

И. В. КОМАРОВ  
Л. И. ПОНОМАРЕВ  
С. Ю. СЛАВЯНОВ

# СФЕРОИДАЛЬНЫЕ И КУЛОНОВСКИЕ СФЕРОИДАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ

---

Под редакцией В. С. Булдырева



ИЗДАТЕЛЬСТВО «НАУКА»  
ГЛАВНАЯ РЕДАКЦИЯ  
ФИЗИКО-МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ЛИТЕРАТУРЫ  
Москва 1976

**Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции.** И. В. Комаров, Л. И. Пономарев, С. Ю. Славянов. Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», М., 1976.

В книге с единой точки зрения изложены основные результаты работ последних лет по теории и применениям сфероидальных и родственных им кулоновских сфероидальных функций. Кулоновские сфероидальные функции как класс специальных функций последовательно определены и рассмотрены впервые.

В книге представлены аналитические свойства сфероидальных и кулоновских сфероидальных функций, их асимптотические разложения и алгоритмы вычисления на ЭВМ. Рассмотрены приложения этих функций в квантовой механике, теории дифракции и оптике.

Книга носит справочный характер. Она предназначена для физиков и специалистов по прикладной математике, радиотехнике и квантовой химии.

Илл. 43, табл. 21, библиогр. назв. 384.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редактора . . . . .	6
Предисловие . . . . .	11
<b>Введение . . . . .</b>	<b>15</b>
§ 1. Сфероидальные системы координат . . . . .	15
§ 2. Разделение переменных в уравнениях Гельмгольца и Шредингера в сфероидальных координатах . . . . .	20
§ 3. Разделение переменных в уравнениях Максвелла в сфероидальных координатах . . . . .	24
<b>Глава I. Сфероидальные функции . . . . .</b>	<b>28</b>
§ 1. Элементарные свойства сфероидальных функций . . . . .	28
1. Общее уравнение для сфероидальных функций, его преобразования и свойства решений (28). 2. Вытянутые угловые сфероидальные функции (в. у. с. ф.) и вытянутые радиальные сфероидальные функции (в. р. с. ф.) (30). 3. Сплюснутые угловые сфероидальные функции (с. у. с. ф.) и сплюснутые радиальные сфероидальные функции (с. р. с. ф.) (39). 4. Некоторые интегралы от сфероидальных функций (45).	
Библиографические указания . . . . .	47
§ 2. Интегральные уравнения и соотношения для сфероидальных функций . . . . .	47
1. Основное интегральное уравнение для в. у. с. ф. и свойства его характеристических чисел (47). 2. Собственные функции преобразования Фурье в конечных пределах. Свойство двойной ортогональности (54). 3. Другие типы интегральных уравнений и соотношений для сфероидальных функций (57). 4. Гиперсфероидальные функции (61).	
Библиографические указания . . . . .	64
§ 3. Разложения сфероидальных функций в ряды . . . . .	65
1. Предварительные сведения из теории цепных дробей (65). 2. Разложения угловых сфероидальных функций по присоединенным полиномам Лежандра (68). 3. Другие типы разложений угловых сфероидальных функций (75). 4. Разложения радиальных сфероидальных функций (79). 5. Сведения о таблицах сфероидальных функций (83).	
Библиографические указания . . . . .	84

§ 4. Разложения сфероидальных функций при малых значениях параметра . . . . .	85
1. Вычисления по теории возмущений (85). 2. Алгебраический подход (87).	
Библиографические указания . . . . .	93
§ 5. Асимптотические разложения сфероидальных функций по большому параметру . . . . .	93
1. Предварительные замечания (93). 2. Асимптотика вытянутых угловых сфероидальных функций (97). 3. Асимптотика вытянутых радиальных сфероидальных функций (110). 4. Асимптотика сплюснутых угловых сфероидальных функций (112). 5. Асимптотика сплюснутых радиальных сфероидальных функций (122).	
Библиографические указания . . . . .	124
§ 6. Квазиклассическая асимптотика сфероидальных функций	124
Библиографические указания . . . . .	130
§ 7. Разложения функций Грина и плоских волн по сфероидальным функциям . . . . .	131
1. Разложения функций Грина по сфероидальным функциям (131). 2. Разложения плоских волн по сфероидальным функциям (134). 3. Другой вывод интегральных уравнений и соотношений для сфероидальных функций (136). 4. Интегральные представления функций Грина (138).	
Библиографические указания . . . . .	140
Глава II. Кулоновские сфероидальные функции . . . . .	141
§ 1. Определение и элементарные свойства . . . . .	141
1. Уравнение для кулоновских сфероидальных функций и элементарные свойства его решений (141). 2. Угловые кулоновские сфероидальные функции (у. к. с. ф.) (143). 3. Радиальные кулоновские сфероидальные функции (р. к. с. ф.) (148).	
§ 2. Разложение кулоновских сфероидальных функций в ряды	152
1. Предварительные замечания (152). 2. Разложение у. к. с. ф. в ряды (154). 3. Разложение р. к. с. ф. в ряды (159). 4. Полиномы, связанные с у. к. с. ф. и р. к. с. ф. (162).	
Библиографические указания к §§ 1, 2 . . . . .	170
§ 3. Задача двух кулоновских центров в квантовой механике	171
1. Основные определения. Представление решений через р. к. с. ф. и у. к. с. ф. (171). 2. Дискретный спектр. Общие свойства решений (173). 3. Правила соответствия термов при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ (176). 4. Алгоритм вычисления термов и волновых функций (179). 5. Пересечения и квазипересечения термов и другие особенности дискретного спектра (186). 6. Непрерывный спектр (196). 7. Сведения о таблицах (202).	
§ 4. Асимптотические разложения решений задачи двух кулоновских центров при $R \rightarrow \infty$ . . . . .	203
1. Асимптотические разложения $\mathcal{E}_{mq}(\rho, 2\rho\beta; \eta)$ и $\Pi_{mk}(\rho, 2\rho\alpha; \xi)$ и соответствующих им собственных значений $\lambda$ при $\rho \rightarrow \infty$ (203). 2. Энергия системы $Z_1eZ_2$ при $R \rightarrow \infty$ (218).	
Библиографические указания . . . . .	226

§ 5. Асимптотические разложения решений задачи $Z_1 e Z_2$ при $R \rightarrow 0$ . . . . .	227
1. Теория возмущений для оператора энергии (227). 2. Разложения у. к. с. ф. и р. к. с. ф., необходимые для анализа системы $Z_1 e Z_2$ при $R \rightarrow 0$ (229). 3. Основное состояние системы $Z_1 e Z_2$ при малых $R$ (231).	
Библиографические указания . . . . .	233
§ 6. Квазиклассическая асимптотика решений задачи $Z_1 e Z_2$	233
Библиографические указания . . . . .	238
§ 7. Слабосвязанные состояния в поле конечного диполя	239
1. Постановка задачи (239). 2. Асимптотика р. к. с. ф. $\Pi_{mk}(p, 0; \xi)$ и собственных значений $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 0)$ при $p \rightarrow 0$ (239). 3. Асимптотика у. к. с. ф. $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$ и $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)$ при $b \rightarrow \infty$ (246). 4. Энергетический спектр системы вблизи $E=0$ (250).	
Библиографические указания . . . . .	252
§ 8. Связь задачи $Z_1 e Z_2$ с одноцентрковой кулоновской задачей	252
1. Оператор константы разделения (252). 2. Водородоподобный атом в сферондальных координатах (256). 3. Элементарные решения в задаче $Z_1 e Z_2$ (261). 4. Кулоновские серны в системе $Z_1 e Z_2$ (263).	
Глава III. Обзор физических приложений . . . . .	265
§ 1. Применения сфероидальных функций, связанные с разделением переменных в акустических и электродинамических задачах . . . . .	265
1. Обзор литературы (265). 2. Поле вертикального электрического диполя, расположенного на оси вытянутого сфероида (266). 3. Собственные колебания типа «прыгающего мячика» внутри сплюснутого сфероида (269).	
§ 2. Применения сфероидальных функций, связанные с интегральными уравнениями . . . . .	271
1. Принцип неопределенности в оптике и радиотехнике (271). 2. Восстановление структуры объекта по изображению (275). 3. Задача синтеза линейной антенны (278). 4. Собственные колебания конфокального открытого резонатора (283).	
Библиографические указания . . . . .	286
§ 3. Рассеяние на потенциалах, допускающих разделение переменных в сфероидальных координатах . . . . .	287
Библиографические указания . . . . .	293
§ 4. Применение решений задачи двух центров в задаче трех тел, взаимодействующих по закону Кулона . . . . .	294
Библиографические указания . . . . .	299
Литература . . . . .	301

## ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРА

Сфероидальные функции обязаны своим появлением в математической физике разделению переменных в уравнении Гельмгольца в координатах вытянутого и сплюснутого сфероидов. До последнего времени основной областью применения сфероидальных функций были задачи дифракции на вытянутом и сплюснутом сфероидах, тесно связанные с разделением переменных. Вторую жизнь обрели сфероидальные функции, когда была подробно проанализирована их связь с преобразованием Фурье в конечных пределах и установлено свойство двойной ортогональности вытянутых радиальных сфероидальных функций. Именно благодаря этим свойствам сфероидальные функции стали широко использоваться в таких далеких от задач дифракции на сфероидах областях, как теория синтеза антенн и теория изображений.

Родственные сфероидальным функциям кулоновские сфероидальные функции возникают при решении квантовомеханической задачи о движении заряженной частицы в поле двух кулоновских центров. Простейшей задачей такого рода является задача о ионе водорода  $H_2^+$ .

Исследование сфероидальных функций значительно сложнее исследования таких широко распространенных специальных функций, как функции Бесселя или функции Лежандра. Основная причина этого — отсутствие у сфероидальных функций достаточно простых интегральных представлений. Метод Лапласа, применяемый при решении дифференциальных уравнений второго порядка, обычно дает удобные для исследования интегральные представления специальных функций. В случае сфероидальных функций метод Лапласа приводит к интегральному уравнению. Но именно это интегральное уравне-

ние, заменяющее собою интегральное представление сфероидальных функций и тем самым значительно упрощающее их исследование, замечательно тем, что оно устанавливает связь сфероидальных функций с преобразованием Фурье в конечных пределах.

Полное изложение многочисленных свойств сфероидальных и кулоновских сфероидальных функций и их приложений потребовало бы объема значительно большего, чем объем настоящей книги. Авторы не ставили перед собой задачи написать монографию энциклопедического характера, подобную «Теории бесселевых функций» Г. И. Ватсона или «Теории сферических и эллипсоидальных функций» Е. В. Гобсона. Книга трех авторов содержит лишь основные сведения по теории сфероидальных и кулоновских сфероидальных функций. В ней изучаются только такие сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции, которые являются собственными функциями краевых задач штурм-лиувиллевского типа и зависят от двух целочисленных индексов. Краевые условия, которым удовлетворяют угловые сфероидальные функции, естественным образом возникают из условий периодичности и условий ограниченности решений в особых точках уравнения. Радиальные функции, как правило, задаются своей асимптотикой на бесконечности. При этом следует отметить, что треть книги посвящена приложениям сфероидальных и кулоновских сфероидальных функций к различным задачам квантовой механики и математической физики.

В первой главе книги рассматриваются основные свойства сфероидальных функций, зависящих от двух целых индексов. Здесь излагаются общие свойства сфероидальных функций, интегральные уравнения и интегральные соотношения для сфероидальных функций, строятся разложения сфероидальных функций в ряды по более простым функциям. Много внимания уделено различным асимптотическим представлениям сфероидальных функций. В этой своей части глава содержит новые результаты, публиковавшиеся ранее лишь в периодической литературе. Асимптотика сфероидальных функций при больших значениях параметра разделения строится двух видов: равномерная и локальная. При получении равномерной асимптотики, пригодной на всем промежутке изменения независимого переменного, используется метод эталонного уравнения. Локальная асимптотика

строится в окрестностях особых точек уравнения и точек поворота, и затем полученные выражения сшиваются с обычной ВКБ-асимптотикой или друг с другом. Метод эталонного уравнения и техника сшивания локальных асимптотик — эти общие приемы построения асимптотических разложений решений дифференциальных уравнений — получают на страницах книги дальнейшее развитие.

Во второй главе суммируются результаты, полученные в настоящее время в теории кулоновских сфероидальных функций и в квантовомеханической задаче двух центров. Авторы проделали большой труд по сведению воедино многочисленных публикаций, связанных с задачей двух центров, и приданию всему изложению логической стройности и последовательности.

Задача двух центров — одна из нестареющих задач квантовой механики. Впервые эта задача была поставлена в двадцатые годы как задача об уровнях энергии молекулярного иона водорода. Тогда же были введены угловые и радиальные кулоновские сфероидальные функции, играющие при решении задачи двух центров ту же роль, что и сферические функции и функции Лагерра в задаче о движении электрона в кулоновском поле точечного заряда. Однако большого прогресса в решении задачи двух центров в предвоенные годы достигнуто не было главным образом из-за ограниченности вычислительных возможностей того времени. Возрождение интереса к задаче двух центров в последнее двадцатилетие объясняется не только появлением ЭВМ и теми успехами, которые к этому времени были достигнуты в асимптотических методах решения обыкновенных дифференциальных уравнений, но и потребностями квантовой химии и мезоатомной физики. Новые результаты были получены как в самой задаче о молекулярном ионе водорода, так и в задаче двух центров с различными зарядами.

Задача двух центров была предметом исследований всех авторов книги, и именно эта задача соединила их в авторский коллектив. Интересы авторов удачно дополняют друг друга. Это позволило дать изложение задачи двух центров во второй главе книги с трех взаимно дополняющих точек зрения: непосредственно квантовомеханической, математической и вычислительной. В этом отношении наиболее характерным является



вопрос о квазипересечении термов в задаче двух центров, вопрос, который в одинаковой степени интересен и для физика-теоретика и для математика.

Третья глава книги вводит читателя в широкий круг вопросов современной физики, в которых используются сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции.

В первую очередь это задачи дифракции скалярных и электромагнитных волн на вытянутом и сплюснутом сфероиде вращения. В книге ставится соответствующая задача дифракции, в осесимметричном случае выписывается в виде рядов по сфероидальным функциям ее решение и приводится обзор литературы. Полезно обратить внимание читателя, особенно молодого, что, несмотря на большое число работ по исследованию точного решения, еще не все закономерности поведения волнового поля установлены. В частности, остается не изученной коротковолновая асимптотика волнового поля, рассеянного сплюснутым сфероидом, толщина которого соизмерима с длиной волны. Такая асимптотика позволила бы проследить очень важный в практическом отношении и не менее интересный с теоретической точки зрения процесс формирования краевой волны, которая возникает при сжатии сфероида и хорошо известна в предельном случае дифракции на диске.

В этой главе описывается также применение сфероидальных функций в задачах на собственные колебания открытых резонаторов, которые являются неотъемлемой частью лазеров, получающих все более и более широкое распространение.

Примеры использования сфероидальных функций в радиотехнике и оптике дают разобранные в третьей главе книги задачи о связи между длительностью сигнала и шириной его спектра, о восстановлении структуры объекта по его изображению и о синтезе линейных антенн. Помимо постановок соответствующих задач, здесь описываются основные идеи их решения и приводятся наиболее важные формулы.

Применению кулоновских сфероидальных функций посвящены два последних параграфа главы. В одном из них разбирается квантовомеханическая задача о рассеянии частицы на сферически несимметричном потенциале, допускающем разделение переменных в сфероидальных координатах. В другом — обсуждаются примеры использования разложения по кулоновским сфе-

сфероидальным функциям в задаче трех тел, взаимодействующих по закону Кулона.

Книга содержит многочисленные таблицы. Это и таблицы коэффициентов различных асимптотических рядов для сфероидальных и кулоновских сфероидальных функций, и таблицы термов в задаче двух центров и ряд других таблиц. Особенно полезной для читателя является таблица, в которой приводятся обозначения сфероидальных функций, встречающиеся у различных авторов, и указывается их связь с обозначениями, примененными в книге.

Книга И. В. Комарова, Л. И. Пономарева, С. Ю. Славянова — первая монография в отечественной литературе, посвященная сфероидальным функциям, и первая монография в мировой литературе, в которой последовательно излагаются свойства кулоновских сфероидальных функций и их применение в задаче двух центров. Она, несомненно, будет полезной как для физиков-теоретиков, занимающихся задачами квантовой механики и квантовой химии, так и для специалистов по прикладной математике, работающих в области теории распространения и дифракции волн, теории синтеза антенн оптического изображения и т. д.

*В. С. Булдырев*

## ПРЕДИСЛОВИЕ

Сфероидальные и родственные им кулоновские сфероидальные функции — важный класс специальных функций математической физики. Они находят широкое применение в задачах радиофизики (дифракция электромагнитных волн, теория антенн и резонаторов и т. д.), в оптике (теория шумов в оптических системах, принцип неопределенности в оптике и радиотехнике), в квантовой механике (задача двух центров, задача трех тел, рассеяние на молекулах и т. д.).

По сравнению с «классическими» специальными функциями сфероидальные функции обладают рядом особенностей, которые до последнего времени затрудняли их подробное исследование.

Специальные функции вводятся как решения уравнений математической физики в различных системах криволинейных координат. Например, функции Бесселя  $J_l(kx)$  и сферические функции Бесселя  $j_l(kx)$  являются радиальными частями решений уравнения Гельмгольца

$$(\Delta + k^2)u = 0 \quad (1)$$

в цилиндрической и сферической системах координат соответственно; сферические функции  $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$  определяются как угловая часть решений уравнения (1) в сферической системе координат и т. д.

С точки зрения теории групп все эти специальные функции являются матричными элементами операторов неприводимых представлений группы движений трехмерного пространства, а их различия обусловлены разным выбором параметров в группе, соответствующих различным разложениям группы движений пространства на однопараметрические подгруппы.

Сфероидальные функции вводятся как решения уравнения (1) в сфероидальных координатах. Однако в

сфероидальной системе координат нельзя осуществить разложение группы движений трехмерного пространства на однопараметрические подгруппы. Как следствие этого факта «радиальная» и «угловая» части решений уравнения (1) оказываются существенно связанными между собой не только через константу разделения, но и через энергетический параметр  $k$ . Поэтому для сфероидальных функций отсутствуют рекуррентные соотношения, представления через производящую функцию и другие свойства, характерные для классических специальных функций. Отмеченные особенности затрудняют их изучение и применение.

Существенным препятствием для широкого практического применения сфероидальных функций долгое время являлась необходимость составления для них обширных таблиц. Однако при современном состоянии вычислительной математики и развитии быстродействующих ЭВМ такая необходимость отпала, поскольку эффективные алгоритмы позволяют вычислять их по мере надобности, не обращаясь к громоздким таблицам.

Классические монографии по сфероидальным функциям (Meixner и Schäfer, 1954, Фламмер, 1962) стали в настоящее время библиографической редкостью. С другой стороны, в последние годы появилось много работ, в которых развиваются теория и методы вычисления сфероидальных и родственных им функций, причем значительное число работ опубликовано в малодоступных изданиях. Кроме того, эти работы не отличаются единством подхода, поскольку методы, в них развитые, большей частью приспособлены для решения конкретных физических задач.

Предлагаемая монография ставит своей целью с единой точки зрения изложить основные результаты, достигнутые к настоящему времени в теории и практике сфероидальных и родственных им кулоновских сфероидальных функций. Она задумана как краткое справочное издание, поэтому в ней относительно мало внимания уделяется строгим математическим доказательствам. Основная часть книги посвящена задачам Штурма — Лиувилля; почти все вопросы, связанные с сингулярными решениями рассматриваемых уравнений, опущены. В книге также не рассматривается теория функций Матье, которые хотя и являются частным случаем сфероидальных функций, однако обладают рядом специфических

свойств, благодаря которым они давно стали предметом специальных исследований.

В данной монографии впервые последовательно определяются кулоновские сфероидальные функции как решения квантовомеханической задачи о движении частицы в поле двух кулоновских центров, удаленных на расстояние  $R$ , в сфероидальной системе координат (по аналогии с кулоновскими функциями, которые определяются как решения радиальной части уравнения Шредингера для атома водорода в сферической системе координат). В книге подробно изложены различные алгоритмы их вычисления — вплоть до деталей их практической реализации на ЭВМ.

Аналогичные алгоритмы для вычисления сфероидальных функций хорошо известны, и мы на них останавливаемся менее подробно, зато в части, посвященной сфероидальным функциям, больше внимания уделено различным аналитическим результатам (интегральные представления, свойства двойной ортогональности, функции Грина, обобщенные сфероидальные функции и т. д.). Много места в книге уделено асимптотическим разложениям сфероидальных и кулоновских сфероидальных функций и соответствующих им собственных значений при малых и больших значениях параметров и индексов.

В книгу включен также краткий обзор физических приложений сфероидальных и кулоновских сфероидальных функций (дифракция на диске и сфероидах, теория резонаторов, квантовомеханическая задача трех тел и т. д.), который демонстрирует преимущества их использования в тех случаях, когда они соответствуют симметрии решаемой задачи. Значительное место уделено задаче двух центров квантовой механики, поскольку относящиеся к ней результаты являются в значительной мере новыми и практически нигде не систематизированы с достаточной полнотой.

Книга снабжена таблицами и графиками, которые, с одной стороны, дают качественное представление об изучаемых функциях, а с другой стороны, могут служить для контроля вычислений при практической реализации алгоритмов.

Изложение отдельных вопросов завершается обзором литературы, в котором кратко прослежена последовательность получения приведенных результатов и даны ссылки на определяющие работы. Авторы не ставили

своей целью дать исчерпывающий обзор всех достигнутых результатов в данной области исследований. Упор сделан на краткое и последовательное изложение проверенных методов и работающих алгоритмов. Вместе с тем литературу по затронутым вопросам авторы стремились представить с максимальной полнотой даже в том случае, если результаты цитируемых работ не нашли отражения в основном тексте. Этой же цели служит принятая система ссылок, при которой наряду с координатами статьи приводится ее полное название на языке оригинала. Ссылки на монографии иностранных авторов, переведенные на русский язык, приводятся по русскому изданию.

Разработка общего плана книги и обсуждение отдельных глав осуществлялись совместными усилиями всех авторов, и они в равной мере несут ответственность за возможные недочеты и ошибки. Основная работа по подготовке отдельных частей книги распределялась следующим образом: И. В. Комаров написал §§ 1, 2 введения и п. 4 § 2, §§ 4, 5, 7, 8 главы II, § 3 главы III; Л. И. Пономарев написал § 6 главы I, §§ 1—3, 6 главы II и § 4 главы III; С. Ю. Славянов написал § 3 введения, §§ 1—5, 7 главы I и §§ 1, 2 главы III.

Авторы искренне признательны Д. И. Абрамову, В. М. Бабичу, Ю. Н. Демкову за обсуждения различных разделов книги и Т. П. Пузыниной за проведение большого количества вычислений на ЭВМ.

*И. В. Комаров  
Л. И. Пономарев  
С. Ю. Славянов*

## ВВЕДЕНИЕ

### § 1. Сфероидальные системы координат

Сфероидальные координаты представляют собой вращательно-симметричные координаты и могут быть получены вращением вокруг осей симметрии плоской эллиптической системы координат, состоящей из взаимно ортогональных софокусных эллипсов и гипербол. Существует два вида сфероидальных координат. При вращении вокруг большой оси эллипсов возникают вытянутые сфероидальные координаты; координатными поверхностями служат здесь софокусные вытянутые эллипсоиды вращения и двуполостные гиперболоиды. При вращении вокруг малой оси эллипсов получаются сплюснутые сфероидальные координаты; координатными поверхностями в этом случае оказываются софокусные сплюснутые эллипсоиды вращения и однополостные гиперболоиды. В первом случае фокусы плоской эллиптической системы координат при вращении остаются на месте, во втором случае каждый из фокусов описывает окружность, лежащую в плоскости, перпендикулярной оси вращения. Обозначим фокусное расстояние в эллиптической системе координат  $d$  и будем считать ось  $z$  осью вращения.

Вытянутые сфероидальные координаты  $\xi, \eta, \varphi$  (рис. 1) связаны с прямоугольными координатами точки  $x, y, z$  следующими формулами:

$$\begin{aligned}x &= \frac{d}{2} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \cos \varphi = \rho \cos \varphi, \\y &= \frac{d}{2} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2} \sin \varphi = \rho \sin \varphi, \\z &= \frac{d}{2} \xi \eta, \\ \xi &\in [1, \infty), \quad \eta \in [-1, 1], \quad \varphi \in [0, 2\pi).\end{aligned}\tag{1.1}$$

Аналогичная связь вытянутых сфероидальных координат со сферическими координатами  $r$ ,  $\theta$ ,  $\varphi$  имеет вид

$$r = \frac{d}{2} (\xi^2 + \eta^2 - 1)^{1/2}, \quad \cos \theta = \frac{\xi \eta}{(\xi^2 + \eta^2 - 1)^{1/2}}, \quad \varphi = \varphi. \quad (1.2)$$

Параболические координаты вращения  $\xi$ ,  $\tau$ ,  $\varphi$ , которые задаются формулами

$$x = (\zeta \tau)^{1/2} \cos \varphi, \quad y = (\zeta \tau)^{1/2} \sin \varphi, \quad z = \frac{1}{2} \zeta \tau, \quad (1.3)$$

также могут быть выражены с помощью вытянутых

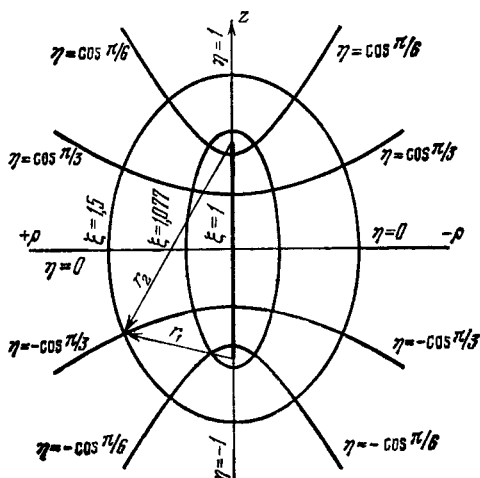


Рис. 1. Вытянутые сфероидальные координаты, определяемые формулами (1.1). Сечение плоскостью  $\varphi = \text{const}$ .

сфероидальных координат. Совмещая полюс параболической системы координат с левым фокусом сфероидальной, получаем

$$\xi_- = \frac{d}{2} (\xi + 1)(1 + \eta), \quad \tau_- = \frac{d}{2} (\xi - 1)(1 - \eta), \quad \varphi = \varphi. \quad (1.4a)$$

Совмещение полюса параболической системы координат с правым фокусом сфероидальной дает

$$\xi_+ = \frac{d}{2} (\xi - 1)(1 + \eta), \quad \tau_+ = \frac{d}{2} (\xi + 1)(1 - \eta), \quad \varphi = \varphi. \quad (1.4b)$$



Для наглядности удобно связать вытянутые сфероидальные координаты с расстояниями  $r_1$  и  $r_2$  от точки  $x, y, z$  до фокусов, лежащих на оси  $z$ ; имеем

$$\begin{aligned} r_1 &= \left[ x^2 + y^2 + \left( z + \frac{d}{2} \right)^2 \right]^{1/2}, \\ r_2 &= \left[ x^2 + y^2 + \left( z - \frac{d}{2} \right)^2 \right]^{1/2}, \\ \xi &= \frac{r_1 + r_2}{d}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{d}. \end{aligned} \quad (1.5)$$

Часто вместо  $\xi, \eta$  вводят переменные  $u, v$  с помощью тригонометрической подстановки

$$\xi = \operatorname{ch} u, \quad u \in [0, \infty), \quad \eta = \cos v, \quad v \in [0, \pi]. \quad (1.6)$$

Важной характеристикой криволинейной системы координат являются метрические коэффициенты  $h_\xi, h_\eta, h_\varphi$  (коэффициенты Ламе), определяемые следующим образом:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 = h_\xi^2 d\xi^2 + h_\eta^2 d\eta^2 + h_\varphi^2 d\varphi^2 \quad (1.7)$$

( $ds$  — элемент длины).

Для вытянутых сфероидальных координат эти коэффициенты равны

$$\begin{aligned} h_\xi &= \frac{d}{2} \left( \frac{\xi^2 - \eta^2}{\xi^2 - 1} \right)^{1/2}, \quad h_\eta = \frac{d}{2} \left( \frac{\xi^2 - \eta^2}{1 - \eta^2} \right)^{1/2}, \\ h_\varphi &= \frac{d}{2} [(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}. \end{aligned} \quad (1.8)$$

Элемент объема, вычисленный с помощью метрических коэффициентов, имеет вид

$$dV = \frac{d^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi. \quad (1.9)$$

В пределе при  $d \rightarrow 0, \xi \rightarrow \infty$  так, что  $r = d\xi/2$  остается конечным, получаем сферические координаты  $r, \vartheta = v, \varphi$ .

В пределе при  $d \rightarrow \infty, \xi \rightarrow 1, \eta \rightarrow \pm 1$  так, что

$$\rho = \frac{d}{2} (\xi^2 - 1)^{1/2} = \frac{d}{2} \operatorname{sh} u, \quad z = \frac{d\eta}{2}$$

остаются конечными, получаем круговые цилиндрические координаты  $\rho, \varphi, z$ .

В пределе  $d \rightarrow \infty, \xi \rightarrow 1, \eta \rightarrow -1$  так, что  $(\xi - 1)d = 2\tau_+, (1 + \eta)d = 2\xi_-$  остаются конечными, получаем параболические координаты вращения  $\xi_-, \tau_-, \varphi_-$ ,

полюс которых находится на оси  $z$  в точке  $z = -d/2$ . В пределе  $d \rightarrow \infty$ ,  $\xi \rightarrow 1$ ,  $\eta \rightarrow +1$  так, что  $(\xi - 1)d = 2\xi_+$ ,  $(1 - \eta)d = 2\tau_+$  остаются конечными, получаем параболические координаты вращения  $\xi_+$ ,  $\tau_+$ ,  $\varphi_+$ , полюс которых находится на оси  $z$  в точке  $z = +d/2$ . Отметим, что замена  $\xi \leftrightarrow \tau$  в параболических координатах эквивалентна изменению направления оси  $z$ .

Сплюснутые сфероидальные координаты связаны с прямоугольными координатами формулами

$$\begin{aligned} x &= \frac{d}{2} [(1 + \xi^2)(1 - \eta^2)]^{1/2} \cos \varphi = \rho \cos \varphi, \\ y &= \frac{d}{2} [(1 + \xi^2)(1 - \eta^2)]^{1/2} \sin \varphi = \rho \sin \varphi, \\ z &= \frac{d}{2} \xi \eta, \end{aligned} \quad (1.10)$$

где область изменения  $\xi$ ,  $\eta$  можно выбрать двумя альтернативными способами:

случай А

$$\xi \in [0, \infty), \eta \in [-1, 1], \varphi \in [0, 2\pi); \quad (1.11a)$$

случай Б

$$\xi \in (-\infty, \infty), \eta \in [0, 1], \varphi \in [0, 2\pi). \quad (1.11b)$$

Формы координатных поверхностей в обоих случаях совпадают, меняются лишь уравнения, определяющие координатные поверхности (рис. 2, а, б).

Для наглядности полезно связать сплюснутые сфероидальные координаты с наибольшим  $s_1$  и наименьшим  $s_2$  расстояниями от точки  $x, y, z$  до окружности радиуса  $d/2$  с центром в начале координат, лежащей в плоскости  $xy$ . Обозначив

$$\begin{aligned} \rho &= (x^2 + y^2)^{1/2}, \\ s_1 &= \left[ z^2 + \left( \rho + \frac{d}{2} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad s_2 = \left[ z^2 + \left( \rho - \frac{d}{2} \right)^2 \right]^{1/2} \end{aligned}$$

и введя переменные  $u, v'$  с помощью тригонометрических подстановок

$$\operatorname{ch} u = \frac{s_1 + s_2}{d}, \quad u \in [0, \infty); \quad \sin v' = \frac{s_1 - s_2}{d}, \quad v' \in \left[ 0, \frac{\pi}{2} \right], \quad (1.12)$$

имеем в случае А

$$\xi = \operatorname{ch} u, \quad \eta = \cos v' \operatorname{sgn} z, \quad (1.13a)$$

в случае Б

$$\xi = \text{sh } u \text{ sgn } z, \quad \eta = \cos v'. \quad (1.136)$$

Здесь  $\text{sgn } z = 1$  при  $z > 0$  и  $\text{sgn } z = -1$  при  $z < 0$ .

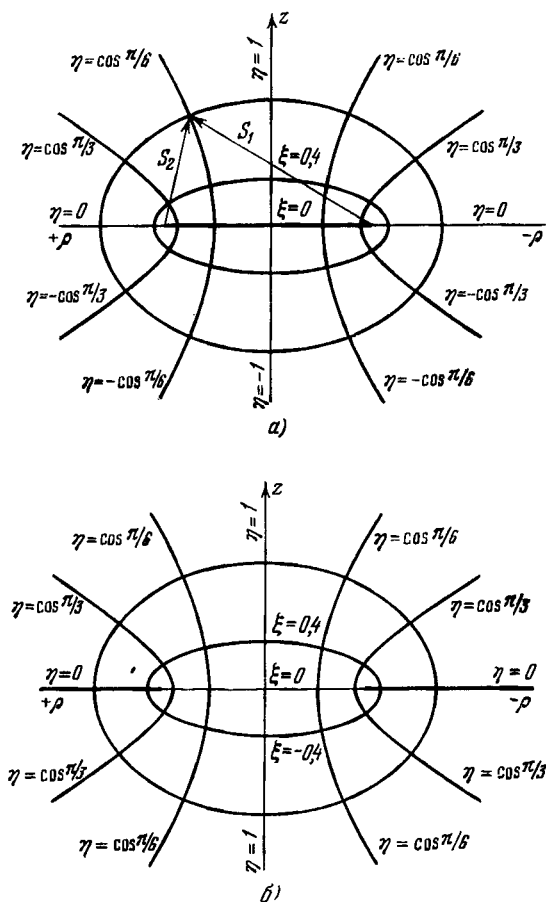


Рис. 2. Сплюснутые сферондальные координаты, определяемые: а) формулами (1.10) и (1.11а), б) формулами (1.10), (1.11б). Сечение плоскостью  $\varphi = \text{const}$ .

В случае А можно ввести новую переменную  $v$  так, что

$$\eta = \cos v = \cos v' \text{ sgn } z, \quad v \in [0, \pi], \quad (1.14)$$

т. е. однозначно связать тригонометрическими подста-

повками вещественную пару  $\xi, \eta$  с вещественной парой  $u, v$ . В случае Б аналогичного преобразования нет, поскольку гиперболические функции от вещественного аргумента всегда положительны. По этой причине в данной книге мы пользуемся системой А.

Сплюснутые сфероидальные координаты связаны со сферическими следующими формулами:

$$r = \frac{d}{2} (\xi^2 - \eta^2 + 1)^{1/2}, \quad \cos \vartheta = \frac{\xi \eta}{(\xi^2 - \eta^2 + 1)^{1/2}}, \quad \varphi = \varphi. \quad (1.15)$$

Метрические коэффициенты для сплюснутых сфероидальных координат равны

$$h_\xi = \frac{d}{2} \left( \frac{\xi^2 + \eta^2}{\xi^2 + 1} \right)^{1/2}, \quad h_\eta = \frac{d}{2} \left( \frac{\xi^2 + \eta^2}{1 - \eta^2} \right)^{1/2}, \\ h_\varphi = \frac{d}{2} [(\xi^2 + 1)(1 - \eta^2)]^{1/2}, \quad (1.16)$$

а вычисленный с их помощью элемент объема имеет вид

$$dV = \frac{d^3}{8} (\xi^2 + \eta^2) d\xi d\eta d\varphi. \quad (1.17)$$

В пределе при  $d \rightarrow 0$ ,  $\xi \rightarrow \infty$ , так что  $r = \frac{d}{2} (\xi^2 + 1)^{1/2} = \frac{d}{2} \operatorname{ch} u$  остается конечным, получаем сферическую систему координат  $r, \vartheta = v, \varphi$ .

В пределе при  $d \rightarrow \infty$ ,  $\xi \rightarrow 0$ ,  $\eta \rightarrow \pm 1$  так, что  $\rho = \frac{d}{2} (1 - \eta^2)^{1/2} = \frac{d}{2} \sin v$ ,  $z = \frac{d}{2} \xi \eta$  остаются конечными, получаем круговые цилиндрические координаты  $\rho, \varphi, z$ , причем  $\eta = +1$  соответствует положительной полуоси  $z$ , а  $\eta = -1$  — отрицательной.

## § 2. Разделение переменных в уравнениях Гельмгольца и Шредингера в сфероидальных координатах

Оператор Лапласа с помощью коэффициентов Ламе (1.8), (1.16) выражается следующим образом в вытянутых сфероидальных координатах:

$$\Delta = \frac{4}{d^2 (\xi^2 - \eta^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\xi^2 - \eta^2}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\} \quad (2.1)$$

и в сплюснутых сфероидальных координатах:

$$\Delta = \frac{4}{d^2(\xi^2 + \eta^2)} \left\{ \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 + 1) \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} + \frac{\xi^2 + \eta^2}{(\xi^2 + 1)(1 - \eta^2)} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right\}. \quad (2.2)$$

Уравнение Гельмгольца

$$(\Delta + k^2) \Psi = 0, \quad (2.3)$$

где  $k$  — волновое число, допускает разделение переменных в обеих сфероидальных системах координат. Полагая

$$\Psi = R(\xi) S(\eta) e^{\pm im\varphi}, \quad m = 0, 1, 2, \dots, \quad (2.4)$$

получаем для функций  $R(\xi)$ ,  $S(\eta)$  обыкновенные дифференциальные уравнения. В вытянутых сфероидальных координатах

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} R + \left[ -\lambda + c^2 (\xi^2 - 1) - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] R = 0, \quad (2.5)$$

$$\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S + \left[ \lambda + c^2 (1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] S = 0, \quad (2.6)$$

где  $\lambda$  — константа разделения,  $c = kd/2$ . В сплюснутых сфероидальных координатах функции  $R$  и  $S$  удовлетворяют уравнениям

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 + 1) \frac{d}{d\xi} R + \left[ -\lambda + p^2 (\xi^2 + 1) + \frac{m^2}{\xi^2 + 1} \right] R = 0, \quad (2.7)$$

$$\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} S + \left[ \lambda - p^2 (1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] S = 0, \quad (2.8)$$

где  $p = kd/2$ . Собственные функции задач Штурма — Лиувилля, связанных с уравнениями (2.5) — (2.8), составляют предмет главы I.

В сфероидальных координатах уравнения Шредингера

$$\Delta \Psi + 2(E - V) \Psi = 0 \quad (2.9)$$

( $E$  — энергия) можно решать методом разделения переменных только при специальном выборе формы потенциала. Потенциалы, допускающие разделение переменных

ных в вытянутых сфероидальных координатах, имеют вид

$$V = -\frac{2}{d^2} \left\{ \frac{a(\xi) + b(\eta)}{\xi^2 - \eta^2} + \frac{c(\varphi)}{(\xi^2 - 1)(1 - \eta^2)} \right\}. \quad (2.10)$$

Аналогично потенциалы, допускающие разделение переменных в сплюснутых сфероидальных координатах, должны представляться в форме

$$V = -\frac{2}{d^2} \left\{ \frac{a(\xi) - b(\eta)}{\xi^2 + \eta^2} + \frac{c(\varphi)}{(\xi^2 + 1)(1 - \eta^2)} \right\}. \quad (2.11)$$

Полагая

$$\Psi = X(\xi) Y(\eta) Z(\varphi), \quad (2.12)$$

приходим к обыкновенным дифференциальным уравнениям для функций  $X(\xi)$ ,  $Y(\eta)$ ,  $Z(\varphi)$  в вытянутых сфероидальных координатах:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} X + \\ + \left[ -\lambda + \frac{Ed^2}{2} (\xi^2 - 1) + a(\xi) - \frac{\mu}{\xi^2 - 1} \right] X = 0, \end{aligned} \quad (2.13)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} Y + \\ + \left[ \lambda + \frac{Ed^2}{2} (1 - \eta^2) + b(\eta) - \frac{\mu}{1 - \eta^2} \right] Y = 0, \end{aligned} \quad (2.14)$$

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} Z + [\mu - c(\varphi)] Z = 0, \quad (2.15)$$

и в сплюснутых сфероидальных координатах:

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} (\xi^2 + 1) \frac{d}{d\xi} X + \\ + \left[ -\lambda + \frac{Ed^2}{2} (\xi^2 + 1) + a(\xi) + \frac{\mu}{\xi^2 + 1} \right] X = 0, \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} Y + \\ + \left[ \lambda - \frac{Ed^2}{2} (1 - \eta^2) + b(\eta) - \frac{\mu}{1 - \eta^2} \right] Y = 0, \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\frac{d^2}{d\varphi^2} Z + [\mu - c(\varphi)] Z = 0. \quad (2.18)$$

В уравнениях (2.13)—(2.18)  $\lambda$  и  $\mu$  — константы разделения. В отличие от сферически симметричных задач, энергия  $E$  входит не только в радиальные уравнения (2.13), (2.16), но и в угловые уравнения (2.14), (2.17), так что соответствующие задачи Штурма — Лиувилля со спектральными параметрами  $\lambda$  и  $E$  приходится решать совместно.

Примером потенциала, допускающего разделение переменных в обеих сфероидальных системах координат, является потенциал изотропного гармонического осциллятора

$$V_0 = \frac{1}{2} \omega^2 r^2. \quad (2.19)$$

В вытянутых сфероидальных координатах

$$a_0(\xi) = -\frac{\omega^2 d^4}{16} \xi^2 (\xi^2 - 1), \quad (2.20)$$

$$b_0(\eta) = -\frac{\omega^2 d^4}{16} \eta^2 (1 - \eta^2), \quad (2.21)$$

в сплюснутых сфероидальных координатах

$$a_0(\xi) = -\frac{\omega^2 d^4}{16} \xi^2 (\xi^2 + 1), \quad (2.22)$$

$$b_0(\eta) = \frac{\omega^2 d^4}{16} \eta^2 (1 - \eta^2), \quad (2.23)$$

причем азимутальная функция в обоих случаях одинакова:

$$Z(\varphi) = (2\pi)^{-1/2} \exp(\pm im\varphi), \quad (2.24)$$

$$\mu = m^2, \quad m = 0, 1, 2, \dots \quad (2.25)$$

Важный пример разделения переменных в вытянутых сфероидальных координатах дает задача о движении электрона в поле двух неподвижных центров с зарядами  $Z_1$  и  $Z_2$ . Потенциал таких двух кулоновских центров

$$V = -\frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \quad (2.26)$$

(здесь  $r_1$  и  $r_2$  — расстояния, отсчитанные от левого и правого фокусов соответственно) может быть представлен в форме (2.10).

Подставляя в уравнение Шредингера волновую функцию в виде произведения

$$\Psi = \Pi(\xi) \Xi(\eta) e^{\pm im\varphi}, \quad m=0, 1, 2, \dots, \quad (2.27)$$

приходим к следующим обыкновенным дифференциальным уравнениям:

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \Pi + \left[ -\lambda - p^2 (\xi^2 - 1) + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] \Pi = 0, \quad (2.28)$$

$$\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} \Xi + \left[ \lambda - p^2 (1 - \eta^2) + b\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] \Xi = 0, \quad (2.29)$$

где обозначено

$$a = (Z_2 + Z_1)d, \quad b = (Z_2 - Z_1)d, \quad (2.30)$$

$$p^2 = -Ed^2/2, \quad E < 0. \quad (2.31)$$

Обозначение (2.31) удобно при отрицательной энергии. Если энергия положительна, вместо  $p$  вводится параметр  $c \rightarrow ip$ , так что

$$c^2 = Ed^2/2, \quad E > 0. \quad (2.32)$$

Когда частица движется достаточно далеко от кулоновских центров, можно разложить потенциал в ряд по мультиполям

$$V_{(r/d) \rightarrow \infty} = -\frac{Z_2 + Z_1}{r} + \frac{(Z_2 - Z_1)d}{2r^2} \cos \widehat{rd} + \dots$$

Отсюда следует, что параметр  $b$  — удвоенный дипольный момент потенциала двух кулоновских центров. Собственные функции задач Штурма — Лиувилля, связанных с уравнениями (2.28), (2.29), подробно изучаются в главе II.

### § 3. Разделение переменных в уравнениях Максвелла в сфероидальных координатах

Уравнения Максвелла для компонент электромагнитного поля с выделенной зависимостью от времени  $e^{i\omega t}$  и при отсутствии источников записываются в виде

$$\text{rot } \mathbf{E} = -ik\mathbf{H}, \quad \text{rot } \mathbf{H} = ik\mathbf{E}, \quad (3.1)$$



где  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  — напряженности электрического и магнитного полей,  $k$  — волновое число. Используя выражение для операции  $\text{rot}$  в произвольной ортогональной системе координат  $\xi, \eta, \varphi$ :

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{A} = & \frac{1}{h_\eta h_\varphi} \left[ \frac{\partial}{\partial \eta} h_\varphi A_\varphi - \frac{\partial}{\partial \varphi} h_\eta A_\eta \right] \mathbf{e}_\xi + \\ & + \frac{1}{h_\varphi h_\xi} \left[ \frac{\partial}{\partial \varphi} h_\xi A_\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} h_\varphi A_\varphi \right] \mathbf{e}_\eta + \\ & + \frac{1}{h_\xi h_\eta} \left[ \frac{\partial}{\partial \xi} h_\eta A_\eta - \frac{\partial}{\partial \eta} h_\xi A_\xi \right] \mathbf{e}_\varphi, \quad (3.2) \end{aligned}$$

где  $h_\xi, h_\eta, h_\varphi$  — метрические коэффициенты системы координат, а  $\mathbf{e}_\xi, \mathbf{e}_\eta, \mathbf{e}_\varphi$  — единичные орты, можно получить следующие уравнения для компонент электромагнитного поля в этих координатах:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \eta} h_\varphi E_\varphi - \frac{\partial}{\partial \varphi} h_\eta E_\eta &= ik h_\eta h_\varphi H_\xi, \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} h_\xi E_\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} h_\varphi E_\varphi &= ik h_\varphi h_\xi H_\eta, \\ \frac{\partial}{\partial \xi} h_\eta E_\eta - \frac{\partial}{\partial \eta} h_\xi E_\xi &= ik h_\xi h_\eta H_\varphi, \\ \frac{\partial}{\partial \eta} h_\varphi H_\varphi - \frac{\partial}{\partial \varphi} h_\eta H_\eta &= - ik h_\eta h_\varphi E_\xi, \\ \frac{\partial}{\partial \varphi} h_\xi H_\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} h_\varphi H_\varphi &= - ik h_\varphi h_\xi E_\eta, \\ \frac{\partial}{\partial \xi} h_\eta H_\eta - \frac{\partial}{\partial \eta} h_\xi H_\xi &= - ik h_\xi h_\eta E_\varphi. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Известно (см., например, Вайнштейн, 1957), что в сферических и обобщенных цилиндрических координатах удается ввести две скалярные функции — потенциалы электромагнитного поля, через которые могут быть вычислены векторы  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  и которые удовлетворяют скалярным уравнениям с разделяющимися переменными.

