{j=0}^n \frac{\Gamma(m+j+1) \sin\left(\pi\left(n-j - \frac{3-D}{2}\right)\right)}{\Gamma(j+1) \Gamma^2\left(\chi + \frac{1-m}{2} - \frac{D-3}{4} - j\right) \pi\left(n-j - \frac{3-D}{2}\right)}, \quad (3.17b)$$

де $n = \chi - \frac{1+m}{2} + \frac{3-D}{4}$.

В області Ω_+ асимптотика $\Xi_{mq}^{(D)}(p, 2p\beta; \eta)$ має вигляд

$$\Xi_{mq}^{(D)}(p, 2p\beta; \eta) = d_+ N_+ \left[\frac{M_{\chi', \frac{m}{2} + \frac{D-3}{4}} \left(2p(1-\eta) + 2(\chi' - \beta) \ln \frac{1+\eta}{2} \right)}{(1-\eta^2)^{\frac{D-1}{4}}} \left(1 + O\left(\frac{1}{p}\right) \right) \right], \eta \in \Omega_+, \quad (3.17b)$$

Коефіцієнти d і d_+ визначаються співвідношеннями
де N_+ отримуємо з N заміною $\chi \rightarrow \chi'$.

$$d_+^2 + d_-^2 = 1, \quad (3.18a)$$

$$d_- = \left| \frac{\sin \left[\pi \left(2\chi' - 1 - m + \frac{3-D}{2} \right) \right]}{\sin \left[\pi \left(2\chi - 1 - m + \frac{3-D}{2} \right) \right] + \sin \left[\pi \left(2\chi' - 1 - m + \frac{3-D}{2} \right) \right]} \right|^{\frac{1}{2}} \operatorname{sgn} \left[\frac{-\cos \left[\pi \left(\chi - \frac{1+m}{2} + \frac{3-D}{4} \right) \right]}{\sin \left[\pi \left(\chi' - \frac{1+m}{2} + \frac{3-D}{4} \right) \right]} \right], \quad (3.18b)$$

$$d_+ = \left| \frac{\sin \left[\pi \left(2\chi - 1 - m + \frac{3-D}{2} \right) \right]}{\sin \left[\pi \left(2\chi - 1 - m + \frac{3-D}{2} \right) \right] + \sin \left[\pi \left(2\chi' - 1 - m + \frac{3-D}{2} \right) \right]} \right|^{\frac{1}{2}}. \quad (3.18g)$$

де $\operatorname{sgn}(x)$ – знак x .

Розглянемо радіальне рівняння (3.1a), його розв'язок будемо шукати у вигляді

$$U(\xi) = N [\omega'(\xi)]^{-\frac{1}{2}} M_{\sigma, \frac{\mu}{2}} [2p\omega(\xi)],$$

$$(N = \text{const}). \quad (3.19)$$

З умови спадання $U(\xi)$ при $\xi \rightarrow \infty$ (3.3a) випливає

$$\sigma = k + \frac{1+m}{2} + \frac{D-3}{4}, \quad k=0,1,2,\dots, \quad (3.20)$$

де k - число нулів радіальної кулонівської гіперсфероїдальної функції. Функція Уіттекера при виконанні (3.20) виражається через поліноми Лаггера.

Виконуючи заміни

$$\xi \rightarrow -\eta, \quad p \rightarrow -p, \quad \alpha \rightarrow -\beta, \quad (3.21)$$

переводимо радіальне рівняння (3.2a) в околі $\xi = 1$ з граничною умовою $U(1) = 0$ в кутове рівняння (3.2б) в околі $\eta = -1$ з граничною умовою $V(-1) = 0$.

Таким чином, розклади для масштабного перетворення $\omega(\xi)$ і власного значення $\lambda(\xi)$ отримуються з розкладів (3.7), (3.8).