В более общем случае координат вращения, к которым относятся и сфероидальные, разделение переменных может быть произведено, если компоненты  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{H}$  не зависят от угловой координаты  $\varphi$ . Система (3.3) тогда

принимает вид

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{d\xi} h_{\varphi} H_{\varphi} &= ik h_{\xi} h_{\varphi} E_{\eta}, \\
 \frac{d}{d\eta} h_{\varphi} H_{\varphi} &= -ikh_{\eta} h_{\varphi} E_{\xi}, \\
 \frac{\partial}{\partial \xi} h_{\eta} H_{\eta} - \frac{\partial}{\partial \eta} h_{\xi} H_{\xi} &= -ikh_{\xi} h_{\eta} E_{\varphi}, \\
 \frac{\partial}{\partial \xi} h_{\varphi} E_{\varphi} &= -ikh_{\xi} h_{\varphi} H_{\eta}, \\
 \frac{\partial}{\partial \eta} h_{\varphi} E_{\varphi} &= ikh_{\eta} h_{\varphi} H_{\xi}, \\
 \frac{\partial}{\partial \xi} h_{\eta} E_{\eta} - \frac{\partial}{\partial \eta} h_{\xi} E_{\xi} &= ikh_{\xi} h_{\eta} H_{\varphi}.
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

Разделение переменных может быть выполнено после введения скалярных функций  $P(\xi, \eta)$  и  $Q(\xi, \eta)$ :

$$P = h_{\varphi} E_{\varphi}, \quad Q = h_{\varphi} H_{\varphi}, \tag{3.5}$$

называемых *потенциалами Абрагама*.

Простыми преобразованиями из первого, второго и шестого уравнений системы (3.4) получается уравнение для потенциала  $P(\xi, \eta)$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \frac{h_{\eta}^2}{h_{\xi} h_{\eta} h_{\varphi}} \frac{\partial}{\partial \xi} P + \frac{\partial}{\partial \eta} \frac{h_{\xi}^2}{h_{\xi} h_{\eta} h_{\varphi}} \frac{\partial}{\partial \eta} P + k^2 \frac{h_{\xi} h_{\eta} h_{\varphi}}{h_{\varphi}^2} P = 0. \tag{3.6}$$

Подставив значения метрических коэффициентов в вытянутых сфероидальных координатах (1.5), получим

$$\begin{aligned}
 (\xi^2 - 1) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} P + (1 - \eta^2) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} P + c^2 (\xi^2 - \eta^2) P &= 0, \\
 c &= kd/2.
 \end{aligned} \tag{3.7}$$

В сплюснутых сфероидальных координатах имеем

$$(\xi^2 + 1) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} P + (1 - \eta^2) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} P + p^2 (\xi^2 + \eta^2) P = 0. \tag{3.8}$$

Для второго потенциала  $Q(\xi, \eta)$  из третьего, четвертого и пятого уравнений системы (3.4) получаются уравнения точно такие же, как (3.7) и (3.8).

В уравнениях (3.7) и (3.8) переменные разделяются. Представим потенциал  $P(\xi, \eta)$  в виде  $P(\xi, \eta) =$

$= U(\xi) V(\eta)$ . Тогда из (3.7) получим систему уравнений

$$\begin{aligned} (1 - \eta^2) \frac{d^2}{d\eta^2} V + [\lambda + c^2(1 - \eta^2)] V &= 0, \\ (\xi^2 - 1) \frac{d^2}{d\xi^2} U + [-\lambda + c^2(\xi^2 - 1)] U &= 0, \end{aligned} \quad (3.9)$$

где  $\lambda$  — константа разделения. В гл. I, § 1 показано, что решения уравнений (3.9) сводятся к решениям общего сфероидального уравнения (1.1) с индексом  $m=1$  (см. (1.5)). Разделение переменных в случае уравнения (3.8) производится аналогично.

Можно было не вводить потенциалов  $P$  и  $Q$ , а получить уравнения непосредственно для компонент поля  $E_\varphi$  и  $H_\varphi$ . Они имеют несколько более сложный вид, чем уравнения (3.7) и (3.8).

При наличии сторонних токов задача разделения переменных становится более сложной. Приведем лишь один пример, когда на оси вращения в точке  $\xi = \xi_0$ ,  $\eta = 1$  находится направленный по оси вращения электрический диполь, дипольный момент которого равен  $D$ . Соответствующая неоднородная система уравнений Максвелла, рассматриваемая, например, в сплюснутых сфероидальных координатах, имеет вид

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -ik\mathbf{H}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= ik\mathbf{E} + \frac{4ik^2 D}{\pi d^3 (\xi^2 + \eta^2)} \delta(\xi - \xi_0) \delta(\eta - 1 + 0), \end{aligned} \quad (3.10)$$

где  $\delta(x-x_0)$  — дельта-функция Дирака. Схема разделения переменных, изложенная выше, приводит к следующему неоднородному уравнению для потенциала Абрагама  $P(\xi, \eta)$ :

$$\begin{aligned} (\xi^2 + 1) \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} P + (1 - \eta^2) \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} P + p^2 (\xi^2 + \eta^2) P &= \\ &= -\frac{ikD}{2\pi d} \delta(\xi - \xi_0) \delta(\eta - 1 + 0). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Переменные в этом уравнении разделяются. Решения разделенных уравнений являются одномерными функциями Грина.

## СФЕРОИДАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ

## § 1. Элементарные свойства сфероидальных функций

1. **Общее уравнение для сфероидальных функций, его преобразования и свойства решений.** Сфероидальные функции вводятся как решения различных краевых задач, порожденных дифференциальным уравнением

$$\frac{d}{dz}(1-z^2) \frac{d}{dz} u(z) + \left[ \lambda + c^2(1-z^2) - \frac{m^2}{1-z^2} \right] u(z) = 0. \quad (1.1)$$

Уравнение (1.1) возникает при разделении переменных в уравнении Гельмгольца в сфероидальных координатах (см. введение).

Изучим сначала некоторые общие свойства решений уравнения (1.1) на комплексной плоскости  $z$ , считая  $\lambda$  и  $c$  комплексными параметрами, а  $m$  целым неотрицательным числом.

Уравнение (1.1) имеет три особые точки, две из которых:  $z = \pm 1$  — регулярные с показателями  $\pm m/2$  и одна:  $z = \infty$  — иррегулярная. В регулярных точках два линейно независимых решения ведут себя следующим образом:

$$\begin{aligned} u(z) &\sim (1-z^2)^{\pm m/2}, & m \neq 0, \\ u_1(z) &\sim \text{const}, \quad u_2(z) \sim \ln(1-z^2), & m = 0. \end{aligned} \quad (1.2)$$

Поскольку при целых положительных  $m$  разность показателей — целое число, решение, отвечающее меньшему показателю, вообще говоря, содержит еще и логарифмическую особенность. Асимптотическое поведение решений при  $z \rightarrow \infty$  в том случае, если  $c \neq 0$ , следующее:

$$u(z) \sim z^{-1} e^{\pm icz}. \quad (1.3)$$

Решения уравнения (1.1) — регулярные функции на

плоскости с разрезом, соединяющим особые точки. Разрез можно провести, например, вдоль луча  $(-\infty, 1)$ . Если в какой-нибудь неособой точке  $z_0$  задать начальные условия  $u(z_0) = a$ ,  $u'(z_0) = b$ , не зависящие от параметров  $c$  и  $\lambda$ , то решение соответствующей задачи Коши — функция  $u_0(z, \lambda, c)$  будет целой функцией переменных  $\lambda$  и  $c$ .

В случае, когда  $m=1$ ,  $\lambda=0$ , решения уравнения (1.1) представляются в элементарной форме

$$u_{1,2}(z) = (1-z^2)^{-1/2} e^{\pm icz}. \quad (1.4)$$

При  $c=0$  уравнение (1.1) совпадает с уравнением для присоединенных функций Лежандра.

Уравнение (1.1), так же как и уравнение для кулоновских сфероидальных функций, которое будет рассматриваться в дальнейшем, является частным предельным случаем общего уравнения Гойна с четырьмя регулярными особыми точками (Бейтмен, Эрдейи, т. 3, 1967), полученным при слиянии двух точек.

Решения (1.1) могут быть разложены в ряды по более простым функциям: степеням  $z$ , функциям Лежандра, функциям Бесселя и т. д. Коэффициенты этих разложений удовлетворяют бесконечным рекуррентным алгебраическим системам уравнений, простейшими из которых являются трехчленные. Укажем также на существование интегральных соотношений между решениями. Ядра этих соотношений приведены в § 2.

Мы не будем здесь более подробно останавливаться на свойствах решений общего вида сфероидального уравнения (1.1), поскольку они редко используются на практике. Детальное изложение этих вопросов можно найти в книге Meixner, Schäfke (1954).

Рассмотрим простейшие преобразования уравнения (1.1), которые будут полезны в дальнейшем. Замена функции

$$u(z) = (1-z^2)^{\nu} v(z)$$

переводит уравнение (1.1) в следующее уравнение для функции  $v(z)$ :

$$(1-z^2)v''(z) - 2(2\nu+1)zv'(z) + \left[ \lambda - 4\nu^2 - 2\nu + c^2(1-z^2) + \frac{4\nu^2 - m^2}{1-z^2} \right] v(z) = 0. \quad (1.5)$$

При  $\nu = -1/2$  получаем уравнение без первой производной

$$(1 - z^2)v''(z) + \left[ \lambda + c^2(1 - z^2) + \frac{1 - m^2}{1 - z^2} \right] v(z) = 0. \quad (1.6)$$

При  $\nu = m/2$  приходим к уравнению, которое принято за основу при исследовании сфероидальных функций в монографии Морса и Фешбаха (1958):

$$(1 - z^2)v''(z) - 2(m + 1)zv'(z) + [\lambda - m^2 - m + c^2(1 - z^2)]v(z) = 0. \quad (1.7)$$

В соответствии с выбором тригонометрических переменных при определении сфероидальной системы координат (см. введение, § 1) часто используются различные тригонометрические и гиперболические замены независимой переменной.

Так, положив  $z = \cos \vartheta$ , получим из (1.5) уравнение  $v''(\vartheta) + (4\nu + 1) \operatorname{ctg} \vartheta v'(\vartheta) +$

$$+ \left[ \lambda - 4\nu^2 - 2\nu + c^2 \sin^2 \vartheta + \frac{4\nu^2 - m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] v(\vartheta) = 0, \quad (1.8)$$

причем условимся, что особые точки  $z = \pm 1$  переходят в особые точки  $\vartheta = 0, \pi$ . При  $\nu = -1/4$  снова имеем уравнение без первой производной.

$$v''(\vartheta) + \left[ \lambda + \frac{1}{4} + c^2 \sin^2 \vartheta + \frac{1/4 - m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] v(\vartheta) = 0. \quad (1.9)$$

Когда  $m = 1/2$ , то уравнение (1.9) есть уравнение Матье, поэтому многие результаты для функций Матье, например асимптотические разложения, могут быть получены как частные случаи соответствующих общих результатов для сфероидальных функций.

Замена переменной  $z = \operatorname{th} t$ , отображающая отрезок  $[-1, 1]$  на всю вещественную ось, преобразует уравнение (1.1) к виду

$$u''(t) + \left[ -m^2 + \frac{\lambda - c^2 \operatorname{th}^2 t}{\operatorname{ch}^2 t} \right] u(t) = 0. \quad (1.10)$$

**2. Вытянутые угловые сфероидальные функции (в. у. с. ф.) и вытянутые радиальные сфероидальные функции (в. р. с. ф.).** Будем обозначать переменную  $z$ , если она принадлежит отрезку  $[-1, 1]$ , через  $\eta$ . Рассмотрим краевую задачу, связанную с дифференциаль-

ным уравнением (1.1)

$$(\lambda - L)u(\eta) = \frac{d}{d\eta}(1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta}u(\eta) + \\ + \left[ \lambda + c^2(1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] u(\eta) = 0, \quad |u(\pm 1)| < \infty, \quad (1.11)$$

где  $c \geq 0$ ,  $m$  — целое. При  $m \geq 1$  краевые условия можно заменить стандартным требованием интегрируемости с квадратом на  $[-1, 1]$ . Задача Штурма — Лиувилля (1.11) имеет бесконечный дискретный набор собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$  и собственных функций  $S_{ml}(c, \eta)$ , которые называются *вытянутыми угловыми сфероидальными функциями* (в. у. с. ф.). Функции  $S_{ml}(c, \eta)$  при фиксированном  $m$  образуют полную ортогональную систему в  $\mathcal{L}_2(-1, 1)^*$ . Нумерацию функций  $S_{ml}(c, \eta)$  выберем таким образом, чтобы они имели  $l - m$  нулей на интервале  $(-1, 1)$ , так что всегда  $l \geq m$ . Собственные значения  $\lambda_{ml}(c)$  при выбранной нумерации возрастают при увеличении индекса  $l$  ( $\lambda_{ml} > \lambda_{m'l'}$  при  $l > l'$ ), причем  $\lambda_{ml} \rightarrow \infty$  при  $l \rightarrow \infty$ . Поведение  $\lambda_{ml}(c)$  представлено на рис. 3 и 4.

Выбор нормировки в. у. с. ф. определяется многими соображениями: простотой, удобством численных расчетов, возможностью представить их в одном масштабе при различных значениях параметров и т. д. Удовлетворить одновременно всем этим требованиям не удастся.

Введем две нормировки и в соответствии с этим два обозначения для в. у. с. ф. Первая нормировка является стандартной для собственных функций задач Штурма — Лиувилля

$$\int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}^2(c, \eta) d\eta = 1. \quad (1.12)$$

Она удобна в теоретических рассуждениях. В этом случае под функцией мы ставим черту. Второй способ

---

\*) Под  $\mathcal{L}_2(a, b)$  понимается пространство функций, интегрируемых с квадратом по Лебегу на  $(a, b)$ , в котором скалярное произведение вводится обычным образом:

$$(f, g) = \int_a^b f(x) \bar{g}(x) dx.$$

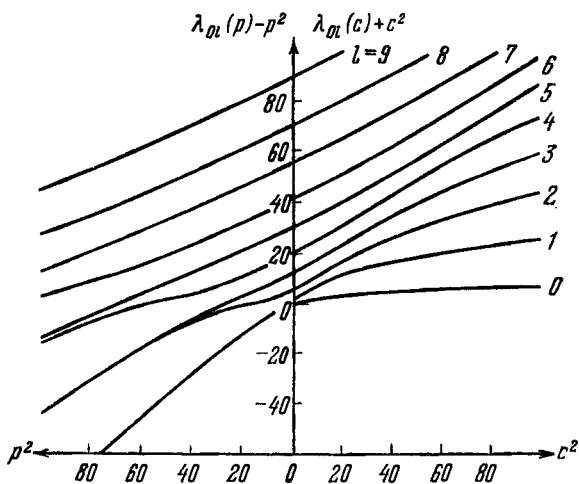


Рис. 3. Собственные значения  $\lambda_{0l}(c) + c^2$  и  $\lambda_{0l}(p) - p^2$  углового уравнения для сферондальных функций.

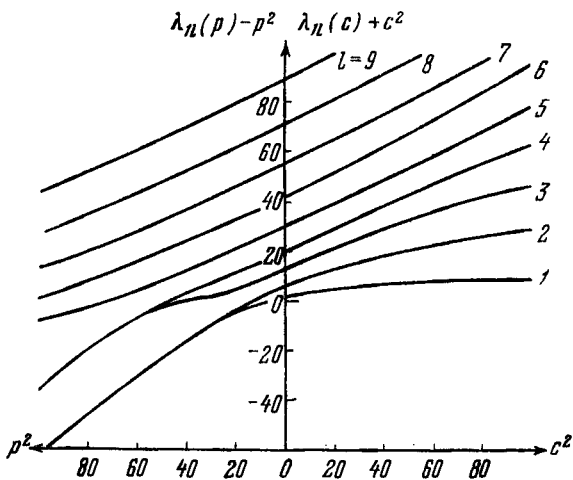


Рис. 4. Собственные значения  $\lambda_{ll}(c) + c^2$  и  $\lambda_{ll}(p) - p^2$  углового уравнения для сферондальных функций.



нормировки в. у. с. ф. по ее значению в точке  $\eta=0$ , принятый в монографии Фламмера (1962) и рядом других авторов, следующий:

$$S_{ml}(c, 0) = P_l^m(0) = \frac{(-1)^{\frac{l-m}{2}} (l+m)!}{2^l \left(\frac{l-m}{2}\right)! \left(\frac{l+m}{2}\right)!}, \quad l-m \text{ четное,} \quad (1.13)$$

$$S'_{ml}(c, 0) = \frac{d}{dx} P_l^m(x)|_{x=0} = \frac{(-1)^{\frac{l-m-1}{2}} (l+m+1)!}{2^l \left(\frac{l-m-1}{2}\right)! \left(\frac{l+m+1}{2}\right)!}, \quad l-m \text{ нечетное.}$$

Здесь  $P_l^m(x)$  — присоединенные полиномы Лежандра в обозначениях Феррера (Смирнов, 1974, т. 3, стр. 481)

$$P_l^m(x) = (1-x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) = \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{m+l}}{dx^{m+l}} (x^2-1)^l. \quad (1.14)$$

Фиксировать значение в. у. с. ф. в какой-либо точке удобно при реализации алгоритмов для их вычислений. В монографии Морса и Фешбаха (1958) задается поведение в. у. с. ф. в точке  $\eta=1$ . Однако выбор этой точки вместо точки  $\eta=0$  менее удобен ввиду того, что при больших значениях параметра  $c$  в. у. с. ф. экспоненциально убывают от точки  $\eta=0$  к точке  $\eta=1$ .

Введем коэффициент  $N_{ml}(c)$ , связывающий в. у. с. ф. с различной нормировкой,

$$S_{ml}(c, \eta) = N_{ml}(c) \bar{S}_{ml}(c, \eta). \quad (1.15)$$

Формулами (1.12) и (1.13) коэффициент  $N_{ml}(c)$  определяется с точностью до знака. Будем считать его положительным.

Там, где нормировка не существенна, используем обозначение  $S_{ml}(c, \eta)$ .

На рис. 5, а, б приведены примеры функций  $S_{0l}(c, \eta)$ .

При  $c=0$  собственными функциями задачи Штурма — Лиувилля (1.11) являются присоединенные полиномы Лежандра, так что с учетом нормировки (1.13)

$$S_{ml}(0, \eta) = P_l^m(\eta).$$

Укажем на еще один частный случай элементарного решения задачи (1.11), который следует из формулы (1.4). Если  $c = l\pi/2$ , то \*)

$$S_{1l}\left(\frac{l\pi}{2}, \eta\right) = P_l^1(0) \frac{1}{\sqrt{1-\eta^2}} \cos \frac{l\pi}{2} \eta, \quad l \text{ нечетное},$$

$$S_{1l}\left(\frac{l\pi}{2}, \eta\right) = \frac{2}{l\pi} \frac{d}{dx} P_l^1(x)|_{x=0} \frac{1}{\sqrt{1-\eta^2}} \sin \frac{l\pi}{2} \eta, \quad l \text{ четное}. \quad (1.16)$$

В. у. с. ф. обладают определенным свойством четности. Действительно, если  $S_{ml}(c, \eta)$  — собственная функция задачи (1.11), то непосредственной проверкой

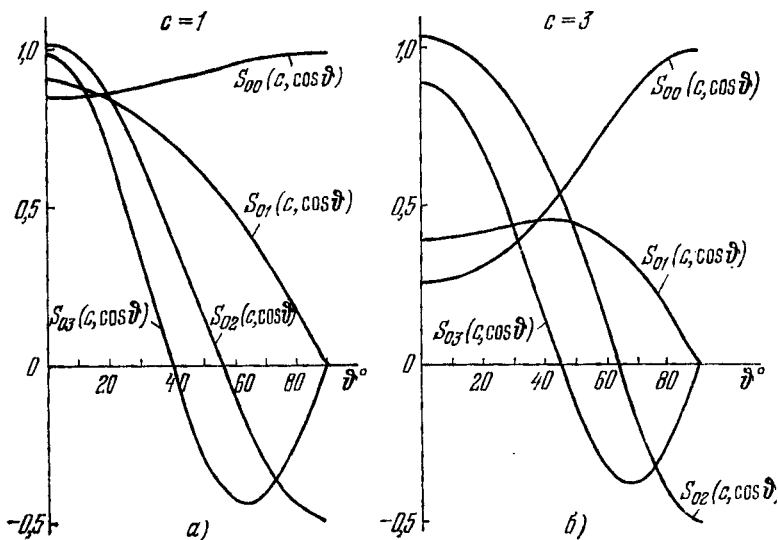


Рис. 5. Функции  $S_{0l}(c, \eta)$ , нормированные условием (1.13), при различных значениях параметра  $c$ : а)  $c=1$ , б)  $c=3$  ( $\vartheta = \arccos \eta$ ).

убеждаемся, что  $S_{ml}(c, -\eta)$  также будет собственной функцией, отвечающей тому же собственному значению. Поскольку дискретный спектр оператора Штурма — Лиувилля не может быть вырожденным, функции  $S_{ml}(c, \eta)$  всегда либо четные, либо нечетные. Четность функции  $S_{ml}(c, \eta)$  совпадает с четностью числа ее нулей на ин-

\*) В монографии Фламмера (1962) в изложении этого вопроса имеется неточность, связанная с неверной нумерацией функций.

тервале  $(-1, 1)$ , так что при выбранной нумерации в. у. с. ф. имеем

$$S_m(c, \eta) = (-1)^{l-m} S_m(c, -\eta).$$

Из аналитических свойств дифференциального уравнения (1.11) следует, что функции  $(1-z^2)^{-m/2} S_m(c, z)$  — целые функции на плоскости  $z$ . Таким образом, при четных  $m$  в. у. с. ф. допускают единственное аналитическое продолжение на полупрямую  $\xi \in [1, \infty)$ , а при  $m$  нечетных для такого продолжения надо предварительно зафиксировать значения  $(1-z^2)^{m/2}$  на верхнем берегу разреза  $[-1, 1]$ , например считать их положительными.

Аналитическое продолжение в. у. с. ф. на полупрямую  $\xi \in [1, \infty)$ , определенным образом нормированное, называется *вытянутой радиальной сфероидальной функцией первого рода* (в. р. с. ф.) и обозначается  $R_m(c, \xi)$  или  $R_m^{(1)}(c, \xi)$ .

Иначе в. р. с. ф.  $R_m(c, \xi)$  можно определить как решения уравнения

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} R_m(c, \xi) + \left[ -\lambda_m(c) + c^2 (\xi^2 - 1) - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] R_m(c, \xi) = 0, \quad \xi \in [1, \infty), \quad (1.17)$$

конечные в точке  $\xi = 1$  и нормированные поведением при  $\xi \rightarrow \infty$ .

В § 2 показано, что при фиксированном отличном от нуля  $c$  и вещественном  $z$  функции  $S_m(c, z)$  имеют с точностью до нормировки следующее асимптотическое поведение\*) при  $z \rightarrow \infty$ :

$$S_m(c, z) \sim \frac{\text{const}}{z} \cos \left( cz - \frac{l+1}{2} \pi \right). \quad (1.18)$$

Будем нормировать функции  $R_m(c, \xi)$  условием

$$R_m(c, \xi) = \frac{1}{c\xi} \cos \left( c\xi - \frac{l+1}{2} \pi \right) + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right). \quad (1.19)$$

Формула (1.19) приводит к важному свойству ортогональности в. р. с. ф. на полуоси  $[1, \infty)$  при различных

\*) На первый взгляд формула (1.18) противоречит свойствам четности в. у. с. ф. Все дело в том, что при нечетных  $m$  аналитическое продолжение  $(1-z^2)^{m/2}$  с полуоси  $[1, \infty)$  на полуось  $(-\infty, -1]$  происходит с изменением знака у функции.

$l$  одинаковой четности и одинаковых  $m$ . Действительно, рассмотрим выражение

$$\int_1^{\infty} [R_{ml}(c, \xi) L R_{m'l'}(c, \xi) - R_{m'l'}(c, \xi) L R_{ml}(c, \xi)] d\xi = \\ = (\lambda_{m'l'} - \lambda_{ml}) \int_1^{\infty} R_{ml}(c, \xi) R_{m'l'}(c, \xi) d\xi,$$

где  $L$  — дифференциальная операция из (1.11) с заменой независимой переменной  $\eta$  на  $\xi$ . Проинтегрировав по частям и приведя подобные члены, получим

$$\int_1^{\infty} R_{ml}(c, \xi) R_{m'l'}(c, \xi) d\xi = \\ = \frac{1}{\lambda_{m'l'} - \lambda_{ml}} \left\{ (1 - \xi^2) \left[ R_{ml}(c, \xi) \frac{d}{d\xi} R_{m'l'}(c, \xi) - \right. \right. \\ \left. \left. - R_{m'l'}(c, \xi) \frac{d}{d\xi} R_{ml}(c, \xi) \right] \right\} \Big|_1^{\infty} = 0. \quad (1.20)$$

Если система функций ортогональна на двух различных промежутках, то говорят, что она обладает свойством *двойной ортогональности*. Поскольку в.р.с.ф. и в.у.с.ф. — это по существу одни и те же аналитические функции, рассматриваемые на разных промежутках, то из (1.20) и четности в.у.с.ф. следует свойство двойной ортогональности вытянутых сферoidalных функций на промежутке  $[-1, 1]$  и на всей действительной оси.

Помимо радиальных функций первого рода, на практике требуются еще функции *второго, третьего и четвертого рода*, которые определяются как решения дифференциального уравнения (1.17) при  $\lambda = \lambda_{ml}(c)$  со следующей асимптотикой при  $\xi \rightarrow \infty$ :

$$R_{ml}^{(2)}(c, \xi) = \frac{1}{c\xi} \sin \left( c\xi - \frac{l+1}{2} \pi \right) + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right), \quad (1.21)$$

$$R_{ml}^{(3)}(c, \xi) = \frac{1}{c\xi} \exp \left[ i \left( c\xi - \frac{l+1}{2} \pi \right) \right] + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right), \quad (1.22)$$

$$R_{ml}^{(4)}(c, \xi) = \frac{1}{c\xi} \exp \left[ -i \left( c\xi - \frac{l+1}{2} \pi \right) \right] + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right). \quad (1.23)$$

Очевидно, что

$$\begin{aligned} R_{ml}(c, \xi) &= \frac{1}{2} [R_{ml}^{(3)}(c, \xi) + R_{ml}^{(4)}(c, \xi)], \\ R_{ml}^{(2)}(c, \xi) &= \frac{1}{2i} [R_{ml}^{(3)}(c, \xi) - R_{ml}^{(4)}(c, \xi)]. \end{aligned} \quad (1.24)$$

Вронскианы в. р. с. ф. первого, второго, третьего и четвертого рода, вычисленные по их асимптотическому поведению, равны

$$\begin{aligned} W(R_{ml}(c, \xi), R_{ml}^{(2)}(c, \xi)) &= \frac{1}{c(\xi^2 - 1)}, \\ W(R_{ml}(c, \xi), R_{ml}^{(3)}(c, \xi)) &= \frac{i}{c(\xi^2 - 1)}, \\ W(R_{ml}(c, \xi), R_{ml}^{(4)}(c, \xi)) &= \frac{-i}{c(\xi^2 - 1)}, \end{aligned} \quad (1.25)$$

так что эти функции линейно независимы попарно при всех  $c$ .

Непосредственный предельный переход  $c \rightarrow 0$  для радиальных сферидальных функций обычно не рассматривают, поскольку он приводит к потере характерных свойств этих функций. Если сделать предварительное преобразование масштаба в дифференциальном уравнении  $\xi \rightarrow \xi/c$  и уже затем положить  $c=0$ , то получится уравнение

$$\frac{d}{d\xi} \xi^2 \frac{d}{d\xi} y(\xi) + [-\lambda + \xi^2] y(\xi) = 0,$$

решения которого можно выразить через цилиндрические функции  $Z_\nu(\xi)$ :

$$y(\xi) = \xi^{-1/2} Z_{\sqrt{\lambda+1/4}}(\xi).$$

Это обстоятельство используется при выборе базисного набора функций при разложении в. р. с. ф. в ряды.

В частном случае  $c=l\pi/2$ ,  $m=1$ , в. р. с. ф. представляются в явном виде

$$R_{11}\left(\frac{l\pi}{2}, \xi\right) = \frac{2}{l\pi \sqrt{\xi^2 - 1}} \cos\left[\frac{l\pi}{2}(\xi - 1) - \frac{\pi}{2}\right]. \quad (1.26)$$

Аналогичные формулы, основанные на равенстве (1.4), можно написать и для функций второго, третьего и четвертого рода.

На промежутке  $[-1, 1]$  в качестве второго решения дифференциального уравнения, линейно независимого

с  $S_{mi}(c, \eta)$ , можно взять соответствующим образом нормированное аналитическое продолжение по аргументу в. р. с. ф. второго рода. Такие решения называются *в. у. с. ф. второго рода* и обозначаются  $S_{mi}^{(2)}(c, \eta)$ . С учетом нормировки определение этих функций удобно дать в § 3.

Остановимся на понятии *характеристической экспоненты*, с которой иногда связывают определение сферидальных функций. Зафиксируем при произвольном  $\lambda$  некоторое решение  $u(z)$  уравнения (1.1). Очевидно,  $u(ze^{i\pi})$  также будет решением в силу инвариантности уравнения (1.1) по отношению к замене  $z \rightarrow -z$ .

Таким образом, с преобразованием  $z \rightarrow ze^{i\pi}$  можно связать линейный оператор  $B$ , действующий в линейном пространстве, образованном двумя линейно независимыми решениями уравнения (1.1) по правилу  $Bu(z) = u(ze^{i\pi})$ . Выберем базисные решения, заданные в некоторой точке  $z_0$ ,  $|z_0| > 1$ , следующим образом:

$$u_1(z_0) = 1, \quad u_1'(z_0) = 0, \quad u_2(z_0) = 0, \quad u_2'(z_0) = 1.$$

Собственные значения  $\mu_{1,2}$  оператора  $B$  являются корнями следующего уравнения:

$$\begin{vmatrix} u_1(z_0 e^{i\pi}) - \mu & u_2(z_0 e^{i\pi}) \\ -u_1'(z_0 e^{i\pi}) & -u_2'(z_0 e^{i\pi}) - \mu \end{vmatrix} = \\ = \mu^2 + \mu (u_2'(z_0 e^{i\pi}) - u_1(z_0 e^{i\pi})) - 1 = 0.$$

Предположим, что это уравнение имеет два различных корня. Тогда собственные значения  $\mu_{1,2}$  можно представить в виде

$$\mu_1 = e^{i\pi\nu}, \quad \mu_2 = e^{-i\pi(\nu+1)}, \quad (1.27)$$

где величина  $\nu$ , заданная с точностью до аддитивного слагаемого  $2k$ ,  $k = \pm 1, \pm 2, \dots$ , определяет характер многозначности решений уравнения (1.1) в окрестности точки  $z = \infty$  и называется *показателем характеристической экспоненты*. Общее решение  $u(z)$  уравнения (1.1) при  $1 < |z| < \infty$  может быть представлено в следующем виде:

$$u(z) = c_1 z^\nu \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k z^k + c_2 z^{-\nu-1} \sum_{k=-\infty}^{\infty} b_k z^k.$$

Величина  $\nu$  является аналитической функцией парамет-

ров  $\lambda$  и  $c$ . Собственные значения  $\lambda_{ml}(c)$  задачи (1.11) могут быть определены как корни уравнения

$$v(\lambda, c) = l - m. \quad (1.28)$$

Более подробные сведения о свойствах характеристической экспоненты и ее применении приведены в книге Meixner, Schäfer (1954).

3. Сплюснутые угловые сфероидальные функции (с. у. с. ф.) и сплюснутые радиальные сфероидальные функции (с. р. с. ф.). Сплюснутые угловые сфероидальные функции (с. у. с. ф.) определим как собственные функции задачи Штурма — Лиувилля

$$(\lambda - L) u(\eta) = \frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} u(\eta) + \left[ \lambda - \rho^2 (1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] u(\eta) = 0, \quad |u(\pm 1)| < \infty, \quad (1.29)$$

которая отличается от (1.11) формальной заменой  $\rho = ic$  ( $\rho \geq 0$ ), и обозначим\*)  $S_{ml}(\rho, \eta)$ .

Существенно, что здесь и в дальнейшем замена  $c \rightarrow \rho$  сводится не к переобозначению параметра, а отвечает переходу к другому типу функции. Таким образом, условимся, что у нас будут величины  $c$ -типа, которые в данной главе связаны с разделением переменных в вытянутых координатах, и величины  $\rho$ -типа, которые связаны с разделением переменных в сплюснутых координатах.

Нумерация функций  $S_{ml}(\rho, \eta)$  задается условием, что на интервале  $(-1, 1)$  они имеют  $l - m$  нулей, так что всегда  $l \geq m$ .

Соответствующие собственные значения  $\lambda_{ml}(\rho)$  (разумеется, они отличны от собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$ )

\*) Переход в обозначениях от вытянутых функций к сплюснутым осуществляется у многих авторов (Морс и Фешбах, 1958, Meixner, Schäfer, 1954) комплексификацией параметра:  $c \rightarrow -ic$ ,  $S_{ml}(c, \eta) \rightarrow S_{ml}(-ic, \eta)$ . Здесь введено новое значение параметра и он сохранен вещественным  $c \rightarrow -i\rho \rightarrow \rho$ , чтобы связать обозначения, принятые в теории сфероидальных функций с квантовомеханической терминологией, упростить запись и сделать вытянутые и сплюснутые функции равноправными. Поскольку в каждом конкретном контексте указывается, о каких функциях идет речь, некоторое неудобство, связанное с тем, что при подстановке численных значений параметра в у. с. ф. и с. у. с. ф. неразличимы, мы считаем не слишком существенным. Связь обозначений сфероидальных функций, принятых в книгах различных авторов, приведена в табл. 1 и 2.

## Основные системы обозначений для вытянутых сферондальных функций

	Угловые функции	Радиальные функции	Число нулей угловых функций на $(-1, 1)$	Нормировка угловых функций
В данной книге	$S_{ml}(c, \eta)$	$R_{ml}^{(i)}(c, \xi)$ $i=1, 2, 3, 4$	$l-m$	$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{S_{ml}(c, \eta)}{P_l^m(\eta)} = 1$
В данной книге	$\mathfrak{S}_{ml}(c, \eta)$		$l-m$	$\int_{-1}^1 \mathfrak{S}_{ml}(c, \eta) d\eta = 1$
Meixner и Schäffe (1954)	$p_n^m(\eta, \nu^2)$	$S_n^{m(j)}(\xi, \nu)$ $j=1, 2, 3, 4$	$n-m$	$\int_{-1}^1 [ps_n^m(\eta, \nu^2)]^2 d\eta = \frac{2}{2n+1} \cdot \frac{(n+m)!}{(n-m)!}$
Stratton и др. (1956)	$S_{ml}^{(l)}(c, \eta)$	$R_{ml}^{(l)}(c, \xi)$	$l$	$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{S_{ml}^{(l)}(c, \eta)}{P_{m+l}^m(\eta)} = 1$
Фламмер (1962)	$S_{mn}(c, \eta)$	$R_{mn}^{(l)}(c, \xi)$	$n-m$	$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{S_{mn}(c, \eta)}{P_n^m(\eta)} = 1$
Морс и Фешбах (1958)	$S_{ml}(h, \eta)$	$ie_{ml}(h, \xi)$ $ne_{ml}(h, \xi)$ $he_{ml}(h, \xi)$	$l-m$	$\lim_{\eta \rightarrow 1-0} \frac{S_{ml}(h, \eta)}{P_l^m(\eta)} = 1$



## Основные системы обозначений для сплюснутых сферидальных функций

	Угловые функции	Радикальные функции	Число нулей угловых функций на $(-1, 1)$	Нормировка угловых функций
В данной книге	$S_{ml}(\rho, \eta)$	$R_{ml}^{(i)}(\rho, i\xi)$ $i=1, 2, 3, 4$	$l-m$	$\lim_{\eta \rightarrow 1-0} \frac{S_{ml}(\rho, \eta)}{P_l^m(\eta)} = 1$
В данной книге	$\bar{S}_{ml}(\rho, \eta)$		$l-m$	$\int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}(\rho, \eta) d\eta = 1$
Meixner и Schäffe (1954)	$\rho s_n^m(\eta, -\gamma^2)$	$S_n^{m(j)}(-i\xi, i\gamma)$ $j=1, 2, 3, 4$	$n-m$	$\int_{-1}^1 [\rho s_n^m(\eta, -\gamma^2)]^2 = \frac{2}{2n+1} \cdot \frac{(n+m)!}{(n-m)!}$
Stratton и др. (1956)	$S_{ml}^{(1)}(-ic, \eta)$	$R_{ml}^{(i)}(-ic, i\xi)$	$l$	$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{S_{ml}^{(1)}(-ic, \eta)}{R_{m+l}^m(\eta)} = 1$
Фламмер (1962)	$S_{mn}(-ic, \eta)$	$R_{mn}^{(i)}(-ic, i\xi)$	$n-m$	$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{S_{mn}(-ic, \eta)}{P_n^m(\eta)} = 1$
Морс и Фешбах (1958)	$S_{ml}(ig, \eta)$	$j e_{ml}(ig, -i\xi)$ $n e_{ml}(ig, -i\xi)$ $h e_{ml}(ig, -i\xi)$	$l-m$	$\lim_{\eta \rightarrow 1-0} \frac{S_{ml}(ig, \eta)}{P_l^m(\eta)} = 1$

задачи (1.11)) возрастают с увеличением индекса  $l$ , причем  $\lambda_{ml}(\rho) \xrightarrow{l \rightarrow \infty} \infty$ . Зависимость  $\lambda_{ml}(\rho)$  от индекса  $l$  и параметра  $\rho$  показана на рис. 3 и 4.

В § 5 показано, что при больших значениях параметра  $\rho$  с. у. с. ф. экспоненциально убывают от точки  $\eta=1$  к точке  $\eta=0$ . Для того чтобы иметь возможность сопоставлять значения функций при больших и малых значениях  $\rho$ , удобнее с. у. с. ф., в отличие от в. у. с. ф.,

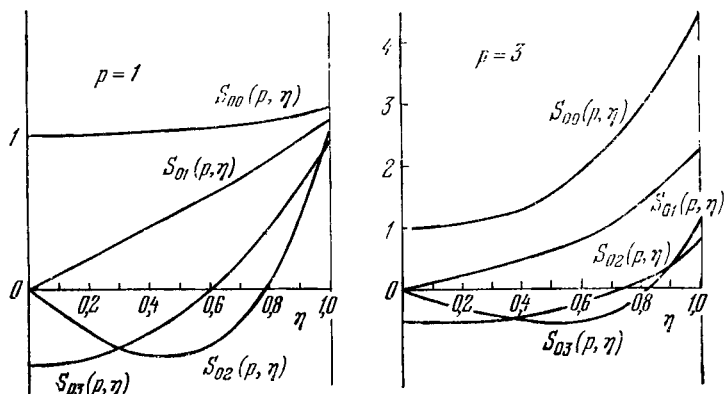


Рис. 6. Функции  $S_{0l}(\rho, \eta)$  при значениях параметра  $\rho=1$  и  $\rho=3$ . Функции нормированы по Фламмеру (табл. 2).

нормировать условием при  $\eta=1$ . Поэтому примем следующую нормировку, используемую в монографии Морса и Фешбаха (1958):

$$[(1 - \eta^2)^{-m/2} S_{ml}(\rho, \eta)]_{\eta=1} = \\ = [(1 - \eta^2)^{-m/2} P_l^m(\eta)]_{\eta=1} = \frac{(m+l)!}{2^m m! (l-m)!}. \quad (1.30)$$

Наряду с функциями  $S_{ml}(\rho, \eta)$  будем рассматривать функции  $\bar{S}_{ml}(\rho, \eta)$ , нормированные условием

$$\int_{-1}^1 [\bar{S}_{ml}(\rho, \eta)]^2 d\eta = 1. \quad (1.31)$$

Так же как в формуле (1.14), введем коэффициент  $N_{ml}(\rho)$ :

$$S_{ml}(\rho, \eta) = N_{ml}(\rho) \bar{S}_{ml}(\rho, \eta). \quad (1.32)$$

На рис. 6 приведены примеры функций  $S_{0l}(\rho, \eta)$ .

При фиксированном индексе  $m$  функции  $S_{ml}(\rho, \eta)$  образуют полную ортонормированную систему в  $\mathcal{L}_2(-1, 1)$ .

В предельном случае  $\rho=0$  с. у. с. ф. переходят в присоединенные полиномы Лежандра

$$S_{ml}(0, \eta) = P_l^m(\eta). \quad (1.33)$$

Явные выражения через элементарные функции при частных значениях  $m$  и  $\rho$  типа (1.16) для с. у. с. ф. неизвестны.

Функции  $(1-z^2)^{-m/2} S_{ml}(\rho, z)$  — целые функции на плоскости  $z$ , четные или нечетные в соответствии с четностью  $l-m$ . Отсюда следует, что можно аналитически продолжить с. у. с. ф. на полуось  $\xi \in [1, \infty)$ . С точностью до нормировки их асимптотика определяется формулами

$$\begin{aligned} S_{ml}(\rho, \xi) &= \frac{1}{\xi} \operatorname{ch} c\xi \left[ 1 + O\left(\frac{1}{\xi}\right) \right], \quad l \text{ четное,} \\ S_{ml}(\rho, \xi) &= \frac{1}{\xi} \operatorname{sh} c\xi \left[ 1 + O\left(\frac{1}{\xi}\right) \right], \quad l \text{ нечетное.} \end{aligned} \quad (1.34)$$

Более важными на практике, однако, являются аналитические продолжения на луч ( $\operatorname{Im} z \geq 0, \operatorname{Re} z = 0$ ). Эти продолжения с точностью до нормировки совпадают со сплюснутыми радиальными сфероидальными функциями первого рода (с. р. с. ф.), которые обозначаются  $R_{ml}(\rho, i\xi)$  или  $R_{ml}^{(1)}(\rho, i\xi)$ .

Сплюснутые радиальные сфероидальные функции являются решениями дифференциального уравнения

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi} (\xi^2 + 1) \frac{d}{d\xi} R_{ml}(\rho, i\xi) - \\ - \left[ \lambda - \rho^2 (\xi^2 + 1) - \frac{m^2}{\xi^2 + 1} \right] R_{ml}(\rho, i\xi) = 0, \quad \xi \in [0, \infty), \end{aligned} \quad (1.35)$$

отличающегося от (1.29) заменой  $\eta \rightarrow i\xi$  при значениях  $\lambda = \lambda_{ml}(\rho)$ , где  $\lambda_{ml}(\rho)$  — соответствующие собственные значения задачи (1.29) (рис. 7а, б, в). Они нормируются поведением при  $\xi \rightarrow \infty$

$$R_{ml}(\rho, i\xi) = \frac{1}{\rho\xi} \cos \left( \rho\xi - \frac{l+1}{2} \pi \right) + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right). \quad (1.36)$$

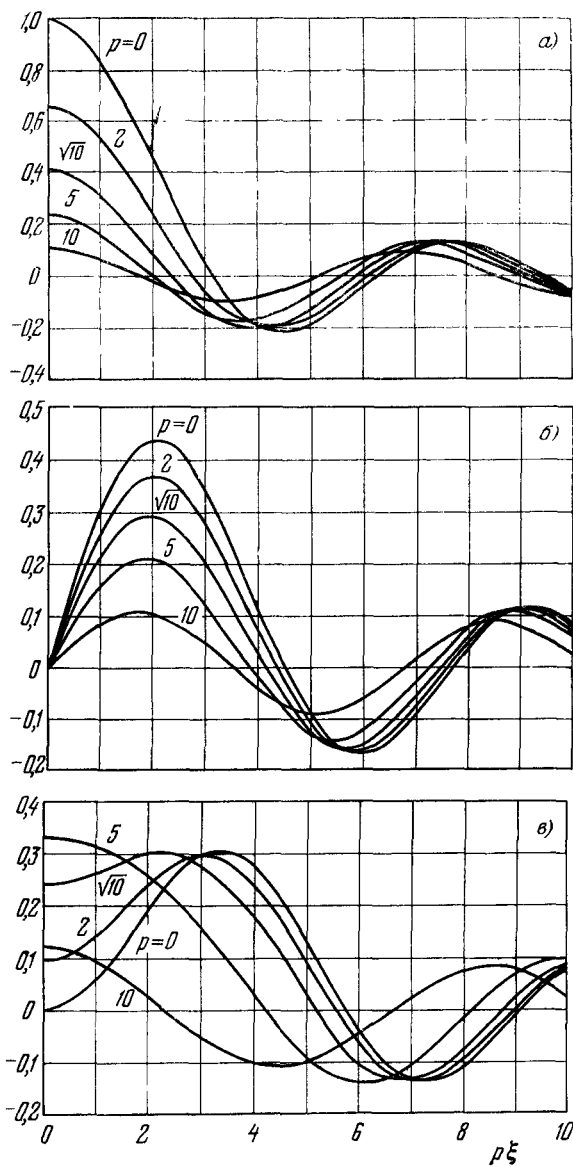


Рис. 7. Функции  $R_{ml}(\rho, i\xi)$  при различных значениях параметра  $\rho=0; 2; \sqrt{10}; 5; 10$ : а)  $m=0, l=0$ , б)  $m=1, l=1$ , в)  $m=1, l=2$ .

Используются также *сплюснутые радиальные функции второго, третьего и четвертого рода*, которые вводятся по аналогии с вытянутыми функциями, т. е. задаются своей асимптотикой

$$R_{ml}^{(2)}(p, i\xi) = \frac{1}{p\xi} \sin\left(p\xi - \frac{l+1}{2}\pi\right) + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right). \quad (1.37)$$

$$R_{ml}^{(3)}(p, i\xi) = \frac{1}{p\xi} \exp\left[i\left(p\xi - \frac{l+1}{2}\pi\right)\right] + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right), \quad (1.38)$$

$$R_{ml}^{(4)}(p, i\xi) = \frac{1}{p\xi} \exp\left[-i\left(p\xi - \frac{l+1}{2}\pi\right)\right] + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right). \quad (1.39)$$

Радиальные функции различных родов попарно линейно независимы при всех значениях параметра  $p$ , поскольку вронскианы

$$\begin{aligned} W(R_{ml}(p, i\xi), R_{ml}^{(2)}(p, i\xi)) &= \frac{1}{p^2(\xi^2 + 1)}, \\ W(R_{ml}(p, i\xi), R_{ml}^{(3)}(p, i\xi)) &= \frac{i}{p^2(\xi^2 + 1)}, \\ W(R_{ml}(p, i\xi), R_{ml}^{(4)}(p, i\xi)) &= \frac{-i}{p^2(\xi^2 + 1)}, \end{aligned} \quad (1.40)$$

вычисленные по асимптотическим формулам (1.37) — (1.39), отличны от нуля. С. р. с. ф. различных родов связаны соотношениями

$$\begin{aligned} R_{ml}(p, i\xi) &= \frac{1}{2} [R_{ml}^{(3)}(p, i\xi) + R_{ml}^{(4)}(p, i\xi)], \\ R_{ml}^{(2)}(p, i\xi) &= \frac{1}{2i} [R_{ml}^{(3)}(p, i\xi) - R_{ml}^{(4)}(p, i\xi)]. \end{aligned} \quad (1.41)$$

Аналитическое продолжение с. р. с. ф. второго рода на отрезок  $[-1, 1]$ , соответствующим образом нормированное, называется *сплюснутой угловой сфероидальной функцией второго рода* и обозначается  $S_{ml}^{(2)}(p, \eta)$ .

**4. Некоторые интегралы от сфероидальных функций.** Выведем некоторые соотношения, которые связывают интегралы от сфероидальных функций с производными от собственных значений по параметрам. В квантовой механике они обычно называются гипервириальными соотношениями и используются для контроля вычислений и исследования асимптотических свойств функций.

Рассмотрим краевую задачу (1.11) при двух различных значениях параметра  $c$  и  $c'$

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

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{d}{d\eta}S_{ml}(c',\eta) + \left[\lambda(c') + c'^2(1-\eta^2) - \frac{m^2}{1-\eta^2}\right]S_{ml}(c',\eta) = 0.$$

Умножим первое уравнение на  $S_{ml}(c',\eta)$ , а второе уравнение на  $S_{ml}(c,\eta)$ , проинтегрируем по  $\eta$  от  $-1$  до  $1$  и вычтем одно из другого. Получим

$$\begin{aligned} [\lambda_{ml}(c) - \lambda_{ml}(c')] \int_{-1}^1 S_{ml}(c,\eta) S_{ml}(c',\eta) d\eta = \\ = (c'^2 - c^2) \int_{-1}^1 S_{ml}(c,\eta) S_{ml}(c',\eta) (1-\eta^2) d\eta. \end{aligned}$$

Устремив теперь  $c' \rightarrow c$  и используя нормировку (1.12), приходим к соотношению

$$\frac{1}{2c} \frac{d\lambda_{ml}(c)}{dc} = - \int_{-1}^1 (1-\eta^2) \bar{S}_{ml}^2(c,\eta) d\eta. \quad (1.42)$$

Аналогичное соотношение для с. у. с. ф. имеет вид

$$\frac{1}{2\rho} \frac{d\lambda_{ml}(\rho)}{d\rho} = \int_{-1}^1 (1-\eta^2) \bar{S}_{ml}^2(\rho,\eta) d\eta. \quad (1.43)$$

Из соотношений (1.42) и (1.43) следует, что собственные значения  $\lambda_{ml}(\rho)$  являются монотонно растущими функциями параметра  $\rho$ , а  $\lambda_{ml}(c)$  монотонно убывающими.

Если считать в (1.11)  $m$  непрерывным параметром, то тем же способом можно получить равенства

$$\frac{1}{2m} \frac{\partial \lambda_{ml}(c)}{\partial m} = \int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}^2(c,\eta) \frac{d\eta}{1-\eta^2}, \quad (1.44)$$

$$\frac{1}{2m} \frac{\partial \lambda_{ml}(\rho)}{\partial m} = \int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}^2(\rho,\eta) \frac{d\eta}{1-\eta^2}, \quad (1.45)$$

откуда вытекает, что при фиксированном индексе  $l$  боль-

шему индексу  $m$  соответствует большее собственное значение  $\lambda$ .

Рассмотрим интегралы, в которые входят различные сфероидальные функции. Возьмем две с. у. с. ф. разной четности  $S_{ml}(p, \eta)$  и  $S_{m'l'}(p, \eta)$ . Умножим уравнение, которому удовлетворяет  $S_{ml}(p, \eta)$ , на  $S_{m'l'}(p, \eta)$ , а уравнение, которому удовлетворяет  $S_{m'l'}(p, \eta)$ , на  $S_{ml}(p, \eta)$ , результаты вычтем один из другого и проинтегрируем по  $\eta$  от 0 до 1. Получим

$$S_{ml}(p, 0) S'_{m'l'}(p, 0) - S'_{ml}(p, 0) S_{m'l'}(p, 0) = \\ = [\lambda_{ml}(p) - \lambda_{m'l'}(p)] \int_0^1 S_{ml}(p, \eta) S_{m'l'}(p, \eta) d\eta. \quad (1.46)$$

Одно из двух слагаемых в левой части (1.46) обращается в нуль в зависимости от четности  $l-m$ . Аналогичная формула может быть получена и для в. у. с. ф.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Первоначальные исследования сфероидальных функций были выполнены в работах Niven (1881), Abraham (1898), MacLaurin (1898), Poole (1923) и др. Первый этап исследований был подытожен в монографии Стретта (1935). Следующий этап нашел отражение в книгах Meixner, Schäfer (1954), Фламмера (1962), Stratton и др. (1956) и в общих монографиях по специальным функциям Arscott (1964), Бейтмена и Эрдейи (1967), Морса и Фешбаха (1958). Из них наиболее полное и математически обоснованное изложение принадлежит Мейкснеру и Шефке в частности в их монографии содержится значительно больше сведений, чем в этом параграфе, о заменах перенормировки и функции в сфероидальном уравнении. Во всех цитированных изданиях рассматриваются, кроме собственно сфероидальных функций, определенных в этом параграфе, другие решения сфероидального уравнения и их свойства. Система обозначений, принятая здесь, имеет много общего с системой обозначений Фламмера и ряда других авторов и сильно отличается от обозначений Мейкснера и Шефке. Сопоставление обозначений, принятых у различных авторов, проведено в табл. 1 и 2. Укажем также на недавние обзоры Muračami и др. (1970—1971) и Rhodes (1970), в которых приведены некоторые новые результаты по сфероидальным функциям.

## § 2. Интегральные уравнения и соотношения для сфероидальных функций

1. Основное интегральное уравнение для в. у. с. ф. и свойства его характеристических чисел. Классические специальные функции: гипергеометрические, функции Бесселя и др.—допускают интегральные представления

как через элементарные функции, так и через функции того же класса. Простейшие представления получаются по методу Лапласа, согласно которому решения  $v(z)$  дифференциального уравнения второго порядка ищутся в виде контурного интеграла

$$v(z) = \int_{\Gamma} e^{zt} w(t) dt$$

на комплексной плоскости  $t$ . В том случае, если коэффициенты дифференциального уравнения для функции  $v(z)$  линейны по аргументу, метод Лапласа приводит к уравнению первого порядка для вспомогательной функции  $w(z)$ , которое разрешимо в элементарных функциях.

Лучшее, чего можно добиться, совершая замены переменных в уравнении для сфероидальных функций, это уравнения с коэффициентами в виде полиномов второй степени по аргументу, что связано с характером особых точек. Вследствие этого реализация метода Лапласа приводит, вообще говоря, к необходимости решить для функции  $w(t)$  уравнение того же класса, что и исходное. Важным свойством сфероидальных функций (в отличие, например, от кулоновских сфероидальных функций) является тот факт, что вспомогательное уравнение для функции  $w(t)$  совпадает с исходным уравнением для функции  $v(z)$ , так что представление Лапласа является по существу интегральным уравнением для функции  $v(z)$ . Для сфероидальных функций можно получить интегральные уравнения и с более сложными ядрами, чем в методе Лапласа. Как показано в § 7, вид этих ядер определяется трехмерной функцией Грина оператора Гельмгольца в сфероидальных координатах.

С помощью интегральных уравнений удастся установить связь между поведением сфероидальных функций в регулярной особой точке  $z=1$  и на бесконечности.

Получим интегральное уравнение для в. у. с. ф., применяя метод Лапласа. Будем искать представление функций

$$v_{ml}(c, z) = (1-z^2)^{-m/2} \bar{S}_{ml}(c, z) \quad (2.1)$$

в виде контурного интеграла на комплексной плоскости  $z$

$$v_{ml}(c, z) = \int_{\Gamma} e^{\alpha z t} w_{ml}(c, t) dt, \quad (2.2)$$

где контур  $\Gamma$ , функции  $w_{ml}(c, t)$  и масштабный множитель  $\alpha$  требуется найти.



Выбор функции  $v_{ml}(c, z)$  вместо в.у.с.ф. связан с тем, что в уравнении

$$(1-z^2)v''(z) - 2(m+1)zv'(z) + [\lambda - m - m^2 + c^2(1-z^2)]v(z) = 0, \quad (2.3)$$

которому они удовлетворяют (см. (1.5)), максимальная степень полиномиальных коэффициентов равна двум (в исходном уравнении (1.11) она равна четырем), а чем ниже эта степень, тем более простые результаты получаются по методу Лапласа.

Подставив выражение (2.2) в уравнение (2.3) и избавившись с помощью интегрирования по частям от полиномов по  $z$ , получим следующее равенство:

$$\left\{ e^{\alpha z t} \left[ \alpha z \left( -\frac{c^2}{\alpha^2} - t^2 \right) \omega(t) - 2m t \omega(t) + \left( \frac{c^2}{\alpha^2} + t^2 \right) \omega'(t) \right] \right\}_{\Gamma} + \int_{\Gamma} e^{\alpha z t} \left[ \left( -\frac{c^2}{\alpha^2} - t^2 \right) \omega''(t) + 2(m-1)t\omega'(t) + (\lambda + m - m^2 + c^2 + \alpha^2 t^2) \omega(t) \right] dt, \quad (2.4)$$

где первое слагаемое — приращение выражения, стоящего в фигурных скобках, на контуре  $\Gamma$ . Положим  $\alpha = ic$  (можно и  $\alpha = -ic$ ) и потребуем, чтобы выражение под знаком интеграла тождественно равнялось нулю. Получившееся уравнение для  $\omega(t)$  сводится к уравнению для сфероидальных функций (см. (1.5)), так что функцию  $\omega_{ml}(c, t)$  можно представить в виде

$$\omega_{ml}(c, t) = \gamma_{ml}(c) (1-t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t), \quad (2.5)$$

где коэффициент  $\gamma_{ml}(c)$  зависит от выбранной нормировки функций  $v_{ml}(c, z)$  в (2.2).

Анализируя затем приращение на контуре  $\Gamma$  в (2.4) с учетом условия

$$|v_{ml}(c, \pm 1)| < \infty, \quad (2.6)$$

которое следует из свойств в.у.с.ф., приходим к заключению, что контур  $\Gamma$  должен соединять точки  $t = -1$  и  $t = 1$ . В частности, его можно выбрать в виде отрезка  $[-1, 1]$ . Объединяя (2.1), (2.2) и (2.5), получаем, что

в. у. с. ф. удовлетворяют соотношению

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(c, \eta) &= \\ &= \gamma_{ml}(c) \int_{-1}^1 e^{i\eta t} (1 - \eta^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t) dt, \quad (2.7) \end{aligned}$$

которое можно рассматривать при фиксированном  $m$  как однородное интегральное уравнение Фредгольма второго рода, причем в. у. с. ф. являются собственными функциями этого уравнения, а  $\gamma_{ml}(c)$  — его характеристическими числами.

Из свойств четности в. у. с. ф. следует, что при четных  $l - m$  в. у. с. ф. удовлетворяют уравнению

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(c, \eta) &= \\ &= \gamma_{ml}(c) \int_{-1}^1 \cos c\eta t (1 - \eta^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t) dt, \quad (2.8) \end{aligned}$$

а при нечетных  $l - m$  — уравнению

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(c, \eta) &= \\ &= i\gamma_{ml}(c) \int_{-1}^1 \sin c\eta t (1 - \eta^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t) dt. \quad (2.9) \end{aligned}$$

Ядра уравнений (2.8) и (2.9) вещественные, откуда следует, что характеристические числа  $\gamma_{ml}(c)$  вещественные при четных  $l - m$  и чисто мнимые при нечетных  $l - m$ .

Важным является вопрос о вырождении характеристических чисел, т. е. о возможности равенств

$$\gamma_{ml}(c) = \gamma_{ml'}(c)$$

при некоторых  $l, l', c$ . Анализ численных материалов и асимптотических формул свидетельствует об отсутствии вырождения, однако общее аналитическое доказательство неизвестно, за исключением случая  $m=0$  (см. ниже п. 2). В силу фредгольмовости уравнения (2.7) вырождение может быть лишь конечной кратности.

Равенства (2.7) — (2.9) могут быть аналитически продолжены на комплексную плоскость  $\eta$  с разрезом  $[-1, 1]$ . Используя определение для в. р. с. ф. из § 1, получаем

интегральное представление

$$R_{ml}(c, \xi) = \kappa_{ml}(c) \int_{-1}^1 (\xi^2 - 1)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} e^{ic\eta t} \bar{S}_{ml}(c, t) dt, \quad (2.10)$$

где  $\kappa_{ml}(c)$  — коэффициент, связывающий в. у. с. ф. и в. р. с. ф.:

$$\kappa_{ml}(c) = k_{ml}(c) \cdot \gamma_{ml}(c), \quad (2.11)$$

$$k_{ml}(c) = \lim_{\substack{\xi \rightarrow 1+0 \\ \eta \rightarrow 1-0}} \frac{R_{ml}(c, \xi)}{(\xi^2 - 1)^{m/2}} \frac{(1 - \eta^2)^{m/2}}{S_{ml}(c, \eta)}.$$

При больших значениях  $\xi$  интеграл в правой части (2.10) вычисляется асимптотически с помощью интегрирования по частям. Первые  $m$  внеинтегральных слагаемых обращаются в нуль, и в результате получаем

$$R_{ml}(c, \xi) = \frac{\kappa_{ml}(c) (-1)^m (\xi^2 - 1)^{m/2}}{(ic\xi)^{m+1}} \times \\ \times \left[ \left\{ e^{ic\xi t} \frac{d^m}{dt^m} [\bar{S}_{ml}(c, t) (1 - t^2)^{m/2}] \right\} \Big|_{-1}^1 - \right. \\ \left. - \int_{-1}^1 e^{ic\xi t} \frac{d^{m+1}}{dt^{m+1}} [\bar{S}_{ml}(c, t) (1 - t^2)^{m/2}] dt \right].$$

Интеграл имеет более высокую степень убывания по  $\xi$ , чем внеинтегральное слагаемое (см. Эрдейи, 1962, стр. 66). После ряда простых преобразований получаем следующую асимптотическую формулу для  $R_{ml}(c, \xi)$ :

$$R_{ml}(c, \xi) = \gamma_{ml}(c) \frac{2^{m+1} m! i^{l-m}}{c^{m+1} \xi} \left[ \lim_{\xi \rightarrow 1+0} \frac{R_{ml}(c, \xi)}{(\xi^2 - 1)^{m/2}} \right] \times \\ \times \cos\left(c\xi - \frac{l+1}{2} \pi\right) + O\left(\frac{1}{(c\xi)^2}\right). \quad (2.12)$$

С учетом нормировки в. р. с. ф. (1.19) приходим к следующему выражению для характеристических чисел  $\gamma_{ml}(c)$ :

$$\gamma_{ml}(c) = \frac{c^{m_l m - l}}{m! 2^{m+1}} \lim_{\xi \rightarrow 1+0} \frac{(\xi^2 - 1)^{m/2}}{R_{ml}(c, \xi)}. \quad (2.13)$$

При разделении переменных в сферических координатах значение радиальной функции в начале координат, заданной своей асимптотикой на бесконечности, называется функцией Иоста\*). В нашем случае естественно называть функцией Иоста радиального уравнения величину

$$\lim_{\xi \rightarrow 1+0} R_{ml}(c, \xi) (\xi^2 - 1)^{-m/2}.$$

В такой терминологии формула (2.13) устанавливает связь между характеристическими числами  $\gamma_{ml}(c)$  интегрального уравнения (2.7) и функцией Иоста радиального уравнения.

В частном, точно решаемом случае  $m=1$ ,  $c=l\pi/2$  (см. (1.16), (1.28))

$$\gamma_{1l} \left( \frac{l\pi}{2} \right) = i^{1-l} \frac{l\pi}{4}. \quad (2.14)$$

Для характеристических чисел  $\gamma_{ml}(c)$  может быть получено еще одно соотношение, аналогичное формулам (1.42), (1.43) для собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$  дифференциального оператора. Продифференцируем (2.7) по  $c$ :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dc} \bar{S}_{ml}(c, \eta) &= \\ &= \gamma_{ml}(c) \int_{-1}^1 e^{ic\eta t} (1 - \eta^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} \frac{d}{dc} \bar{S}_{ml}(c, t) dt + \\ &\quad + \frac{\frac{d}{dc} \gamma_{ml}(c)}{\gamma_{ml}(c)} \bar{S}_{ml}(c, \eta) + \\ &\quad + \gamma_{ml}(c) \int_{-1}^1 e^{ic\eta t} i\eta t (1 - t^2)^{m/2} (1 - \eta^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t) dt. \quad (2.15) \end{aligned}$$

Равенство (2.15) следует рассматривать как неоднородное интегральное уравнение Фредгольма относительно производной  $\frac{d}{dc} \bar{S}_{ml}(c, \eta)$ . Существование этой производной можно доказать, применив теорию возмущений к

---

\*) Если функция в начале координат обращается в нуль, то функцией Иоста называется коэффициент при первом отличном от нуля члене ряда Тейлора в окрестности этой точки.

дифференциальному оператору (1.11) с учетом невырожденности собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$ . Известно, что для разрешимости неоднородного уравнения необходимо, чтобы свободный член был ортогонален всем собственным функциям транспонированного однородного уравнения, соответствующим данному характеристическому числу, в частности  $S_{ml}(c, \eta)$  (о возможности вырождения характеристических чисел см. выше). Условие ортогональности при выборе нормировки в у. с. ф. в соответствии с (1.12) приводит к равенству

$$\begin{aligned} \frac{d}{dc} \gamma_{ml}(c) \\ \gamma_{ml}(c) &= \\ &= -\gamma_{ml}(c) \int_{-1}^1 d\eta \int_{-1}^1 dt e^{ic\eta t} i\eta t (1-\eta^2)^{m/2} (1-t^2)^{m/2} \times \\ &\quad \times \bar{S}_{ml}(c, \eta) \bar{S}_{ml}(c, t). \end{aligned} \quad (2.16)$$

Произведем ряд преобразований

$$\begin{aligned} \frac{d}{dc} \gamma_{ml}(c) \\ \gamma_{ml}(c) &= -\gamma_{ml}(c) \int_{-1}^1 (1-\eta^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, \eta) \times \\ &\quad \times \frac{\eta}{c} \frac{d}{d\eta} \int_{-1}^1 e^{ic\eta t} (1-t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t) dt d\eta = \\ &= -\frac{1}{c} \int_{-1}^1 \eta \bar{S}_{ml}(c, \eta) \frac{d}{d\eta} \bar{S}_{ml}(c, \eta) d\eta - \frac{m}{c} \int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}^2(c, \eta) \frac{\eta^2 d\eta}{1-\eta^2}. \end{aligned}$$

Проинтегрировав первый интеграл по частям, окончательно получим \*)

$$c \frac{d}{dc} \gamma_{ml}(c) \\ \gamma_{ml}(c) = \frac{2m+1}{2} \bar{S}_{ml}^2(c, 1) - m \int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}^2 \frac{d\eta}{1-\eta^2}, \quad (2.17)$$

причем при  $m \neq 0$  второе слагаемое в правой части (2.17) за счет поведения в. у. с. ф. в граничных точках обращается в нуль. Дифференциальное уравнение (2.17) легко

\*) Считая  $m$  непрерывным параметром, можно воспользоваться формулой (1.44).

решается:

$$\gamma_{ml}(c) = \gamma_{ml}(c_0) \left(\frac{c}{c_0}\right)^{\frac{2m+1}{2}} \exp \left\{ - \int_{c_0}^c \left[ \bar{S}_{ml}^2(c, 1) - m \int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}^2(c, \eta) \frac{d\eta}{1-\eta^2} \right] \frac{dc}{c} \right\}. \quad (2.18)$$

В качестве начального значения для величин  $\gamma_{ml}(c_0)$  можно взять их асимптотику при  $c \rightarrow 0$  или  $c \rightarrow \infty$ , которая будет получена при построении асимптотики в. у. с. ф. и в. р. с. ф.

**2. Собственные функции преобразования Фурье в конечных пределах. Свойство двойной ортогональности.** Интегральное уравнение для в. у. с. ф. (2.7) в частном случае  $m=0$  обладает специфическими свойствами, важными для ряда приложений в оптике и радиофизике. После изменения масштаба

$$\sqrt{c} \eta = x, \quad \sqrt{c} t = x'$$

функций

$$\psi_l(c, x) = \frac{1}{\sqrt{c}} \bar{S}_{0l} \left( c, \frac{x}{\sqrt{c}} \right) \quad (2.19)$$

и соответствующих им собственных значений

$$\mu_l(c) = \frac{\sqrt{c}}{\gamma_{0l}(c)} \quad (2.20)$$

из (2.7) следует интегральное уравнение

$$\mu \psi(c, x) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} e^{ixx'} \psi(c, x') dx', \quad (2.21)$$

причем его собственные функции  $\psi_l(c, x)$  образуют полный ортонормированный базис в  $\mathcal{L}_2(-\sqrt{c}, \sqrt{c})$ . Интегральная операция в (2.21) есть суперпозиция операции срезания\*) функции  $\psi(c, x)$  и преобразования Фурье. Поэтому обычно говорят, что функции  $\psi_l(c, x)$  являются *собственными функциями преобразования Фурье в конечных пределах*.

---

\*) Операция срезания функции  $f(x)$  состоит в том, что она полагается равной нулю вне некоторого промежутка, в нашем случае  $[-\sqrt{c}, \sqrt{c}]$ .

Помимо ортогональности на отрезке  $[-\sqrt{c}, \sqrt{c}]$ , функции  $\psi_l(c, x)$ , как уже указывалось в § 1, ортогональны на всей действительной оси. Это свойство называется *двойной ортогональностью*. Докажем ортогональность  $\psi_l(c, x)$  на  $(-\infty, \infty)$  другим способом, используя равенство Парсеваля

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_l(c, x) \psi_{l'}(c, x)| dx = \\ = \frac{2\pi}{|\mu_l \mu_{l'}|} \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} |\psi_l(c, x) \psi_{l'}(c, x)| dx = \frac{2\pi}{|\mu_l|^2} \delta_{ll'}, \quad (2.22)$$

где  $\delta_{ll'}$  — символ Кронекера. Равенство (2.22) дает дополнительно выражение для нормы функции  $\psi_l(c, x)$  на  $(-\infty, \infty)$  через собственные значения  $\mu_l(c)$ . Функции  $\psi_l(c, x)$  на  $(-\infty, \infty)$  образуют полную систему в классе  $\mathcal{F}$  функций  $F(x)$ , представимых в виде

$$F(x) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} e^{ixx'} f(x') dx',$$

где функции  $f(x) \in \mathcal{L}_2(-\sqrt{c}, \sqrt{c})$  (Rhodes, 1965).

Из унитарности преобразования Фурье следуют оценки для собственных значений  $\mu_l$

$$|\mu_l(c)| < \sqrt{2\pi}, \quad |\mu_l(c)| \xrightarrow{c \rightarrow \infty} \sqrt{2\pi}. \quad (2.23)$$

Более точные асимптотические формулы, характеризующие поведение  $\mu_l(c)$  при  $c \rightarrow \infty$  получаются в § 5 на основании формулы

$$\mu_l(c) = i^l \sqrt{2\pi} \exp \left[ - \int_c^{\infty} \psi_l^2(c, \sqrt{c}) \frac{dc}{\sqrt{c}} \right], \quad (2.24)$$

которая выводится аналогично более общему выражению (2.18).

Собственные значения  $\mu_l(c)$  не вырождены и упорядочены таким образом, что  $|\mu_0| > |\mu_1| > |\mu_2| > \dots$  с точкой сгущения в нуле. Докажем сначала способом от противного невырожденность. Пусть собственному значению  $\mu_1$  отвечают две функции  $\psi_1(c, x)$  и  $\psi_2(c, x)$ , причем они должны быть одной четности, поскольку четным  $\psi_l(c, x)$  отвечают вещественные  $\mu_l$ , а нечетным  $\psi_l(c, x)$  — мнимые  $\mu_l$ . Продифференцируем интегральное

равенство (2.21) для  $\psi_1(c, x)$  по  $c$ :

$$\frac{d\mu_1}{dc} \psi_1(c, x) + \mu_1 \frac{d}{dc} \psi_1(c, x) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} e^{ixx'} \frac{d}{dc} \psi_1(c, x') dx' + \\ + \frac{1}{2\sqrt{c}} [e^{ix\sqrt{c}} \psi_1(c, \sqrt{c}) + e^{-ix\sqrt{c}} \psi_1(c, -\sqrt{c})]. \quad (2.25)$$

Существование производной  $\frac{d}{dc} \psi_1(c, x)$  следует из невырожденности собственных значений соответствующего дифференциального оператора. Получившееся равенство можно рассматривать как неоднородное интегральное уравнение относительно производной  $\frac{d}{dc} \psi_1(c, x)$ . Необходимым условием его разрешимости является ортогональность свободного члена к функциям  $\psi_1(c, x)$  и  $\psi_2(c, x)$ . Условие ортогональности к функции  $\psi_2(c, x)$  запишется в виде

$$\frac{d\mu_1}{dc} \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} \psi_1(c, x) \psi_2(c, x) dx - \frac{\mu_1}{\sqrt{c}} \psi_2(c, \sqrt{c}) \psi_1(c, \sqrt{c}) = 0. \quad (2.26)$$

Из поведения в. у. с. ф. в граничных точках следует, что  $\psi_1(c, \sqrt{c}) \neq 0$ . Кроме того,  $\mu_1 \neq 0$ . Функции же  $\psi_1(c, x)$  и  $\psi_2(c, x)$  ортогональны. Таким образом, предположение о вырождении привело к противоречивому равенству (2.26).

После того как доказана невырожденность  $\mu_1(c)$  при всех  $c$ , упорядоченность  $|\mu_1(c)|$  следует из анализа их поведения при малых  $c$  (см. § 4).

Пусть  $T$  — интегральный оператор в (2.21), а  $T^*$  — оператор, эрмитово-сопряженный с  $T$  (в рассматриваемом случае комплексно-сопряженный). Тогда интегральному оператору  $T^*T$  отвечает уравнение

$$\frac{|\mu_1|^2}{2\pi} \psi_1(c, x) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} \frac{\sin \sqrt{c}(x-x')}{\pi(x-x')} \psi_1(c, x') dx'. \quad (2.27)$$

Ядро уравнения (2.27) самосопряженное, ограниченное по аргументу и разностное. При  $c \rightarrow \infty$  оно переходит в дельта-функцию. Поведение собственных значений ин-



тегрального уравнения (2.27) в зависимости от параметра  $c$  показано на рис. 8.

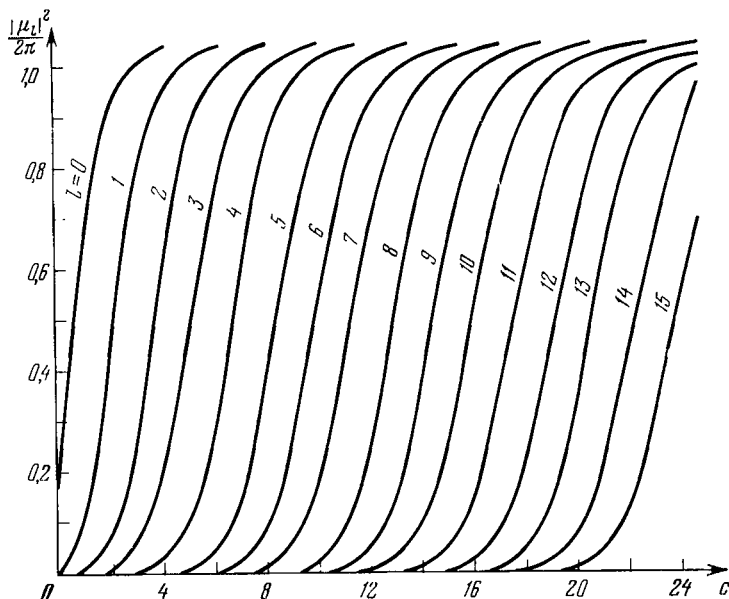


Рис. 8. Собственные значения  $|\mu_l(c)|^2/(2\pi)$  интегрального уравнения (2.27).

**3. Другие типы интегральных уравнений и соотношений для сфероидальных функций.** Прежде всего заметим, что если в правой части уравнения (2.10) интегрирование производить не по отрезку  $[-1, 1]$ , а по лучу  $\text{Re } t=1, \text{Im } t \geq 0$  либо по лучу  $\text{Re } t=-1, \text{Im } t \geq 0$ , то получившиеся интегралы также будут удовлетворять уравнению для вытянутых сфероидальных функций, но не будут ограничены при  $\xi=1$ . Это следует из анализа выражения (2.4) и асимптотического поведения в.у.с.ф. (1.18). Вычислив интегрированием по частям асимптотику соответствующих интегралов при  $\xi \rightarrow \infty$  и сравнив с асимптотикой (1.22) и (1.23), найдем, что они представляют в.р.с.ф. третьего и четвертого рода

$$R_{ml}^{(3)}(c, \xi) = 2\chi_{ml}(c) \int_{1+i\infty}^1 e^{ic\xi t} (\xi^2 - 1)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t) dt \quad (2.28)$$

и

$$R_{ml}^{(4)}(c, \xi) = \\ = 2\kappa_{ml}(c) \int_{-1}^{-1+i\infty} e^{ic\xi t} (\xi^2 - 1)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(c, t) dt. \quad (2.29)$$

Выкладки, проведенные для вытянутых функций, практически без изменений переносятся на случай с. у. с. ф., надо только заменить  $c$  на  $-ip$ . Таким образом, с. у. с. ф. удовлетворяют интегральным уравнениям

$$S_{ml}(p, \eta) = \gamma_{ml}(p) \int_{-1}^1 e^{p\eta t} (1 - \eta^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} S_{ml}(p, t) dt, \quad (2.30)$$

$$S_{ml}(p, \eta) = \\ = \gamma_{ml}(p) \int_{-1}^1 \operatorname{ch}(p\eta t) (1 - \eta^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} S_{ml}(p, t) dt, \\ l - m \text{ четное}, \quad (2.31)$$

$$S_{ml}(p, \eta) = \\ = \gamma_{ml}(p) \int_{-1}^1 \operatorname{sh}(p\eta t) (1 - \eta^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} S_{ml}(p, t) dt, \\ l - m \text{ нечетное}, \quad (2.32)$$

которые аналогичны уравнениям (2.7) — (2.9).

Для характеристических чисел  $\gamma_{ml}(p)$  получается тем же способом, что и в (2.15) — (2.17), дифференциальное уравнение

$$\frac{p}{\gamma_{ml}(p)} \frac{d}{dp} \gamma_{ml}(p) = \\ = \frac{2m+1}{2} - \bar{S}_{ml}^2(p, 1) - m \int_{-1}^1 \bar{S}_{ml}^2(p, \eta) \frac{d\eta}{1-\eta^2}, \quad (2.33)$$

которое может служить для оценки асимптотического поведения  $\gamma_{ml}(p)$  при больших и малых значениях параметра  $p$ .

Интегральное представление с. р. с. ф. получается из (2.30) аналитическим продолжением по аргументу  $\eta$ :

$$R_{ml}(p, i\xi) = \\ = \kappa_{ml}(p) \int_{-1}^1 e^{ip\xi t} (1 + \xi^2)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} \bar{S}_{ml}(p, t) dt. \quad (2.34)$$

Коэффициент  $\kappa_{ml}(p)$  можно найти, вычислив интегрированием по частям асимптотику интеграла в правой части (2.34) при  $\xi \rightarrow \infty$  и сравнив ее с асимптотической формулой (1.35) для  $R_{ml}(p, i\xi)$ :

$$\kappa_{ml}(p) = \frac{i^{m-l} p^m}{2^{m+1} m!} \left[ \lim_{\eta \rightarrow 1-0} \frac{(1-\eta^2)^{m/2}}{\bar{S}_{ml}(p, \eta)} \right]. \quad (2.35)$$

Для того чтобы получить интегральные представления с.р.с.ф. третьего и четвертого рода, достаточно в (2.34) заменить пределы интегрирования  $(-1, 1)$  на  $(1+i\infty, 1)$  и  $(-1, -1+i\infty)$  соответственно и умножить правую часть на два. Полученные таким образом интегральные представления, очевидно, удовлетворяют равенствам (1.41).

Выше были рассмотрены интегральные уравнения и соотношения для сфероидальных функций с ядрами, характерными для метода Лапласа. Существуют интегральные соотношения и с другими симметричными ядрами. Рассмотрим интегральный оператор  $K$  с ядром  $K(\eta, t)$ , собственными функциями которого являются в.у.с.ф. Известно, что ядро симметричного интегрального оператора представляется рядом по своим собственным функциям. В нашем случае

$$K(\eta, t) = \sum_{l=m}^{\infty} a_l S_{ml}(c, \eta) S_{ml}(c, t).$$

Поддействуем дифференциальным оператором  $L_\eta$  из (1.11) на  $K(\eta, t)$  (нижний индекс указывает, на какую переменную действует оператор):

$$L_\eta K(\eta, t) = \sum_{l=m}^{\infty} a_l \lambda_{ml} S_{ml}(c, \eta) S_{ml}(c, t) = L_l K(\eta, t).$$

Таким образом, функция  $K(\eta, t)$  должна удовлетворять уравнению в частных производных

$$(L_\eta - L_l) K(\eta, t) = 0. \quad (2.36)$$

Но  $L_\eta - L_l$  есть часть оператора Гельмгольца, не содержащая угловой переменной  $\varphi$  (см. введение (2.1)), так что уравнение (2.36) в цилиндрических координатах  $\rho, z$  имеет вид

$$\left( \frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} + k^2 \right) K_m(\rho, z) = 0. \quad (2.37)$$

Нетрудно доказать и обратное утверждение, что если  $K_m(\eta, t)$  является решением уравнения (2.36) в координатах  $\eta, t$  и непрерывным при  $a \leq \eta, t \leq b$ , то функция

$$T_{ml}(c, \eta) = \int_a^b K_m(\eta, t) S_{ml}(c, t) dt \quad (2.38)$$

при выборе пределов интегрирования из условия

$$\left\{ (1-t^2) \left[ S_{ml}(c, t) \frac{d}{dt} K_m(\eta, t) - K_m(\eta, t) \frac{d}{dt} S_{ml}(c, t) \right] \right\} \Big|_a^b = 0 \quad (2.39)$$

удовлетворяет дифференциальному уравнению для вытянутых сфероидальных функций. В самом деле, действуем дифференциальным оператором  $L$  из (1.11) на  $T_{ml}(c, \eta)$ , предполагая, что можно дифференцировать под знаком интеграла:

$$\begin{aligned} L_\eta T_{ml}(c, \eta) &= \int_a^b L_t K_m(\eta, t) S_{ml}(c, t) dt = \\ &= \left\{ (1-t^2) \left[ S_{ml}(c, t) \frac{\partial}{\partial t} K_m(\eta, t) - K_m(\eta, t) \times \right. \right. \\ &\times \left. \left. \frac{d}{dt} S_{ml}(c, t) \right] \right\} \Big|_a^b - \int_a^b K_m(\eta, t) L_t S_{ml}(c, t) dt = \lambda_{ml} T_{ml}(c, \eta). \end{aligned}$$

Здесь были дважды проинтегрированы по частям выражения, содержащие дифференцирование по  $\eta$ . Если выбрать  $a = -1, b = 1$ , то функции  $T_{ml}(c, \eta)$  с точностью до нормировки совпадают с в. у. с. ф.

Простейшие ядра  $K_m(\eta, t)$  можно получить, решая уравнение (2.37) методом разделения переменных и переходя в решении от цилиндрических координат к сфероидальным. Так, например,

$$K_m^-(\eta, t) = e^{i c \eta t \cos \alpha} I_m(c [(1-\eta^2)(1-t^2)]^{1/2} \sin \alpha), \quad (2.40)$$

где  $I_m(z)$  — модифицированная функция Бесселя,  $0 < \alpha < \pi/2$ . В предельном случае  $\alpha \rightarrow 0$  получаем ядро уравнения (2.7). Характеристические числа интегрального уравнения могут быть выражены через значения в. р. с. ф. тем же приемом, что и в случае уравнения (2.7).

Интегральные представления в.р.с.ф. и с.р.с.ф. и уравнения для с.у.с.ф. получаются формальной заменой аргумента  $\eta \rightarrow \xi$ ,  $\eta \rightarrow i\xi$  и параметра  $c \rightarrow -ip$  в соответствии с определениями в § 1. Более подробно мы остановимся на этом в § 7, где различные интегральные соотношения для сфероидальных функций получены с несколько иных позиций.

**4. Гиперсфероидальные функции.** Выше было показано, что в.у.с.ф. являются собственными функциями преобразования Фурье на конечном промежутке. Можно поставить более общую задачу. Пусть  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{x}'$  — векторы в  $\mathcal{R}^n$  ( $n$ -мерном евклидовом пространстве со скалярным произведением  $\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle$ ). Рассмотрим интегральное уравнение

$$\chi \psi(\mathbf{x}) = \int_S \exp i \langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' \rangle \psi(\mathbf{x}') d\mathbf{x}'. \quad (2.41)$$

Собственные функции этого уравнения  $\psi_n(\mathbf{x})$  естественно назвать *собственными функциями многомерного преобразования Фурье в конечной области*. В случае области  $S$  общего вида свойства  $\psi_n(\mathbf{x})$  мало исследованы, однако если  $S$  —  $n$ -мерный шар, можно свести задачу решения интегрального уравнения (2.41) к нахождению собственных функций некоторого дифференциального оператора. Соответствующие функции называются *гиперсфероидальными* или *обобщенными сфероидальными функциями*.

Здесь мы проведем все выкладки только для двумерного случая, наиболее важного в приложениях. Перейдем в уравнении (2.41), где  $S$  считаем кругом радиуса  $a$ , к полярным координатам и будем искать  $\psi(\mathbf{x})$  по методу разделения переменных в виде

$$\psi(\mathbf{x}) = r^{-1/2} T(r) e^{im\varphi}. \quad (2.42)$$

После выкладок, использующих интегральное представление функций Бесселя,

$$\begin{aligned} \chi r^{-1/2} T(r) e^{im\varphi} &= \\ &= \int_0^a r'^{1/2} dr' \int_0^{2\pi} T(r') \exp [i(rr' \cos(\varphi - \varphi') + m\varphi')] d\varphi' = \\ &= 2\pi i^m \int_0^a r'^{1/2} J_m(rr') e^{-im\varphi} T(r') dr' \end{aligned}$$

задача сводится к решению интегрального уравнения с симметричным ограниченным ядром

$$\chi T(r) = 2\pi i^m \int_0^a (rr')^{1/2} J_m(rr') T(r') dr'. \quad (2.43)$$

Собственные функции  $T_{ml}(a, r)$  уравнения (2.43), нормированные условием

$$\int_0^a |T_{ml}(a, r)|^2 dr = 1, \quad (2.44)$$

образуют полную ортонормированную систему в  $\mathcal{L}_2(0, a)$ . При  $a = \infty$  интегральная операция в (2.43) есть преобразование Ганкеля, так что функции  $T_{ml}(a, r)$  называют *собственными функциями преобразования Ганкеля в конечных пределах*. Из характера аналитичности ядра в уравнении (2.43) следует, что функции  $T_{ml}(a, r)$  допускают аналитическое продолжение на комплексную плоскость  $r$  с разрезом вдоль отрицательной части вещественной оси. Продолженные функции обладают дополнительным свойством ортогональности на полуоси, что следует из равенства Парсеваля для преобразования Ганкеля

$$\begin{aligned} & \int_0^\infty |T_{ml}(a, r) T_{m'l'}(a, r)| dr = \\ & = \frac{4\pi^2}{|\chi_{ml}\chi_{m'l'}|} \int_0^a |T_{ml}(a, r) T_{m'l'}(a, r)| dr = \frac{4\pi^2}{|\chi_{ml}|^2} \delta_{ll'}. \end{aligned} \quad (2.45)$$

Таким образом, функции  $T_{ml}(a, r)$  подобно в. у. с. ф. обладают свойством *двойной ортогональности*.

Собственные значения  $\chi_{ml}(a)$ , как можно показать тем же приемом, что и в предыдущем пункте, невырождены и упорядочены:

$$2\pi > |\chi_{m_1}(a)| > |\chi_{m_2}(a)| > \dots > 0.$$

Они удовлетворяют дифференциальному уравнению

$$\frac{d}{da} \chi_{ml}(a) = \chi_{ml}(a) T_{ml}^2(a, a),$$

аналогичному уравнению (2.17).

Покажем, что функции  $T_{ml}(a, r)$  являются собственными функциями задачи Штурма — Лиувилля

$$\begin{aligned} (L_r T)(r) &= \\ &= \frac{d}{dr}(r^2 - a^2) \frac{d}{dr} T(r) + a^2 \left( r^2 + \frac{m^2 - 1/4}{r^2} \right) T(r) = \Lambda T(r), \\ & \quad |r^{-1/2} T(r)|_{r=0} < \infty, \quad |T(a)| < \infty \end{aligned} \quad (2.46)$$

и, обратно, что собственные функции задачи Штурма — Лиувилля (2.46) удовлетворяют интегральному уравнению (2.43). Поскольку система функций  $T_{ml}(a, r)$  полна, для этого достаточно показать, что дифференциальный оператор  $L_r$  из (2.46) и интегральный оператор  $K$  из (2.43) с ядром  $K_m(rr') = \sqrt{rr'} I_m(rr')$  коммутируют. При доказательстве используем тот факт, что ядро  $K_m(rr')$  удовлетворяет уравнению

$$K_m''(rr') + \left[ 1 - \frac{m^2 - 1/4}{(rr')^2} \right] K_m(rr') = 0. \quad (2.47)$$

Штрих обозначает дифференцирование по аргументу.

Поействуем последовательно операторами  $L_r$  и  $K$  на функцию  $T(r)$  из области определения оператора  $L_r$ , проинтегрируем по частям и воспользуемся равенством (2.47)

$$\begin{aligned} (KL_r T)(r) &= \\ &= \int_0^a K_m(rr') \left[ \frac{d}{dr'}(r'^2 - a^2) \frac{d}{dr'} + a^2 \left( r'^2 + \frac{m^2 - 1/4}{r'^2} \right) \right] \times \\ & \quad \times T(r') dr' = \{ K_m(rr') (r'^2 - a^2) T'(r') - r K_m'(rr') \times \\ & \quad \times (r'^2 - a^2) T(r') \} \Big|_{r'=0}^{r'=a} + \\ &+ \int_0^a T(r') \left[ \frac{d}{dr'}(r'^2 - a^2) \frac{d}{dr'} + a^2 \left( r'^2 + \frac{m^2 - 1/4}{r'^2} \right) \right] \times \\ & \quad \times K(rr') dr' = \int_0^a T(r') \left[ \frac{d}{dr} r^2 \frac{d}{dr} K(rr') - a^2 r'^2 K''(rr') + \right. \\ & \quad \left. + a^2 \left( r^2 + \frac{m^2 - 1/4}{r^2} \right) K(rr') \right] dr' = (L_r KT)(r). \end{aligned}$$

Коммутация операторов  $L_r$  и  $K$  доказана.

Дифференциальная операция из (2.46) после изменения масштаба  $r = a\eta$  может быть представлена в виде

$$\frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} T(a, \eta) + \left( \Lambda - a^4 \eta^2 + \frac{1/4 - m^2}{\eta^2} \right) T(a, \eta) = 0. \quad (2.48)$$

Видно, что уравнение (2.48), если положить  $m = 1/2$  и  $a^2 = c$ , является частным случаем уравнения (1.11) для в. у. с. ф. В пределе, когда  $a \rightarrow 0$ , функции  $T_{ml}(a, r)$  переходят в полиномы

$$T_{ml}(a, r) \xrightarrow{a \rightarrow 0} C r^{m+1/2} F(-l, l+m+1, m+1; r^2),$$

где  $F(a, b, c; z)$  — гипергеометрическая функция,  $C$  — нормировочный коэффициент. Убедиться в этом можно непосредственной подстановкой в дифференциальное уравнение (2.48). Эти полиномы тесно связаны с так называемыми полиномами Цернике.