Асимптотика радіальної кулонівської гіперсфероїдальної функції $\Pi_{m,k}^{(D)}(p, 2p\alpha; \xi)$, що задовольняє в першому порядку по p умові неперервності (3.11) і нормування (3.4a), має вигляд

$$\Pi_{mk}^{(D)}(p, 2p\alpha; \xi) = N \left[\frac{M_{\sigma, \frac{m}{2} + \frac{D-3}{4}} (2p(\xi-1))}{(\xi^2-1)^{\frac{D-1}{4}}} \left[1 + O\left(\frac{1}{p}\right) \right] \right], \quad +1 \leq \xi < \infty, \quad (3.22a)$$

де

$$\frac{1}{N^2} = \frac{p^{\frac{D-3}{2}}}{2} \left[\frac{\Gamma\left(\frac{3-D}{2}+1\right)\Gamma\left(m+\frac{D-3}{2}+1\right)k!}{\Gamma\left(k+m+\frac{D-3}{2}+1\right)} \sum_{j=0}^k \frac{(m+j)!}{j!(k-j)!^2} \frac{\sin\left[\pi\left(k-j-\frac{3-D}{2}\right)\right]}{\pi\left(k-j-\frac{3-D}{2}\right)} \right]^2. \quad (3.22б)$$

4. Розв’язок рівнянь (2.8в), (2.8г)

Константа $B_{D-1} = -m_{D-2}(m_{D-2} + D - 3)$ є власним значенням оператора Лапласа на (D-2) - одиничних сферах (при D>3) або на одиничних колах (при D=3). При цьому константи m_1, m_2, \dots, m_{D-2} рівні цілим невід’ємним числам і $m_1 \leq m_2 \leq \dots \leq m_{D-2}$.

Неперервними і однозначними на таких сферах або колах розв’язками рівнянь (2.8в), (2.8г) є сферичні функції. Представимо їх у вигляді:

$$F(\beta_1) = \frac{\exp(\pm im_1 \beta_1)}{\sqrt{2\pi}}, \quad D=3, \quad (4.1)$$

$$F(\beta_1, \dots, \beta_{D-2}) = \frac{\exp(\pm im_1 \beta_1)}{\sqrt{2\pi}} \times \prod_{k=2}^{D-2} A_k \sin^{m_{k-1}} \beta_k C_{m_k - m_{k-1}}^{m_{k-1} + \frac{k-1}{2}}(\cos \beta_k), \quad D > 3, \quad (4.2)$$

де $C_n^m(\cos \beta_k)$ - поліноми Гегенбауєра, A_k - постійні нормування.

З умови нормування хвильової функції

$$\int |F(\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_{D-2})|^2 d\Omega = 1, \quad (4.3)$$

де $d\Omega$ - елемент поверхні одиничної сфери, знаходимо постійні A_k :

$$A_k^2 \int_0^\pi \sin^{2m_{k-1}} \beta_k \left[C_{m_k - m_{k-1}}^{m_{k-1} + \frac{k-1}{2}}(\cos \beta_k) \right]^2 \times \sin^{k-1} \beta_k d\beta_k = 1. \quad (4.4)$$

Після підстановки $t = \cos \beta_k$:

$$A_k^2 \int_{-1}^1 (1-t^2)^{\frac{p-1}{2}} \left[C_n^{p/2}(t) \right]^2 dt = 1, \quad (4.5)$$

де

$$\frac{p}{2} = m_{k-1} + \frac{k-1}{2}, \quad n = m_k - m_{k-1}. \quad (4.6)$$

Виписаний інтеграл відомий, враховуючи (4.6) одержуємо:

$$A_k = \sqrt{\frac{n!(p+2n)\Gamma^2(p/2)}{2^{2-p} \pi \Gamma(n+p)}} = \sqrt{\frac{(m_k - m_{k-1})!(2m_k + k - 1)\Gamma^2(m_{k-1} + \frac{k-1}{2})}{2^{3-k-2m_{k-1}} \pi \Gamma(m_k + m_{k-1} + k - 1)}}. \quad (4.7)$$

5. Асимптотичні розклади для енергетичних термів. Квазіперетини енергетичних термів.

Коли міжцентрова відстань R прямує до нескінченності, витягнуті гіперсфероїдальні координати поблизу $\xi = 1$ і $\eta = \pm 1$ зводяться до D-вимірних параболічних (2.14), (2.16). У границі $R \rightarrow \infty$ задача $(Z_1 e Z_2)_D$ розпадається на дві одноцентрові кулонівські задачі з зарядами Z_1 і Z_2 . Атоми eZ_1 і

eZ_2 характеризуються наборами параболічних квантових чисел $[n, n_1, n_2, m]$ і $[n', n'_1, n'_2, m]$, що зв'язані співвідношеннями $n = n_1 + n_2 + m + 1$, $n' = n'_1 + n'_2 + \mu + 1$, (5.1) де n_1, n_2 і n'_1, n'_2 - кількості нулів хвильових функцій атомів eZ_1 і eZ_2 в параболічних координатах відповідно.