Мы не будем в данной книге подробно исследовать свойства гиперсфероидальных функций. Читатель, заинтересовавшийся этими вопросами, может обратиться к оригинальным статьям, указанным в библиографических указаниях.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Интегральные уравнения и представления для сфероидальных функций были получены в ранних работах Abraham (1898), Poole (1923) и Mögliche (1927). Некоторые дополнительные интегральные представления приведены в работе Chako (1957). Подробное изложение всех этих результатов содержится в монографиях Meixner, Schäfer (1954) и Фламмера (1962). Дифференциальное уравнение для собственных значений  $\mu_l(c)$  впервые встречается в статье Fuchs (1964), который использовал его для нахождения асимптотики  $\mu_l(c)$  при больших значениях параметра  $c$ . Slepian, Pollak (1961) и Rhodes (1963, 1965) подробно проанализировали связь в. у. с. ф. с преобразованием Фурье в конечных пределах и свойство двойной ортогональности в. у. с. ф. Гиперсфероидальные функции и их свойства были введены Heurtley (1964), Вайнштейном (1965а, б), Slepian (1964). Некоторые подробности математического характера содержатся в статье Кузнецова (1970), где приведены также наиболее полные и обоснованные результаты по асимптотике гиперсфероидальных функций. Перевод на русский язык ряда статей по теории и приложениям собственных функций преобразования Фурье в конечных пределах и их научную обработку осуществили Размахнин и Яковлев (1971).



### § 3. Разложения сферидальных функций в ряды

**1. Предварительные сведения из теории цепных дробей.** При разложении классических специальных функций: гипергеометрических, функций Бесселя и др. в степенные и другие ряды для коэффициентов разложения, как правило, получаются двучленные рекуррентные соотношения, которые позволяют найти явные выражения для коэффициентов. При разложении сферидальных функций в ряды по элементарным функциям и простейшим специальным функциям лучшее, чего удастся добиться, это трехчленные рекуррентные соотношения для коэффициентов. Эти соотношения не дают возможности выписать явные выражения для  $n$ -го коэффициента и собственных значений задачи Штурма — Лиувилля. Однако трехчленные системы имеют все же определенные преимущества перед системами с большим числом членов, поскольку они тесно связаны с аппаратом цепных дробей, достаточно эффективным как в вычислительном, так и в теоретическом отношении.

Нам понадобятся в дальнейшем некоторые понятия и утверждения из теории цепных дробей (подробнее см. Хованский, 1961; Wall, 1948). *Цепной* или *непрерывной дробью* называют выражение

$$b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \dots \frac{a_n}{b_n + \dots}}}, \quad (3.1)$$

для которого часто используют упрощенную запись

$$b_0 + \frac{a_1}{b_1 + \frac{a_2}{b_2 + \dots \frac{a_n}{b_n + \dots}}}$$

или

$$b_0 + \frac{a_1}{b_1 +} \frac{a_2}{b_2 +} \dots \frac{a_n}{b_n +} \dots \quad (3.2)$$

Конечную цепную дробь

$$b_0 + \frac{a_1}{b_1 +} \dots \frac{a_n}{b_n} = \frac{P_n}{Q_n} \quad (3.3)$$

называют  $n$ -й *подходящей дробью* цепной дроби (3.2), причем  $P_n$  и  $Q_n$  находятся из рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned} P_k &= b_k P_{k-1} + a_k P_{k-2}, \\ Q_k &= b_k Q_{k-1} + a_k Q_{k-2}, \quad k=1, 2, \dots, \\ P_0 &= b_0, \quad Q_0=1, \quad P_{-1}=1, \quad Q_{-1}=0. \end{aligned} \quad (3.4)$$

При  $b_0=0$  надо брать  $P_0=0$ ,  $Q_0=1$ ,  $P_{-1}=Q_{-1}=0$ .

Цепная дробь называется *сходящейся*, если существует конечный предел  $\lim_{n \rightarrow \infty} (P_n/Q_n) = \alpha$ , который принимают значением цепной дроби. Если  $\lim_{n \rightarrow \infty} (P_n/Q_n) = \pm \infty$ , цепная дробь называется *несущественно расходящейся*, и, наконец, если  $\lim_{n \rightarrow \infty} (P_n/Q_n)$  не существует, цепную дробь называют *существенно расходящейся*. Отбрасывание или добавление конечного числа начальных звеньев в сходящейся цепной дроби может оставить ее сходящейся или превратить в несущественно расходящуюся, но не может превратить в существенно расходящуюся.

Условие

$$\left| \frac{a_n}{b_{n-1} b_n} \right| < \frac{1}{4}, \quad n \geq 1, \quad (3.5)$$

является достаточным для сходимости цепной дроби (3.2). Если неравенство (3.5) выполняется, начиная с некоторого  $n_0$ , дробь может быть либо сходящейся, либо несущественно расходящейся. В дальнейшем мы не будем отделять случай несущественной расходимости от сходимости.

Цепные дроби допускают *основное тождественное преобразование*

$$\begin{aligned} b_0 + \frac{a_1}{b_1 +} \frac{a_2}{b_2 +} \dots \frac{a_n}{b_n +} \dots &= \\ &= b_0 + \frac{p_1 a_1}{p_1 b_1 +} \frac{p_1 p_2 a_2}{p_2 b_2 +} \dots \frac{p_{n-1} p_n a_n}{p_n b_n + \dots}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

где  $p_1, p_2, \dots, p_n, \dots$  — любые отличные от нуля числа. С помощью преобразования (3.6) можно перевести цепную дробь (3.3) в обыкновенную цепную дробь вида

$$\alpha_0 + \frac{1}{\alpha_1 + \frac{1}{\alpha_2 + \dots \frac{1}{\alpha_n + \dots}},} \quad (3.7)$$

где

$$\alpha_0 = b_0, \quad \alpha_{2k-1} = \frac{a_2 \dots a_{2k-2} b_{2k-1}}{a_1 a_3 \dots a_{2k-1}}, \quad \alpha_{2k} = \frac{a_1 a_3 \dots a_{2k-1} b_{2k}}{a_2 \dots a_{2k}}.$$

Равенство

$$\alpha_0 = b_0 + \frac{b_1}{a_1 + \dots \frac{b_n}{a_n + \dots}} = b_0 + \frac{b_1}{a_1 + \dots \frac{b_{k-1}}{a_{k-1} + \frac{b_k}{r_k}},} \quad (3.8)$$

где

$$r_k \neq 0, \quad r_k = a_k + \frac{b_{k+1}}{a_{k+1} + \dots \frac{b_n}{a_n + \dots}}, \quad (3.9)$$

позволяет частично «обернуть» цепную дробь, а именно выразить остаток  $r_k$  через исходную цепную дробь  $\alpha$ :

$$r_k = \frac{b_k}{-a_{k-1} + \frac{b_{k-1}}{-a_{k-2} + \dots \frac{b_1}{-b_0 + 1}} \alpha}. \quad (3.10)$$

В качестве примера использования цепных дробей рассмотрим вычисление бесконечного трехчленного определителя вида

$$\begin{vmatrix} \beta_0 - \lambda & \alpha_0 & 0 & 0 & \dots \\ \gamma_1 & \beta_1 - \lambda & \alpha_1 & 0 & \dots \\ 0 & \gamma_2 & \beta_2 - \lambda & \alpha_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = J_0. \quad (3.11)$$

Применяя формально правила действия с конечными определителями, получим

$$J_0 = (\beta_0 - \lambda) J_1 - \alpha_0 \gamma_1 J_2, \quad (3.12)$$

где  $J_1$  и  $J_2$  — определители той же структуры, что и  $J_0$ , получающиеся последовательным вычеркиванием левого столбца и верхней строки. Аналогично

$$J_n = (\beta_n - \lambda) J_{n+1} - \alpha_n \gamma_{n+1} J_{n+2}. \quad (3.13)$$

Предполагая, что  $J_1 \neq 0$ , получаем из (3.13) представление в виде бесконечной цепной дроби \*)

$$\frac{J_0}{J_1} = (\beta_0 - \lambda) - \frac{\alpha_0 \gamma_1}{\beta_1 - \lambda +} \dots \frac{-\alpha_n \gamma_{n+1}}{\beta_{n+1} - \lambda +} \dots \quad (3.14)$$

Равенство нулю определителя  $J_0$  эквивалентно обращению в нуль цепной дроби (3.14).

**2. Разложения угловых сфероидальных функций по присоединенным полиномам Лежандра.** Разложение в ряд по присоединенным полиномам Лежандра является наиболее важным для угловых сфероидальных функций как с точки зрения исследования их свойств, так и для вычисления их числовых значений. Довольно часто всю теорию сфероидальных функций строят на основе этих разложений.

Учитывая свойства четности, представим в.у.с.ф. в виде

$$S_{ml}(c, \eta) = \sum'_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) P_{m+r}^m(\eta), \quad (3.15)$$

где штрих над знаком суммы указывает здесь и в дальнейшем, что суммирование идет по целым  $r$  той же четности, что и число  $q = l - m$ . Аналогичное разложение запишем и для с.у.с.ф.

$$S_{ml}(p, \eta) = \sum'_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(p) P_{m+r}^m(\eta), \quad (3.16)$$

причем, разумеется, коэффициенты  $d_r^{ml}(p)$  отличны от  $d_r^{ml}(c)$ .

Разложения (3.15) и (3.16) можно понимать как ряды Фурье по полной системе функций  $P_{m+r}^m(\eta)$  на промежутке  $[-1, 1]$ . При этом коэффициенты  $d_r^{ml}$  являются коэффициентами Фурье и сходимость понимается в смысле равномерной сходимости рядов Фурье. С другой стороны, после выделения множителя  $(1-\eta^2)^{m/2}$  разложения (3.15) и (3.16) можно рассматривать как разложения целой функции в ряд по полиномам и исследовать сходимость на комплексной плоскости аргумента. Заметим, что ряды (3.15) и (3.16) можно дифференци-

---

\*) При  $J_1 = 0$  цепная дробь (3.14) будет несущественно расходящейся.

ровать с сохранением сходимости произвольное число раз.

Будем подробно рассматривать только разложение (3.15), поскольку все результаты, относящиеся к разложению (3.16), могут быть получены формальной заменой  $c^2 \rightarrow -p^2$  и изменением нормировки функций.

Подставив ряд (3.15) в дифференциальное уравнение (1.11) и воспользовавшись уравнением для  $P_{m+r}^m(\eta)$

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{d}{d\eta}P_{m+r}^m(\eta) + \left[ (m+r)(m+r+1) - \frac{m^2}{1-\eta^2} \right] P_{m+r}^m(\eta) = 0,$$

получим

$$\sum_{r=0,1}^{\nu} [\lambda_{ml} + c^2(1-\eta^2) - (m+r)(m+r+1)] d_r^{ml}(c) P_{m+r}^m(\eta) = 0. \quad (3.17)$$

Из рекуррентного соотношения для присоединенных полиномов Лежандра

$$(2m+2r+1)\eta P_{m+r}^m(\eta) = (r+1)P_{m+r+1}^m(\eta) + (2m+r)P_{m+r-1}^m(\eta)$$

легко выводится равенство

$$\begin{aligned} \eta^2 P_{m+r}^m(\eta) &= \frac{(r+1)(r+2)}{(2m+2r+1)(2m+2r+3)} P_{m+r+2}^m(\eta) + \\ &+ \frac{(m+r)(m+r-1)}{(2m+2r+1)(2m+2r+3)} P_{m+r-2}^m(\eta) + \\ &+ \frac{2r(2m+r+1)+2m-1}{(2m+2r+3)(2m+2r-1)} P_{m+r}^m(\eta). \end{aligned} \quad (3.18)$$

В силу линейной независимости  $P_{m+r}^m(\eta)$  при различных  $r$  из (3.17) с использованием (3.18) получаем при каждом фиксированном  $m$  две бесконечные трехчленные системы линейных уравнений для коэффициентов  $d_r^{ml}(c)$  отдельно для четных и нечетных  $l-m$

$$A_r d_{r+2}^{ml}(c) + (B_r - \lambda_{ml}) d_r^{ml}(c) + C_r d_{r-2}^{ml}(c) = 0, \quad (3.19)$$

где

$$A_r = \frac{(2m+r+2)(2m+r+1)}{(2m+2r+3)(2m+2r+5)} c^2, \quad (3.20)$$

$$B_r = (m+r)(m+r+1) - \frac{2c^2[(r+m)(r+m+1)+m^2-1]}{(2m+2r+3)(2m+2r-1)},$$

$$C_r = \frac{r(r-1)}{(2m+2r-3)(2m+2r-1)} c^2, \quad d_{-2}^{m_l}(c) = d_{-1}^{m_l}(c) = 0.$$

Для коэффициентов  $d_r^{m_l}(p)$  получаются те же уравнения (3.19), но коэффициенты  $A_r$ ,  $B_r$  и  $C_r$  отличаются от (3.20) заменой  $c^2$  на  $-p^2$ . В дальнейшем исследовании не будет использоваться специфика коэффициентов  $A_r$ ,  $B_r$ ,  $C_r$  (кроме асимптотического поведения при  $r \rightarrow \infty$ ), так что оно будет общим для всех трехчленных рекуррентных систем, которые нам встретятся.

Прежде всего заметим, что системы (3.19) определяют коэффициенты  $d_r^{m_l}(c)$  с точностью до множителя, который задается нормировкой в. у. с. ф. Принимая нормировку (1.13), получаем соотношения

$$\sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^{r/2} (r+2m)!}{2^r \left(\frac{r}{2}\right)! \left(\frac{r}{2}+m\right)!} d_r^{m_l}(c) = \frac{(-1)^{(l-m)/2} (l+m)!}{2^{l-m} \left(\frac{l-m}{2}\right)! \left(\frac{l+m}{2}\right)!},$$

$l-m$  четное, (3.21)

$$\sum_{r=1}^{\infty} \frac{(-1)^{\frac{r-1}{2}} (r+2m+1)!}{2^r \left(\frac{r-1}{2}\right)! \left(\frac{r-1}{2}+m\right)!} d_r^{m_l}(c) =$$

$$= \frac{(-1)^{\frac{l-m-1}{2}} (l+m+1)!}{2^{l-m} \left(\frac{l-m-1}{2}\right)! \left(\frac{l+m+1}{2}\right)!}, \quad l-m \text{ нечетное.}$$

Нормировочный коэффициент  $N_{ml}(c)$  из (1.15) определяется через коэффициенты  $d_r^{m_l}(c)$  следующим образом:

$$N_{ml}(c) = \left[ \sum_{r=0,1}^{\infty} (d_r^{m_l}(c))^2 \int_{-1}^1 [P_{m+r}^m(x)]^2 dx \right]^{1/2} =$$

$$= \left[ \sum_{r=0,1}^{\infty} (d_r^{m_l}(c))^2 \frac{2(2m+r)!}{m!(2m+2r+1)} \right]^{1/2}. \quad (3.22)$$

Выразим еще величину  $\kappa_{ml}(c)$ , входящую в интегральное представление в. р. с. ф. (2.10) и определяемую формулами (2.11) и (2.13), через коэффициенты  $d_r^{ml}(c)$ :

$$\begin{aligned} \kappa_{ml}(c) &= \frac{c^{m_l m - l}}{2^{m+1} m!} \lim_{\eta \rightarrow 1-0} \frac{(1-\eta^2)^{m/2}}{\bar{S}_{ml}(c, \eta)} = \\ &= \frac{c^{m_l m - l}}{\sqrt{2} \sqrt{m!}} \left[ \sum'_{r=0,1}^{\infty} (d_r^{ml}(c))^2 \frac{(2m+r)!}{2m+2r+1} \right]^{1/2} / \sum'_{r=0}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Для с. у. с. ф. нормировка (1.30) приводит к соотношению

$$\sum'_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(p) \frac{(2r+m)!}{r!} = \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (3.24)$$

Нормировочный коэффициент  $N_{ml}(p)$  по существу такой же, как и в случае в. у. с. ф.:

$$N_{ml}(p) = \sum'_{r=0,1}^{\infty} \left[ (d_r^{ml}(p))^2 \frac{2(2m+r)!}{m!(2m+2r+1)} \right]^{1/2}.$$

Если систему (3.19) решать от «начала», то получим для отношения  $d_r^{ml}(c)/d_{r+2}^{ml}(c)$  рекуррентные формулы

$$\frac{d_r^{ml}(c)}{d_{r+2}^{ml}(c)} = \frac{-A_r}{B_r - \lambda_{ml} + C_r d_{r-2}^{ml}(c)/d_r^{ml}(c)}. \quad (3.25)$$

Последовательное их применение позволяет выразить это отношение в виде конечной цепной дроби. Например, для четных  $l-m$

$$\frac{d_r^{ml}(c)}{d_{r+2}^{ml}(c)} = \frac{-A_r}{B_r - \lambda_{ml} - \frac{C_r A_{r-2}}{B_{r-2} - \lambda_{ml} - \dots \frac{C_2 A_0}{B_0 - \lambda_{ml}}}}. \quad (3.26)$$

Однако этот процесс приводит к цели, только если известны собственные значения  $\lambda_{ml}(c)$ . Действительно, при произвольных  $\lambda$ , как следует из асимптотического поведения коэффициентов  $A_r$ ,  $B_r$  и  $C_r$  при  $r \rightarrow \infty$ ,

$$A_r = \frac{c^2}{4} + O\left(\frac{1}{r}\right), \quad B_r = r^2 + O(r), \quad C_r = \frac{c^2}{4} + O\left(\frac{1}{r}\right), \quad (3.27)$$

отношение коэффициентов  $d_{r+2}^{ml}(c)/d_r^{ml}(c)$ , полученное с помощью (3.25), возрастает как  $4r^2/c^2$ , и ряд (3.15), рассматриваемый как ряд Фурье, расходится. Только

при специальном выборе  $\lambda$  можно скомпенсировать рост знаменателя в правой части (3.25) с точностью до членов  $O(r^{-2})$  и сделать так, чтобы отношение  $d_{r+2}^{ml}(c)/d_r^{ml}(c)$  убывало как  $c^2/4r^2$ . Выведем условие, которому должны удовлетворять значения  $\lambda$  и которое является по существу уравнением для собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$ . Для этого рассмотрим процесс вычисления  $d_r^{ml}(c)$  от «конца». Имеем из (3.19)

$$\frac{d_r^{ml}(c)}{d_{r-2}^{ml}(c)} = \frac{-C_r}{B_r - \lambda_{ml} + A_r d_{r+2}^{ml}(c)/d_r^{ml}(c)} \quad (3.28)$$

и в случае, если

$$\frac{d_{r+2}^{ml}(c)}{d_r^{ml}(c)} \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0,$$

получаем для каждого фиксированного  $\lambda$  представление отношения  $d_r^{ml}(c)/d_{r-2}^{ml}(c)$  в виде бесконечной сходящейся цепной дроби

$$\frac{d_r^{ml}(c)}{d_{r-2}^{ml}(c)} = \frac{-C_r}{B_r - \lambda_{ml} - \frac{A_r C_{r+2}}{B_{r+2} - \lambda_{ml} - \dots}} \quad (3.29)$$

Сходимость цепной дроби (3.29) (по крайней мере при достаточно больших  $r$ ) следует из условия (3.5) и оценок (3.27). Поскольку отношение коэффициентов  $d_r^{ml}(c)/d_{r-2}^{ml}(c)$  убывает как  $c^2/(4r^2)$ , ряда (3.15) сходится и как ряд Фурье на промежутке  $[-1, 1]$ , и на всей комплексной плоскости  $\eta$ .

Очевидно, оба процесса (3.25) и (3.28) должны давать одно и то же значение отношения  $d_{r+2}^{ml}(c)/d_r^{ml}(c)$ , если  $\lambda = \lambda_{ml}(c)$ . Перейдем от дроби (3.26) к обратной

$$\frac{d_{r+2}^{ml}(c)}{d_r^{ml}(c)} = \frac{\lambda - B_r}{A_r} - \frac{C_r A_{r-2}}{A_r (\lambda - B_{r-2})} - \dots - \frac{C_2 A_0}{\lambda - B_0}. \quad (3.30)$$

Приравняв правые части в (3.30) и (3.29) с учетом сдвига индекса, получим уравнение для собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$  при четных  $l=m$

$$\begin{aligned} \frac{\lambda - B_r}{A_r} - \frac{C_r A_{r-2}}{A_r (\lambda - B_{r-2})} - \dots - \frac{C_2 A_0}{\lambda - B_0} &= \\ &= \frac{-C_{r+2}}{B_{r+2} - \lambda} - \frac{A_{r+2} C_{r+4}}{B_{r+4} - \lambda} - \dots \end{aligned} \quad (3.31)$$



Уравнение для собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$  при нечетных  $l - m$  отличается от (3.31) заменой  $A_0, B_0$  на  $A_1, B_1$ .

При численных расчетах величины  $\lambda_{ml}(c)$  в формуле (3.31) обычно полагают  $r = l - m$  и, обрывая цепную дробь, получают для  $\lambda_{ml}(c)$  конечное алгебраическое уравнение. Уравнения (3.31) при различных  $r$  получаются частичным обертыванием цепной дроби в уравнении

$$0 = B_0 - \lambda - \frac{A_0 C_2}{B_2 - \lambda} - \frac{A_2 C_4}{B_4 - \lambda} - \dots \quad (3.32)$$

Уравнение (3.32) и аналогичное ему при четных  $l - m$ , согласно (3.11) — (3.14), можно рассматривать как равенство нулю формально вычисленного бесконечного определителя системы (3.19) при четных и нечетных  $l - m$ .

После того как вычислены собственные значения  $\lambda_{ml}$ , отношение коэффициентов  $d_r^{ml}/d_{r+2}^{ml}$  находится из рекуррентных соотношений (3.25), а их абсолютное значение — из соотношения (3.21) в случае в. у. с. ф. и из соотношения (3.24) в случае с. у. с. ф.

Вытянутые угловые сфероидальные функции второго рода  $S_{ml}^{(2)}(c, \eta)$  (линейно независимые с  $S_{ml}(c, \eta)$ ) решения уравнения (1.11) при  $\lambda = \lambda_{ml}(c)$  определяются с помощью разложения по присоединенным функциям Лежандра второго рода

$$S_{ml}^{(2)}(c, \eta) = \sum_{r=-\infty}^{\infty} d_r^{ml}(c) Q_{m+r}^m(\eta). \quad (3.33)$$

Здесь коэффициенты  $d_r^{ml}(c)$  при  $r \geq 0$  те же, что и в разложении в. у. с. ф. (3.15), а при  $r < 0$  определяются по рекуррентным соотношениям (3.19) с коэффициентами  $A_r, B_r$  и  $C_r$ , заданными формулами (3.20), но уже при  $r < 0$ . Можно показать, что представление (3.33) согласуется с определением, данным в § 1.

При положительном целом  $l$  присоединенная функция Лежандра второго рода  $Q_l^m(x)$  определена формулой

$$\begin{aligned} Q_l^m(x) &= \\ &= (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} Q_l(x) = (1 - x^2)^{m/2} \frac{d^m}{dx^m} \left[ \frac{1}{2} P_l(x) \ln \frac{1+x}{1-x} - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{k=0}^{\lfloor l/2 - 1/2 \rfloor} \frac{2l - 4k - 1}{(l - k)(2k + 1)} P_{l-2k-1}(x) \right]. \quad (3.34) \end{aligned}$$

При отрицательных индексах  $l$  таких, что  $l \geq -m$ , функции  $Q_l^m(x)$  получаются предельным переходом  $\nu \rightarrow l$ ,  $l = -1, -2, \dots, -m$ , из соотношения для присоединенных функций Лежандра

$$\begin{aligned} \sin[\pi(\nu - m)] Q_{-\nu-1}^m(x) &= \\ &= \sin[\pi(\nu + m)] Q_\nu^m(x) - (-1)^m \pi \cos(\pi\nu) P_\nu^m(x), \end{aligned} \quad (3.35)$$

справедливого на комплексной плоскости индекса  $\nu$ . При значениях  $\nu = l$ ,  $l = -m, -m-1, \dots$ , функции  $Q_\nu^m(x)$ , рассматриваемые как аналитические функции индекса  $\nu$ , имеют полюс первого порядка. С другой стороны, коэффициенты  $d_r^{ml}(c)$  при  $r \leq -2m-1$  обращаются в нуль, поскольку из формул (3.20) следует, что  $A_{-2m-2} = 0$  и  $A_{-2m-1} = 0$ , причем, если перейти от целочисленного индекса  $r$  к комплексному индексу  $\nu$ , то на плоскости  $\nu$  соответствующие нули будут нулями первого порядка. Таким образом, члены ряда (3.33) при  $r \leq -2m-1$  следует понимать как результат предельного перехода

$$\begin{aligned} d_r^{ml}(c) Q_{m+r}^m(\eta) &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d_{r+\varepsilon}^{ml}(c)}{\varepsilon} \cdot \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \varepsilon Q_{m+r+\varepsilon}^m(\eta) = \\ &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d_{r+\varepsilon}^{ml}(c)}{\varepsilon} P_{-m-r-1}^m(\eta) \end{aligned}$$

и разложение (3.33) можно представить в виде

$$\begin{aligned} S_{ml}^{(2)}(c, \eta) &= \sum'_{r=-2m, -2m+1}^{\infty} d_r^{ml}(c) Q_{m+r}^m(\eta) + \\ &+ \sum'_{r=2m, 2m-1}^{\infty} d_{r|e}^{ml}(c) P_{r-m-1}^m(\eta), \end{aligned} \quad (3.36)$$

где коэффициенты  $d_{r|e}^{ml}(c)$  равны

$$d_{r|e}^{ml}(c) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{d_{-r+\varepsilon}^{ml}(c)}{\varepsilon}. \quad (3.37)$$

Для определения сплюснутых угловых сфероидальных функций второго рода  $S_{ml}^{(2)}(\rho, \eta)$  надо в формулах (3.33), (3.36), (3.37) заменить коэффициенты  $d_r^{ml}(c)$  на коэффициенты  $d_r^{ml}(\rho)$ .

**3. Другие типы разложений угловых сферонидальных функций.** Для угловых сферонидальных функций может быть написан еще целый ряд разложений по системам элементарных функций (не обязательно ортогональных) таких, что коэффициенты этих разложений удовлетворяют трехчленным рекуррентным уравнениям.

Как в у. с. ф., так и с. у. с. ф. можно разложить в степенные ряды по четным или нечетным степеням  $\eta$  в зависимости от четности  $l-m$ :

$$S_{ml}(c, \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} \sum'_{s=0,1}^{\infty} g_s(c) \eta^s, \quad (3.38)$$

$$S_{ml}(p, \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} \sum'_{s=0,1}^{\infty} g_s(p) \eta^s. \quad (3.39)$$

Подстановка разложения (3.38) в уравнение (1.11) приводит к трехчленной рекуррентной системе уравнений для коэффициентов

$$\alpha_s g_{s+2} - \beta_s g_s + \gamma_s g_{s-2} = 0, \quad (3.40)$$

где

$$\alpha_s = (s+1)(s+2),$$

$$\beta_s = (s+m)(s+m+1) - c^2 - \lambda_{ml}(c), \quad \gamma_s = -c^2. \quad (3.41)$$

Рекуррентная система для  $g_s(p)$  отличается от системы (3.40) заменой  $c^2 \rightarrow -p^2$  и  $\lambda_{ml}(c) \rightarrow \lambda_{ml}(p)$  в формулах (3.41).

Собственные значения  $\lambda_{ml}(c)$  получаются из условия равенства нулю цепной дроби, через которую выражается бесконечный определитель системы (3.40). При четных  $l-m$  уравнение для  $\lambda_{ml}(c)$  имеет вид

$$\lambda + c^2 - m(m+1) + \frac{1 \cdot 2 \cdot c^2}{\lambda + c^2 - (m+2)(m+3)} + \frac{3 \cdot 4 \cdot c^2}{\lambda + c^2 - (m+4)(m+5)} + \dots \quad (3.42)$$

Правило, по которому последовательно строятся члены цепной дроби (3.42), проще, чем в случае разложения по присоединенным полиномам Лежандра.

Отношения коэффициентов  $g_{s+2}(c)/g_s(c)$  и  $g_{s+2}(p)/g_s(p)$  убывают при больших  $s$  как  $c^2/s^2$  (соответственно  $p^2/s^2$ ), так что ряды (3.38) и (3.39) сходятся на всей плоскости  $\eta$ , однако сходимость их хуже, чем сходимость рядов (3.15) и (3.16), и для численных расчетов они значительно менее эффективны.

Нормировка (1.13) задает коэффициенты  $g_0(c)$  и  $g_1(c)$ :

$$g_0(c) = \frac{(-1)^{\frac{l-m}{2}} (l+m)!}{2^l \left(\frac{l-m}{2}\right)! \left(\frac{l+m}{2}\right)!},$$

$$g_1(c) = \frac{(-1)^{\frac{l-m-1}{2}} (l+m+1)!}{2^l \left(\frac{l-m-1}{2}\right)! \left(\frac{l+m+1}{2}\right)!}. \quad (3.43)$$

Соответственно неопределенный числовой множитель при  $g_r^{ml}(p)$  определяется из нормировочного условия

$$\sum_{s=0,1} g_s(p) = \frac{(l+m)!}{2^m m! (l-m)!}, \quad (3.44)$$

которое следует из выбранной нормировки с.у.с.ф. в точке  $\eta=1$  (1.30).

При больших значениях параметра  $c$  ряды (3.15) и (3.38) сходятся медленно, что показывают как оценки коэффициентов, так и конкретные числовые расчеты. Это связано с характером асимптотического поведения в.у.с.ф. при больших  $c$ . Таким же свойством обладают и разложения с.у.с.ф. (3.16) и (3.39) при больших  $p$ .

Для с.у.с.ф. предложены два типа разложений, которые, не будучи асимптотическими в полном смысле этого слова, имеют лучшую сходимость при больших  $p$

$$S_{ml}(p, \eta) = e^{-p(1-\eta)} \sum_{s=0}^{\infty} h_s(p) P_{m+s}^m(\eta), \quad (3.45)$$

$$S_{ml}(p, \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} e^{-p(1-\eta)} \sum_{s=0}^{\infty} b_s(p) (1 - \eta)^s. \quad (3.46)$$

Разложения (3.45) и (3.46) в явном виде не учитывают свойства четности с.у.с.ф. и удобны лишь для проме-

жутка  $[0, 1]$ . Выделение экспоненциального множителя, убывающего от точки  $\eta=1$  к точке  $\eta=0$ , как будет показано в дальнейшем, хорошо отражает асимптотическое поведение с. у. с. ф. при больших  $p$ . Разложения, удобные для промежутка  $[-1, 0]$ , получаются из (3.45) и (3.46) заменой  $\eta \rightarrow -\eta$  с использованием свойств четности с. у. с. ф.

Коэффициенты  $h_s(p)$  удовлетворяют следующей трехчленной рекуррентной системе:

$$\alpha_s h_{s+1} - \beta_s h_s + \gamma_s h_{s-1} = 0, \quad h_{-1} = 0, \quad (3.47)$$

где 
$$\alpha_s = \frac{2p(s+m+1)(s+2m+1)}{2s+2m+3},$$

$$\beta_s = (s+m)(s+m+1) - \lambda_{ml}(p), \quad \gamma_s = -\frac{2ps(s+m)}{2s+2m-1}. \quad (3.48)$$

Рекуррентная система для коэффициентов  $b_s(p)$  отличается от системы (3.47) только значениями  $\alpha_s, \beta_s, \gamma_s$ :

$$\begin{aligned} \alpha_s &= 2(s+1)(s+m+1), \\ \beta_s &= (s+m)(s+m+1) + 2p(2s+m+1) - \lambda_{ml}(p), \\ \gamma_s &= 2(s+m)p. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Собственные значения  $\lambda_{ml}(p)$  в случае системы (3.47) находятся из уравнения

$$\beta_0(\lambda) - \frac{\alpha_0 \gamma_1}{\beta_1(\lambda) - \beta_2(\lambda) - \dots} = 0. \quad (3.50)$$

Отношение коэффициентов  $h_{s+1}(p)/h_s(p)$  при больших  $s$  убывает как  $p/s$ , отношение коэффициентов  $b_{s+1}(p)/b_s(p)$  убывает как  $2p/s$ . Ряды (3.45) и (3.46) сходятся на всей плоскости  $\eta$ . Нормировку с. у. с. ф. (1.30) задаст коэффициент  $b_0(p)$ :

$$b_0(p) = \frac{(l+m)!}{2^m m! (l-m)!} \quad (3.51)$$

и приводит к следующему нормировочному условию для коэффициентов  $h_s(p)$ :

$$\sum_{s=0}^{\infty} h_s(p) \frac{(2m+s)!}{s!} = \frac{(l+m)!}{(l-m)!}. \quad (3.52)$$

Разложения в у. с. ф., аналогичные по свойствам разложениям (3.45) и (3.46), не найдены. Формальный переход  $p \rightarrow -ic$  приводит к разложению по комплекснозначной системе функций с комплексными коэффициентами.

В заключение запишем еще одно разложение в у. с. ф., для которого имеется очевидный аналог и в случае с. у. с. ф.

$$S_{ml}(c, \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} \sum_{s=0}^{\infty} g_s (1 - \eta^2)^s, \quad l - m \text{ четное}, \quad (3.53)$$

$$S_{ml}(c, \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} \eta \sum_{s=0}^{\infty} g_s (1 - \eta^2)^s, \quad l - m \text{ нечетное}.$$

Коэффициенты  $g_s$  удовлетворяют рекуррентной системе (3.40) с коэффициентами  $\alpha_s, \beta_s, \gamma_s$ :

$$\begin{aligned} \alpha_s &= 4(s+2)(s+m+2), \\ \beta_s &= (2s+m+2)(2s+m+3) - \lambda_{ml}(c), \quad l - m \text{ четное}, \\ \beta_s &= (2s+m+3)(2s+m+4) - \lambda_{ml}(c), \quad l - m \text{ нечетное}, \\ \gamma_s &= c^2. \end{aligned} \quad (3.54)$$

С вычислительной точки зрения разложение (3.53) является удобным лишь в малой окрестности точек  $\eta = \pm 1$ .

Из разложения (3.53) можно получить еще одно разложение для с. у. с. ф. второго рода, используя формулу Лиувилля, которая позволяет найти второе решение дифференциального уравнения второго порядка по первому решению. В нашем случае формула Лиувилля принимает вид

$$S_{ml}^{(2)}(c, \eta) = c S_{ml}(c, \eta) \left[ \int_0^{\eta} \frac{d\eta}{S_{ml}^2(c, \eta)(1 - \eta^2)} + A \right].$$

Постоянная  $A$  находится путем сравнения коэффициента при какой-нибудь степени  $1 - \eta^2$  с соответствующим коэффициентом, полученным из разложения (3.36). Поскольку в данной книге не ставилась задача подробного исследования произвольных решений сфероидально-

го уравнения, за деталями мы отсылаем к книгам Фламмера (1962) и Meixner, Schäfer (1954).

#### 4. Разложения радиальных сфероидальных функций.

Поскольку в. р. с. ф. являются аналитическим продолжением перенормированных в. у. с. ф. на полуось  $\xi \in [1, \infty)$ , а ряды (3.15), (3.38), (3.53), если выделить множитель  $(1 - \eta^2)^{m/2}$ , сходятся на всей комплексной плоскости  $\eta$ , можно считать их разложениями и для в. р. с. ф. Однако эти ряды никак не учитывают осцилляций в. р. с. ф. при  $\xi \rightarrow \infty$ . Поэтому их сходимость при возрастании  $\eta$  резко ухудшается и для численных расчетов они мало пригодны, подобно тому, как степенные ряды не годятся для вычисления тригонометрических функций при больших значениях аргумента.

Разложения в. р. с. ф. по системам функций, которые учитывают характер поведения в. р. с. ф., можно получить, используя интегральные представления. Подставив разложение в. у. с. ф. по полиномам Лежандра (3.15) в интегральное представление (2.10)

$$R_{ml}(c, \xi) = \frac{\kappa_{ml}(c)}{N_{ml}(c)} \int_{-1}^1 (\xi^2 - 1)^{m/2} (1 - t^2)^{m/2} e^{ic\xi t} \times \\ \times \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) P_{m+r}^m(t) dt \quad (3.55)$$

и воспользовавшись формулой Родрига для присоединенных полиномов Лежандра (1.14), получим

$$R_{ml}(c, \xi) = N_{ml}^{-1}(c) \kappa_{ml}(c) (\xi^2 - 1)^{m/2} \times \\ \times \int_{-1}^1 e^{ic\xi t} \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(-1)^m (2m+r)!}{r! 2^{m+r} (m+r)!} \frac{d^r}{dt^r} (t^2 - 1)^{m+r} dt.$$

Поменяем местами суммирование и интегрирование и проинтегрируем  $r$ -е слагаемое  $r$  раз по частям:

$$R_{ml}(c, \xi) = N_{ml}^{-1}(c) \kappa_{ml}(c) (\xi^2 - 1)^{m/2} \times \\ \times \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(-1)^{m+r} (2m+r)! (ic\xi)^r}{2^{m+r} r! (m+r)!} \int_{-1}^1 e^{ic\xi t} (t^2 - 1)^{m+r} dt.$$

Используя интегральное представление для функций

Бесселя

$$J_{m+r+1/2}(c\xi) = \frac{(c\xi)^{r+m+1/2}}{\sqrt{\pi} 2^{m+r+1/2} (r+m)!} \int_{-1}^1 e^{ic\xi t} (1-t^2)^{m+r} dt,$$

получим разложение в. р. с. ф. первого рода по функциям Бесселя

$$R_{ml}(c, \xi) = \frac{\kappa_{ml}(c)}{N_{ml}(c)} \frac{(\xi^2 - 1)^{m/2}}{(c\xi)^{m+1/2}} \times \\ \times \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{1}{r!} i^r \sqrt{2\pi} [(2m+r)!]^2 J_{m+r+1/2}(c\xi). \quad (3.56)$$

Заменяя  $\kappa_{ml}(c)$  и  $N_{ml}(c)$  выражениями (3.23) и (3.22), можно преобразовать разложение (3.56) к виду

$$R_{ml}(c, \xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} \left[ \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} \right]^{-1} \times \\ \times \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)! i^{r+m-l}}{r!} J_{m+r+1/2}(c\xi). \quad (3.57)$$

Таким же способом из интегральных представлений (2.24) и (2.25) с учетом интегральных представлений функций Ханкеля первого и второго рода

$$H_k^{(1)}(c\xi) = \frac{(c\xi)^{k+1/2}}{\sqrt{\pi} 2^{k-1/2} k!} \int_{1+i\infty}^1 e^{ic\xi t} (1-t^2) dt, \\ H_k^{(2)}(c\xi) = \frac{(c\xi)^{k+1/2}}{\sqrt{\pi} 2^{k-1/2} k!} \int_{-1}^{-1+i\infty} e^{ic\xi t} (1-t^2) dt$$

получаются разложения для в. р. с. ф. третьего и четвертого рода по функциям Ханкеля

$$R_{ml}^{(3),(4)}(c, \xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} \left[ \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} \right]^{-1} \times \\ \times \sum_{r=0,1}^{\infty} i^{r+m-l} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} H_{m+r+1/2}^{(1),(2)}(c\xi). \quad (3.58)$$



Разложения для в. р. с. ф. второго рода могут быть найдены с помощью формулы (1.24)

$$R_{ml}^{(2)}(c, \xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} \left[ \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} \right]^{-1} \times \\ \times \sum_{r=0,1}^{\infty} i^{r+m-l} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!} N_{m+r+1/2}(c\xi), \quad (3.59)$$

где  $N_m(z)$  — функция Неймана.

Нужно заметить, что если изменение порядка дифференцирования и интегрирования в случае в. р. с. ф. первого рода математически оправдано и ряд (3.49) после выделения множителя  $(\xi^2 - 1)^{m/2}$  сходится при всех комплексных  $\xi$ , то в случае в. р. с. ф. остальных родов это не так, ряды (3.58), (3.59) являются по существу расходящимися. Тем не менее при не слишком малых значениях  $c\xi$  ( $c\xi \gg 1$ ) они вполне пригодны для численных расчетов.

Поскольку цилиндрические функции от полуцелого индекса выражаются через элементарные функции, для в. р. с. ф. можно написать следующее разложение:

$$R_{ml}(c, \xi) = \frac{(\xi^2 - 1)^{m/2}}{\xi^{m+1}} \left\{ \cos \left[ c\xi - \frac{(l-m+1)\pi}{2} \right] \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s} \xi^{-2s} + \right. \\ \left. + \sin \left[ c\xi - \frac{(l-m+1)\pi}{2} \right] \sum_{s=0}^{\infty} a_{2s+1} \xi^{-2s-1} \right\}. \quad (3.60)$$

К сожалению, коэффициенты разложения  $a_s$  удовлетворяют не трехчленным, а пятичленным рекуррентным соотношениям, и поэтому разложения (3.60) практически не используются. Нетрудно написать ряды вида (3.60) и для радиальных функций других родов.

Сходящийся ряд для функции  $R_{ml}^{(2)}(c, \xi)$  получается, если аналитически продолжить разложение (3.36) для  $S_{ml}^{(2)}(c, \eta)$  на полуось  $\xi \in [1, \infty)$ . Подробнее с разложениями в. р. с. ф. второго, третьего и четвертого рода можно ознакомиться по книгам Фламмера (1962) и Meixner, Schäfer (1954).

Приведем в справочных целях коэффициент  $k_{ml}^{(2)}(c)$ , связывающий в. у. с. ф. второго рода с в. р. с. ф. второго

рода:

$$k_{ml}^{(2)}(c) = \lim_{\substack{\eta \rightarrow 1-0 \\ \xi \rightarrow 1+0}} \frac{R_{ml}^{(2)}(c, \xi) (\xi^2 - 1)^{m/2}}{S_{ml}^{(2)}(c, \eta) (1 - \eta^2)^{m/2}} =$$

$$= \begin{cases} \frac{2^{l-m} (2m)! \left(\frac{l-m}{2}\right)! \left(\frac{l+m}{2}\right)! d_{-2m}^{ml}(c)}{(2m-1) m! (l+m)! c^{m-1}} \sum_{r=0}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r}, & l-m \text{ четное,} \\ \frac{2^{l-m} (2m)! \left(\frac{l-m-1}{2}\right)! \left(\frac{l+m+1}{2}\right)! d_{-2m+1}^{ml}(c)}{(2m-3) (2m-1) m! (l+m+1)! c^{m-2}} \sum_{r=1}^{\infty} d_r^{ml}(c) \times \\ \times \frac{(2m+r)!}{r!}, & l-m \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (3.61)$$

Коэффициент  $k_{ml}(c)$ , связывающий функции первого рода  $S_{ml}(c, \eta)$  и  $R_{ml}(c, \xi)$ , находится путем сравнения разложений (3.15) и (3.57) в единице и оказывается равным

$$k_{ml}(c) = \lim_{\substack{\eta \rightarrow 1- \\ \xi \rightarrow 1+0}} \frac{R_{ml}(c, \xi) (1 - \eta^2)^{m/2}}{(\xi^2 - 1)^{m/2} S_{ml}(c, \eta)} =$$

$$= \begin{cases} \frac{(2m+1) (l+m)! \sum_{r=0}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!}}{2^{l+m} d_0^{ml}(c) c^m m! \left(\frac{l-m}{2}\right)! \left(\frac{l+m}{2}\right)!}, & l-m \text{ четное,} \\ \frac{(2m+3) (l+m+1)! \sum_{r=0}^{\infty} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)!}{r!}}{2^{l+m} d_1^{ml}(c) c^{m+1} m! \left(\frac{l-m-1}{2}\right)! \left(\frac{l+m+1}{2}\right)!}, & l-m \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (3.62)$$

Используя интегральное представление (3.16), можно построить разложения с. р. с. ф. по цилиндрическим функциям того же типа, что и (3.57), (3.59) для в. р. с. ф.  $R_{ml}(p, i\xi)$ :

$$R_{ml}(p, i\xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2p\xi}} \left(\frac{\xi^2 - 1}{\xi^2}\right)^{m/2} \sum_{r=0,1}^{\infty} d_r^{ml}(p) \times$$

$$\times \frac{(2m+r)! i^{r+m+l}}{r!} J_{m+r+1/2}(p\xi). \quad (3.63)$$

Разложения с.р.с.ф. других родов получаются заменой в формуле (3.63) функций Бесселя на функции Ханкеля и Неймана.

5. Сведения о таблицах сфероидальных функций. Если еще лет двадцать тому назад применение сфероидальных функций в математической физике сдерживалось отсутствием достаточно полных и точных таблиц, то теперь эти трудности в значительной степени преодолены. К настоящему времени создано несколько программ для ЭВМ, позволяющих достаточно точно вычислять сфероидальные функции в широком интервале изменения аргумента, параметра и индексов. Имеется также значительное число таблиц, данные о которых приведены ниже.

Подавляющее большинство методов вычислений сфероидальных функций базируется на разложениях по более элементарным функциям, рассмотренных в этом параграфе. Наибольшие вычислительные трудности при этом представляет нахождение собственных значений. Собственные значения определяются либо из уравнений, получаемых обрыванием соответствующей цепной дроби, либо непосредственно из обращения в нуль обрезанного определителя соответствующей рекуррентной системы (Hodge, 1970). Алгоритмы численного решения этих уравнений выбираются различные и здесь обсуждаться не будут. Во всех методах важно задать некоторое начальное приближение для собственных значений, которое может быть получено из разложения (4.15) при малых значениях параметра и асимптотических формул при больших значениях параметра. Практическим критерием того, является ли параметр малым (большим), может, например, служить неравенство  $c < l + 3$  ( $c > l + 3$ ) (Ерашевская и др., 1973).

Другой характерной особенностью всех используемых алгоритмов является предварительное тождественное преобразование (см. (3.6)) цепной дроби, определяющей собственные значения. Оно используется для того, чтобы оперировать при вычислениях на ЭВМ величинами одного порядка.

Для вычисления в.у.с.ф. в основном используется разложение (3.15) по присоединенным полиномам Лежандра, для с.у.с.ф. разложение (3.16), а иногда при больших  $p$  разложение (3.39) с выделенной экспонентой. Следует обратить внимание, что нормировка с.у.с.ф. и в.у.с.ф. в таблицах бывает различная. Для вычисления радиальных функций используются при малых  $c\xi$  разложения по присоединенным полиномам Лежандра (3.15) и (3.62) с учетом перенормировки (3.62), а при больших  $c\xi$  разложения по функциям Бесселя (3.57) и (3.63). Нахождение функций второго рода представляет собой более трудную вычислительную задачу, и они протабулированы значительно менее полно, чем функции первого рода.

В ряде работ на основе формулы (2.13) вычислены (при  $m=0$ ) собственные значения интегрального уравнения для в.у.с.ф. (Slepian, 1965; Slepian, Sonnenblick, 1965; Frieden, 1971).

Укажем также на статьи Weinhold, Chipen, 1972; Patel, 1967), где для с.у.с.ф. в связи с проблемой иона  $H_2^+$  предлагаются приближенные выражения, зависящие от ряда параметров, которые находятся из вариационных соображений. Перечислим наиболее известные и полные таблицы сфероидальных функций и оригинальные статьи, содержащие большой числовой материал.

Stratton, Morse, Chu, Hunter (1941) Таблицы содержат собственные значения и коэффициенты разложения с у. с. ф. и в. у. с. ф. по присоединенным полиномам Лежандра при значениях параметра  $c, p=0(0,2) 5,0$  и индексов  $m=0(1), l=m(1)3$  с 5 знаками.

Stratton, Morse, Chu, Little, Corbato (1956). Таблицы содержат собственные значения и коэффициенты разложения с. у. с. ф. и в. у. с. ф. по присоединенным полиномам Лежандра и коэффициенты разложений с. р. с. ф. и в. р. с. ф. по функциям Бесселя при значениях параметра  $c, p=0,0(0,1)1,0(0,2)8,0$  и индексов  $m=0(1)8, l=m(1)8$  с 7 знаками

Фламмер (1962). В книге содержится обширный численный материал по сфероидальным функциям Приведены таблицы собственных значений, коэффициентов разложений по полиномам Лежандра, разложений этих коэффициентов при малых значениях параметра, самих сфероидальных функций и др. Наиболее точные вычисления выполнены с 8 знаками.

Stuckey, Layton (1964). Таблицы собственных значений и коэффициентов разложений по полиномам Лежандра при значениях параметра  $c, p=0,2(0,25) 10,0$  и индексов  $m=0, l=0(1) 10$  с 11 знаками.

Hunter, Kirk, Sinior, Wittenberg, (1965). Таблицы в. у. с. ф. при значениях параметра  $c=0,1(0,1)10,0$ , индексов  $m=0, l=0(1)20$  и аргумента  $\eta=0(0,05)1$ .

Hanish, Baier, van Vurep, King (1971) Таблицы радиальных сфероидальных функций, вычисленные с 18 знаками. Вытянутые функции приведены при значениях параметра  $c=0,1(0,1) 1 2(1)10 12(2)30 35 40$ , индексов  $m=0(1)2, l=m(1)m+49$ , независимой переменной  $\xi=1,00000001 1,0000001 1,000001 1,0001 1,01 1,02 (0,02) 1,2 1,4 (0,2)2$ . Сплюснутые функции приведены при тех же значениях параметра и индексов и следующих значениях аргумента  $\xi=0,00(0,02) 0,10 0,1 (0,2) 1,0 (0,2) 2,0$ .

Ерашевская, Иванов, Пальцев, Соколов (1973). Таблицы с. р. с. ф. первого и второго рода и их первых производных при значениях параметра  $p=0,5(0,5)8$ , индексов  $m=0(1)16, l=m(1)16$  и аргумента  $\xi=0(0,5)1,5$ , вычисленные с 15 знаками

Slerian (1964). В статье содержится числовой и графический материал по обобщенным сфероидальным функциям.

Slerian (1965). В статье имеются таблицы вытянутых сфероидальных функций при больших значениях параметра  $c$  и производится сравнение с асимптотическими формулами

Slerian, Soppenblick (1965). Таблицы собственных значений интегрального уравнения для в. у. с. ф. при значениях индексов  $m=0, l=0(1)20 25(5) 40$  и параметра  $c=1(1)20 25(5)40$  с 8 знаками.

Oguchi (1970). В статье содержится численный и графический материал о поведении собственных значений  $\lambda$  при комплексных значениях параметра.

В указателе литературы можно найти еще ряд ссылок на таблицы сфероидальных функций.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Разложения угловых сфероидальных функций по присоединенным полиномам Лежандра и радиальных функций по функциям Бесселя были предложены Niven (1881). MacLaurin (1898) и Fischer (1937) рассмотрели разложения сфероидальных функций в степенные ряды.

Разложения с у с. ф с выделенной экспонентой были введены и исследованы Wilson (1928a, b), Baber, Hassé (1935) и Bouwkamp (1960a, b, c). В работе Chu, Stratton (1941) дан дополнительный анализ рядов для сфероидальных функций по присоединенным полиномам Лежандра и функциям Бесселя и введены разложения для сфероидальных функций второго рода. Независимо разложения функций второго рода получил Bouwkamp (1947). Разложения радиальных функций третьего и четвертого рода по функциям Ханкеля исследовали Fischer (1937), Leitner, Spence (1950), Морс и Фешбах (1958). В работах Schmid (1948, 1949) рассмотрены общие свойства решений бесконечных систем трехчленных рекуррентных уравнений.

Meixner (1950, 1951) предложил строить разложения для сфероидальных функций по функциям Бесселя и присоединенным полиномам Лежандра, сравнивая представления сферической волны в виде рядов по сферическим и сфероидальным функциям. В книге Meixner, Schäike (1954) дано большое число разложений как для сфероидальных функций рассмотренных здесь, так и для других решений сфероидального уравнения (1.1) при произвольных  $c, \lambda$ . Подробный анализ различных разложений для сфероидальных функций приводится в монографиях Фламмера (1962), Морса и Фешбаха (1958), Бейтмена и Эрдейи (1967) и обзорах Rhodes (1970), Murakami и др. (1970, 1971).

#### § 4. Разложения сфероидальных функций при малых значениях параметра

1. **Вычисления по теории возмущений.** Дифференциальный оператор (1.1), порождающий в. у. с. ф., можно представить в виде

$$(-L_0 + \lambda + c^2 W) S_{ml}(c, \eta) = 0, \quad (4.1)$$

где оператор умножения  $W$

$$Wf(\eta) = (1 - \eta^2)f(\eta) \quad (4.2)$$

рассматривается как возмущение. Норма  $\|W\|$  оператора  $W$ , заданного на функциях  $f(\eta) \in \mathcal{L}_2(-1, 1)$ , определяется следующим образом:

$$\|W\|^2 = \sup_{f(\eta)} \frac{\int_{-1}^1 (1 - \eta^2)^2 |f(\eta)|^2 d\eta}{\int_{-1}^1 |f(\eta)|^2 d\eta}. \quad (4.3)$$

Оценив числитель в формуле (4.3) по теореме о среднем, приходим к неравенству

$$\|W\| \leq 1, \quad (4.4)$$

из которого следует, что возмущение является ограниченным.

Собственными функциями невозмущенного оператора

$$(-L_0 + \lambda^{(0)}) P_l^m(\eta) = 0 \quad (4.5)$$

являются присоединенные полиномы Лежандра  $P_l^m(\eta)$ , а соответствующие собственные значения  $\lambda^{(0)}$  равны

$$\lambda_{ml}^{(0)} = l(l+1). \quad (4.6)$$

С помощью стандартной схемы теории возмущений можно получить для в. у. с. ф. ряды по степеням  $c^2$  в виде

$$S_{ml}(c, \eta) = P_l^m(\eta) + \sum_{k=1}^{\infty} c^{2k} [S(\eta)]_k, \quad (4.7)$$

а также разложение соответствующих собственных значений

$$\lambda_{ml}(c) = l(l+1) + \sum_{k=1}^{\infty} c^{2k} [\lambda]_k. \quad (4.8)$$

Все матричные элементы от возмущения по невозмущенным функциям вычисляются в явном виде. Кроме того, поскольку возмущение можно представить в виде суммы трех полиномов Лежандра, имеется только конечное число матричных элементов, отличных от нуля. Поэтому реализация теории возмущений сводится к алгебраическим операциям. В частности, поправка первого порядка к собственному значению равна

$$\begin{aligned} c^2 [\lambda]_1 &= -c^2 \int_{-1}^1 (1-\eta^2) [P_l^m(\eta)]^2 d\eta \bigg/ \int_{-1}^1 [P_l^m(\eta)]^2 d\eta = \\ &= -\frac{c^2}{2} \left[ 1 + \frac{(2m-1)(2m+1)}{(2l-1)(2l+3)} \right]. \end{aligned} \quad (4.9)$$

Согласно теоремам о возмущениях самосопряженных дифференциальных операторов второго порядка ограниченными операторами (Rellich, 1937; Meixner, Schäfer, 1954) ряд (4.8) сходится по крайней мере при

$$c^2 \leq \frac{\nu_{ml}}{2\|W\|} = \frac{\rho_{ml}}{2}, \quad (4.10)$$

где  $\rho_{ml}$  — расстояние от невозмущенного собственного значения  $\lambda_{ml}^{(0)}$  до ближайшего соседнего невозмущенного собственного значения. При значениях  $c^2$ , удовлетворяющих условию (4.10), выполняется неравенство

$$|\lambda_{ml}(c) - \lambda_{ml}^{(0)}| \leq \rho_{ml}/2. \quad (4.11)$$

Из формулы (4.6) следует, что

$$\rho_{ml} = \begin{cases} 2(l+1), & l = m, \\ 2l, & l = m+1, m+2, \dots \end{cases} \quad (4.12)$$

Используя оценку Коши для коэффициентов произвольного степенного ряда (Смирнов, 1974, т. 3, стр. 53) получим, что коэффициенты  $[\lambda]_k$  разложения (4.8) оцениваются следующим образом:

$$[\lambda]_k \leq \frac{\rho_{ml}}{2} \left[ \frac{\rho_{ml}}{2} \right]^{-k} = \begin{cases} (l+1)^{1-k}, & l = m, \\ l^{1-k}, & l = m+1, m+2, \dots \end{cases} \quad (4.13)$$

Поэтому разложение по степеням  $c^2$  (4.8) является одновременно асимптотическим разложением по индексу  $l$  при  $l \rightarrow \infty$ . Это разложение, однако, не имеет формы степенного ряда по обратным степеням  $l$ . Существенно также, что в отличие от равномерного по  $c$  асимптотического представления, полученного в § 6, оно не допускает, естественно, предельного перехода  $c \rightarrow \infty$ .

Оценки (4.10) и (4.13) довольно грубые. Детальный анализ сходимости ряда (4.8) проведен в работе Schäfer, Groh (1962). Тот факт, что ряд (4.8) имеет конечный радиус сходимости, следует из наличия точек ветвления функций  $\lambda_{lm}(c)$  на комплексной плоскости  $c$ , обнаруженных при численных расчетах Oguchi (1970).

Разложения с. у. с. ф. и соответствующих им собственных значений  $\lambda_{ml}(p)$  получаются из (4.8) и (4.7) после формальной замены  $c^2 \rightarrow -p^2$ .

**2. Алгебраический подход.** Хотя теория возмущений дает возможность решить принципиальные вопросы, связанные с разложением собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$  в ряды по степеням  $c^2$ , непосредственно коэффициенты  $[\lambda]_k$  удобнее находить из уравнений типа (3.31) алгебраическим путем. Перепишем уравнение (3.31), частично

«обернув» входящие в него цепные дроби:

$$\lambda_{ml}(c) = B_{l-m} - \frac{C_{l-m} A_{l-m-2}}{B_{l-m-2} - \lambda_{ml}(c) - \dots} \frac{C_2 A_0}{B_0 - \lambda_{ml}(c)} - \frac{A_{l-m} C_{l-m+2}}{B_{l-m+2} - \lambda_{ml}(c) - \dots} \frac{A_{l-m+2} C_{l-m+4}}{B_{l-m+4} - \lambda_{ml}(c) - \dots}, \quad (4.14)$$

где коэффициенты  $A_r$ ,  $B_r$ ,  $C_r$  заданы формулами (3.28). Уравнение (4.14) можно решать итерациями, разлагая входящие в него цепные дроби в ряды по степеням  $c^2$  и беря последовательно все большее число членов цепных дробей. Приведем здесь часть известных результатов:

$$\begin{aligned} \lambda_{ml}(c) = & l(l+1) - \frac{c^2}{2} \left[ 1 + \frac{(2m-1)(2m+1)}{(2l-1)(2l+3)} \right] + \\ & + \frac{c^4}{2} \left[ \frac{(l-m-1)(l-m)(l+m-1)(l+m)}{(2l-3)(2l-1)^3(2l+1)} - \right. \\ & \left. - \frac{(l-m+1)(l-m+2)(l+m+1)(l+m+2)}{(2l+1)(2l+3)^3(2l+5)} \right] - \\ & - c^6 (4m^2 - 1) \left[ \frac{(l-m-1)(l-m)(l+m-1)(l+m)}{(2l-5)(2l-3)(2l-1)^5(2l+1)(2l+3)} - \right. \\ & \left. - \frac{(l-m+1)(l-m+2)(l+m+1)(l+m+2)}{(2l-1)(2l+1)(2l+3)^5(2l+5)(2l+7)} \right] + \\ & + c^8 [\lambda]_4 + O(c^{10}), \quad (4.15) \end{aligned}$$

$$\lambda_{00}(c) = -\frac{2}{3} c^2 - \frac{2}{135} c^4 + \frac{4}{8505} c^6 + \frac{26}{1913625} c^8 + O(c^{10}). \quad (4.16)$$

Коэффициент  $[\lambda]_4$  выписан в табл. 3. В табл. 4 приведены численные значения коэффициентов  $[\lambda]_k$  для нескольких первых значений  $m$  и  $l$ .

С помощью формулы (4.15) удается вычислить значения  $\lambda_{ml}(c)$  при  $c/l \leq 1$  ( $l \neq 0$ ) с точностью не менее трех-четырех знаков. Разложение (4.15) раньше широко использовалось для отыскания  $\lambda_{ml}(c)$ , однако при современном развитии ЭВМ значительно проще находить непосредственно корни цепной дроби (4.14). При этом вычисленное по (4.15) значение  $\lambda_{ml}(c)$  берется как начальное приближение.

Обратимся теперь к разложению в. у. с. ф. по присоединенным полиномам Лежандра (3.15). Отношение



Коэффициент  $[\lambda]_4$  разложения (4.15)

$$\begin{aligned}
[\lambda]_4 & 2(4m^2 - 1)^2 \left\{ \frac{(l-m-1)(l-m)(l+m-1)(l+m)}{(2l-5)^2(2l-3)(2l-1)^7(2l+1)(2l+3)^2} - \right. \\
& \left. - \frac{(l-m+1)(l-m+2)(l+m+1)(l+m+2)}{(2l-1)^2(2l+1)(2l+3)^7(2l+5)(2l+7)^2} \right\} + \\
& + \frac{1}{16} \left\{ \frac{(l-m-3)(l-m-2)(l-m-1)(l-m)(l+m-3)(l+m-2)(l+m-1)(l+m)}{(2l-7)(2l-5)^2(2l-3)^3(2l-1)^4(2l+1)} - \right. \\
& \left. - \frac{(l-m+1)(l-m+2)(l-m+3)(l-m+4)(l+m+1)(l+m+2)(l+m+3)(l+m+4)}{(2l+1)(2l+3)^4(2l+5)^3(2l+7)^2(2l+9)} \right\} + \\
& + \frac{1}{8} \left\{ \frac{(l-m+1)^2(l-m+2)^2(l+m+1)^2(l+m+2)^2}{(2l+1)^2(2l+3)^7(2l+5)^2} - \frac{(l-m-1)^2(l-m)^2(l+m-1)^2(l+m)^2}{(2l-3)^2(2l-1)^7(2l+1)^2} \right\} + \\
& + \frac{1}{2} \frac{(l-m-1)(l-m)(l-m+1)(l-m+2)(l+m-1)(l+m)(l+m+1)(l+m+2)}{(2l-3)(2l-1)^4(2l+1)^2(2l+3)^4(2l+5)}
\end{aligned}$$

Численные значения коэффициентов  $[\lambda]_1, [\lambda]_2, [\lambda]_3, [\lambda]_4$   
разложения (4.8)  
(по Meixner, Schafke, 1954)

$m$	$l$	$([\lambda]_1+1) \cdot 10^8$	$[\lambda]_2 \cdot 10^8$	$[\lambda]_3 \cdot 10^8$	$[\lambda]_4 \cdot 10^8$
0	0	33 333 333	-1481 481	47 031	1 359
	1	60 000 000	- 685 714	-6 095	259
	2	52 380 952	1 015 009	-47 608	-1 411
	3	51 111 111	329 418	5 960	-265
	4	50 649 351	177 505	531	50
1	1	20 000 000	-457 143	12 190	-210
	2	42 857 143	-388 727	1 442	56
	3	46 666 667	136 476	-11 825	213
	4	48 051 948	119 024	-1 315	-56
2	2	14 285 714	-194 363	3 606	-58
	3	33 333 333	-224 467	1 279	6
	4	40 259 740	-21 399	-3 097	60

коэффициентов этого разложения  $d_r^{ml}(c)/d_{l-m}^{ml}(c)$  можно представить в виде ряда по степеням  $c^2$ . Последовательные члены этого ряда находятся из рекуррентных уравнений (3.19) после подстановки в них разложения для собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$ . Выпишем, например, уравнения, в которые входит коэффициент  $d_{l-m}^{ml}(c)$ , и потребуем их выполнения с точностью до величин порядка  $O(c^4)$ :

$$A_{l-m} d_{l-m+2}^{ml} + (B_{l-m} - \lambda_{ml}) d_{l-m}^{ml} + C_{l-m} d_{l-m-2}^{ml} = 0, \quad (4.17)$$

$$A_{l-m-2} d_{l-m}^{ml} + (B_{l-m-2} - \lambda_{ml}) d_{l-m-2}^{ml} + C_{l-m-2} d_{l-m-4}^{ml} = 0, \quad (4.18)$$

$$A_{l-m+2} d_{l-m+4}^{ml} + (B_{l-m+2} - \lambda_{ml}) d_{l-m+2}^{ml} + C_{l-m+2} d_{l-m}^{ml} = 0. \quad (4.19)$$

Если подставить в уравнение (4.17) два первых слагаемых разложения (4.15) и выражения (3.20) для коэффициентов  $A_r, B_r$  и  $C_r$ , то равенство будет выполнено с

точностью до  $O(c^4)$ . Из уравнений (4.18) и (4.19) следует, что

$$d_{l-m-2}^{ml}(c) = c^2 \frac{(l+m)(l+m-1)}{2(2l-1)^2(2l+1)} d_{l-m}^{ml}(c) + O(c^4), \quad (4.20)$$

$$d_{l-m+2}^{ml}(c) = -c^2 \frac{(l-m+2)(l-m+1)}{2(2l+1)(2l+3)^2} d_{l-m}^{ml}(c) + O(c^4). \quad (4.21)$$

Беря все большее число уравнений рекуррентной системы (3.19) и подставляя в них последовательно коэффициенты  $[\lambda]_k$ , можно найти отношение коэффициентов  $d_r^{ml}(c)/d_{l-m}^{ml}(c)$  в виде разложения

$$d_r^{ml}(c)/d_{l-m}^{ml}(c) = c^{l-r+l+ml} \sum_{k=0}^{\infty} [d_r]_k c^{2k}. \quad (4.22)$$

Ряд по степеням  $c^2$  для  $d_{l-m}^{ml}(c)$  находится из нормировки в. у. с. ф. В частности, из интегральной нормировки (1.12) получаем

$$d_{l-m}^{ml}(c) = \left[ \frac{2}{2l+1} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{-1/2} + O(c^4). \quad (4.23)$$

Очевидно, что если подставить разложение (4.22) в разложение в. у. с. ф. по присоединенным полиномам Лежандра (3.15), то с точностью до замены порядка суммирования должен получиться ряд теории возмущений (4.7). Таким образом, функции  $[S(\eta)]_k$  из (4.7) раскладываются не в бесконечные ряды по присоединенным полиномам Лежандра  $P_l^m(\eta)$ , а в конечные суммы вида

$$[S(\eta)]_k = d_{l-m}^{ml}(c) \sum_{r=l-m-2k \geq 0}^{l-m+2k} [d_r]_k P_{m+r}^m(\eta). \quad (4.24)$$

Перейдем теперь к исследованию поведения в. р. с. ф. при малых  $c$ . Для этого можно использовать разложение в. р. с. ф. по функциям Бесселя (3.57). Если рассматривать только большие значения аргумента, такие, что  $c\xi \geq M_0 > 0$  при  $c \rightarrow 0$ ,  $\xi \rightarrow \infty$ , то из (3.57) и (4.22) следует

$$R_{ml}(c, \xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} \left( \frac{\xi^2 - 1}{\xi^2} \right)^{m/2} J_{m+r+1/2}(c\xi) + O(c^2). \quad (4.25)$$

При этом величина поправочного слагаемого  $O(c^2)$  зависит от постоянной  $M_0$ .

Когда  $c \rightarrow 0$ , а значение  $\xi$  фиксировано, в разложении (3.57) от функций Бесселя можно перейти к их представлению при малом аргументе

$$J_{m+r+1/2}(c\xi) = \frac{(c\xi)^{m+r+1/2}}{\sqrt{2\pi}(2m+2r+1)!} [1 + O((c\xi)^2)]. \quad (4.26)$$

Учитывая характер зависимости коэффициентов  $d_r^{ml}(c)$  от параметра  $c$  (см. (4.22)), получим, что члены разложения (3.57) до  $(l-m)$ -го содержат множителем одинаковую степень малого параметра  $c$ . Сумма этих членов дает представление в. р. с. ф. при  $c \rightarrow 0$  и фиксированных  $\xi$ , а именно

$$\begin{aligned} R_{ml}(c, \xi) &= \frac{(\xi^2 - 1)^{m/2} c^m (l-m)!}{d_{l-m}^{ml}(c) (l+m)!} \times \\ &\times \sum_{r=0,1}^{l-m} d_r^{ml}(c) \frac{(2m+r)! i^{r+m-l}}{r! (2m+2r+1)!} (c\xi)^r [1 + O(c^2)] = \\ &= \frac{(\xi^2 - 1)^{m/2} c^l}{(2l+1)!} \left\{ \xi^{l-m} - \xi^{l-m-2} \frac{(l-m)(l-m-1)}{1 \cdot 2 \cdot (2l-1)} + \right. \\ &+ \xi^{l-m-4} \frac{(l-m)(l-m-1)(l-m-2)(l-m-3)}{2! 2^2 (2l-3)(2l-1)} + \dots \left. \right\} \times \\ &\times [1 + O(c^2)]. \quad (4.27) \end{aligned}$$

Здесь главные члены асимптотики  $d_r^{ml}(c)$  при  $c \rightarrow 0$  найдены из рекуррентных соотношений (3.19). Конечная сумма в правой части (4.27) может быть выражена через полиномы Лежандра следующим образом:

$$R_{ml}(c, \xi) = \frac{(\xi^2 - 1)^{m/2} c^l (l-m)!}{(2l+1)! (2l-1)!} \frac{d^m}{d\xi^m} P_l(\xi) [1 + O(c^2)]. \quad (4.28)$$

Разумеется, что с точностью до нормировки представление (4.28) совпадает с аналитическим продолжением главного члена разложения (4.7). Сравнивая (4.28) и (4.7), можно найти поведение при малых  $c$  коэффициента  $\kappa_{ml}(c)$ , связывающего в. у. с. ф. и в. р. с. ф. (см. (2.11)):

$$\kappa_{ml}(c) = \frac{c^l (l-m)!}{(2l+1)! (2l-1)!} \left[ \frac{2}{2l+1} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} [1 + O(c^2)]. \quad (4.29)$$

Из формул (2.13) и (2.20) следует также асимптотическое выражение для собственных значений  $\mu_l(c)$  интегрального уравнения (2.17)

$$\mu_l(c) = i^l c^{l+1/2} \frac{2^{2l+1} (l!)^3}{(2l)! (2l+1)!} [1 + O(c^2)]. \quad (4.30)$$

Выражение (4.30) является при фиксированных  $c$  одновременно асимптотическим по  $l$  при  $l \rightarrow \infty$ . Упростив его по формуле Стирлинга, получим

$$\mu_l(c) = i^l \sqrt{\frac{\pi c}{2}} \left(\frac{ce}{4l}\right)^l \left[1 + O\left(\frac{1}{l}\right)\right], \quad (4.31)$$

откуда следует, что собственные значения  $\mu_l(c)$  с ростом номера  $l$  убывают быстрее, чем по экспоненте.

Из формулы (2.13) находится и асимптотическое представление характеристических чисел  $\gamma_{ml}(c)$  интегрального уравнения (2.7):

$$\gamma_{ml}(c) = (ic)^{m-l} \frac{(2l+1)!! (2l-1)!!}{2(l+m)!} [1 + O(c^2)]. \quad (4.32)$$

Выражение (4.32) может служить начальным приближением при расчетах по формуле (2.18).

Представления с. р. с. ф. при малых значениях параметра  $p$  строятся аналогично.

Анализ поведения в. р. с. ф. и с. р. с. ф. при малых значениях параметров  $c$  и  $p$  может быть выполнен также с помощью техники, используемой в § 7 гл. II.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Поправки порядка  $c^2$  к в. у. с. ф. и соответствующим собственным значениям  $\lambda_{ml}(c)$  были известны уже Niven (1881). Наиболее полные результаты для коэффициентов разложений (4.8) и (4.22) как аналитические, так и численные получены Bouwkamp (1950a, b, c) и Meixner (1944). Большое число таблиц этих коэффициентов приведено в книге Фламмера (1962). Радиус сходимости разложений (4.7), (4.8) и (4.22) исследователи Schmid (1948, 1949), Schäffe (1951), Schäffe, Groh (1962).

## § 5. Асимптотические разложения сферoidalных функций по большому параметру

**1. Предварительные замечания.** Во многих физических задачах, примеры которых будут рассматриваться в главе III, необходимо знать асимптотику вытянутых и сплюснутых сферoidalных функций при больших

значениях параметра  $c$  (или  $p$ ) и фиксированных номерах  $l$  и  $m$ . Характер изменения в. у. с. ф. и в. р. с. ф. с ростом параметра  $c$  можно проследить на рис. 9, 10.

В зависимости от поставленной цели для получения асимптотик можно использовать различные формы разложений и методы их получения. Здесь мы рассмотрим

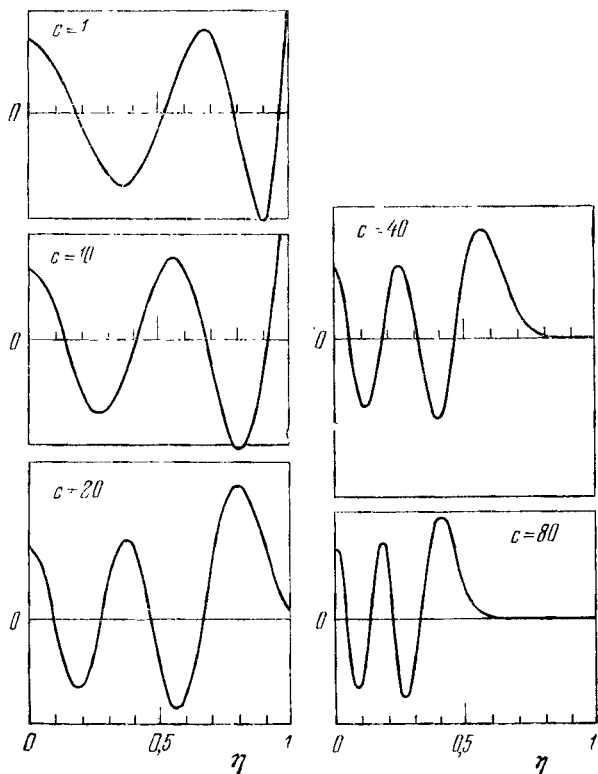


Рис. 9. Характер изменения поведения в. у. с. ф.  $S_{0l}(c, \eta)$  при  $l=8$  и различных значениях параметра  $c$ .

две наиболее развитые методики: метод эталонного уравнения и теорию возмущений.

*Метод эталонного уравнения* в форме, предложенной Cherry (1950) и развитой в работах Славянова (1967, 1969), состоит в следующем. Пусть требуется построить асимптотику по большому параметру  $c$  решений сингулярной краевой задачи, связанной с дифференциальным

уравнением

$$y''(x) + [\lambda r(x) + c^2 p(x) + q(x)]y(x) = 0, \quad (5.1)$$

где  $r(x)$ ,  $p(x)$  и  $q(x)$  — аналитические функции, причем  $r(x)$  и  $p(x)$  имеют полюсы не выше первого порядка,

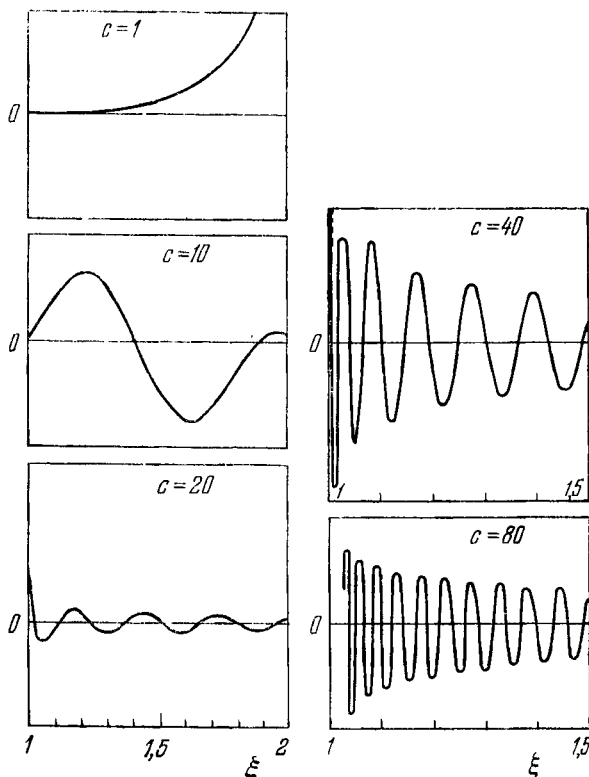


Рис. 10. Характер изменения поведения в. р. с. ф.  $R_{0l}(c, \xi)$  при  $l=8$  и различных значениях параметра  $c$ .

а  $q(x)$  — не выше второго порядка на промежутке, где рассматривается краевая задача.

Сначала следует «угадать» грубую асимптотику (порядок роста по  $c$ ) собственных значений  $\lambda$ . Такое «угадывание» можно осуществить с помощью ряда соображений, например, используя простейшие формулы квазиклассического метода. После этого надо выяснить число и расположение точек перехода, т. е. нулей и простых

полюсов выражения  $\lambda r(x) + c^2 p(x)$ . Точки перехода отделяют области осцилляции решений от областей экспоненциального их роста или убывания. Далее исходный промежуток, где рассматривается краевая задача, покрывается пересекающимися интервалами, содержащими не более двух точек перехода\*). Для каждого такого интервала составляется эталонное уравнение

$$w''(z) + [\sigma r_1(z) + c^2 p_1(z)] w(z) = 0, \quad (5.2)$$

т. е. наиболее простое уравнение, имеющее тот же характер и расположение точек перехода. Если коэффициент  $q(x)$  имеет полюс второго порядка, то такую же особенность следует включить в уравнение (5.2). Решения уравнения (5.1) на рассматриваемом интервале ищем в виде

$$y_{1,2}(c, x) = [z'(c, x)]^{-1/2} w_{1,2}(z(c, x)), \quad (5.3)$$

где нелинейное преобразование масштаба  $z(c, x)$  находится в виде асимптотического ряда по обратным степеням  $c$ . Коэффициенты этого ряда удовлетворяют рекуррентной системе дифференциальных уравнений первого порядка, легко интегрируемой. Связь параметров  $\sigma$  и  $\lambda$  задается условиями, смысл которых заключается в том, что точки перехода уравнения (5.1) должны совпадать с точками перехода уравнения (5.2) при  $z = z(c, x)$ .

Далее строятся асимптотические представления решений в других интервалах изменения аргумента. Из условий «сшивания» решений при переходе от одного интервала к другому и граничных условий находятся асимптотические разложения собственных значений  $\lambda$ .

Общность методики позволяет применять ее, не используя специфики сфероидальных функций, но это же обстоятельство вызывает быстро нарастающие вычислительные трудности при определении последующих членов ряда в асимптотических разложениях.

Другая методика, развитая в применении к вытянутым сфероидальным функциям Sierpian (1965) и Müller (1963), а в применении к сплюснутым функциям Müller (1962) и Damburg, Propin (1968a, б) — это по существу видоизмененная теория возмущений. На разных интерва-

---

\*) Ограничение на число точек перехода связано с тем, что функции  $w(z)$  должны быть достаточно хорошо изученными, не сложнее гипергеометрических.



лах изменения независимой переменной исходный дифференциальный оператор преобразуется к виду

$$L\psi = \frac{1}{c} M\psi,$$

где стоящий в левой части дифференциальный оператор достаточно простой, например оператор, собственными функциями которого являются полиномы Эрмита, и т. д. После этого функция  $\psi$  раскладывается в ряд по функциям, связанным с оператором  $L$ . Коэффициенты этого ряда в свою очередь раскладываются в ряд по обратным степеням большого параметра  $c$ . После подстановки решения в такой форме в исходное уравнение и использования рекуррентных соотношений для базисной системы функций вычисления в конечном итоге сводятся к рекуррентной алгебраической процедуре, которая позволяет определить как коэффициенты разложения функции  $\psi$  с точностью до нормировки, так и коэффициенты разложения собственных значений по обратным степеням  $c$ . Такая процедура сильно зависит от специфики коэффициентов в уравнении для сфероидальной функции.

Строящиеся по второму методу асимптотические представления являются более «локальными», чем те, которые получаются с помощью эталонных уравнений. Преимущество второй методики заключается в том, что при ее реализации можно эффективно использовать ЭВМ.

**2. Асимптотика вытянутых угловых сфероидальных функций.** Изменив масштаб в уравнении (1.11)

$$t = \eta\sqrt{c} \quad (5.4)$$

и введя новый спектральный параметр

$$\nu = c + \lambda/c, \quad (5.5)$$

придем к уравнению

$$\frac{d}{dt} \left( 1 - \frac{t^2}{c} \right) \frac{d}{dt} u(t) + \left[ \nu - t^2 - \frac{m^2}{c(1 - t^2/c)} \right] u(t) = 0. \quad (5.6)$$

Положим  $c = \infty$  и заменим граничные условия в (1.11) условием интегрируемости с квадратом  $u(t)$  на промежутке  $(-\infty, \infty)$ . Решение получившейся задачи хорошо известно, а именно:

$$\nu_{ml} |_{c=\infty} = 2q + 1, \quad q = l - m, \quad (5.7)$$

$$u_{ml}(t) |_{c=\infty} = C e^{-t^2/2} H_q(t), \quad (5.8)$$

где  $C$  — константа, а  $H_q(t)$  — полиномы Эрмита,

$$H_q(t) = (-1)^q e^{t^2} \frac{d^q}{dt^q} e^{-t^2}. \quad (5.9)$$

Отождествление функций по номеру мы произвели, исходя из требования, чтобы число нулей функций  $u_{ml}(t)$  и  $H_q(t)$  совпадало.

Формулы (5.5), (5.7), (5.8) дают наиболее грубую асимптотику в. у. с. ф. и соответствующих им собственных значений.

Перейдем теперь к построению равномерных асимптотических разложений по схеме эталонных уравнений, которая была описана выше.

В соответствии с заменой (1.6) будем исходить из краевой задачи

$$V''(\eta) + \left[ \frac{\nu c - c^2 \eta^2}{1 - \eta^2} + \frac{1 - m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right] V(\eta) = 0, \quad (5.10)$$

$$\left| \frac{V(\eta)}{\sqrt{1 - \eta^2}} \right|_{\eta = \pm 1} < \infty. \quad (5.11)$$

Собственные функции  $V_{ml}(c, \eta)$  выражаются через в. у. с. ф.

$$V_{ml}(c, \eta) = C \sqrt{1 - \eta^2} S_{ml}(c, \eta), \quad (5.12)$$

где  $C$  — константа. Связь спектральных параметров  $\lambda$  и  $\nu$  задается формулой (5.5), причем из равенства (5.7) следует, что  $\nu$  в первом приближении не зависит от большого параметра  $c$ .

Уравнение (5.10) имеет две «близкие» точки перехода  $\eta = \pm \sqrt{\nu/c}$  и еще две точки перехода  $\eta = \pm 1$ . Краевое условие при  $\eta = -1$  можно заменить требованием четности или нечетности решений, что сужает промежуток рассмотрения до  $[0, 1]$ . Выделим два перекрывающихся промежутка изменения  $\eta$ :

$$\mathcal{D}_0 = [0, \eta_0], \quad \mathcal{D}_1 = [\eta_1, 1], \quad \eta_0 > \eta_1.$$

На промежутке  $\mathcal{D}_1$  в качестве эталонного можно взять уравнение

$$w''(z) + \left[ -\frac{c^2}{z} + \frac{1 - m^2}{4z^2} \right] w(z) = 0. \quad (5.13)$$

Его решение, конечное в нуле, выражается через

цилиндрические функции

$$\psi(z) = \sqrt{z} I_m(2c\sqrt{z}), \quad (5.14)$$

где  $I_m(2c\sqrt{z})$  — модифицированная функция Бесселя

$$I_m(2c\sqrt{z}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{c^{m+2k} z^{m/2+k}}{k!(k+m)!}. \quad (5.15)$$

Функцию  $V_{ml}(c, \eta)$  представим в виде (5.3)

$$V_{ml}(c, \eta) = \left[ \frac{z(c, \eta)}{z'(c, \eta)} \right]^{1/2} I_m(2c\sqrt{z(c, \eta)}). \quad (5.16)$$

Непосредственной подстановкой в уравнение (5.10) можно убедиться, что функция  $z(c, \eta)$  удовлетворяет следующему нелинейному уравнению:

$$c^2 \left[ \frac{z'^2}{z} - \frac{\eta^2}{1-\eta^2} \right] + \frac{cv}{1-\eta^2} + (1-m^2) \left[ \frac{1}{(1-\eta^2)^2} - \frac{z'^2}{4z^2} \right] - \frac{1}{2} \{z, \eta\} = 0, \quad (5.17)$$

где символ  $\{z, \eta\}$  обозначает производную Шварца

$$\{z, \eta\} = \frac{z'''}{z'} - \frac{3}{2} \left( \frac{z''}{z'} \right)^2. \quad (5.18)$$

Предположим, что функции  $z(c, \eta)$  и спектральный параметр  $v$  разлагаются в асимптотические ряды по обратным степеням  $c$

$$z(c, \eta) = \sum_{k=0}^{\infty} z_k(\eta) c^{-k}, \quad (5.19)$$

$$v(c) = \sum_{k=0}^{\infty} v_k c^{-k}. \quad (5.20)$$

Подставим разложения (5.19) и (5.20) в уравнение (5.17) и потребуем, чтобы коэффициенты при всех степенях  $c$  обращались в нуль. В результате получим рекуррентную систему линейных дифференциальных уравнений для коэффициентов  $z_k(\eta)$

$$\frac{z_0'^2}{z_0} = \frac{\eta^2}{1-\eta^2}, \quad \frac{d}{d\eta} \left( \frac{z_1}{\sqrt{z_0}} \right) = \frac{1}{\sqrt{z_0}} \left( -\frac{v_0 z_0'}{2\eta^2} \right),$$

. . . . . (5.21)

$$\frac{d}{d\eta} \left( \frac{z_i}{\sqrt{z_n}} \right) = \frac{1}{\sqrt{z_n}} \Theta_i(v_{i-1}; z_0, \dots, z_{i-1}; \eta), \quad i \geq 1.$$

Нетрудно показать, что функции  $\Theta_i(\nu_{i-1}; z_0, \dots, z_{i-1}; \eta)$  будут ограниченными на отрезке  $\mathcal{D}_1$ , если наложить условия

$$z_i(1) = 0, \quad i \geq 0. \quad (5.22)$$

Смысл условий (5.22) заключается в том, что точка перехода  $z=0$  уравнения (5.13) при замене переменной  $z=z(c, \eta)$  переводится в точку перехода  $\eta=1$  уравнения (5.10). Система уравнений (5.21) с начальными условиями (5.22) имеет однозначное, ограниченное в точке  $\eta=1$  решение. Для построения главного члена асимптотики в. у. с. ф. нам понадобятся два члена разложения (5.19)

$$z(c, \eta) = \frac{1-\eta^2}{4} - \frac{\nu_0}{4c} \sqrt{1-\eta^2} \operatorname{arth} \sqrt{1-\eta^2} + O\left(\frac{1}{c^2}\right). \quad (5.23)$$

На этом этапе величины  $\nu_h(c)$  не определяются.

Перейдем теперь к промежутку  $\mathcal{D}_0$ . В качестве эталонного возьмем уравнение Вебера с измененным масштабом

$$w''(s) + (c\sigma - c^2 s^2)w(s) = 0. \quad (5.24)$$

Для того чтобы упростить дальнейшие вычисления, сразу потребуем, чтобы решения уравнения (5.24) убывали при  $|\sqrt{c} s| \rightarrow \infty$ , поскольку только такие решения можно использовать при продолжении асимптотики из  $\mathcal{D}_0$  в  $\mathcal{D}_1$

Отсюда

$$\sigma = \sigma_q = 2q + 1, \quad q = 0, 1, \dots, \quad (5.25)$$

$$w_q(s) = \exp\left(-c \frac{s^2}{2}\right) H_q(\sqrt{c} s). \quad (5.26)$$

Асимптотику функций  $V_{ml}(c, \eta)$  в  $\mathcal{D}_0$  будем искать в виде

$$V_{ml}(c, \eta) = C |s'(c, \eta)|^{-1/2} \exp\left(-c \frac{s^2(c, \eta)}{2}\right) H_q(\sqrt{c} s(c, \eta)), \quad (5.27)$$

где  $C$  — константа, а  $q = l - m$ . Преобразование масштаба  $s(c, \eta)$  и собственные значения  $\nu_{ml}(c)$  представим в

виде разложений

$$s(c, \eta) = \sum_{k=0}^{\infty} s_k(\eta) c^{-k}, \quad (5.28)$$

$$v_{ml}(c) = \sum_{k=0}^{\infty} v_k(\sigma) c^{-k}. \quad (5.29)$$

Коэффициенты  $s_k(\eta)$  зависят также от  $\sigma$ . Тем же способом, что и в предыдущем случае, получаем для коэффициентов  $s_k(\eta)$  рекуррентную систему уравнений

$$s_0 s_0' = \frac{\eta}{\sqrt{1-\eta^2}}, \quad (5.30)$$

$$s_k s_0' = \frac{1}{s_0 s_0'} \left[ \Omega_k(\sigma; s_0, \dots, s_{k-1}; \eta) - \frac{v_{k-1}}{1-\eta^2} \right], \quad k \geq 1.$$

Нетрудно показать, что функции  $\Omega_k(\sigma; s_0, \dots, s_{k-1}; \eta)$  будут в совокупности ограниченными в  $\mathcal{D}_0$ , если наложить при всех  $k$  условие

$$s_k(\eta) |_{\eta=0} = 0. \quad (5.31)$$

Ввиду того, что знаменатели в правой части уравнений (5.30) обращаются в нуль при  $\eta=0$ , проинтегрировать их, удовлетворив условию (5.31), можно только при выполнении равенств

$$v_k(\sigma) = \Omega_{k+1}(\sigma; s_0, \dots, s_k; \eta) |_{\eta=0}, \quad (5.32)$$

из которых определяются величины  $v_k(\sigma)$ .

Уравнения (5.30) вместе с условиями (5.31) задают однозначную рекуррентную процедуру нахождения  $s_k(\eta)$ . При  $k=0$  условия (5.31) и (5.32) обеспечивают совпадение точек перехода уравнения (5.10) и (5.24) при замене переменной  $s=s(c, \eta)$ .

Два первых члена разложения для  $s(c, \eta)$  имеют вид

$$s(c, \eta) = [2(1 - \sqrt{1-\eta^2})]^{1/2} + \frac{\sigma}{4c} [2(1 - \sqrt{1-\eta^2})]^{-1/2} \ln \frac{1 + \sqrt{1-\eta^2}}{2} + O\left(\frac{1}{c^2}\right). \quad (5.33)$$

Асимптотическое разложение собственных значений приведено ниже. Формулы (5.33) и (5.23) совместно с представлениями (5.16) и (5.27) позволяют построить

главный член асимптотики в. у. с. ф. Вычисления дальнейших членов разложения довольно громоздки. Заметим, что для с. у. с. ф. они значительно проще. Используя асимптотику функций Бесселя и полиномов Эрмита при больших аргументах, нетрудно показать, что на пересечении  $\mathcal{D}_0 \cap \mathcal{D}_1$  асимптотические разложения, полученные из (5.16) и (5.27), совпадают с точностью до числового множителя. Вычисляя этот множитель и нормируя в. у. с. ф. в соответствии с (1.12), получим

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(c, \eta) &= \\ &= \frac{c^{1/4} 2^{1/2}}{\pi^{1/4} [q! ]^{1/2}} \frac{e^{-c(1-\xi)}}{\xi^{1/2} (1+\xi)^{(q+1)/2}} H_q(\sqrt{2c(1-\xi)}) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right] \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$\eta \in \mathcal{D}_0,$$

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(c, \eta) &= \\ &= \frac{e^{-c} \pi^{1/4} c^{(2q+3)/4} 2^{(3q+2)/2}}{[q! ]^{1/2} \eta^{1/2}} I_m\left(c\xi - \frac{2q+1}{2} \operatorname{arth} \xi\right) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right] \end{aligned} \quad (5.35)$$

$$\eta \in \mathcal{D}_1,$$

где  $q = l - m$ ,  $\xi = (1 - \eta^2)^{1/2}$ .