З рівності власних значень радіальних і кутових кулонівських гіперсфероїдальних функцій і з врахуванням зв'язків параметрів

$$\lambda'(\eta)_{mq}(p, 2p\beta) = \lambda'(\xi)_{mk}(p, 2p\alpha), \quad (5.2)$$

p, α, β з R і енергією E (3.2) і (2.8д) отри-

муємо формули для енергії при $R \rightarrow \infty$ і здійснюється перехід від параметра p до параметра R

$$\begin{aligned} E_{[n, n_1, n_2, m]}^{(D)}(Z_1, Z_2, R) = & -\frac{Z_1^2}{2\left(n + \frac{D-3}{2}\right)^2} - \frac{Z_2}{R} + \\ & + \frac{3Z_2\left(n + \frac{D-3}{2}\right)\Delta}{2Z_1R^2} - \frac{Z_2\left(n + \frac{D-3}{2}\right)^2}{2R^3Z_1^2} \left(6\Delta^2 - \left(n + \frac{D-3}{2}\right)^2 + 1\right) + \\ & - \frac{Z_2\left(n + \frac{D-3}{2}\right)^3}{16Z_1^4R^4} \left[Z_1\Delta \left(109\Delta^2 - 39\left(n + \frac{D-3}{2}\right)^2 - 9\left(m + \frac{D-3}{2}\right)^2 + 59\right) - \right. \\ & \left. - Z_2\left(n + \frac{D-3}{2}\right) \left(17\left(n + \frac{D-3}{2}\right)^2 - 3\Delta^2 - 9\left(m + \frac{D-3}{2}\right)^2 + 19\right) \right] + O(R^{-5}), \end{aligned} \quad (5.3)$$

де $\Delta = n_1 - n_2$.

Формула (5.3) дає розклад по мультиполям енергії електростатичної взаємодії атома eZ_1 з віддаленим точковим зарядом Z_2 (eZ_1 - терми). Перехід до терму, що відповідає атому eZ_2 , здійснюється з формули (5.3) замінами

$$Z_1 \leftrightarrow Z_2, \quad n \rightarrow n', \quad \Delta \rightarrow \Delta', \quad n_2 \rightarrow n'_2. \quad (5.4)$$

Зв'язок між D-вимірними параболічними $[n, n_1, n_2, m]$ і гіперсфероїдальними $[k, q, m]$ квантовими числами такий: $k = n_1$,

$$n_2 = \begin{cases} q, & -\beta > q, \\ \frac{1}{2}(q + Ent(\beta)), & |\beta| < q, \end{cases} \quad (5.5a)$$

$$n'_2 = \begin{cases} \frac{1}{2}(q + Ent(\beta)), & |\beta| < q, \\ q, & \beta > q. \end{cases} \quad (5.5b)$$

Сусідні по q власні значення λ , які при

$$\beta = n'_2 - n_2 \quad (5.6)$$

без врахування поправок $\delta\chi$ і $\delta\chi'$ збігалися, при врахуванні цих добавок виявляються розсунутими на експоненціально малу величину; тому точки $\beta = n'_2 - n_2$ назива-

ються точками квазіперетину.

Квазіперетину власних значень

$\lambda'(\eta)_{mq}$ і $\lambda'(\eta)_{mq+1}$, що визначається співвідношенням (5.6), відповідає квазіперетин енергетичних термів у який $n_1 = n'_1$, а n_2 і n'_2 задовольняють умові

$$\beta = (Z_2 - Z_1)(-2E)^{-1/2} = n'_2 - n_2.$$

Дві серії степеневих розкладів для eZ_1 і eZ_2 - термів, відповідають переважної локалізації електрона тільки в одного з двох зарядів. Врахування експоненціально малих по R поправок до E_1 і E_2 в цьому випадку є перевищенням точності. Однак, експоненціальні поправки відіграють вирішальну роль у точках квазіперетину (5.6), де стани системи енергетично нерозрізнені

$$E_1 = E_{[n, n_1, n_2, m]}^{(D)}(R_c), \quad E_1 = E_{[n, n_1, n_2, m]}^{(D)}(R_c), \quad (5.7a)$$

$$E_1 = E_2 = E_c = -\frac{(Z_2 - Z_1)^2}{2(\chi' - \chi)^2}, \quad (5.7b)$$

де $E_{[n, n_1, n_2, m]}^{(D)}$ і $E_{[n', n'_1, n'_2, m]}^{(D)}$ - визначаються аси-