Оценка в формуле (5.34) не является равномерной в окрестности корней функций. Это означает, что если фиксировать значение  $c$ , то величина  $O(c^{-1})$ , входящая в (5.34), стремится к бесконечности, когда аргумент функции  $H_q(\sqrt{2c(1-\xi)})$  стремится к ее корню. Можно было написать равномерное асимптотическое представление, используя, помимо функции  $H_q(\sqrt{2c(1-\xi)})$ , еще и ее производную, но здесь и в дальнейшем мы не будем применять такую усложненную форму записи.

Поправочные члены в аргументах функций Бесселя и Эрмита следует учитывать на пересечении  $\mathcal{D}_0 \cap \mathcal{D}_1$ , где справедлива формула

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(c, \eta) &= \frac{c^{(2q+1)/4} 2^{(3q+1)/2}}{\pi^{1/4} [q! ]^{1/2}} \times \\ &\times \left[ \frac{(1-\xi)^q}{\xi(1+\xi)^{q+1}} \right]^{1/2} e^{-c(1-\xi)} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

При  $\eta = O(c^{-1/2})$  из (5.34) следует асимптотика (5.8). Приведем еще запись формул (5.34), (5.35), (5.36) в переменной  $\vartheta = \arcsin \eta$

$$\bar{S}_{m_l}(c, \eta) = \frac{c^{1/4} \exp(-2c \sin^2(\vartheta/2))}{\pi^{1/4} (2^q q!)^{1/2} (\cos(\vartheta/2))^{q+1} (\cos \vartheta)^{1/2}} \times \\ \times H_q \left( 2 \sqrt{c} \sin \left( \frac{\vartheta}{2} \right) \right) \left[ 1 + O \left( \frac{1}{c} \right) \right], \quad (5.37)$$

$$\bar{S}_{m_l}(c, \eta) = \frac{e^{-c} \pi^{1/4} c^{(2q+3)/4} 2^{(3q+2)/2}}{(q!)^{1/2} (\sin \vartheta)^{1/2}} \times \\ \times I_m \left( c \cos \vartheta + \frac{2q+1}{2} \operatorname{Intg}(\vartheta/2) \right) \left[ 1 + O \left( \frac{1}{c} \right) \right], \quad (5.38)$$

$$\bar{S}_{m_l}(c, \eta) = \\ = \frac{c^{\frac{2q+1}{4}} 2^{3q/2} (\operatorname{tg}(\vartheta/2))^q}{\pi^{1/4} (q!)^{1/2} (\cos \vartheta)^{1/2} (\cos \vartheta/2)} e^{-2c \sin^2(\vartheta/2)} \left[ 1 + O \left( \frac{1}{c} \right) \right]. \quad (5.39)$$

Асимптотические разложения собственных значений  $\lambda_{ml}(c)$  могут быть получены при продолжении рекуррентного процесса, описанного выше, а также другими способами:

$$\lambda_{m_l}(c) = -c^2 + c\sigma - \frac{1}{8}(\sigma^2 + 5 - 8m^2) - \\ - \frac{\sigma}{64c} [\sigma^2 + 11 - 32m^2] - \frac{1}{1024c^2} [5(\sigma^4 + 26\sigma^2 + 21) - \\ - 384m^2(\sigma^2 + 1)] - \frac{[\lambda]_3}{c^3} - \frac{[\lambda]_4}{c^4} - \frac{[\lambda]_5}{c^5} + O \left( \frac{1}{c^6} \right). \quad (5.40)$$

Здесь величина  $\sigma$  определена формулой (5.25). Старшие члены  $[\lambda]_3$ ,  $[\lambda]_4$  и  $[\lambda]_5$  асимптотического разложения (5.40) вынесены в табл. 5. В частном случае  $l=m=0$

$$\lambda_{00}(c) = -c^2 + c - \frac{3}{4} - \frac{3}{16c} - \frac{15}{64c^2} - \frac{453}{2^{10}c^3} - \\ - \frac{4425}{2^{12}c^4} - \frac{209101}{2^{16}c^5} + O \left( \frac{1}{c^6} \right). \quad (5.41)$$

Числовые коэффициенты при степенях  $c$  в (5.41) примерно одного порядка, так что последовательные члены

Коэффициенты  $[\lambda]_3$ ,  $[\lambda]_4$ ,  $[\lambda]_5$  асимптотического разложения  
(5.40) собственных значений  $\lambda_{m_l}(c)$  при  $c \rightarrow \infty$   
(по Meixner, 1948)

$[\lambda]_3$	$2^{-14} [(33 \sigma^5 + 1594 \sigma^3 + 5621 \sigma) - 128 m^2 (37 \sigma^3 + 167 \sigma) + 2048 m^4 \sigma]$
$[\lambda]_4$	$2^{-16} [63 \sigma^6 + 4940 \sigma^4 + 43 327 \sigma^2 + 22 470] - 128 m^2 (115 \sigma^4 + 1310 \sigma^2 + 735) + 6144 m^4 (\sigma^2 + 1)$
$[\lambda]_5$	$2^{-20} [(527 \sigma^7 + 61 529 \sigma^5 + 1 043 961 \sigma^3 + 2 241 599 \sigma) - 32 m^2 (5739 \sigma^5 + 127 550 \sigma^3 + 298 951 \sigma) + 2048 m^4 (355 \sigma^3 + 1505 \sigma) - 65 536 m^6 \sigma]$

ны разложения (5.41) убывают как обратные степени  $c$  (порядок убывания членов разложения (5.40)  $\sigma/c$ ).

Полученная асимптотика в. у. с. ф. позволяет с помощью формулы (2.24) найти асимптотическое выражение для собственных значений  $\mu_l(c)$  интегрального уравнения (2.21) для в. у. с. ф.

$$\mu_l(c) = i^l \sqrt{2\pi} \left\{ 1 - 2 \sqrt{\pi c} \frac{(8c)^l}{l!} e^{-2c} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right] \right\}. \quad (5.42)$$

Перейдем теперь к построению локальных асимптотических разложений в. у. с. ф. с помощью теории возмущений. Приведем здесь только часть полученных результатов, а метод вычислений проиллюстрируем на одном примере.

Введем три перекрывающихся промежутка изменения  $\eta$ :

$$\mathcal{D}'_1 = [0, \eta_1], \quad \mathcal{D}'_2 = [\eta_2, \eta_3], \quad \mathcal{D}'_3 = [\eta_4, 1];$$

$$\eta_2 < \eta_1 < \eta_4 < \eta_3;$$

$$\eta_1 = O(c^{-1/2+\varepsilon_1}), \quad \eta_2 = O(c^{-1/2+\varepsilon_1}), \quad 0 < \varepsilon_1 < 1/2;$$

$$\eta_3 = 1 - O(c^{-2+\varepsilon_2}), \quad \eta_4 = 1 - O(c^{-2+\varepsilon_2}), \quad 1/2 < \varepsilon_2 < 3/2.$$

На промежутке  $\mathcal{D}'_1$  сделаем замену независимой переменной  $t = \eta \sqrt{2c}$  и функции

$$\bar{S}_{m_l}(c, \eta) = k_1(c) (1 - \eta^2)^{m/2} u_{m_l}(c, t). \quad (5.43)$$

В новых переменных из (5.11) получим уравнение для  $u_{m_l}(c, t)$  вида

$$Lu(t) - \frac{1}{2c} Mu(t) + \frac{\nu}{2} u(t) = 0, \quad (5.44)$$



где

$$L = \frac{d^2}{dt^2} - \frac{t^2}{4}, \quad M = t^2 \frac{d^2}{dt^2} + 2(m+1)t \frac{d}{dt} + m(m+1)$$

и использовано обозначение (5.5). Представим убывающее при  $|t| \rightarrow \infty$  решение уравнения (5.44) в виде формального ряда

$$u_{m1}(t) = D_q(t) + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{1}{2c}\right)^j Q_j(t), \quad (5.45)$$

где  $D_q(t) = \exp(-t^2/4) H_q(t/\sqrt{2})$  — функции Вебера, а  $H_q(t/\sqrt{2})$  — полиномы Эрмита. Подставив ряды (5.45) и (5.29) в уравнение (5.44) и приравняв нулю коэффициенты при различных степенях большого параметра  $c$ , получим рекуррентную систему уравнений

$$LD_q(t) + (q+1/2)D_q(t) = 0,$$

$$LQ_j(t) + (j+1/2)Q_j(t) = MQ_{j-1}(t) - \sum_{k=1}^j 2^k v_k Q_{j-k}(t),$$

$$j = 1, 2, \dots, \quad (5.46)$$

$$Q_0(t) \equiv D_q(t).$$

В силу рекуррентных соотношений для функции Вебера результат действия оператора  $M$  на них можно свести к следующему:

$$MD_q(t) = \sum_{i=-2}^2 \gamma_q^i D_{q+2i}(t),$$

где

$$\gamma_q^{-2} = \frac{1}{4} q(q-1)(q-2)(q-3), \quad \gamma_q^{-1} = mq(q-1),$$

$$\gamma_q^0 = m^2 - \frac{1}{4}(2q^2 + 2q + 3), \quad \gamma_q^1 = -m, \quad \gamma_q^2 = \frac{1}{4}.$$

Отсюда непосредственно следует, что функции  $Q_j(t)$  можно представить в виде

$$Q_j(t) = \sum_{k=-2j}^{2j} A_k^j D_{j+2k}(t).$$

Тогда из рекуррентной системы (5.46) для функции  $Q_j(t)$  получается рекуррентная система для

коэффициентов  $A_k^j$

$$2kA_k^j = \sum_{s=1}^j 2^s \nu_s A_k^{j-s} - \sum_{s=-2} A_k^{j-1-s} \gamma_{q+2k-2s}^s, \quad (5.47)$$

$A_k^0 \equiv \delta_{0k}$ ,  $A_k^j = 0$ , если  $|k| > 2j$ , или  $k=0$ , или  $k < -q/2$ . Из условия разрешимости системы (5.47) следует, что

$$2^k \nu_k = \sum_{s=-2}^2 A_{-s}^{k-1} \gamma_{q-2s}^s, \quad \nu_0 \equiv 0,$$

откуда находятся величины  $\nu_h$ . Окончательно имеем на промежутке  $\mathcal{D}'_1$  следующее асимптотическое разложение в. у. с. ф., нормированных в соответствии с (1.12):

$$\bar{S}_{ml}(c, \eta) = k_1(c) (1 - \eta^2)^{m/2} \left[ D_q(\eta \sqrt{2c}) + \sum_{j=1}^{\infty} \left( \frac{1}{2c} \right)^j \sum_{k=-2j}^{2j} A_k^j D_{q+2k}(\eta \sqrt{2c}) \right]. \quad (5.48)$$

Вычисленные по рекуррентным формулам (5.47) коэффициенты  $A_k^j$  при  $j=1, 2$  и асимптотическое разложение коэффициента  $k_1(c)$  приведены в табл. 6. В статье Slepian (1965) вычислен еще один член асимптотического разложения (5.48).

На промежутке  $\mathcal{D}'_2$  аналогичным способом можно построить разложение в. у. с. ф. в виде

$$\bar{S}_{ml}(c, \eta) = k_1(c) k_2(c) \frac{(1 - \zeta)^{q/2}}{\zeta^{1/2} (1 + \zeta)^{(q+1)/2}} e^{c\zeta} \times \\ \times \left[ 1 + \sum_{j=0}^{\infty} \left( \frac{1}{2c} \right)^j \sum_{k=1}^j \left[ \frac{D_k^j}{\zeta^k} + \frac{E_k^j}{(1 + \zeta)^k} + \frac{F_k^j}{(1 - \zeta)^k} \right] \right], \quad (5.49)$$

где  $q = l - m$ ,  $\zeta = \sqrt{1 - \eta^2}$ .

И наконец, на промежутке  $\mathcal{D}'_3$  асимптотика в. у. с. ф. может быть представлена в виде

$$\bar{S}_{ml}(c, \eta) = k_1(c) k_2(c) k_3(c) \left[ I_m(c\zeta) + \sum_{j=1}^{\infty} \left( \frac{1}{2c} \right)^j \sum_{k=1}^j B_k^j(c\zeta)^k I_{m+k}(c\zeta) \right], \quad (5.50)$$

Коэффициенты  $A_k^j$  разложения (5.48)  
и нормировочный коэффициент  $k_1(c)$

$A_2^1$	$-2^{-4}$
$A_1^1$	$2^{-1} m$
$A_{-1}^1$	$2^{-1} m q (q-1)$
$A_{-2}^1$	$2^{-4} q (q-1) (q-2) (q-3)$
$A_4^2$	$2^{-9}$
$A_3^2$	$-2^{-5} m$
$A_2^2$	$-2^{-5} (2q+5-4m^2)$
$A_1^2$	$-2^{-5} m (q^2 - 25q - 36)$
$A_{-1}^2$	$2^{-5} m (q^2 - 27q - 10) q (q-1)$
$A_{-2}^2$	$2^{-5} (2q - 3 + 4m^2) q (q-1) (q-2) (q-3)$
$A_{-3}^2$	$2^{-5} m q (q-1) (q-2) (q-3) (q-4) (q-5)$
$A_{-4}^2$	$2^{-9} q (q-1) (q-2) (q-3) (q-4) (q-5) (q-6) (q-7)$
$k_1(c)$	$\left[ q! \right]^{-1/2} c^{1/4} \pi^{-1/4} \left\{ 1 + \frac{m(2q+1)}{4c} - \frac{1}{2^{10} c^2} [(q^4 + 2q^3 + \right.$ $\left. + 23q^2 + 22q + 12) - 192m(3q^2 + 3q + 1) - 96m^2(2q^2 + 2q + 1)] \right\}$

где  $I_m(c\xi)$  — модифицированная функция Бесселя (см. (5.15)).

Коэффициенты  $D_k^j, E_k^j, F_k^j, B_k^j$  при  $j=1, 2$ , а также асимптотическое разложение нормировочных постоянных  $k_2(c)$  и  $k_3(c)$  приведены в табл. 7, 8, 9.

Таблица 7

Коэффициенты  $B_k^j$  разложений (5.50) и (5.62)

$B_1^1$	$-(2q+1)$
$B_1^2$	$q^2+q+3/2+2m$
$B_2^2$	$2q^2+2q+3/2$

Таблица 8

Коэффициенты  $D_k^j$ ,  $E_k^j$  и  $F_k^j$  разложений (5.49) и (5.63)

$D_1^1$	$2^{-1}(1-4m^2)$
$D_2^2$	$2^{-5}(1-4m^2)(9-4m^2)$
$D_1^2$	$3 \cdot 2^{-5}(2q+1)(1-4m^2)$
$E_1^1$	$2^{-2}(q+1)(q+2)$
$E_2^2$	$2^{-5}(q+1)(q+2)(q+3)(q+4)$
$E_1^2$	$-2^{-5}(q^2-5q-8m^2)(q+1)(q+2)$
$F_1^1$	$-2^{-2}q(q-1)$
$F_2^2$	$-2^{-5}q(q-1)(q-2)(q-3)$
$F_1^2$	$-2^{-5}(q^2+7q+6-8m^2)q(q-1)$

Разложения (5.48) — (5.50) не являются равномерными по аргументу  $\eta$ . Если оборвать их на  $\eta$ -м слагаемом, то оценка поправочного члена будет сильно зависеть от значения  $\eta$  и от величин  $\varepsilon_1, \varepsilon_2$ , входящих в определение промежутков  $\mathcal{D}_1, \mathcal{D}_2$  и  $\mathcal{D}_3$ . Для того чтобы точность формул (5.48) и (5.49) на промежутке их перекрывания была одинаковой, удобно взять  $\varepsilon_1 = 1/6$ , в определении

Нормировочные коэффициенты  $k_2(c)$ ,  $k_3(c)$  разложений  
(5.49), (5.50) и (5.62)

$k_2(c)$	$e^{-c} c^{q/2} 2^{(3q+1)/2} \frac{1-c^{-1}2^{-8}g_1^1+c^{-2}[3! ]^{-1}2^{-17}g_2^1+O(c^{-3})}{1-c^{-1}2^{-8}g_1^2+c^{-2}[3! ]^{-1}2^{-17}g_2^2+O(c^{-3})}$
$k_3(c)$	$(2\pi c)^{1/2} \frac{1+c^{-1}2^{-4}h_1^2+c^{-2}2^{-10}h_2^2+O(c^{-3})}{1+c^{-1}2^{-4}h_1^3+c^{-2}2^{-10}h_2^3+O(c^{-3})}$
$g_1^1$	$q^4+10 q^3+35 q^2+50 q+24 \pm m(128 q+64)$
$g_2^1$	$q^8+36 q^7+546 q^6+3000 q^5+3249 q^4-24 876 q^3-93 076 q^2-119 280 q-51 840+m(1536 q^5+19 200 q^4+43 008 q^3-157 440 q^2-238 080 q-129 024)+m^2(98 304 q^2+196 608 q+73 728)$
$g_1^2$	$q^4+10 q^3-13 q^2-62 q-64+128 m^2$
$g_2^2$	$q^8+36 q^7-30 q^6-4104 q^5-18 351 q^4+13 140 q^3+112 268 q^2+265 680 q+165 888+m^2(1536 q^4+15 360 q^3+29 184 q^2-537 600 q-491 520)+98 304 m^4$
$h_1^2$	$6 q+3+m^2(8 q+4)$
$h_2^2$	$324 q^2+324 q+171+m^2(736 q^2+736 q+200)+m^4(64 q^2+64 q+48)$
$h_1^3$	$6 q+3+m(16 q+8)+m^2(8 q+4)$
$h_2^3$	$324 q^2+324 q+171+m(1152 q^2+1152 q+480)+m^2(1248 q^2+1248 q+328)+m^3(512 q^2+512 q+128)+m^4(64 q^2+64 q+48)$

для  $\eta_1$  и  $\eta_2$  и  $\varepsilon_2 = 1$  в определениях для  $\eta_3$  и  $\eta_4$ . Как показывают численные расчеты, применение формул (5.48) — (5.50) при  $l=0, 1, 2, m=0, 1$  дает хорошие результаты (4—5 верных значащих цифр) уже при значениях параметра  $c=5$ .

**3. Асимптотика вытянутых радиальных сферических функций.** Построим вначале асимптотику в. р. с. ф. по методу эталонного уравнения. Здесь придется по существу повторить все выкладки, относящиеся к построению асимптотики в. у. с. ф. на промежутке  $\mathcal{D}_1$ . Будем исходить из уравнения

$$U''(\xi) + \left[ \frac{c^2 \xi^2 - cv_{ml}}{\xi^2 - 1} + \frac{1 - m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right] U(\xi) = 0, \quad (5.51)$$

которому удовлетворяют функции

$$U_{ml}(c, \xi) = \sqrt{\xi^2 - 1} R_{ml}(c, \xi). \quad (5.52)$$

Асимптотика спектрального параметра  $v_{ml}(c)$  определена формулами (5.5), (5.40).

В качестве эталонного используем уравнение

$$w''(z) + \left[ \frac{c^2}{z} + \frac{1 - m^2}{4z^2} \right] w(z) = 0 \quad (5.53)$$

и его решение, конечное в нуле

$$w(z) = \sqrt{z} J_m(2c\sqrt{z}), \quad (5.54)$$

где  $J_m(2c\sqrt{z})$  — функции Бесселя

$$J_m(2c\sqrt{z}) = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{c^{m+2k} z^{m/2+k}}{k! (m+k)!}. \quad (5.55)$$

Произведя вычисления, аналогичные (5.16) — (5.23), получим

$$U_{ml}(c, \xi) = C \left[ \frac{z(c, \xi)}{z'(c, \xi)} \right]^{1/2} J_m(2c\sqrt{z(c, \xi)}), \quad (5.56)$$

$$z(c, \xi) = \frac{\xi^2 - 1}{4} - \frac{2(l-m)+1}{4c} \sqrt{\xi^2 - 1} \operatorname{arctg} \sqrt{\xi^2 - 1} + O\left(\frac{1}{c^3}\right) \quad (5.57)$$

( $C$  — константа), откуда следует асимптотическая формула для в. р. с. ф., нормированных в соответствии

с (1.19),

$$R_{ml}(c, \xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} J_m \left( c\xi - \frac{2q+1}{2} \operatorname{arctg} \xi \right) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right], \quad (5.58)$$

где  $\xi = \sqrt{\xi^2 - 1}$ ,  $q = l - m$ . При  $\xi \rightarrow \infty$  порядок роста поправочного члена  $O(c^{-2})$  в (5.57) такой же, как и порядок роста второго слагаемого. Оценка в (5.58) не является равномерной в окрестности корней функций  $R_{ml}(c, \xi)$ . При  $\xi > 1 + \varepsilon$ ,  $\varepsilon > 0$ ,  $\varepsilon \neq \varepsilon(c)$ , воспользовавшись асимптотикой функции Бесселя, можно получить более простое выражение

$$R_{ml}(c, \xi) = \frac{1}{c\sqrt{\xi\xi}} \cos \left( c\xi - \frac{2q+1}{2} \operatorname{arctg} \xi - \frac{\pi m}{2} - \frac{\pi}{4} \right) + O\left(\frac{1}{c^2}\right). \quad (5.59)$$

Асимптотические формулы для в. р. с. ф. третьего и четвертого рода следуют из (5.58) после замены функций Бесселя на функции Ханкеля первого и второго рода соответственно

$$R_m^{(3),(4)}(c, \xi) = \sqrt{\frac{\pi}{2c\xi}} H_m^{(1),(2)} \left( c\xi - \frac{2q+1}{2} \operatorname{arctg} \xi \right) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right]. \quad (5.60)$$

Первое из равенств (1.24) позволяет найти также формулу для в. р. с. ф. второго рода, куда входит функция Неймана. Легко получить для в. р. с. ф. второго, третьего, и четвертого рода и более простые выражения, аналогичные (5.59). Равенство (2.13) и асимптотическая формула (5.24) позволяют написать нетривиальное асимптотическое выражение для  $R_{0l}(c, 1)$ , которое не следует непосредственно из (5.58)

$$R_{0l}(c, 1) = \sqrt{\frac{\pi}{2c}} \left[ 1 - \frac{2\sqrt{\pi c} (8c)^l}{l!} e^{-2c} \left( 1 + O\left(\frac{1}{c}\right) \right) \right]. \quad (5.61)$$

Можно также построить асимптотические разложения в. р. с. ф. в виде, близком (5.49) и (5.50). Разобьем полюсь  $\xi \in [1, \infty)$  на два перекрывающихся промежутка

$$\mathcal{D}'_4 = [1, \xi_1] \quad \text{и} \quad \mathcal{D}'_5 = [\xi_2, \infty], \quad \xi_1 > \xi_2, \quad \xi_2 = O(c^{-1}).$$

На промежутке  $\mathcal{D}'_4$  в. р. с. ф. можно представить рядом

$$R_{ml}(c, \xi) = \\ = \frac{k_3(c)}{2c} \left\{ J_m(c\xi) + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{1}{2c}\right)^j \sum_{k=1}^j B_k^l (-c\xi)^k J_{m+k}(c\xi) \right\}, \quad (5.62)$$

где  $\zeta = \sqrt{\xi^2 - 1}$ . На промежутке  $\mathcal{D}'_5$ , используя асимптотику функций Бесселя, получаем более простое разложение

$$R_{ml}(c, \xi) = \operatorname{Re} \frac{(1 - i\zeta)^{q/2} e^{i(c\xi - \pi m/2)}}{c(i\zeta)^{1/2} (1 + i\zeta)^{(q+1)/2}} \times \\ \times \left\{ 1 + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\frac{1}{2c}\right)^j \sum_{k=1}^j \left[ \frac{D_k^l}{(i\zeta)^k} + \frac{E_k^l}{(1 + i\zeta)^k} + \frac{F_k^l}{(1 - i\zeta)^k} \right] \right\}. \quad (5.63)$$

Коэффициенты  $B_k^l$ ,  $D_k^l$ ,  $E_k^l$ ,  $F_k^l$  находятся из рекуррентных алгебраических соотношений. Они совпадают с соответствующими коэффициентами разложения (5.49) и (5.50). Несколько первых коэффициентов и нормировочный множитель  $k_3(c)$  приведены в табл. 7, 8, 9. Переход к радиальным функциям других родов в (5.62) осуществляется, как обычно, заменой функций Бесселя на другие стандартные цилиндрические функции.

**4. Асимптотика сплюснутых угловых сфероидальных функций.** Будем исходить из краевой задачи

$$V''(\eta) + \left[ -\rho^2 + \frac{\lambda}{1 - \eta^2} + \frac{1 - m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right] V(\eta) = 0, \\ \left| \frac{V(\eta)}{\sqrt{1 - \eta^2}} \right|_{\eta = \pm 1} < \infty \quad (5.64)$$

для функций  $V_{ml}(\rho, \eta)$ , которые связаны со с. у. с. ф. следующим образом:

$$V_{ml}(\rho, \eta) = C \sqrt{1 - \eta^2} S_{ml}(\rho, \eta), \quad (5.65)$$

где  $C$  — константа.



Для того чтобы нагляднее представлять дальнейшие выкладки, удобно использовать квантовомеханическую терминологию и рассматривать (5.64) как уравнение Шредингера с потенциалом

$$v(\eta) = -\frac{\lambda}{1-\eta^2} - \frac{1-m^2}{(1-\eta^2)^2}$$

и энергией  $E = -p^2$ . Потенциал  $v(\eta)$  при достаточно больших  $\lambda$ , рассматриваемых как параметр, имеет вид двух симметричных потенциальных ям, каждая из которых локализована в окрестности точек  $\eta = \pm 1$  и носит характер кулоновской (рис. 11). Такому потенциалу отвечают две серии собственных значений энергии  $E$ . Точно так же, зафиксировав значение  $p$ , получим две серии собственных значений  $\lambda$ , одна из которых порождает симметричные относительно точки  $\eta = 0$  собственные функции, другая — антисимметричные.

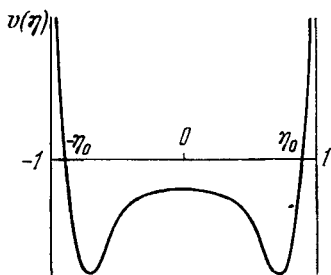


Рис. 11. Схематическое поведение потенциала  $v(\eta)$  в уравнении (5.64).

Запишем эталонное уравнение с кулоновским потенциалом при соответствующем выборе масштаба

$$\omega''(z) + \left( -p^2 + \frac{p\chi}{z} + \frac{1-m^2}{4z^2} \right) \omega(z) = 0. \quad (5.66)$$

Решение уравнения (5.66)  $\omega_1(z)$ , конечное в точке  $z=0$ , выражается через функцию Уиттекера

$$\begin{aligned} \omega_1(z) &= M_{\chi, m/2}(2pz) \equiv \\ &\equiv (2pz)^{(m+1)/2} e^{-pz} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left( \frac{1+m}{2} - \chi \right)_n}{n! (m+1)_n} (2pz)^n. \end{aligned} \quad (5.67)$$

Здесь использован символ Похгаммера  $(\alpha)_n$

$$(\alpha)_0 = 1, \quad (\alpha)_n = \alpha(\alpha+1) \dots (\alpha+n-1) = \frac{\Gamma(\alpha+n)}{\Gamma(\alpha)},$$

$$n = 1, 2, \dots$$

Асимптотика функций Уиттекера  $M_{\chi, m/2}(2pz)$  при  $pz \gg 1$ , равномерная по индексу  $\chi$ , имеет вид

$$M_{\chi, m/2}(2pz) = \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma\left(\chi + \frac{m+1}{2}\right)} \cos \left[ \pi \left( -\chi + \frac{m+1}{2} \right) \right] (2pz)^\chi e^{-pz} \Sigma_- + \frac{\Gamma(m+1)}{\Gamma\left(-\chi + \frac{m+1}{2}\right)} (2pz)^{-\chi} e^{pz} \Sigma_+, \quad (5.68)$$

где

$$\Sigma_{\mp} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\left(\frac{1+m}{2} \mp \chi\right)_n \left(\frac{1-m}{2} \mp \chi\right)_n}{n!} (\mp 2pz)^{-n}$$

— асимптотические ряды по обратным степеням  $p$ . Слагаемым, содержащим убывающую экспоненту, нельзя пренебрегать в «малой» окрестности полюсов гамма-функции

$$\Gamma\left(-\chi + \frac{m+1}{2}\right).$$

В частности, когда выполняется равенство

$$\chi = \chi_0 = n + \frac{m+1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad (5.69)$$

в формуле (5.68) имеется лишь убывающее слагаемое, и функции Уиттекера  $M_{\chi, m/2}(2pz)$  являются собственными функциями задачи Штурма — Лиувилля, порожденной уравнением (5.66) на полуоси  $[0, \infty)$ , а  $\chi_0$  — соответствующими собственными значениями. В этом случае функции Уиттекера  $M_{\chi, m/2}(2pz)$  сводятся к полиномам Лагерра

$$M_{n + \frac{m+1}{2}, \frac{m}{2}}(x) = e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{m+1}{2}} \frac{n!m!}{(n+m)!} L_n^m(x) = e^{\frac{x}{2}} x^{\frac{1-m}{2}} \frac{m!}{(n+m)!} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x} x^{n+m}.$$

Разобьем функции  $V_{ml}(p, \eta)$  на два класса: симметричные  $V_{ml}^{(s)}(p, \eta)$  и антисимметричные  $V_{ml}^{(a)}(p, \eta)$  — в соответствии с четностью  $l-m$  — и рассмотрим вместо за-

дачи (5.64) две задачи на промежутке  $\eta \in [-1, 0]$  с условиями

$$V'_{ml}(p, 0) = 0 \quad (5.70a)$$

для симметричных функций, и

$$V_{ml}(p, 0) = 0 \quad (5.70б)$$

для антисимметричных.

Эталонным уравнением на  $[-1, 0]$  является уравнение Уиттекера (5.66), причем, сравнивая (5.64), (5.66) и (5.69), можем заключить, что

$$\lambda(p) \equiv 2pv(p) = 2p \sum_{k=0}^{\infty} v_k p^{-k}, \quad (5.71)$$

где

$$v(p) = O(1) \quad p \rightarrow \infty.$$

Если искать функции  $V_{ml}(p, \eta)$  в виде

$$V_{ml}(p, \eta) = [z'(p, \eta)]^{-1/2} M_{\chi, m/2}(2pz(p, \eta)), \quad (5.72)$$

где

$$z(p, \eta) = \sum_{k=0}^{\infty} z_k(\eta) p^{-k}, \quad (5.73)$$

то рекуррентный процесс, аналогичный тому, который был разобран для случая в. у. с. ф., после довольно громоздких вычислений приводит к следующей асимптотической формуле:

$$\begin{aligned} z(p, \eta) = & 1 + \eta + \frac{\chi}{p} \ln \frac{1-\eta}{2} + \frac{1}{(2p)^2} \left[ \frac{4\chi^2}{1+\eta} \ln \frac{1-\eta}{2} - \right. \\ & \left. - \frac{2(\chi^2 + \tau)}{1-\eta} + 3\chi^2 + \tau \right] + \frac{1}{(2p)^3} \left[ - \frac{4\chi^3}{(1+\eta)^2} \ln^2 \left( \frac{1-\eta}{2} \right) + \right. \\ & \left. + \frac{4\chi(3\chi^2 + \tau)}{(1+\eta)^2} \ln \left( \frac{1-\eta}{2} \right) + \frac{2\chi}{1+\eta} (3\chi + \tau) - \frac{4\chi(\chi^2 + \tau)}{1-\eta} - \right. \\ & \left. - \frac{2\chi(\chi^2 + \tau + 1)}{(1-\eta)^2} + \frac{\chi}{2} (10\chi^2 + 6\tau + 1) \right] + O\left(\frac{1}{p^4}\right), \quad (5.74) \end{aligned}$$

где

$$\tau = (1-m^2)/4.$$

Из условий разрешимости рекуррентного процесса на каждом этапе следует асимптотическое разложение

собственных значений  $\lambda_{ml}(p)$

$$\lambda_{ml}(p) = 4p\chi - 2(\chi^2 + \tau) - \frac{\chi(\chi^2 + \tau)}{p} - \frac{1}{4p^2}(5\chi^4 + 6\chi^2\tau + \chi^2 + \tau^2) - \frac{1}{16p^3}[33\chi^5 + 46\chi^3\tau + 17\chi^3 + 13\chi\tau^2 + 6\chi\tau] + O\left(\frac{1}{p^4}\right). \quad (5.75)$$

Значение параметра  $\chi$  находится из неиспользованных еще граничных условий (5.70а) и (5.70б). Обозначим величину  $\chi$  в симметричном случае через  $\chi_a$ , а в антисимметричном — через  $\chi_a$ . Условия (5.70а) и (5.70б) являются трансцендентными уравнениями относительно  $\chi_a$  и  $\chi_a$ .

Рассмотрим подробно антисимметричный случай. Так как  $2pz(p, \eta)$  при  $\eta=0$  и  $p \rightarrow \infty$  — большая величина, воспользуемся асимптотикой функций Уиттекера. Тогда из (5.72) и (5.68) после элементарных преобразований следует

$$\frac{1}{\pi} \operatorname{tg} \left[ \pi \left( \chi_a - \frac{m+1}{2} \right) \right] = \frac{e^{-2pz} (2pz)^{2\chi_a} \Sigma_-}{\Gamma\left(\chi_a + \frac{1+m}{2}\right) \Gamma\left(\chi_a + \frac{1-m}{2}\right) \Sigma_+}. \quad (5.76)$$

Если заменить правую часть при  $p \rightarrow \infty$  нулем, то  $\chi_a$  перейдет в

$$\chi_0 = n + \frac{m-1}{2}, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.77)$$

Подставим в уравнение (5.76) разложения (5.74) и (5.75) и представим  $\chi_a$  в виде

$$\chi_a = \chi_0 + \delta\chi. \quad (5.78)$$

Первая итерация уравнения (5.76) дает

$$\delta\chi = \frac{(4p)^{2\chi_0} e^{-2p}}{n!(n+m)!} \left[ 1 - \frac{1}{2p} (3\chi_0^2 + \tau) + \frac{1}{8p^2} (9\chi_0^4 + 10\chi_0^3 + 6\chi_0^2\tau + 6\chi_0\tau + \tau^2 - \chi_0) + O\left(\frac{1}{p^3}\right) \right]. \quad (5.79)$$

Последующие итерации приводят к величинам, которые в асимптотическом разложении надо опускать.

В симметричном случае имеет место формула

$$\chi_s = \chi_0 - \delta\chi, \quad (5.80)$$

где величина  $\delta\chi$  определяется тем же выражением (5.77). Формулы (5.78), (5.80) справедливы с точностью до  $O((\delta\chi)^2)$ . Доказательство формулы (5.80) можно получить, используя при выводе дисперсионного уравнения для величины  $\chi$  вместо равенств (5.70а, б) эквивалентное им равенство

$$V_{ml}^{2'}(\rho, 0) = 0. \quad (5.81)$$

Все величины  $f$ , зависящие от  $\chi$ , например собственные значения  $\lambda_{ml}(\rho)$  (см. (5.75)), могут быть представлены в виде

$$f(\chi) = f(\chi_0) \pm \frac{\partial f}{\partial \chi} \delta\chi + O((\delta\chi)^2), \quad (5.82)$$

где знак плюс берется в антисимметричном случае, а минус в симметричном.

По существу формулы (5.72), (5.74) и (5.77) задают асимптотику с. у. с. ф., а формулы (5.75), (5.77) и (5.79) — асимптотику соответствующих им собственных значений. Окончательные результаты будут приведены в конце пункта, после построения локальных асимптотических разложений для с. у. с. ф.

Произведя замену переменной

$$y = 2\rho(1 - \eta) \quad (5.83)$$

и функций

$$S_{ml}(\rho, \eta) = e^{\rho\eta}(1 - \eta^2)^{m/2} \varphi_{ml}(\rho, y) \quad (5.84)$$

в исходном уравнении (1.29) для с. у. с. ф., приходим к уравнению

$$\begin{aligned} y \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + (m + 1 - y) \frac{d\varphi(y)}{dy} + \nu\varphi(y) = \\ = \frac{1}{4\rho} \left[ y^2 \frac{d^2\varphi(y)}{dy^2} + (2m + 2 - y) y \frac{d\varphi(y)}{dy} + (m + 1)(m - y) \varphi(y) \right] \end{aligned} \quad (5.85)$$

с «малым возмущением» в правой части.

Согласно п. 1 настоящего параграфа функции  $\varphi_{ml}(\rho, y)$  раскладываются в ряд по невозмущенным

функциям вида

$$\varphi_{ml}(\rho, y) = \sum_{j=0}^{\infty} \left(\frac{1}{4\rho}\right)^j \sum_{k=-j}^j c_k^{(j)} L_{\rho+k}^{(m)}(y), \quad (5.86)$$

где  $L_{\rho+k}^{(m)}(y)$  — функции Лагерра, которые представляются через вырожденную гипергеометрическую функцию

$$L_{\rho}^{(m)}(y) = \frac{\Gamma(\rho + m + 1)}{m! \Gamma(\rho + 1)} F(-\rho, m + 1, y), \quad (5.87)$$

а при целочисленных значениях  $\rho$  обращаются в полиномы Лагерра.

В рассматриваемом случае следует предположить, что индекс  $\rho$  принимает значения  $\rho = n + \delta\rho$ , причем  $n$  — целое, а  $\delta\rho$  — экспоненциально малая по  $\rho$  величина.

Если подставить разложения (5.86) для функций  $\varphi_{ml}(\rho, y)$  и разложение (5.71) для  $v_{ml}(\rho)$  в уравнение (5.85) и потребовать его выполнения в каждом члене разложения по  $\rho$ , то получится рекуррентная система уравнений для коэффициентов  $c_k^{(j)}$

$$\begin{aligned} kc_k^{(j)} = & [(\rho + k + m + 1)(2\rho + 2k + m + 1) - \\ & - (\rho + k + m)(m + 1)] c_k^{(j-1)} - (\rho + k)(\rho + k + m) c_{k-1}^{(j-1)} - \\ & - (\rho + k + m + 1)(\rho + k + 1) c_{k+1}^{(j-1)} + \sum_{t=1}^{j-|k|} 2^{2t-1} v_t c_k^{(j-t)}, \end{aligned} \quad (5.88)$$

$c_k^{(j)} = 0$  при  $j > k$ .

Из рекуррентной системы уравнений (5.88) коэффициенты  $c_k^{(j)}$  (при  $k \neq 0$ ) и  $v_k$  выражаются через величину  $\rho$  и коэффициенты  $c_0^{(j)}$ . Коэффициенты  $c_0^{(j)}$  определяются нормировкой с. у. с. ф. Целая часть  $\rho$  равна числу нулей функции  $S_{ml}(\rho, \eta)$  на интервале  $\eta \in (0, 1)$ , т. е.

$$n = \text{Ent } \rho = \begin{cases} \frac{l-m}{2}, & l-m \text{ четное,} \\ \frac{l-m-1}{2}, & l-m \text{ нечетное.} \end{cases} \quad (5.89)$$

Здесь и далее  $\text{Ent } \rho$  — целая часть действительного числа  $\rho$ .

Представление с. у. с. ф. с помощью формул (5.84), (5.86) справедливо при  $\eta \in \mathcal{D}_1$ , где  $\mathcal{D}_1 = [1 - \eta_1, 1]$ ,  $\eta_1 =$

$= o(p^{-1/2-\varepsilon})$ ,  $0 < \varepsilon < 1/2$ . На промежутке  $\mathcal{D}_2 = [0, 1 - \eta_2]^i$ ,  $\eta_2 < \eta_1$ ,  $\eta_2 = o(p^{-1/2-\varepsilon})$  можно построить следующее асимптотическое разложение:

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(p, \eta) = & \frac{N}{\sqrt{1-\eta^2}} \left\{ e^{-p(1+\eta)} \left( \frac{1+\eta}{1-\eta} \right)^{n+\frac{m+1}{2}} \times \right. \\ & \times \sum_{j=0}^{\infty} \left( \frac{1}{4p} \right)^j \sum_{k=-j}^j a_k^{(j)} \left( \frac{1+\eta}{1-\eta} \right)^k \pm e^{-p(1-\eta)} \left( \frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^{n+\frac{m+1}{2}} \times \\ & \left. \times \sum_{j=0}^{\infty} \left( \frac{1}{4p} \right)^j \sum_{k=-j}^j a_k^{(j)} \left( \frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^k \right\} \quad (5.90) \end{aligned}$$

( $N$  — константа), которое симметризовано в соответствии со свойством четности с. у. с. ф. Знак плюс берется при четных  $l-m$ , минус — при нечетных. Коэффициенты  $a_k^{(j)}$  находятся из рекуррентной системы алгебраических уравнений, которая может быть получена, если подставить разложение (5.90) в уравнение (5.64).

Величина  $\delta\rho$  определяется из условия, чтобы разложения (5.84), (5.86) с учетом асимптотики функций Лагерра и разложения (5.90) совпадали на пересечении  $\mathcal{D}_1 \cap \mathcal{D}_2$ . Подробности соответствующих вычислений приведены в статье Damburg, Propin (1968). Можно показать, что величина  $\delta\rho$  равна величине  $\delta\chi$ , введенной выше (см. (5.79)).

Преимущество вычислений по второй схеме заключается в том, что процедуру последовательного вычисления коэффициентов  $c_k^{(n)}$  и  $a_k^{(n)}$  можно легко реализовать на ЭВМ.

Сформулируем окончательные результаты для асимптотики с. у. с. ф. и собственных значений  $\lambda_{ml}(p)$ . При этом наряду со степенными по большому параметру слагаемыми будем сохранять и экспоненциально малые по  $p$  величины.

«Малые» экспоненты позволяют различить симметричные и антисимметричные решения. Кроме того, при не слишком больших  $p$  учет «малых» экспонент приводит к значительно лучшему совпадению точных расчетов и расчетов по асимптотическим формулам.

Введем целочисленный индекс  $s$  (см. 5.89):

$$s = 2n + m + 1. \quad (5.91)$$

Из формул (5.72), (5.74), (5.75) получаем следующее асимптотическое представление для с. у. с. ф.:

$$\bar{\mathfrak{S}}_{ml}(\rho, \eta) = \left[ \frac{(n+m)!}{n!} \right]^{1/2} \cdot \frac{1}{m! (1-\eta^2)^{1/2}} M_{\chi, m/2} \left( 2\rho (1+\eta) + \right. \\ \left. + 2\chi \ln \frac{1-\eta}{2} \right) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{\rho}\right) \right], \quad (5.92)$$

где  $\chi = s/2 \pm \delta\chi$  (см. (5.79)),  $\eta \in [-1, 0]$ . Знак плюс соответствует четным  $l-m$ , знак минус — нечетным. Если пренебречь малой окрестностью  $\eta=0$ , то можно написать более простое выражение

$$\bar{\mathfrak{S}}_{ml}(\rho, \eta) = \left[ \frac{2^s n! \rho^{m+1}}{(n+m)!} \right]^{1/2} \cdot \left[ \frac{(1+\eta)^m}{(1-\eta)^{s+1}} \right]^{1/2} \times \\ \times e^{-\rho(1+\eta)} L_n^m(2\rho(1+\eta)) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{\rho}\right) \right]. \quad (5.93)$$

Часто выражение (5.93) симметризируют так, чтобы учесть свойство четности с. у. с. ф.:

$$\bar{\mathfrak{S}}_{ml}(\rho, \eta) = \left[ \frac{2^{s-1} n! \rho^{m+1}}{(n+m)!} \right]^{1/2} \left\{ \left[ \frac{(1+\eta)^m}{(1-\eta)^{s+1}} \right]^{1/2} \times \right. \\ \times e^{-\rho(1+\eta)} L_n^m(2\rho(1+\eta)) \pm \left[ \frac{(1-\eta)^m}{(1+\eta)^{s+1}} \right]^{1/2} \times \\ \left. \times e^{-\rho(1-\eta)} L_n^m(2\rho(1-\eta)) \right\} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{\rho}\right) \right]. \quad (5.94)$$

Очевидно, что при  $\eta \in [-1, -\varepsilon]$  асимптотическое выражение (5.94) отличается от (5.93) слагаемым, которое можно внести в поправочный член. Здесь снова знак плюс берется при четных  $l-m$ , а минус — при нечетных и, кроме того, в окрестности точек  $\eta = \pm 1$  надо пренебрегать сингулярным слагаемым. Оценка в формулах (5.92) — (5.94) не является равномерной в окрестности нулей с. у. с. ф.