асимптотичними рядами (5.3) і (5.4), R_c - координата квазіперетину. Співвідношення (5.7б) прямо впливає з умови (5.6). Врахування експоненціальних поправок приводить, як і повинно бути, до розщеплення термів E_1 і E_2 на два близькі терми E'_1 і E'_2 , що відповідають станам, у яких електрон рухається одночасно в обох ямах. Мінімальна відстань між термами (розщеплення) $\Delta E(R_c)$ визначається в цьому випадку підбар'єрною резонансною взаємодією й оцінюється формулою виду:

$$\Delta E(R_c) = \delta E_1(R_c) + \delta E_2(R_c) = T\delta(R_c), \quad (5.8)$$

де δ визначено рівністю (3.16).

Пономарьов [24] звернув увагу, що при диференціюванні E_1 і E_2 за індексами потрібно враховувати залежність $\tilde{\beta}(E)$. Слідуючи його ідеї, Комаров і Соловйов одержали [23]

$$T_{ПКС} = \frac{\partial E_1 / \partial n_2}{\sqrt{1 + \frac{\partial \tilde{\beta}}{\partial E_1} \frac{\partial E_1}{\partial n_2}}} + \frac{\partial E_2 / \partial n_2}{\sqrt{1 + \frac{\partial \tilde{\beta}}{\partial E_2} \frac{\partial E_2}{\partial n_2}}}. \quad (5.9)$$

Усі величини, що входять у вираз (5.9), можна обчислювати за допомогою асимптотичних розкладів (5.3) і (5.4). Тоді для різниці термів у точках квазіперетину R_c одержуємо

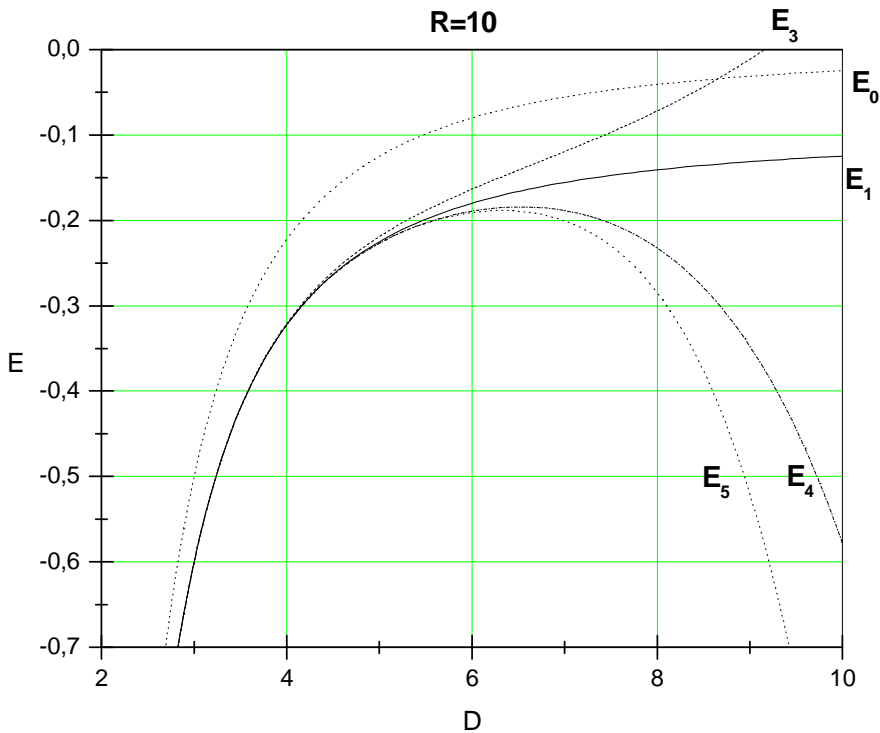


Рис.1. Залежність E_k для основного стану молекулярного іона водню, при значенні міжцентрової відстані $R=10$ а.о., від розмірності простору.