В подбарьерной области  $\eta \in [-1+\varepsilon, 1-\varepsilon]$  там, где полиномы Лагерра можно заменить их асимптотикой,



справедлива формула

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(\rho, \eta) = & \\ = 2^{n-1/2} \left[ \frac{(2\rho)^s}{n!(n+m)!} \right]^{1/2} \frac{1}{\sqrt{1-\eta^2}} & \left\{ e^{-\rho(1+\eta)} \left( \frac{1+\eta}{1-\eta} \right)^{s/2} \pm \right. \\ & \left. \pm e^{-\rho(1-\eta)} \left( \frac{1-\eta}{1+\eta} \right)^{s/2} \right\} \left[ 1 + O\left(\frac{1}{\rho}\right) \right]. \quad (5.95) \end{aligned}$$

Асимптотическое разложение для собственных значений  $\lambda_{ml}(\rho)$  имеет вид ( $s=2n+m+1$ )

$$\begin{aligned} \lambda_{ml}(\rho) = 2\rho s - \frac{1}{2}(s^2 + 1 - m^2) - \frac{s}{8\rho}(s^2 + 1 - m^2) - \\ - \frac{1}{64\rho^2}[5s^4 + 10s^2 + 1 - 2m^2(3s^2 + 1) + m^4] - \frac{[\lambda]_3}{\rho^3} - \\ - \frac{[\lambda]_4}{\rho^4} - \frac{[\lambda]_5}{\rho^5} + O\left(\frac{1}{\rho^6}\right) \pm \frac{(4\rho)^{s+1}e^{-2\rho}}{n!(n+m)!} \left[ 1 - \frac{3s^2 + 4s + 1 - m^2}{8\rho} + \right. \\ \left. + \frac{[\delta\lambda]_2}{\rho^2} - \frac{[\delta\lambda]_3}{\rho^3} + O\left(\frac{1}{\rho^4}\right) \right]. \quad (5.96) \end{aligned}$$

Коэффициенты  $[\lambda]_3, [\lambda]_4, [\lambda]_5, [\delta\lambda]_2, [\delta\lambda]_3$  приводятся в табл. 10. Знак плюс берется при нечетных  $l-m$ , знак минус — при четных. В частном случае  $m=0, l=0, 1,$

Таблица 10

Коэффициенты  $[\lambda]_3, [\lambda]_4, [\lambda]_5, [\delta\lambda]_2, [\delta\lambda]_3$  асимптотического разложения (5.96) собственных значений  $\lambda_{ml}(\rho)$  при  $\rho \rightarrow \infty$ .  
Обозначения: см. формулы (5.89) и (5.91)

$[\lambda]_3$	$2^{-9}s[33s^4 + 114s^2 + 37 - 2m^2(23s^2 + 25) + 13m^4]$
$[\lambda]_4$	$2^{-10}[63s^6 + 340s^4 + 239s^2 + 14 - 10m^2(10s^4 + 23s^2 + 3) + 3m^4(13s^2 + 6) - 2m^6]$
$[\lambda]_5$	$2^{-13}s[527s^6 + 4139s^4 + 5221s^2 + 1009 - m^2(939s^4 + 3750s^2 + 1591) + m^4(465s^2 + 635) - 53m^6]$
$[\delta\lambda]_2$	$2^{-7}[(9s^4 + 4s^3 - 18s^2 - 12s - 7) - m^2(6s^2 - 4s - 6) + m^4]$
$[\delta\lambda]_3$	$3^{-1}2^{-10}[(23s^6 - 44s^5 - 171s^4 + 400s^3 + 257s^2 + 444s + 51) - m^2(19s^4 - 56s^3 - 50s^2 + 240s \pm 55) + m^4(5s^2 - 12s + 5) - m^6]$

известно большее число членов асимптотического разложения

$$\begin{aligned} \lambda_{00}(p) = & 2p - 1 - \frac{1}{4p} - \frac{4}{(4p)^2} - \frac{23}{(4p)^3} - \frac{164}{(4p)^4} - \frac{1362}{(4p)^5} - \\ & - \frac{12\,744}{(4p)^6} - \frac{131\,707}{(4p)^7} - \frac{1\,484\,244}{(4p)^8} - O\left(\frac{1}{p^9}\right) - \\ & - 2(4p)^2 e^{-2p} \left\{ 1 - \frac{4}{4p} - \frac{3}{(4p)^2} - \frac{20}{(4p)^3} - \frac{146}{(4p)^4} - \right. \\ & \left. - \frac{1240}{(4p)^5} - \frac{11\,839}{(4p)^6} - \frac{124\,324}{(4p)^7} - \frac{1\,416\,490}{(4p)^8} - O\left(\frac{1}{p^9}\right) \right\}. \quad (5.97) \end{aligned}$$

Выражение для  $\lambda_{01}$  отличается знаком при экспоненциально малом слагаемом. Выписанные степенные слагаемые в разложении (5.96) убывают по порядку величин как  $s/p$ , слагаемые в множителе при экспоненте — как  $s^2/p$ . При  $s=1$  удовлетворительные численные результаты для  $\lambda_{00}(p)$  и  $\lambda_{01}(p)$  (не менее трех верных знаков) получаются уже при  $p > 3$ .

**5. Асимптотика сплюснутых радиальных сферических функций.** Асимптотические разложения с. р. с. ф. наиболее простые. Приведем здесь результаты, полученные по методу эталонного уравнения.

Введем в рассмотрение функции  $U_{ml}(p, \xi)$

$$U_{ml}(p, \xi) = \sqrt{\xi^2 + 1} R_{ml}(p, i\xi), \quad (5.98)$$

уравнение для которых не содержит первой производной

$$U''(\xi) + \left[ p^2 - \frac{\lambda_{ml}(p)}{\xi^2 + 1} + \frac{m^2 - 1}{(\xi^2 + 1)^2} \right] U(\xi) = 0, \quad \xi \in [0, \infty). \quad (5.99)$$

Из свойств четности с. р. с. ф. следует, что функции  $U_{ml}(p, \xi)$  удовлетворяют следующим условиям:

$$\begin{aligned} U_{ml}(p, 0) &= 0, \quad l - m \text{ нечетное,} \\ U'_{ml}(p, 0) &= 0, \quad l - m \text{ четное.} \end{aligned} \quad (5.100)$$

Из формулы (5.75), определяющей асимптотику собственных значений  $\lambda_{ml}(p)$ , следует, что уравнение (5.99) не имеет точек перехода на рассматриваемом промежутке  $\xi \in [0, \infty)$ . Поэтому асимптотику функций  $U_{ml}(p, \xi)$

можно искать в виде

$$U_{ml}(p, \xi) = C_1 [z'(p, \xi)]^{-1/2} \cos(pz(p, \xi)), \quad l - m \text{ четное,} \quad (5.101)$$

$$U_{ml}(p, \xi) = C_2 [z'(p, \xi)]^{-1/2} \sin(pz(p, \xi)), \quad l - m \text{ нечетное} \quad (5.102)$$

( $C_1, C_2$  — константы), где функция  $z(p, \xi)$  раскладывается в асимптотический ряд

$$z(p, \xi) = \sum_{k=0}^{\infty} z_k(\xi) p^{-k}, \quad (5.103)$$

причем

$$z_k(\xi) |_{\xi=0} = 0. \quad (5.104)$$

В силу равенства (5.104) граничные условия (5.100) выполняются автоматически. Для  $z_k(\xi)$  получаем стандартным образом рекуррентную систему дифференциальных уравнений первого порядка. Интегрируя эту систему при дополнительных условиях (5.104), находим

$$z(p, \xi) = \xi - \frac{2\chi}{p} \operatorname{arctg} \xi - \frac{(\chi + \tau) \xi}{p^2 (\xi^2 + 1)} - \frac{1}{p^3} \left[ \chi (1 + \chi^2 + \tau) \frac{\xi}{(\xi^2 + 1)^2} + \frac{\chi}{2} (\chi^2 + \tau) \frac{\xi}{\xi^2 + 1} \right] + O\left(\frac{1}{p^4}\right), \quad (5.105)$$

где обозначения для  $\chi$  и  $\tau$  те же, что и в предыдущем пункте. Отсюда следует главный член асимптотики

$$R_{ml}(p, i\xi) = \frac{1}{p \sqrt{\xi^2 + 1}} \cos [p\xi - 2\chi \operatorname{arctg} \xi] + O\left(\frac{1}{p^2}\right), \quad l - m \text{ четное,} \quad (5.106)$$

$$R_{ml}(p, i\xi) = \frac{1}{p \sqrt{\xi^2 + 1}} \sin [p\xi - 2\chi \operatorname{arctg} \xi] + O\left(\frac{1}{p^2}\right) \quad l - m \text{ нечетное.} \quad (5.107)$$

Асимптотика с. р. с. ф. второго, третьего и четвертого рода может быть легко получена из (5.106) и (5.107), если заменить тригонометрические функции в (5.106) и (5.107) в соответствии с определениями (1.35), (1.37) — (1.39).

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Простейшие асимптотические разложения угловых сфероидальных функций при больших значениях параметра в виде рядов по полиномам Эрмита и Лагерра были получены в работах Meixner (1948), Eberlein (1950), Sips (1949), Abramowitz (1949). Там же были найдены степенные члены разложения собственных значений дифференциального оператора.

Равномерные асимптотические представления сфероидальных функций имеются в книге Meixner, Schäfer (1954). Там же приведен главный член экспоненциального расщепления собственных значений  $\lambda_{ml}(p)$ .

Более подробные исследования асимптотики вытянутых сфероидальных функций в различных интервалах изменения независимой переменной были выполнены Fuchs (1964), Slepian (1965), Вайнштейном (1965), Müller (1963), Славяновым (1967), Sirefer (1968). Первые три автора нашли асимптотику собственных значений интегрального уравнения для в. у. с. ф. В работах Слепяна и Вайнштейна рассматривается также случай, когда одновременно с  $c \gg 1$  большой величиной является индекс  $l - m$ . Изложение в настоящем параграфе опирается на работы Слепяна и Славянова.

Асимптотика с. у. с. ф. на полном интервале изменения независимой переменной строилась в основном в связи с проблемой молекулярного иона водорода (см. библиографические указания к § 4 гл. II). Детальное исследование проблемы было проведено Комаровым и Славяновым (1967) и Damburg, Propin (1968a, b). В работе Дамбурга и Пропина используются разложения, предложенные Müller (1962), однако последний не обратил внимания на экспоненциальное расщепление собственных значений. В настоящем параграфе использованы построения Комарова и Славянова, Дамбурга и Пропина. Асимптотические формулы для с. р. с. ф. приведены по заметке Славянова (1974).

Асимптотические разложения гиперсфероидальных функций получены в работах Neufley (1964), Slepian (1964), Вайнштейна (1965b), Кузнецова (1970). Частично результаты помещены в обзорной монографии Размахнина и Яковлева (1971), в связи с чем мы сочли возможным не приводить их здесь. Асимптотике в. у. с. ф. и гиперсфероидальных функций при целом значении  $m$  посвящена работа Лося (1969). Литература, посвященная асимптотике сфероидальных функций при больших индексах  $l$  и  $m$ , приведена в следующем параграфе.

### § 6. Квазиклассическая асимптотика сфероидальных функций

Решения уравнения (1.1) при большом числе нулей  $q = l - m$  собственных функций  $u_{ml}(z)$  можно представить в достаточно простом и компактном виде, воспользовавшись методом ВКБ (или *квазиклассическим приближением*), который был развит и получил известность как метод приближенного решения задач квантовой механики (см., например, Хединг (1965), Фреман (1967), Пономарев (1967), Вергу, Mount (1972)). Метод ВКБ

позволяет получить равномерные оценки для собственных значений и собственных функций при любых значениях параметров  $s$  и  $p$ , причем эти оценки тем точнее, чем больше число нулей решений. Другим достоинством квазиклассических асимптотик является их простота. В дальнейшем мы не будем останавливаться на вопросах обоснования и деталях метода и приведем только окончательные результаты, применительно к рассматриваемому частному случаю.

Квазиклассическая асимптотика решений уравнений типа

$$\frac{d^2 u}{dz^2} + Q(z) u = 0 \quad (6.1)$$

имеет вид

$$u(z) \cong N [Q(z)]^{-1/4} \exp \left\{ \pm i \int_{z_0}^z \sqrt{Q(z)} dz \right\}, \quad (6.2)$$

где  $z_0$  — один из корней уравнения  $Q(z) = 0$ , а  $N$  — нормировочный множитель.

Формула (6.2) аппроксимирует решения уравнения (6.1) всюду, за исключением малой окрестности точек поворота  $z_0$ . Асимптотика (6.2) представляет собой главный член асимптотического разложения по числу нулей решения. Условия применимости формулы (6.2) и вид поправок к ней мы здесь обсуждать не будем, отсылая за подробностями к цитированным монографиям.

Уравнения для сфероидальных функций различных типов, которые следуют из исходного трехмерного уравнения при разделении переменных в сфероидальных координатах, получают в самосопряженной форме

$$\frac{1}{\rho(z)} \frac{d}{dz} \rho(z) \frac{du}{dz} + r(z) u = 0. \quad (6.3)$$

Для построения квазиклассической асимптотики решений уравнения (6.3), его необходимо предварительно привести к нормальной форме (6.1). Такое приведение можно осуществить бесконечным числом способов с помощью одновременного преобразования аргумента и функции

$$t = \chi(z), \quad y(t) = u(z) \sqrt{\rho(z) \chi'(z)}. \quad (6.4)$$

Здесь  $\chi(z)$  — монотонная непрерывная функция, а штрих означает производную  $d/dz$ . Функция  $y(t)$  удовлетворяет

уравнению

$$\frac{d^2 y}{dt^2} + [\chi'(z)]^{-2} [r(z) + \sigma(z)] y = 0, \quad (6.5)$$

где  $\sigma(z)$  — функция  $t$ , определенная соотношениями

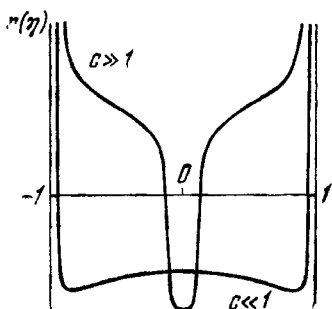
$$\sigma(z) = -\frac{1}{2} q(z) \frac{d}{dz} \ln \left[ q(z) \sqrt{\frac{\rho(z)}{\chi'(z)}} \right], \quad (6.6)$$

$$q(z) = \frac{d}{dz} \ln [\rho(z) \chi'(z)].$$

Квазиклассическая асимптотика решений уравнения (6.5) после перехода к прежней функции  $u(z)$  и прежнему аргументу  $z$  имеет вид

$$u(z) \approx N [\rho(z)]^{-1/2} [r(z) + \sigma(z)]^{-1/4} \times \exp \left\{ \pm i \int \sqrt{r(z) + \sigma(z)} dz \right\}. \quad (6.7)$$

Преобразование (6.4), которое обеспечивает правильное поведение асимптотических решений (6.7) в особых точках уравнения (6.3), имеет вид (Пономарев, 1965)



$$t = \int \frac{dz}{\rho(z)}, \quad y(t(z)) = u(z). \quad (6.8)$$

Для него справедливо равенство

$$\sigma(z) = 0, \quad (6.9)$$

откуда следует асимптотическое представление

$$u(z) \approx N [\rho(z) p(z)]^{-1/2} \times \exp \left\{ \pm i \int_{z_0}^z p(z) dz \right\}. \quad (6.10)$$

Рис. 12. Схематическое поведение эффективного потенциала  $r(\eta) = -[\rho(\eta)]^2$  в уравнении (6.3) для квазипульса (6.12) при  $c \ll 1$  и при  $c \gg 1$ .

Функция  $p(z)$  называется

квазипульсом и определяется соотношением

$$p(z) = \sqrt{r(z)}. \quad (6.10a)$$

В области, где  $[\rho(\eta)]^2 > 0$ , т. е. при  $-\eta_0 < \eta < \eta_0$  ( $\pm \eta_0$  — корни уравнения  $\rho(\eta) = 0$ , рис. 12), с учетом формулы (6.10) и других правил построения квазиклас-

сических асимптотик находим асимптотику в у. с. ф., определенном уравнением (1.11)

$$\bar{S}_{ml}(c, \eta) = \tilde{N}_{ml} [(1 - \eta^2) p(\eta)]^{-1/2} \cos \left( \int_{\pm \eta_0}^{\eta} p(\eta) d\eta \pm \frac{\pi}{4} \right). \quad (6.11a)$$

В области, где  $[p(\eta)]^2 < 0$ , соответственно получим

$$\begin{aligned} \bar{S}_{ml}(c, \eta) = \\ = \frac{\tilde{N}_{ml}}{2} [(1 - \eta^2) p(\eta)]^{-1/2} \exp \left\{ - \left| \int_{\pm \eta_0}^{\eta} p(\eta) d\eta \right| \right\}, \end{aligned} \quad (6.11б)$$

причем  $\tilde{N}_{ml} = N_{ml}$  и  $\tilde{N}_{ml} = (-1)^{l-m} N_{ml}$  для нижнего предела интегрирования  $+\eta_0$  и  $-\eta_0$  соответственно. Здесь

$$p(\eta) = \left[ c^2 + \frac{\lambda}{1 - \eta^2} - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right]^{1/2}, \quad (6.12)$$

а  $\pm \eta_0$  — корни уравнения  $p(\eta) = 0$ , лежащие на интервале\*)  $\eta \in (-1, 1)$ .

Формулы (6.11a), (6.11б) применимы во всей области изменения  $\eta$ , за исключением малой окрестности точек поворота  $\pm \eta_0$ .

С учетом соотношений (6.10) и (1.12) нормировка  $N_{ml}(c)$  определяется из условия

$$\frac{1}{2} N_{ml}^2 \int_{-\eta_0}^{\eta_0} \frac{d\eta}{(1 - \eta^2) p(\eta)} = 1 \quad (6.13)$$

---

\*) Наиболее часто используемое преобразование (6.4) (см., например, Ландау и Лифшиц, 1963) имеет вид

$$t = z, \quad y(t) = u(z) \sqrt{\rho(z)} \quad (6.8a)$$

и приводит к выражению

$$\sigma(z) = -\frac{1}{4}(\rho'/\rho)^2 - \frac{1}{2}(\rho'/\rho)',$$

что для  $\rho(z) = 1 - z^2$  дает  $\sigma(z) = (1 - z^2)^{-2}$ . Квазинмпульс, соответствующий этому преобразованию, отличается от выражения (6.12) заменой  $m^2 \rightarrow m^2 - 1$ . Легко убедиться, что при такой замене решения (6.11б) не аналитичны в точках  $z = \pm 1$ , а соответствующие фазовые интегралы при  $m = 0$  логарифмически расходятся (Пономарев, 1965, 1967).

Отметим также, что случай  $m = 0$  при любом выборе квазинмпульса требует в окрестности особых точек более аккуратного подхода, чем квазиклассический, и его надо исследовать, например, с помощью метода эталонного уравнения (§ 5).

и равна

$$N_{ml} = [c\xi_0/K(\kappa)]^{1/2}, \quad \kappa = \eta_0/\xi_0, \quad (6.14)$$

где корни  $\eta_0$  и  $\xi_0$  квазиимпульса равны

$$\begin{aligned} \eta_0 &= \left[ 1 + \frac{1}{2c^2} (\lambda - \sqrt{\lambda^2 + 4m^2c^2}) \right]^{1/2}, \\ \xi_0 &= \left[ 1 + \frac{1}{2c^2} (\lambda + \sqrt{\lambda^2 + 4m^2c^2}) \right]^{1/2}, \end{aligned} \quad (6.15)$$

а  $K(\kappa)$  — полный эллиптический интеграл второго рода (Градштейн и Рыжик, 1971, стр. 918):

$$K(\kappa) = \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{\sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}}. \quad (6.16)$$

Собственные значения  $\lambda = \lambda_{ml}(c)$  находятся из квазиклассического условия квантования ( $q = l - m$ ):

$$\int_{-\eta_0}^{\eta_0} p(\eta) d\eta = \pi \left( q + \frac{1}{2} \right), \quad (6.17)$$

которое после вычисления интеграла принимает вид трансцендентного уравнения

$$\begin{aligned} \frac{2c}{\xi_0} \{ \xi_0^2 E(\kappa) - (1 - \eta_0^2) [K(\kappa) - (\xi_0^2 - 1) \Pi(\eta_0^2, \kappa)] \} = \\ = \pi \left( q + \frac{1}{2} \right), \end{aligned} \quad (6.18)$$

где  $E(\kappa)$  и  $\Pi(\alpha^2, \kappa)$  — полные эллиптические интегралы первого и третьего рода соответственно \*

$$\begin{aligned} E(\kappa) &= \int_0^{\pi/2} \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi} d\varphi, \\ \Pi(\alpha^2, \kappa) &= \int_0^{\pi/2} \frac{d\varphi}{(1 - \alpha^2 \sin^2 \varphi) \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \varphi}}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

---

\*) При пользовании справочником Градштейна и Рыжика (1971) следует иметь в виду, что формулы 3.167, в которых определены эллиптические интегралы третьего рода, неверны, и в них необходимо произвести замену  $n \rightarrow -n = \alpha^2$ .



Уравнение (6.18) справедливо при любых вещественных  $c$ . Собственные значения  $\lambda_{ml}(c)$  определяются из него с относительной точностью  $O(q^{-2})$ . В пределе малых и больших  $c$  из соотношения (6.18) следуют разложения для  $\lambda_{ml}(c)$  по степеням  $c$  и  $1/c$  соответственно. В частном случае  $m=0$  имеем:

при  $c \ll 1$

$$\lambda_{0l}(c) = (q + 1/2)^2 - \frac{c^2}{2} + \frac{c^4}{32(q + 1/2)^2} + \dots, \quad (6.20)$$

при  $c \gg 1$

$$\lambda_{0l}(c) = -c^2 + c(2q + 1) - \frac{(2q + 1)^2}{8} - \frac{(2q + 1)^3}{64c} + \dots \quad (6.21)$$

Выражения (6.20) и (6.21) представляют собой разложения по двум параметрам  $q$  и  $c$ . Коэффициенты разложений при степенях  $c$  и  $c^{-1}$  совпадают с коэффициентами асимптотических разложений (4.15) и (5.40) с точностью  $O(q^{-2})$ .

Подчеркнем, что в формулы (6.11а), (6.11б) для функций  $S_{ml}(c, \eta)$  даже при  $q=0$ , когда квазиклассические собственные значения наиболее сильно отличаются от точных, надо подставлять квазиклассические собственные значения, поскольку именно они обеспечивают аналитичность приближенных решений в особых точках уравнения для в. у. с. ф. и правильную фазу при  $2c(1 \pm \eta) \gg 1$ .

Квазиклассическая асимптотика в. р. с. ф., нормированных условием (1.21), в области  $\xi_0 < \xi < \infty$ , где  $[p(\xi)]^2 > 0$ , имеет вид

$$R_{ml}(c, \xi) \approx [c(\xi^2 - 1)p(\xi)]^{-1/2} \cos\left(\int_{\xi_0}^{\xi} p(\xi) d\xi - \frac{\pi}{4}\right), \quad (6.22а)$$

где  $\xi_0$  — корень уравнения  $p(\xi) = 0$  на интервале  $\xi \in (1, \infty)$ .

В области  $1 \leq \xi < \xi_0$ , где  $[p(\xi)]^2 < 0$ ,

$$R_{ml}(c, \xi) \approx \frac{1}{2} [c(\xi^2 - 1)|p(\xi)|]^{-1/2} \exp\left\{-\left|\int_{\xi_0}^{\xi} p(\xi) d\xi\right|\right\}. \quad (6.22б)$$

Квазимпульс в выражениях (6.22а), (6.22б) равен

$$\rho(\xi) = \left[ c^2 - \frac{\lambda}{\xi^2 - 1} - \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right]^{1/2} \quad (6.23)$$

и совпадает по форме с квазимпульсом для в. у. с. ф. (6.12).

Точно так же, используя формулы (6.10), можно найти квазиклассическую асимптотику с. р. с. ф.:

в области  $\xi > \xi_0$ , где  $[\rho(\xi)]^2 > 0$ ,

$$R_{ml}(\rho, i\xi) = [\rho(\xi^2 + 1) \rho(\xi)]^{-1/2} \cos \left( \int_{\xi_0}^{\xi} \rho(\xi) d\xi - \frac{\pi}{4} \right), \quad (6.24a)$$

в области  $\xi < \xi_0$ , где  $[\rho(\xi)]^2 < 0$ ,

$$R_{ml}(\rho, i\xi) \approx \frac{1}{2} [\rho(\xi^2 + 1) |\rho(\xi)|]^{-1/2} \exp \left\{ - \left| \int_{\xi_0}^{\xi} \rho(\xi) d\xi \right| \right\}. \quad (6.24б)$$

Здесь  $\xi_0$  — корень квазимпульса  $\rho(\xi)$  на промежутке  $0 \leq \xi < \infty$

$$\rho(\xi) = \left[ -\rho^2 + \frac{\lambda}{\xi^2 + 1} - \frac{m^2}{(\xi^2 + 1)^2} \right]^{1/2}. \quad (6.25)$$

Асимптотика с. у. с. ф. приведена в § 6 гл. II.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

В работах Вайнштейна (1965а), Cloizeaux, Meth (1972) строится равномерная (включая точки поворота) асимптотика вытянутых сфероидальных функций при больших индексах  $l$  и параметре  $c$  по методу эталонного уравнения. Там же найдена асимптотика собственных значений, как дифференциального, так и интегрального операторов, связанных с в. у. с. ф. Несколько иной метод решения той же задачи предложил Slepian (1965). Случай нецелых  $m$  исследовал Лось (1969).

Асимптотика вытянутых сфероидальных функций при больших значениях индекса  $m$  рассмотрена Meixner (1948), Abramowitz (1949), Müller (1965). Дупленковым и Коваленко (1965).

Бабиц и Григорьева (1973) получили асимптотические формулы для с. у. с. ф., когда одновременно оба индекса  $l$  и  $m$  и параметр  $\rho$  стремятся к бесконечности.

Квазиклассическая асимптотика вытянутых сфероидальных функций при произвольных  $c$  построена в работе Пономарева (1967).

## § 7. Разложения функций Грина и плоских волн по сфероидальным функциям

**1. Разложения функций Грина по сфероидальным функциям.** Рассмотрим разложения по сфероидальным функциям функций Грина ряда задач, связанных с уравнением Гельмгольца. Эти разложения, во-первых, важны для приложений, во-вторых, они могут быть использованы для вывода ряда соотношений, связывающих как сами сфероидальные функции, так и сфероидальные функции со сферическими.

Функция Грина уравнения Гельмгольца для всего пространства

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{\exp(ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \quad (7.1)$$

задающая стационарное волновое поле точечного источника, расположенного в точке  $\mathbf{r}'$ , определяется как решение неоднородного уравнения

$$(\Delta + k^2)G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (7.2)$$

удовлетворяющее условию излучения

$$r \left( \frac{\partial}{\partial r} G - ikG \right) \rightarrow 0 \text{ при } r \rightarrow \infty.$$

Здесь  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  — трехмерная дельта-функция Дирака.

В вытянутых сфероидальных координатах  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  записывается в виде

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{8}{d^3(\xi^2 - \eta^2)} \delta(\xi - \xi') \delta(\eta - \eta') \delta(\varphi - \varphi'). \quad (7.3)$$

Множитель  $\delta(\eta - \eta') \delta(\varphi - \varphi')$  может быть представлен в виде разложения по полной ортогональной системе функций  $\bar{S}_{ml}(c, \eta) e^{\pm im\varphi}$  на единичной сфере с полярными координатами  $\varphi, \vartheta$  ( $\vartheta = \arccos \eta$ )

$$\begin{aligned} \delta(\eta - \eta') \delta(\varphi - \varphi') &= \\ &= \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} \frac{2 - \delta_{0m}}{2\pi} \bar{S}_{ml}(c, \eta) \bar{S}_{ml}(c, \eta') \cos m(\varphi - \varphi'), \end{aligned} \quad (7.4)$$

где

$$\delta_{0m} = \begin{cases} 1, & m = 0, \\ 0, & m \neq 0. \end{cases}$$

Коэффициенты Фурье в разложении (7.4) находятся стандартным образом, причем используется симметрия дельта-функции.

По методу разделения переменных функция  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  ищется в виде

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} \frac{2 - \delta_{0m}}{2\pi} \bar{S}_{ml}(c, \eta) \bar{S}_{ml}(c, \eta') \times \\ \times \cos m(\varphi - \varphi') G_{ml}(\xi, \xi'). \quad (7.5)$$

Подставив выражение (7.5) в уравнение (7.2), записанное в сферических координатах (см. (7.3) и (2.1) введения), получим, что функция  $G_{ml}(\xi, \xi')$  является решением задачи

$$\frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} G_{ml}(\xi, \xi') + \\ + \left[ -\lambda_{ml} + c^2 (\xi^2 - 1) - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] G_{ml}(\xi, \xi') = \\ = -\frac{2}{d} \delta(\xi - \xi'), \quad 1 \leq \xi < \infty, \quad (7.6)$$

$$|G_{ml}(1, \xi')| < \infty, \quad \lim_{\xi \rightarrow \infty} \xi \left( \frac{\partial}{\partial \xi} G - icG \right) \rightarrow 0. \quad (7.7)$$

Таким образом, функция  $G_{ml}(\xi, \xi')$  является функцией Грина одномерного дифференциального оператора (7.6), (7.7) и может быть построена стандартным образом через два решения однородного уравнения  $R_{ml}^{(1)}(c, \xi)$  и  $R_{ml}^{(3)}(c, \xi)$ , удовлетворяющих граничным условиям (7.7). Используя значение вронскиана  $W(R_{ml}^{(1)}(c, \xi), R_{ml}^{(3)}(c, \xi))$  из (1.25), можно получить одномерную функцию Грина  $G_{ml}(\xi, \xi')$  в виде

$$G_{ml}(\xi, \xi') = ik R_{ml}^{(1)}(c, \xi_{<}) R_{ml}^{(3)}(c, \xi_{>}). \quad (7.8)$$

Здесь и в дальнейших формулах

$$\xi_{<} = \min(\xi, \xi'), \quad \xi_{>} = \max(\xi, \xi') \quad (7.9)$$

Окончательно разложение полной функции Грина уравнения Гельмгольца для всего пространства  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$

по вытянутым сфероидальным функциям имеет вид

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{ik}{2\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} (2 - \delta_{0m}) \bar{S}_{ml}(c, \eta) \bar{S}_{ml}(c, \eta') \times \\ \times \cos m(\varphi - \varphi') R_{ml}^{(1)}(c, \xi_{<}) R_{ml}^{(3)}(c, \xi_{>}). \quad (7.10)$$

Таким же способом можно построить функции Грина внешних и внутренних задач для уравнения Гельмгольца с однородными граничными условиями на вытянутом эллипсоиде  $\xi = \xi_0$ . Разница состоит лишь в том, что граничные условия для  $G_{ml}(\xi, \xi')$  имеют вид, отличный от (7.7). Например, в случае внешней задачи и граничного условия

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') |_{\xi=\xi_0} = 0, \quad (7.11)$$

имеем

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{ik}{2\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} (2 - \delta_{0m}) \bar{S}_{ml}(c, \eta) \bar{S}_{ml}(c, \eta') \times \\ \times \cos m(\varphi - \varphi') \left[ R_{ml}^{(1)}(c, \xi_{<}) R_{ml}^{(3)}(c, \xi_{>}) - \right. \\ \left. - \frac{R_{ml}^{(1)}(c, \xi_0)}{R_{ml}^{(3)}(c, \xi_0)} R_{ml}^{(3)}(c, \xi_{<}) R_{ml}^{(1)}(c, \xi_{>}) \right]. \quad (7.12)$$

Разложение функций Грина в сплюснутых сфероидальных координатах проводится аналогично. Окончательный результат для функции Грина  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  во всем пространстве таков:

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{ik}{2\pi} \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} (2 - \delta_{0m}) \bar{S}_{ml}(p, \eta) \bar{S}_{ml}(p, \eta') \times \\ \times \cos m(\varphi - \varphi') R_{ml}^{(1)}(p, i\xi_{<}) R_{ml}^{(3)}(p, i\xi_{>}). \quad (7.13)$$

Можно написать еще целый ряд разложений функций Грина различных задач по сфероидальным функциям. Например, если точечный источник находится на оси вращения, получается однократный ряд по сфероидальным функциям с индексом  $m$ , равным нулю. Возможно рассмотрение поверхностных функций Грина, когда дельта-функция входит не в уравнение Гельмгольца, а в граничное условие, задаваемое на поверхности сфероида, и т. д.

2. Разложения плоских волн по сфероидальным функциям. Из разложений функций Грина (7.10) и (7.13) предельным переходом при  $r' \rightarrow \infty$  можно получить и разложение плоской волны по сфероидальным функциям.

Пусть направление векторов  $r$  и  $r'$  задано сферическими углами  $\vartheta, \varphi$  и  $\vartheta', \varphi'$  соответственно. Нетрудно убедиться, что при  $r' \rightarrow \infty$

$$|r' - r| = r' - r \left( \cos \vartheta' \cos \vartheta + \sin \vartheta' \sin \vartheta \cos (\varphi - \varphi') + O\left(\frac{1}{r'}\right) \right). \quad (7.14)$$

Плоская волна получается из сферической волны (7.1) в пределе при  $r' \rightarrow \infty$ . Направление ее распространения противоположно направлению вектора  $r'$  и характеризуется углами  $\vartheta_0, \varphi_0$

$$\vartheta_0 = \pi - \vartheta', \quad \varphi_0 = \varphi' - \pi. \quad (7.15)$$

Еще заметим, что из определения вытянутых сфероидальных координат (введение (1.15)) следует, что при  $r' \rightarrow \infty$

$$\xi' = \frac{c}{k} r' + O\left(\frac{1}{r'}\right), \quad \eta' = \cos \vartheta' + O\left(\frac{1}{r'^2}\right). \quad (7.16)$$

Теперь, воспользовавшись формулами (7.14) — (7.16) и асимптотическим поведением функций  $R_{ml}^{(3)}(c, \xi)$  (1.22), получим предельным переходом  $r' \rightarrow \infty$  из разложения (7.10) искомого разложение плоской волны по сфероидальным функциям

$$\begin{aligned} \exp [ikr (\cos \vartheta_0 \cos \vartheta + \sin \vartheta_0 \sin \vartheta \cos (\varphi_0 - \varphi))] = \\ = 2 \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} i^l (2 - \delta_{0m}) \bar{S}_{ml}(c, \cos \vartheta_0) \bar{S}_{ml}(c, \eta) \times \\ \times R_{ml}^{(1)}(c, \xi) \cos m(\varphi_0 - \varphi). \quad (7.17) \end{aligned}$$

Показатель экспоненты в левой части (7.17) упрощается, если ввести угол  $\psi$  между направлением плоской волны и вектором  $r$ . Тогда

$$\cos \vartheta_0 \cos \vartheta + \sin \vartheta_0 \sin \vartheta \cos (\varphi_0 - \varphi) = \cos \psi. \quad (7.18)$$

В дальнейшем нам понадобится еще представление показателя экспоненты плоской волны в вытянутых и

сплюснутых координатах соответственно

$$kr \cos \psi = c [\eta \xi \cos \vartheta_0 + \\ + [(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)]^{1/2} \sin \vartheta_0 \cos(\varphi_0 - \varphi)], \quad (7.19)$$

$$kr \cos \psi = p [\eta \xi \cos \vartheta_0 + \\ + [(1 - \eta^2)(\xi^2 - 1)]^{1/2} \sin \vartheta_0 \cos(\varphi_0 - \varphi)]. \quad (7.20)$$

Разложение плоской волны в сплюснутых координатах полностью аналогично разложению (7.17) с заменой вытянутых функций на сплюснутые

$$\exp(ikr \cos \psi) = 2 \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} i^l (2 - \delta_{0m}) \bar{S}_{ml}(p, \cos \vartheta_0) \times \\ \times \bar{S}_{ml}(p, \eta) R_{ml}^{(1)}(p, i\xi) \cos m(\varphi_0 - \varphi). \quad (7.21)$$

Сравнивая формулы (7.17) и (7.21) с разложением плоской волны по сферическим функциям

$$\exp(ikr \cos \psi) = \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{l=m}^{\infty} i^l (2 - \delta_{0m}) (2l + 1) \frac{(l - m)!}{(l + m)!} \times \\ \times P_l^m(\cos \vartheta_0) P_l^m(\cos \vartheta) \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{l+1/2}(kr) \cos m(\varphi - \varphi_0), \quad (7.22)$$

можно найти ряд соотношений, связывающих сфероидальные и сферические волновые функции (теорем сложения). Перепишем в несколько иных обозначениях разложение (3.15)

$$\bar{S}_{ml}(c, \cos \vartheta_0) = N_{ml}^{-1}(c) \sum_{s=0,1}^{\infty} d_s^{ml}(c) P_{l+s}^m(\cos \vartheta_0). \quad (7.23)$$

Умножив теперь (7.23) на равенство правых частей (7.17) и (7.22) и проинтегрировав по  $\vartheta_0$  от 0 до  $\pi$ , получим разложение вытянутых сфероидальных волновых функций по сферическим

$$S_{ml}(c, \eta) R_{ml}(c, \xi) = \\ = \sum_{s=0,1}^{\infty} d_s^{ml}(c) P_{m+s}^m(\cos \vartheta) \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{m+s+1/2}(kr). \quad (7.24)$$

Аналогичное разложение для сплюснутых сфероидальных

функций имеет вид

$$S_{ml}(\rho, \eta) R_{ml}(\rho, i\xi) = \sum_{s=0,1}^{\infty} d_s^{ml}(\rho) P_{m+s}^m(\cos \vartheta) \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{m+s+1/2}(kr), \quad (7.25)$$

где коэффициенты  $d_s^{ml}(\rho)$  те же, что и в разложении (3.16). Аналогичным приемом можно найти и разложение сферической волновой функции в ряд по сфероидальным.

**3. Другой вывод интегральных уравнений и соотношений для сфероидальных функций.** Как уже указывалось в § 2 интегральные уравнения и соотношения для сфероидальных функций тесно связаны с разложениями трехмерной функции Грина по сфероидальным функциям. При этом собственные значения интегральных уравнений могут быть явно выражены через значения сфероидальных функций.

Положим  $\vartheta_0 = \arccos t$ ,  $\varphi_0 = 0$ , домножим (7.17) на  $S_{ml}(c, t) \cos m\varphi$  и проинтегрируем по  $\varphi$  от 0 до  $2\pi$  и  $t$  от  $-1$  до  $1$  с учетом (7.19) и свойства ортогональности в. у. с. ф. Получим

$$4\pi i^l S_{ml}(c, \eta) R_{ml}^{(1)}(c, \xi) = \int_{-1}^1 dt \int_0^{2\pi} \exp\{ic[\eta\xi t + (1-\eta^2)(\xi^2-1)(1-t^2)^{1/2} \cos \varphi]\} \times \\ \times S_{ml}(c, t) \cos m\varphi d\varphi. \quad (7.26)$$

Воспользовавшись интегральным представлением функций Бесселя

$$J_m(cz) = \frac{1}{2\pi i^m} \int_0^{2\pi} e^{icz \cos \varphi} \cos m\varphi d\varphi, \quad (7.27)$$

преобразуем равенство (7.26) к виду

$$S_{ml}(c, \eta) R_{ml}^{(1)}(c, \xi) = \frac{i^{m-l}}{2} \int_{-1}^1 e^{ic\eta\xi t} J_m[c((1-\eta^2)(\xi^2-1)(1-t^2))^{1/2}] \times \\ \times S_{ml}(c, t) dt. \quad (7.28)$$

Равенство (7.28) является *основным интегральным соотношением* для вытянутых сфероидальных функций,



откуда легко могут быть получены уравнение (2.7) и представление (2.10). Действительно, положив  $m=0$  и совершив предельный переход  $\xi \rightarrow 1$ , придем к уравнению

$$S_{0l}(c, \eta) = \frac{i^{m-l}}{2R_{0l}^{(1)}(c, 1)} \int_{-1}^1 e^{ic\eta t} S_{0l}(c, t) dt, \quad (7.29)$$

которое является частным случаем (2.7). В общем случае  $m \neq 0$  надо домножить (7.28) на  $(\xi^2 - 1)^{-m/2}$  и раскрыть неопределенность в правой части при  $\xi \rightarrow 1$  с учетом известного поведения  $J_m(z)$  при  $z \rightarrow 0$

$$J_m(z) = \frac{z^m}{2^m m!} [1 + O(z^2)].$$

Считая  $l-m$  четным, положим в равенстве (7.28)  $\eta=0$ , в результате получим представление  $R_{ml}^{(1)}(c, \xi)$

$$\begin{aligned} R_{ml}^{(1)}(c, \xi) &= \\ &= \frac{i^{m-l}}{2S_{ml}(c, 0)} \int_{-1}^1 J_m[c((1-t^2)(\xi^2-1))^{1/2}] S_{ml}(c, t) dt. \end{aligned} \quad (7.30)$$

Если  $l-m$  нечетно, то (7.28) следует вначале продифференцировать по  $\eta$  и затем положить  $\eta=0$ , что дает

$$\begin{aligned} R_{ml}^{(1)}(c, \xi) &= \\ &= \frac{i^{m-l+1} c \xi}{2S'_{ml}(c, 0)} \int_{-1}^1 t J_m[c((1-t^2)(\xi^2-1))^{1/2}] S_{ml}(c, t) dt. \end{aligned} \quad (7.31)$$

Наконец, домножив (7.28) на  $(1-\eta^2)^{-m/2}$  и перейдя к пределу при  $\eta \rightarrow 1$ , получим представление (2.10).

Основное интегральное соотношение для сплюснутых сфероидальных функций выводится из (7.21) теми же приемами, что и соотношение (7.28). Окончательно имеем

$$\begin{aligned} S_{ml}(p, \eta) R_{ml}^{(1)}(p, i\xi) &= \\ &= \frac{i^{m-l}}{2} \int_{-1}^1 e^{ip\xi\eta t} J_m[p((1-\eta^2)(\xi^2+1)(1-t^2))^{1/2}] \times \\ &\quad \times S_{ml}(p, t) dt. \end{aligned} \quad (7.32)$$

Совершив предельный переход  $\eta \rightarrow 1$  и  $i\xi \rightarrow 1$ , можно

получить интегральное уравнение (2.30) и интегральное соотношение (2.34).

Наконец, заметим, что если заменить в правой части (7.28) и (7.32) пределы интегрирования на  $(1+i\infty, 1)$  или  $(-1+i\infty, -1)$  и убрать двойку в знаменателе, то в левой части вместо радиальных функций первого рода будут содержаться радиальные функции третьего и четвертого рода соответственно.

**4. Интегральные представления функций Грина.** Разложения функций Грина различных задач дифракции в ряды Фурье вида (7.10), (7.12), (7.13) по базисным функциям, возникающим при разделении переменных в сфероидальных координатах, удобны для расчетов лишь в тех случаях, когда безразмерный параметр  $s$  (либо  $p$ ) не слишком большой. В задачах коротковолновой дифракции эти ряды сходятся плохо, и приходится переходить к асимптотическим разложениям. Обычно используют два способа получения представления функций Грина, удобных для вычисления коротковолновых асимптотик. Один — это применение к ряду Фурье преобразования Ватсона, другой — непосредственная запись функции Грина в виде контурных интегралов на комплексных плоскостях констант разделения и дальнейшее их вычисление асимптотическим методом. Оба эти способа, хорошо разработанные в задачах с цилиндрическими и сферическими границами раздела, лишь в последнее время получили развитие в задачах со сфероидальными границами раздела.

Поскольку детальное изложение этого вопроса требует рассмотрения свойств решений сфероидального уравнения (1.1) при произвольных значениях констант разделения  $\lambda$  и  $m$ , а в данной книге такая задача не ставилась, здесь будут даны лишь основные идеи подхода к поставленной проблеме, на примере функций Грина точечного источника в присутствии вытянутого сфероида с условием Дирихле на границе.

Искомая функция Грина  $G(r, r')$  удовлетворяет уравнению

$$(\Delta + k^2)G(r, r') = -\delta(r-r'), \quad (7.33)$$

граничному условию

$$G(r, r')|_{\xi=\xi_0} = 0,$$

где  $\xi = \xi_0$  — уравнение сфероида, и условию излучения.

Нетрудно убедиться, что функция Грина  $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  может быть формально (без строгого оправдания сходимости) представлена в виде двойного интеграла

$$G(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi i)^2} \int_{\Gamma_1} \int_{\Gamma_2} G_1(\eta, \eta'; m, \lambda) \times \\ \times G_2(\xi, \xi'; m, \lambda) \frac{\cos m(\pi - |\varphi - \varphi'|)}{\sin m\pi} dm d\lambda, \quad (7.34)$$

где контур  $\Gamma_1$  на  $m$ -плоскости выбран так, как показано на рис. 13 и интегрирование по нему понимается в смысле главного значения (пересекается полюс  $m=0$ ), а контур  $\Gamma_2$  проведен так, что при любом фиксированном  $m$ ,

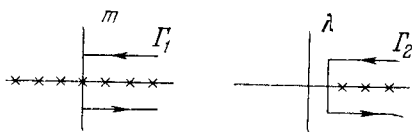


Рис. 13. Контур  $\Gamma_1$  и  $\Gamma_2$  интегрального представления (7.34) на плоскостях  $m$  и  $\lambda$ . Крестиками помечены полюса функции Грина.

принадлежащем  $\Gamma_1$ , он охватывает на  $\lambda$ -плоскости собственные значения  $\lambda_{ml}(c)$  задачи (1.11) и не охватывает других особенностей подынтегрального выражения. Одномерная «угловая» функция Грина  $G(\eta, \eta'; m, \lambda)$  является решением задачи

$$\frac{d}{d\eta}(1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} G_1 + \left[ \lambda + c^2(1 - \eta^2) - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] G_1 = \\ = -\delta(\eta - \eta'), \quad (7.35)$$

$$G_1|_{\eta=\pm 1} = 0. \quad (7.36)$$

Введем функцию  $S^-(\eta; m, \lambda)$ , являющуюся решением однородного уравнения, соответствующего (7.35), и заданную своим поведением при  $\eta \rightarrow -1$

$$S^-(\eta; m, \lambda) = (1 - \eta^2)^{m/2} [1 + O(1 + \eta)] \quad (7.37)$$

и функцию  $S^+(\eta; m, \lambda) = S^-(-\eta; m, \lambda)$ . Тогда функция Грина  $G_1(\eta, \eta'; m, \lambda)$  представляется в виде

$$G_1(\eta, \eta'; m, \lambda) = \frac{S^-(\eta_{<}; m, \lambda) S^+(\eta_{>}; m, \lambda)}{(1 - \eta^2) W(S^-(\eta; m, \lambda), S^+(\eta; m, \lambda))}, \quad (7.38)$$

где  $\eta_{<} = \min(\eta, \eta')$ ,  $\eta_{>} = \max(\eta, \eta')$ . Нули вронскиана

$W(S^-(\eta; m, \lambda), S^+(\eta; m, \lambda))$  отвечают собственным значениям «угловой» задачи Штурма—Лиувилля.