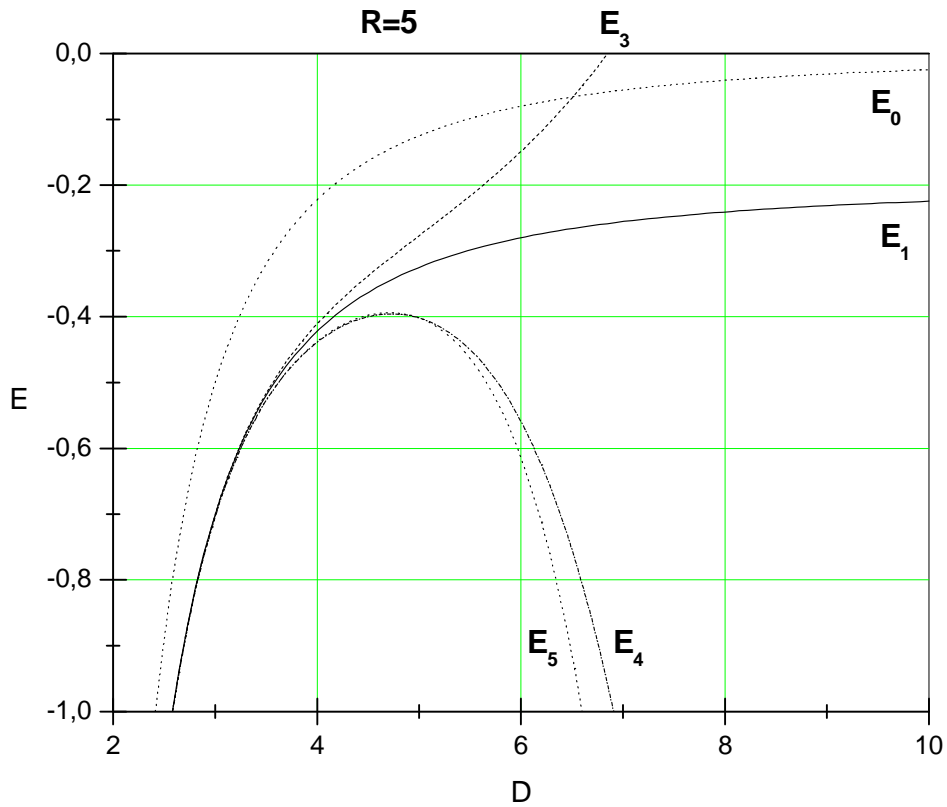


Рис.2. Залежність E_k для основного стану молекулярного іона водню, при значенні міжцентрової відстані $R=5$ а.о., від розмірності простору.

$$\Delta E(R_c) = \left\{ \frac{Z_1^2}{N^3} \left[1 + \frac{Z_1^2(Z_2 - Z_1)}{N^3(-2E_c)^{3/2}} \right]^{-1/2} + \frac{Z_2^2}{(N')^3} \left[1 - \frac{Z_2^2(Z_2 - Z_1)}{(N')^3(-2E_c)^{3/2}} \right]^{-1/2} \right\} \delta_c, \quad (5.10)$$

де $N = n + \frac{D-3}{2}$, $N' = n' + \frac{D-3}{2}$, а $\delta_c = \delta(R_c)$ визначено в (3.16).

Обговорення результатів

Отримано асимптотичні розклади для власних функцій і власних значень енергії рівняння Шредінгера для задачі $(Z_1 e Z_2)_D$ при великих міжцентрових відстанях. На рис.1 і рис.2 представлена залежність різних E_k , для основного стану молекулярного іона водню ($Z_1=Z_2=1$, $n_1=n_2=m=0$), від розмірності простору D ,

при значеннях міжцентрової відстані $R=10$ і $R=5$ а.о. відповідно. Де E_k - вирази для енергії з точністю до $O(R^{-k})$, що отримуються з (5.3). Як добре видно з рисунків, ряди для енергії розходяться починаючи із значення $D=O(1)$, що обумовлено вихідною умовою (3.1) для μ .

Література

1. P. Erenfest. Proc. Amsterdam Acad. vol. 20, p. 200, 1917; см. также Г.Е Горелик. Размерность пространства. Изд. МГУ, 1983. с.197.
2. Dimensional Scaling in Chemical Physics, ed. by D.R. Herschbach, J. S. Avery, and O. Goshinsky, Kluwer Academic Publ., Dordrecht, Netherland, 1993.
3. New Methods in Quantum Theory, ed. by C. A. Tsipis, V. S. Popov, D. R. Hershach and J. S. Avery, Kluwer Academic Publ., Dordrecht, Netherland, 1996.
4. C. M. Bender, L.D. Mlodinov, and N. Papanicolaou, Phys. Rev. A.25, p.1305, 1982.
5. V. S. Popov, V. D. Mur, A.V. Scheblykin, et al., Phys. Lett. A 124, p. 77, 1987; 149, p. 418, 425, 1990.
6. В. С. Попов, А. В. Сергеев. ЖЭТФ, т. 105, вып. 3, стр. 568-591, 1994.
7. В. Д. Мур, В. С. Попов, А. В. Сергеев. ЖЭТФ, т. 97, вып.1, стр 32-46, 1990.
8. W. P. Su, J. R. Schriffier, and A. J. Heeger. Phys. Rev. Lett., v.42,p.1698, 1979.
9. K. von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. Phys. Rev. Lett., v. 45, p.494, 1980.
10. И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции.- М.: Наука , 1976. стр. 320.
11. S. Yu. Slavjanov, W. Laj. Special function: A United Theory Based on Singularities /Foreword by A. Seeger. Oxford; New York: Oxford University Press, 2000.-ISBN 0-19-850573-6.
12. А. Т. Филиппов. Сингулярные потенциалы в нерелятивистской квантовой теории. ЭЧАЯ, том 10, вып. 3, стр. 501-538, 1979.
13. А. Т. Филиппов. Я. Ф. т. 29, стр. 1035-, 1979.
14. L. G. Mardoyan, A.N. Sissakian, V. M. Ter-Antonyan. Mod. Phys. Lett. A. v. 14, p. 1303, 1999.
15. Л.Г. Мардоян, А.Н. Сисакян, В.М. Тер-Антонян . Базисы и межбазисные преобразования для SU(2)-монополя . ТМФ, т.123, №1.стр. 44-56, 2000.
16. C. N. Yang. J. Math. Phys. v. 19, p. 320, 1978.
17. S. A. Teukolsky. Phys. Rev. Lett. vol. 29, p. 1114-1118, 1972.
18. E. W. Leaver. J. Math. Phys. vol 27, №5, p. 1238-1265, 1986.
19. E. W. Leaver. Phys. Rev. D. vol. 41, №10, p. 2986-2997, 1990.
20. С.И. Винницкий, Л.И. Пономарев. адиабатическое представление в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием. ЭЧАЯ, том 13, вып. 6, стр. 1336-1418, 1982.
21. J. J. Bowman, T. B. Senior, P. L. E. Uslengi. Elektromagnetic and Acooustic Scattering by Simple Shapes. N. Y. Pub. Comp.-Amsterdam, 1969.
22. Л. А. Вайнштейн. В кн.: Электроника больших мощностей. М.: Наука, №4, с. 93, 106, 130, 1965.
23. И.В. Комаров, Е.А. Соловьев. Квази-пересечения термов в задаче двух кулоновских центров с сильно отличающимися зарядами // ТМФ.- 1979.- т.40, №1.- с.130-136.
24. Л.И. Пономарев. Конфигурационное взаимодействие термов в системе ZeZ' // ЖЭТФ.- 1968.- т.55, вып.5.- с.1836-1844.

THE TWO COULOMB CENTERS PROBLEM IN QUANTUM MECHANICS: INFLUENCE OF DIMENSION

D.I. Bondar, V.Yu. Lazur, I.M. Shvab

Uzhgorod National University, 294000, Uzhgorod, Voloshin, 54

Asymptotic solutions of the Schroedinger equation with two Coulomb potentials are obtained in the hyperspheroidal coordinate system. These solutions are expressed in the form of new higher transcendental functions, particular case of which are the Coulombs ppheroidal functions. The asymptotic expressions for energy of the considered system are obtained and basic properties of the mentioned expressions are studied.