«Радиальная» функция Грина  $G_2(\xi, \xi'; m, \lambda)$  является решением задачи

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\xi}(\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} G_2 + \left[ -\lambda + c^2(\xi^2 - 1) - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] G_2 = \\ = -\frac{2}{d} \delta(\xi - \xi'), \end{aligned} \quad (7.39)$$

$$G_2(\xi, \xi'; m, \lambda)|_{\xi=\xi_0} = 0, \quad (7.40)$$

удовлетворяющим условию излучения. Введем два решения  $R^+(\xi; m, \lambda)$  и  $R^-(\xi; m, \lambda)$ , заданные своей асимптотикой при  $\xi \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} R^+(\xi; m, \lambda) &= \frac{1}{c\xi} e^{ic\xi} \left( 1 + O\left(\frac{1}{\xi}\right) \right), \\ R^-(\xi; m, \lambda) &= \frac{1}{c\xi} e^{-ic\xi} \left( 1 + O\left(\frac{1}{\xi}\right) \right). \end{aligned} \quad (7.41)$$

Функция  $R^+(\xi; m, \lambda)$  убывает по экспоненте в верхней полуплоскости, функция  $R^-(\xi; m, \lambda)$  убывает по экспоненте в нижней полуплоскости. Тогда стандартным образом получаем для  $G_2(\xi, \xi'; m, \lambda)$

$$\begin{aligned} G_2(\xi, \xi'; m, \lambda) &= ik \left[ R^-(\xi_{<}; m, \lambda) - \right. \\ &\quad \left. - \frac{R^-(\xi_0; m, \lambda)}{R^+(\xi_0; m, \lambda)} R^+(\xi_{<}; m, \lambda) \right] R^+(\xi_{>}; m, \lambda). \end{aligned} \quad (7.42)$$

Особенности функции Грина  $G_2(\xi, \xi'; m, \lambda)$ , определяемые нулями функции  $R^+(\xi_0, m, \lambda)$ , связаны с так называемыми *волнами соскальзывания*, которые определяют коротковолновую асимптотику функции Грина в зоне геометрической тени. Коротковолновая асимптотика на свету получается при вычислении интеграла (7.34) по методу перевала. Асимптотика функций  $S^\mp(\eta; m, \lambda)$  и  $R^\mp(\xi; m, \lambda)$ , необходимая для таких вычислений, получена в работе Бабица и Григорьевой (1973).

#### БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Разложения функции Грина по сфероидальным функциям были получены в работах MacLaurin (1898) и Morse (1935). Интегральные соотношения для сфероидальных функций в связи с функциями Грина изучал Möglich (1927). Интегральные представления для функций Грина строили Kazanipoff и Ritt (1959), Sleeman (1969a), Бабица и Григорьева (1974).

## КУЛОНОВСКИЕ СФЕРОИДАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ

### § 1. Определение и элементарные свойства

**1. Уравнение для кулоновских сфероидальных функций и элементарные свойства его решений.** Кулоновские сфероидальные функции возникают как решения задач Штурма—Лиувилля, порождаемых дифференциальным уравнением

$$\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{du}{dz} + \left[ \lambda - p^2(1-z^2) + bz - \frac{m^2}{1-z^2} \right] u = 0, \quad (1.1a)$$

где  $m$  — целое число,  $b$  — произвольный параметр, а величина  $p$  изменяется в пределах  $0 \leq p < \infty$ .

Производя в уравнении (1.1a) формальную замену  $p = ic$ , причем  $0 \leq c < \infty$ , придем к уравнению

$$\frac{d}{dz}(1-z^2)\frac{du}{dz} + \left[ \lambda + c^2(1-z^2) + bz - \frac{m^2}{1-z^2} \right] u = 0. \quad (1.1б)$$

В дальнейшем решения уравнения (1.1a) будем называть *решениями  $p$ -типа*, а решения уравнения (1.1б) — *решениями  $c$ -типа*.

Решения уравнений (1.1) — аналитические функции на плоскости  $z$  с разрезом, соединяющим особые точки уравнения  $z = \pm 1, \infty$ .

Показатели регулярных особых точек  $z = \pm 1$  уравнений (1.1) равны  $\pm m/2$  и регулярные решения в окрестности  $z = \pm 1$  ведут себя следующим образом:

$$u(z) \underset{z \rightarrow \pm 1}{\sim} (1-z^2)^{m/2}. \quad (1.2)$$

Асимптотика сингулярных решений при  $z \rightarrow \pm 1$  имеет вид

при  $m=0$

$$u(z) \sim \ln(1-z^2), \quad (1.3)$$

при  $m \neq 0$

$$u(z) \sim (1-z^2)^{-m/2}. \quad (1.4)$$

В иррегулярной особой точке  $z = \infty$  решения  $p$ -типа имеют асимптотическое поведение

$$u(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} e^{\pm pz} (2pz)^{-1 \pm b/(2p)}. \quad (1.5)$$

При  $p=0$ ,  $b \neq 0$  точка  $z = \infty$  остается иррегулярной, причем

$$u(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} z^{-3/4} \exp \{ \pm \sqrt{-bz} \}. \quad (1.6)$$

Асимптотика решений  $c$ -типа содержит логарифмическую фазу

$$u(z) \underset{z \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{cz} \exp \left\{ \pm i \left( cz - \frac{b}{2c} \ln 2cz \right) \right\}. \quad (1.7)$$

При  $b=0$  уравнение (1.16) переходит в уравнение (1.1) гл. I, порождающее различные типы сфероидальных функций, а при  $c=b=0$  — в уравнение для присоединенных полиномов Лежандра.

Заменой  $u(z) = (1-z^2)^{-1/2} U(z)$  уравнение (1.1а) приводится к нормальному виду, который удобен при исследовании различного рода асимптотических разложений

$$U''(z) + \left[ -p^2 + \frac{\lambda + bz}{1-z^2} - \frac{m^2 - 1}{(1-z^2)^2} \right] U(z) = 0. \quad (1.8)$$

Переход к новой функции и новому аргументу по формулам

$$u(z) = (1-z^2)^{-1/4} v(z), \quad z = \cos \vartheta \quad (1.9)$$

дает уравнение

$$v''(\vartheta) + \left[ \lambda + \frac{1}{4} - p^2 \sin^2 \vartheta + b \cos \vartheta - \frac{m^2 - 1/4}{\sin^2 \vartheta} \right] v(\vartheta) = 0. \quad (1.10)$$

На интервале  $z \in [1, \infty)$  замена переменной  $z = \operatorname{ch} t$  приводит к уравнению для функции  $v(t)$ , которое удобно при исследовании зависимости спектра собственных значений  $\lambda$  краевой задачи, связанной с уравнением (1.1а), от параметров  $p$  и  $b$ :

$$v''(t) + \left[ -\lambda - \frac{1}{4} - p^2 \operatorname{sh}^2 t - b \operatorname{ch} t - \frac{m^2 - 1/4}{\operatorname{sh}^2 t} \right] v(t) = 0. \quad (1.11)$$

Наконец, выделяя особенности в точках  $z = \pm 1, \infty$

$$u(z) = (1-z^2)^{m/2} e^{\pm pz} f(z), \quad (1.12)$$

придем к уравнению

$$(1-z^2)f''(z) - [2(m+1)z + 2p(1-z^2)]f'(z) + \left[ \lambda - m(m+1) + 2pz \left( \frac{b}{2p} + m + 1 \right) \right] f(z) = 0, \quad (1.13)$$

которое используют при решении уравнения (1.1а) в виде бесконечных рядов.

**2. Угловые кулоновские сфероидальные функции (у. к. с. ф.).** У. к. с. ф.  $p$ -типа  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$  определим как решения задачи Штурма—Лиувилля

$$\frac{d}{d\eta}(1-\eta^2)\frac{d}{d\eta}\Xi_{mq}(p, b; \eta) + \left[ \lambda_{mq}^{(\eta)} - p^2(1-\eta^2) + b\eta - \frac{m^2}{1-\eta^2} \right] \Xi_{mq}(p, b; \eta) = 0, \quad (1.14a)$$

$$|\Xi_{mq}(p, b; \pm 1)| < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1.$$

Краевая задача (1.14а) имеет дискретный невырожденный бесконечный спектр. Собственные функции  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$  при заданных целых  $m \geq 0$  и вещественных параметрах  $p$  и  $b$  образуют полный базис в пространстве  $\mathcal{L}_2(-1, 1)$  функций, квадратично интегрируемых на отрезке  $[-1, 1]$ . Функции  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$  и соответствующие им собственные значения  $\lambda_{mq}^{(\eta)} \equiv \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)$  при фиксированных  $m, p$  и  $b$  нумеруются по числу нулей  $q = 0, 1, 2, \dots$  на интервале  $\eta \in (-1, 1)$ .

Нормировка у. к. с. ф. в разных задачах определяется по-разному. Функции, нормированные условием

$$\int_{-1}^1 \bar{\Xi}_{mq'}(p, b; \eta) \bar{\Xi}_{mq}(p, b; \eta) d\eta = \delta_{qq'}, \quad (1.15)$$

будем отмечать чертой сверху. При численных расчетах удобна также нормировка в некоторых точках  $\eta$ , например в точках  $\eta = -1$  или  $\eta = 1$ :

$$\lim_{\eta \rightarrow \pm 1 \mp 0} (1-\eta^2)^{-m/2} \Xi_{mq}(p, b; \eta) = 1. \quad (1.16)$$

При  $b = 0$  краевая задача (1.14а) совпадает с краевой задачей (1.29) гл. I для сплюснутых угловых сфероидальных функций, так что имеет место предельное

соотношение

$$\bar{\Xi}_{mq}(p, 0; \eta) = \bar{S}_{ml}(p, \eta), \quad (1.17)$$

причем  $l = q + m$ .

У. к. с. ф.  $c$ -типа  $\Xi_{mq}(c, b; \eta)$  определяются как решения краевой задачи (1.14а) при формальной замене  $p = ic$ :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\eta} (1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} \Xi_{mq}(c, b; \eta) + \\ & + \left[ \lambda_{mq}^{(\eta)} + c^2 (1 - \eta^2) + b\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] \Xi_{mq}(c, b; \eta) = 0, \end{aligned} \quad (1.14б)$$

$$|\Xi_{mq}(c, b; \pm 1)| < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1.$$

Функции  $\Xi_{mq}(c, b; \eta)$ , так же как и функции  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$ , образуют полный ортогональный базис на отрезке  $\eta \in [-1, 1]$  при фиксированных  $m, c$  и  $b$ . Определения (1.15), (1.16), для функций  $\Xi_{mq}(c, b; \eta)$  остаются в силе.

При  $b = 0$  у. к. с. ф.  $c$ -типа переходят в вытянутые угловые сферондальные функции, определенные краевой задачей (1.11) гл. I:

$$\bar{\Xi}_{mq}(c, 0; \eta) = \bar{S}_{ml}(c, \eta). \quad (1.18)$$

При  $p = c = b = 0$  уравнения (1.14а) и (1.14б) переходят в уравнение для присоединенных полиномов Лежандра (1.13а) гл. I. Зафиксировав предельное соотношение

$$\bar{\Xi}_{mq}(0, 0; \eta) = \left[ \frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(\eta) \quad (1.19)$$

определим из него знак у. к. с. ф. при  $p \neq 0, c \neq 0, b \neq 0$ .

При одновременной замене  $b \rightarrow -b, \eta \rightarrow -\eta$  краевые задачи (1.14) для у. к. с. ф.  $p$ -типа и  $c$ -типа не меняются. Следовательно, при этом преобразовании функции приобретают лишь фазовый множитель, по модулю равный единице, например:

$$\Xi_{mq}(p, b; \eta) = e^{i\pi\nu_{mq}(p,b)} \Xi_{mq}(p, -b; -\eta), \quad (1.20)$$

где  $\nu_{mq}(p, b)$  — вещественная фаза.

Соответствующие собственные значения обладают свойством четности

$$\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, -b). \quad (1.21)$$



При  $b=0$  фазы  $v_{mq}(p, 0)$  зависят лишь от числа нулей  $q$  у. к. с. ф., причем (см. (1.28) гл. I)

$$v_{mq}(p, 0) = q. \quad (1.22)$$

В этом случае равенство (1.20) отражает свойства четности сплюснутых угловых сферондальных функций по аргументу  $\eta$ . Аналогичные формулы справедливы и для решений  $c$ -типа.

Согласно осцилляторной теореме собственные значения возрастают с увеличением числа нулей  $q$  функций  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$

$$\lambda_{mq+1}^{(\eta)}(p, b) > \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b). \quad (1.23)$$

Для производных собственных значений по параметрам  $p$  и  $b$  из уравнения (1.14а) по аналогии с § 1 гл. I получаем выражения

$$\begin{aligned} \frac{1}{2p} \frac{\partial}{\partial p} \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b) &= \\ &= \int_{-1}^1 \Xi_{mq}^2(p, b; \eta) (1 - \eta^2) d\eta \bigg/ \int_{-1}^1 \Xi_{mq}^2(p, b; \eta) d\eta = \\ &= \int_{-1}^1 \bar{\Xi}_{mq}^2(p, b; \eta) (1 - \eta^2) d\eta, \quad (1.24a) \end{aligned}$$

$$\frac{\partial}{\partial b} \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b) = - \int_{-1}^1 \Xi_{mq}^2(p, b; \eta) \eta d\eta. \quad (1.24б)$$

Считая индекс  $m$  непрерывным параметром, можно вывести также соотношение

$$\frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial m} \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b) = \int_{-1}^1 \Xi_{mq}^2(p, b; \eta) \frac{d\eta}{1 - \eta^2}. \quad (1.24в)$$

Легко видеть, что собственные значения  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)$  являются монотонно растущими функциями  $p$  и  $m$ , в то время как знак производной  $\partial \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b) / \partial b$  может быть любым.

Аналогичные производные по  $m$  и  $b$  собственных значений  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(c, b)$  для решений  $c$ -типа выражаются по формулам (1.24а), (1.24б) после замен  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b) \rightarrow \lambda_{mq}^{(\eta)}(c, b)$  и  $\bar{\Xi}_{mq}(p, b; \eta) \rightarrow \bar{\Xi}_{mq}(c, b; \eta)$ . Для производной по

параметру  $c$  вместо (1.24а) справедлива формула

$$\frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial c} \lambda_{mq}^{(n)}(c, b) = - \int_{-1}^1 \Xi_{mq}^2(c, b; \eta) (1 - \eta^2) d\eta, \quad (1.24\Gamma)$$

откуда следует, что  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, b)$  — монотонно убывающая функция  $c$ .

В пределе  $p=c=b=0$

$$\lambda_{mq}^{(n)}(0, 0) = (q + m)(q + m + 1). \quad (1.25)$$

При  $b=0$  величины  $\lambda_{mq}^{(n)}$  в случае у.к.с.ф.  $p$ -типа совпадают с собственными значениями сплюснутых угловых сфероидалных функций (см. рис. 3, 4,  $q=l-m$ )

$$\lambda_{mq}^{(n)}(p, 0) = \lambda_{ml}(p), \quad (1.26)$$

а в случае у.к.с.ф.  $c$ -типа — с собственными значениями вытянутых угловых сфероидалных функций (см. рис. 3 и 4)

$$\lambda_{mq}^{(n)}(c, 0) = \lambda_{ml}(c). \quad (1.27)$$

В предельном случае  $p=c=0$ ,  $b \neq 0$  функции  $\Xi_{mq}^{(n)}(0, b; \eta)$  не сводятся к хорошо изученным функциям.

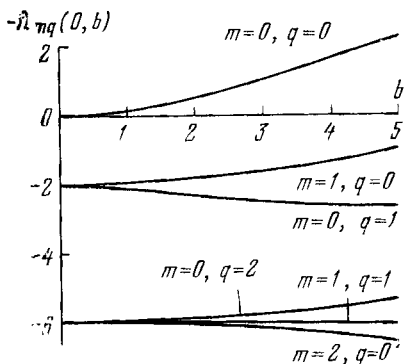


Рис. 14а. Собственные значения —  $\lambda_{mq}(0, b)$  как функции параметра  $b$ .

В § 8 построена их асимптотика при  $b \rightarrow \infty$ . Собственные значения  $\lambda_{mq}(0, b)$  как функции параметра  $b$  представлены на рис. 14а.

Зависимости  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, b)$  общего вида, когда одновременно  $p \neq 0$  и  $b \neq 0$ , приведены в § 3 при изучении

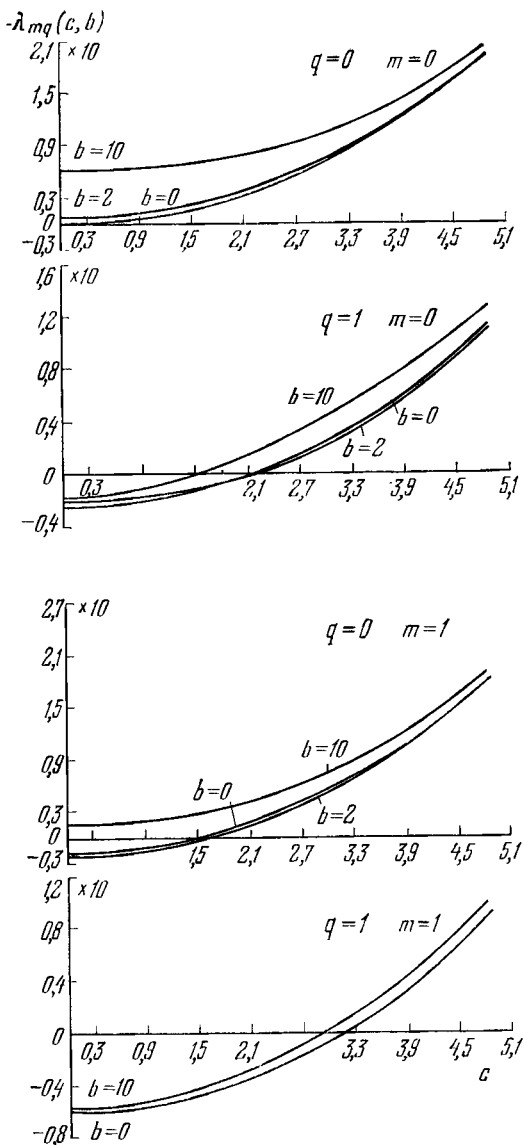


Рис. 146. Собственные значения  $-\lambda_{mq}(c, b)$  как функции параметра  $c$  при  $b=0; 2; 10$ .

спектра собственных значений задачи двух центров квантовой механики. Зависимости  $\lambda_{mq}(c, b)$  от параметра  $c$  при фиксированных значениях  $b$  представлены на рис. 146.

**3. Радиальные кулоновские сфероидальные функции (р. к. с. ф.).** Р. к. с. ф.  $p$ -типа  $\Pi_{mk}(p, a; \xi)$  определим как решения задачи Штурма—Лиувилля на луче  $\xi \in [1, \infty)$

$$\frac{d}{d\xi}(\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \Pi_{mk}(p, a; \xi) + \left[ -\lambda_{mk}^{(\xi)} - p^2(\xi^2 - 1) + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] \Pi_{mk}(p, a; \xi) = 0, \quad (1.28)$$

$$|\Pi_{mk}(p, a; 1)| < \infty, \quad \Pi_{mk}(p, a; \xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0. \quad (1.29)$$

При  $p^2 > 0$  и фиксированных значениях  $m$  и  $a$  спектр задачи (1.28), (1.29) дискретный. Собственные значения  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a)$  и собственные функции  $\Pi_{mk}(p, a; \xi)$  нумеруются индексом  $k=0, 1, 2, \dots$ , равным числу нулей на интервале  $\xi \in (1, \infty)$ . На этом интервале решения  $\Pi_{mk}(p, a; \xi)$  образуют полный базис и любая квадратично интегрируемая функция может быть по ним разложена.

Нормировку р. к. с. ф.  $p$ -типа определим равенством

$$\int_1^{\infty} \bar{\Pi}_{mk'}(p, a; \xi) \bar{\Pi}_{mk}(p, a; \xi) d\xi = \delta_{kk'}. \quad (1.30)$$

Знак р. к. с. ф.  $\bar{\Pi}_{mk}(p, a; \xi)$  выберем так, чтобы при  $\xi \rightarrow 1$  они всегда были положительными. Р. к. с. ф. можно нормировать также условием в точке  $\xi = 1$

$$\lim_{\xi \rightarrow 1} (\xi^2 - 1)^{-m/2} \Pi_{mk}(p, a; \xi) = 1. \quad (1.31)$$

Собственные значения  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a)$  радиального уравнения (1.28) при фиксированных  $m, p, a$  монотонно возрастают с увеличением номера решения  $k$ :

$$\lambda_{mk+1}^{(\xi)}(p, a) > \lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a). \quad (1.32)$$

Из уравнения (1.28) следуют выражения для производных собственных значений  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a)$  по параметрам  $p$  и  $a$ , а также индексу  $m$  (в предположении его

непрерывности):

$$\frac{1}{2\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, a) = - \int_1^{\infty} \bar{\Pi}_{mk}^2(\rho, a; \xi) (\xi^2 - 1) d\xi, \quad (1.33a)$$

$$\frac{\partial}{\partial a} \lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, a) = \int_1^{\infty} \bar{\Pi}_{mk}^2(\rho, a; \xi) \xi d\xi, \quad (1.33б)$$

$$\frac{1}{2m} \frac{\partial}{\partial m} \lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, a) = \int_1^{\infty} \bar{\Pi}_{mk}^2(\rho, a; \xi) \frac{d\xi}{\xi^2 - 1}. \quad (1.33в)$$

Видно, что  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, a)$  являются монотонно растущими функциями  $m$  и  $a$  и убывающими функциями параметра  $\rho$ .

Предельный случай  $a=0, \rho \rightarrow 0$  рассмотрен в § 7 при исследовании слабосвязанных состояний в поле конечного диполя.

В пределе  $a \rightarrow 0, \rho \rightarrow 0$  при дополнительном условии  $a/(2\rho) = n$ , где  $n$  — целое число и  $\rho \xi \rightarrow Zr/n = \text{const}$ , имеет место соотношение

$$\lim_{\rho \rightarrow 0, n > k+m} \lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, 2\rho n) = (n - k - 1)(n - k), \quad (1.34)$$

а р. к. с. ф.  $\rho$ -типа переходят в радиальную часть волновой функции водородоподобного атома с зарядом  $Z$ :

$$\begin{aligned} & - \lim_{a \rightarrow 0, n > k+m} \left[ \frac{R^3}{16\rho} \frac{\partial \lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, 2\rho n)}{\partial \rho} \right]^{-1/2} \bar{\Pi}_{mk}^2(\rho, 2\rho n; \xi) = \\ & = \left[ \frac{2Z^3}{\rho n^4(2l+1)} \right]^{-1/2} \bar{\Pi}_{mk}(\rho, 2\rho n; \xi) = R_{nl}(r), \end{aligned} \quad (1.35)$$

где  $l = n - k - 1$ , а функции  $R_{nl}(r)$  определены в п. 2 § 8.

Р. к. с. ф.  $c$ -типа  $\Pi_m(c, a, \lambda; \xi)$  определяются как решения уравнения (1.28) после формальной замены  $\rho = ic$ :

$$\begin{aligned} & \frac{d}{d\xi} (\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \Pi_m(c, a, \lambda; \xi) + \\ & + \left[ -\lambda + c^2 (\xi^2 - 1) + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] \Pi_m(c, a, \lambda; \xi) = 0, \end{aligned} \quad (1.36)$$

$$|\Pi_m(c, a, \lambda; 1)| < \infty. \quad (1.36a)$$

Спектр задачи (1.36) сплошной. Решения параметрически зависят от  $c$ ,  $a$  и  $\lambda$ , которые могут принимать произвольные вещественные значения.

По аналогии с решениями уравнения Бесселя и радиальными сфероидальными функциями введем четыре рода решений  $\Pi_m^{(i)}(c, a, \lambda; \xi)$ , которые различаются асимптотикой при  $\xi \rightarrow \infty$

$$\begin{aligned} \Pi_m^{(1)}(c, a, \lambda; \xi) &= \frac{A}{c\xi} \cos\left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi + \chi_m\right) + O(\xi^{-2}), \\ \Pi_m^{(2)}(c, a, \lambda; \xi) &= \frac{A}{c\xi} \sin\left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi + \chi_m\right) + O(\xi^{-2}), \\ \Pi_m^{(3,4)}(c, a, \lambda; \xi) &= \frac{B}{c\xi} \exp\left\{\pm i\left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi + \chi_m\right)\right\} + \\ &+ O(\xi^{-2}). \end{aligned} \quad (1.37)$$

Решение первого рода регулярно в точке  $\xi=1$ , и для него мы будем иногда опускать индекс  $i$ . Решения  $i=2, 3, 4$  не удовлетворяют граничному условию (1.36а) при  $\xi=1$ .

Функции  $\Pi_m^{(i)}(c, a, \lambda; \xi)$  можно нормировать, зафиксировав абсолютное значение коэффициентов в асимптотике (1.37), например, полагая

$$A=B=1. \quad (1.38)$$

Интегральная нормировка определяется равенством

$$\int_1^\infty \bar{\Pi}_m^{(i)*}(c', a, \lambda; \xi) \bar{\Pi}_m^{(i)}(c, a, \lambda; \xi) (\xi^2 - 1) d\xi = \delta(c - c'), \quad (1.39)$$

где  $\delta(c-c')$  — дельта-функция. В этом случае нормировочные коэффициенты равны

$$A=B\sqrt{2}=c\sqrt{2/\pi}. \quad (1.40)$$

Знак функций  $\bar{\Pi}_m(c, a, \lambda; \xi)$  выбирается из условия их положительности при  $\xi \rightarrow 1$ .

Фаза  $\chi_m \equiv \chi_m(c, a, \lambda)$  — действительная функция параметров  $c$ ,  $a$  и  $\lambda$ . Ее необходимо знать, например, для вычисления сечения рассеяния на двух кулоновских центрах (см. § 3 гл. III). При решении последней задачи параметр  $\lambda$  в радиальном уравнении (1.36) перестает быть произвольным и должен выбираться как

собственное значение  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, b)$  соответствующего углового уравнения.

При подстановке  $\lambda = \lambda_{mq}^{(n)}(c, b)$  в радиальное уравнение (1.36) фаза  $\chi_m$  в соотношениях (1.37) становится неявной функцией  $q$  и  $b$  и ее удобнее представить в виде (§ 3 гл. III)

$$\chi_m^-(c, a, \lambda_{mq}^{(n)}(c, b)) = -\frac{q+m+1}{2}\pi + \Delta_{mq}(c, a, b). \quad (1.41)$$

В пределе  $a=b=0$  справедливо равенство  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, 0) = \lambda_{ml}(c)$ , т. е.  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, 0)$  равно собственному значению уравнения (1.11) гл. I для вытянутых сфероидальных функций  $S_{ml}(c, \eta)$ . В этом случае р. к. с. ф.  $c$ -типа переходят в вытянутые радиальные сфероидальные функции

$$\Pi_m^{(i)}(c, 0, \lambda_{ml}(c); \xi) = R_{ml}^{(i)}(c, \xi). \quad (1.42)$$

Кроме того, как следует из определения (1.41) и сравнения асимптотик (1.37) и (1.19) гл. I,

$$\Delta_{mq}(c, 0, 0) = 0. \quad (1.43)$$

В другом предельном случае, когда  $b=0$ ,  $a \rightarrow 0$ ,  $c \rightarrow 0$ , причем  $a/(2c) = Z/k = \text{const}$  и  $c\xi \rightarrow kr = \text{const}$ , имеем  $\lambda_{mq}^{(n)}(0, 0) = l(l+1)$ , а р. к. с. ф.  $c$ -типа переходят в кулоновские функции  $F_l(Z/k, kr)$ ,  $Z = Z_1 + Z_2$ :

$$\lim_{c \rightarrow 0} \bar{\Pi}_m(c, \frac{2cZ}{k}, l(l+1); \xi) = \frac{1}{r} F_l\left(\frac{Z}{k}, kr\right), \quad (1.44)$$

где функции  $F_l(Z/k, kr)$  можно выразить через вырожденную гипергеометрическую функцию

$$F_l(Z/k, kr) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} kre^{\pi/(2k)} \left| \Gamma\left(l+1 - i\frac{Z}{k}\right) \right| \times \\ \times \frac{(2kr)^l}{(2l+1)!} e^{-ikr} F\left(i\frac{Z}{k} + l + 1, 2l + 2, 2ikr\right). \quad (1.45)$$

Фаза  $\Delta_{mq}(c, a, b)$  в этом пределе совпадает с хорошо известной кулоновской фазой при рассеянии на потенциале притяжения  $-Z/r$ :

$$\lim_{c \rightarrow 0} \Delta_{mq}\left(c, \frac{2cZ}{k}, 0\right) = \delta_l = \arg \Gamma\left(l+1 - i\frac{Z}{k}\right). \quad (1.46)$$

В пределе  $p=c=0$  обе крайние задачи (1.28) и (1.36) совпадают по форме и могут иметь как дискрет-

ный спектр, так и сплошной — в зависимости от знака  $a$ . В этом случае функциями  $p$ -типа естественно называть решения, соответствующие дискретному спектру, который имеет место только при  $a < 0$ . Краевая задача (1.28), (1.29) при  $p=0$ ,  $a < 0$  обладает всеми спектральными свойствами общей задачи при  $p^2 > 0$  и произвольном вещественном  $a$ , и для нее все соотношения (1.30), (1.31), (1.33б), (1.33в) остаются справедливыми. Нижняя граница спектра определяется неравенством

$$-\lambda_{mk}^{(\xi)}(0, a) - \frac{1}{4} \geq -a > 0, \quad (1.47)$$

которое легко может быть получено из анализа уравнения для р.к.с.ф., записанного в тригонометрической форме (1.11).

При  $p=c=0$ ,  $a > 0$  краевые задачи (1.28) и (1.36) имеют сплошной спектр и соответствующие им решения  $\Pi_m^{(i)}(0, a, \lambda; \xi)$  будем относить к  $c$ -типу. Из формулы (1.6) следует, что асимптотика решений первого типа при  $\xi \rightarrow \infty$

$$\Pi_m(0, a, \lambda; \xi) \sim (a\xi)^{-3/4} \cos(2\sqrt{a\xi} + \chi_m(0, a, \lambda)). \quad (1.48)$$

При  $p=c=a=0$  уравнения (1.28), (1.36) совпадают с уравнением Лежандра, однако их решения на промежутке  $\xi \in [1, \infty)$  физического интереса не представляют.

## § 2. Разложение кулоновских сфероидальных функций в ряды

**1. Предварительные замечания.** При исследовании и вычислении кулоновских сфероидальных функций используют их различные разложения в виде рядов по другим специальным функциям, свойства которых достаточно хорошо изучены. Как правило, для этого предварительно выделяют особенности в точках  $z = \pm 1$  и  $z = \infty$  с помощью представления (1.12)

$$u(z) = (1-z^2)^{m/2} e^{-p(1\pm z)} f(z). \quad (2.1)$$

Функцию  $f(z)$  ищем в виде разложения

$$f(z) = \sum_{s=0}^{\infty} g_s(p, b, \lambda) u_s(z) \quad (2.2)$$

по некоторому базису  $u_s(z)$  (не обязательно ортогональ-



ному) с коэффициентами  $g_s \equiv g_s(p, b, \lambda)$ , зависящими от параметров  $p$  и  $b$  и собственного значения  $\lambda$ . При удачном выборе базисных функций  $u_s(z)$  подстановка разложений (2.1) и (2.2) в уравнение (1.1) приводит к трехчленным рекуррентным соотношениям вида

$$\alpha_s g_{s+1} - \beta_s g_s + \gamma_s g_{s-1} = 0, \quad (2.3)$$

где величины  $\alpha_s, \beta_s, \gamma_s$  являются полиномами от  $p, b, \lambda$ . Из соотношений (2.3) определяются как коэффициенты разложения  $g_s$ , так и собственные значения  $\lambda$ .

В матричном виде система рекуррентных соотношений (2.3) приобретает вид

$$\hat{A}g = \begin{bmatrix} -\beta_0 & \alpha_0 & 0 & 0 & \dots \\ \gamma_1 & -\beta_1 & \alpha_1 & 0 & \dots \\ 0 & \gamma_2 & -\beta_2 & \alpha_2 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \vdots \end{bmatrix} = 0. \quad (2.4)$$

Собственные значения краевых задач (1.14), (1.28) находятся из условия разрешимости этой системы:

$$\det \hat{A} = F(p, b, \lambda) = 0. \quad (2.5)$$

Особое преимущество тридиагональных матриц состоит в том, что их детерминант пропорционален бесконечной цепной дроби (§ 3 гл. I), которая для матрицы  $\hat{A}$  принимает вид

$$F(p, b, \lambda) = \beta_0 - \frac{\alpha_0 \gamma_1}{\beta_1 -} \frac{\alpha_1 \gamma_2}{\beta_2 -} \dots \quad (2.6)$$

Это обстоятельство значительно облегчает создание алгоритмов вычисления на ЭВМ собственных значений  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)$  и  $\tilde{\lambda}_{mk}^{(\xi)}(p, a)$  и соответствующих им собственных функций  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$  и  $\Pi_{mk}(p, a; \xi)$ .

Достаточным условием сходимости цепной дроби (2.6) является выполнение неравенства (3.5) гл. I при достаточно больших  $s$

$$\left| \frac{\alpha_{s-1} \gamma_s}{\beta_{s-1} \beta_s} \right| < \frac{1}{4}. \quad (2.7)$$

Сходимость рядов (2.2) определяется поведением отношения  $g_{s+1}/g_s$  при  $s \rightarrow \infty$ . Из соотношений (2.3) в предположении, что  $\lim_{s \rightarrow \infty} g_{s+1}/g_s$  существует, следует

$$\frac{g_{s+1}}{g_s} \underset{s \rightarrow \infty}{\sim} \frac{\beta_s}{2\alpha_s} \left[ 1 - \left( 1 - 4 \frac{\alpha_s \gamma_s}{\beta_s^2} \right)^{1/2} \right]. \quad (2.8)$$

В зависимости от выбора базисных функций  $u_s(z)$  необходимо различать два случая.

Для степенных рядов, когда  $u_s(z) = z^s$ , радиус сходимости  $G$  равен

$$G = \lim_{s \rightarrow \infty} \left| \frac{g_s}{g_{s+1}} \right|. \quad (2.9)$$

В частном случае, когда  $g_{s+1}/g_s \rightarrow 0$  при  $s \rightarrow \infty$  ряд (2.2) сходится при всех  $z$ .

Если в качестве базиса  $u_s(z)$  взята система ортогональных полиномов, то достаточным условием сходимости ряда (2.2), рассматриваемого как ряд Фурье, является выполнение неравенства (Смирнов, 1974)

$$\left| \frac{g_{s+1}}{g_s} \right| \leq 1 - \frac{1}{s}. \quad (2.10)$$

**2. Разложение у.к.с.ф. в ряды.** При разложении у.к.с.ф. в ряды в качестве базисной системы функций  $u_s(\eta)$  наиболее естественно выбрать присоединенные полиномы Лежандра  $P_{s+m}^m(\eta)$ , которые образуют полную систему на отрезке  $\eta \in [-1, 1]$  и в которые у.к.с.ф. переходят в пределе  $p=b=0$ . Однако подстановка разложения

$$\Xi_{mq}(p, b; \eta) = \sum_{s=0}^{\infty} c_s P_{s+m}^m(\eta) \quad (2.11)$$

в уравнение (1.14а) для у.к.с.ф.  $p$ -типа приводит к пятичленным рекуррентным соотношениям

$$\begin{aligned} & p^2 \frac{(s+2m+1)(s+2m+2)}{(2s+2m+3)(2s+2m+5)} c_{s+2} + \\ & + b \frac{s+2m+1}{2s+2m+3} c_{s+1} + \left\{ \lambda - (s+m)(s+m+1) - p^2 + \right. \\ & \left. + \frac{p^2}{2s+2m+1} \left[ \frac{s(s+2m)}{(2s+2m-1)} + \frac{(s+1)(s+2m+1)}{(2s+2m+3)} \right] \right\} c_s + \\ & + b \frac{s}{(2s+2m-1)} c_{s-1} + p^2 \frac{s(s-1)}{(2s+2m-3)(2s+2m-1)} c_{s-2} = 0. \end{aligned} \quad (2.12)$$

Этими соотношениями иногда пользуются (Hunter и др., 1966), однако они не столь удобны, как трехчленные, поскольку детерминант пятидиагональной матрицы, им соответствующей, нельзя представить в виде цепной дроби.

В случае  $b=0$  из (2.12) следуют трехчленные рекуррентные соотношения отдельно для четных ( $c_{-2}=0, c_0=1$ ) и нечетных ( $c_{-1}=0, c_1=1$ ) решений уравнения (1.14); соответствующие разложения подробно изучены в § 3 гл. I.

В общем случае  $b \neq 0$  разложения для функций  $E_{mq}(\rho, b; \eta)$ , учитывающие их поведение в особых точках  $\eta = \pm 1$  и  $\eta = \infty$ , были предложены Baber, Hassé (1935)

$$E_{mq}(\rho, b; \eta) = e^{-\rho(1+\eta)} \sum_{s=0}^{\infty} c_s P_{s+m}^m(\eta), \quad (2.13)$$

$$E_{mq}(\rho, b; \eta) = e^{-\rho(1-\eta)} \sum_{s=0}^{\infty} c'_s P_{s+m}^m(\eta). \quad (2.13')$$

Они приводят к трехчленным рекуррентным соотношениям

$$\rho_s c_{s+1} - \kappa_s c_s + \delta_s c_{s-1} = 0, \quad c_{-1} = 0, \quad (2.14)$$

в которых для случая разложения (2.13)

$$\begin{aligned} \rho_s &= \frac{(s+2m+1)[b-2p(s+m+1)]}{2(s+m)+3}, \\ \kappa_s &= (s+m)(s+m+1) - \lambda, \\ \delta_s &= \frac{s[b+2p(s+m)]}{2(s+m)-1}. \end{aligned} \quad (2.15)$$

Для оценок сходимости разложений (2.13) полностью применимы формулы (2.7)–(2.10), если в них произведены замены

$$\alpha_s \rightarrow \rho_s, \quad \beta_s \rightarrow \kappa_s, \quad \gamma_s \rightarrow \delta_s, \quad g_s \rightarrow c_s.$$

Отношение последовательных коэффициентов разложения в (2.13) стремится к пределу

$$\frac{c_{s+1}}{c_s} \sim \frac{\rho}{s} \rightarrow 0, \quad (2.16)$$

откуда следует, что при каждом фиксированном  $\rho$  ряды (2.13) сходятся не только на отрезке  $[-1, 1]$ , но и на всей комплексной плоскости  $\eta$ . Для разложений (2.13) выполняется соотношение

$$\left| \frac{\rho_{s-1} \delta_s}{\kappa_{s-1} \kappa_s} \right|_{s \rightarrow \infty} \sim \left( \frac{\rho}{s} \right)^2, \quad (2.17)$$

т. е. при значениях  $\rho > 1$  условие (2.7) начинает выпол-

няться только при  $s > 2p$ . Эту оценку следует иметь в виду при выборе минимального числа членов в цепной дроби (2.6), достаточного для вычисления  $\lambda$  с необходимой точностью.

Рекуррентные соотношения для коэффициентов  $c_s'$  разложения (2.13') отличаются от соотношений (2.14) заменой  $p \rightarrow -p$  в формулах (2.15). Такая замена очевидным образом не изменит вида цепной дроби

$$F^{(n)}(p, b, \lambda) = \kappa_0 - \frac{\rho_0 \delta_1 \rho_1 \delta_2}{\kappa_1 - \kappa_2} \dots, \quad (2.18)$$

поскольку величины  $\kappa_s$  и произведения  $\rho_s \delta_{s+1}$  не зависят от знака  $p$ . Отсюда следует, что в обоих случаях (2.13) и (2.13') собственные значения  $\lambda$  находятся из одного и того же уравнения

$$F^{(n)}(p, b, \lambda) = 0. \quad (2.19)$$

При практической реализации изложенного алгоритма бесконечная цепная дробь (2.18) заменяется конечной  $F_{N+1}^{(n)}(p, b, \lambda)$  с достаточно большим числом членов  $N$  и собственные значения вычисляются как корни полинома  $Q_{N+1}(p, b, \lambda)$  степени  $N+1$ :

$$F_{N+1}^{(n)}(p, b, \lambda) = Q_{N+1}(p, b, \lambda) / P_{N+1}(p, b, \lambda). \quad (2.20)$$

Такое представление позволяет исключать из уравнения (2.19) сингулярности, связанные с нулями полинома  $P_{N+1}(p, b, \lambda)$  (см. § 3 гл. I). Из определений (2.18) и (2.20) следуют рекуррентные соотношения для полиномов  $Q_k(p, b, \lambda)$

$$Q_{k+1} = Q_k \bar{\rho}_{N-k} - Q_{k-1} \bar{\rho}_{N-k} \bar{\delta}_{N-k+1}, \quad Q_{-1} = 0, \quad Q_0 = 1. \quad (2.21)$$

Коэффициенты  $\bar{\rho}_s$ ,  $\bar{\kappa}_s$  и  $\bar{\delta}_s$  отличаются от выражений (2.15) множителем  $(1 + \kappa_s^2)^{-1/2}$ , который не изменяет рекуррентных соотношений (2.14), однако позволяет избежать в промежуточных вычислениях накопления больших чисел (см. § 3 гл. I). (Из выражений (2.15) для  $\kappa_s$  следует, что старшие коэффициенты полиномов  $Q_k$  растут как  $k^{4k}$ , если не осуществить указанную перенормировку коэффициентов  $\rho_s$ ,  $\kappa_s$  и  $\delta_s$ .)

Для того чтобы из множества корней полинома  $Q_{N+1}(p, b, \lambda)$  выделить собственное значение  $\lambda = \lambda_{mq}^{(n)}(p, b)$ , которое соответствует собственной функции  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$ , необходимо задать его начальное приближение, напри-

мер, в точке  $p=b=0$ , где, согласно (1.25),  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(0,0) = (q+m)(q+m+1)$ . Изменяя последовательно значения  $p$  и  $b$  при фиксированных  $m$  и  $q$ , из уравнения (2.19) можно найти значения  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p,b)$  для заданных  $p$  и  $b$ . Такие алгоритмы в настоящее время подробно разработаны.

При  $p \gg 1$ , когда у.к.с.ф. сосредоточены в окрестности точек  $\eta = \pm 1$ , разложения (2.13) сходятся медленно и вместо них используют другие:

$$E_{mq}(p, b; \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} e^{-p(1+\eta)} \sum_{s=0}^{\infty} c_s (1 + \eta)^s, \quad (2.22)$$

$$E_{mq}(p, b; \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} e^{-p(1-\eta)} \sum_{s=0}^{\infty} c'_s (1 - \eta)^s. \quad (2.22')$$

Очевидно, что разложение (2.22) сходится быстрее на отрезке  $[-1, 0]$ , а разложение (2.22') — на отрезке  $[0, 1]$ . Для коэффициентов  $c_s$  разложения (2.22) справедливы трехчленные соотношения (2.14), в которых

$$\begin{aligned} \rho_s &= 2(s+1)(s+m+1), \\ \kappa_s &= s(s+1) + (2s+m+1)(2p+m) + b - \lambda, \\ \delta_s &= b + 2p(s+m). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Ряды (2.22) и (2.22') сходятся при всех  $\eta$ , а соответствующие им цепные дроби (2.6) — при всех  $p$ , поскольку

$$\frac{c_{s+1}}{c_s} \underset{s \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2p}{s}, \quad \left| \frac{\rho_{s-1} \delta_s}{\kappa_{s-1} \kappa_s} \right| \underset{s \rightarrow \infty}{\sim} \frac{4p}{s}. \quad (2.24)$$

Для коэффициентов  $c'_s$  справедливы те же соотношения с заменой  $b \rightarrow -b$  в выражениях (2.23).

На практике используют комбинацию разложений (2.13) и (2.22): из разложения (2.13) находят собственные значения, а собственные функции вычисляют по формулам (2.22). Разумеется, оба решения (2.22) и (2.22') должны быть «сшиты», например, в точке  $\eta=0$ , поскольку общая нормировка коэффициентов  $c_s$  и  $c'_s$  рекуррентными соотношениями (2.14) не определяется.

Условие сшивания, определяющее нормировку коэффициентов  $c_s$  и  $c'_s$ , принимает при этом вид

$$\sum_{s=0}^{\infty} c_s = \sum_{s=0}^{\infty} c'_s.$$

Для получения асимптотики у. к. с. ф. и соответствующих им собственных значений иногда используют разложение по полиномам Лагерра

$$\Xi_{mq}(\rho, b; \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} e^{-\rho(1 \pm \eta)} \sum_{s=0}^{\infty} c_s L_{s+m}^m(2\rho(1 \pm \eta)), \quad (2.25)$$

$$L_n^m(x) = \frac{e^x x^{-m}}{n!} \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x} x^{n+m}).$$

Подставляя это разложение в уравнение (1.14а), используя уравнение для полиномов Лагерра (Градштейн, Рыжик, 1971, стр. 1051)

$$x \frac{d^2}{dx^2} L_n^m(x) + (1 - x + m) \frac{d}{dx} L_n^m(x) + n L_n^m(x) = 0 \quad (2.26a)$$

и рекуррентные соотношения, которым они удовлетворяют,

$$x \frac{d}{dx} L_n^m(x) = n L_n^m(x) - (n + m) L_n^m(x),$$

$$x L_n^m(x) = -(n + 1) L_{n+1}^m(x) + (2n + m + 1) L_n^m(x) - (n + m) L_{n-1}^m(x), \quad (2.26б)$$

придем к рекуррентным соотношениям (2.14) для коэффициентов  $c_s$ . В случае верхнего знака в (2.25) следует положить

$$\begin{aligned} \rho_s &= -(s + m + 1) \left( s + 1 + \frac{b}{2\rho} \right), \\ \kappa_s &= -(2s + m + 1) \left( s + m + 1 + \frac{b}{2\rho} - 2\rho \right) + \\ &\quad + (s + m)(m + 1) + b - \lambda, \quad (2.27) \end{aligned}$$

$$\delta_s = -s \left( s + m + \frac{b}{2\rho} \right).$$

Для численных расчетов ряды (2.25) не используются.

Разложения (2.25) при  $\rho \gg 1$  являются асимптотическими, на что неоднократно указывали ряд авторов (Blanch, 1964, Power, 1973).

Все предыдущие формулы, справедливые для у. к. с. ф.  $\rho$ -типа  $\Xi_{mq}(\rho, b; \eta)$ , практически без изменений пригодны и для у. к. с. ф.  $c$ -типа  $\Xi_{mq}(c, b; \eta)$ . Различие состоит

в том, что после формальной замены  $p=ic$  почти все предыдущие разложения становятся комплексными и для нахождения действительных решений уравнения (1.14б) из соответствующих рядов необходимо выделить действительную часть. Иногда даже в этом нет необходимости. Например, для разложения, аналогичного (2.13)

$$E_{mq}(c, b; \eta) = e^{ic(1 \pm \eta)} \sum_{s=0}^{\infty} c_s'' P_{s+m}^m(\eta), \quad (2.13'')$$

коэффициенты  $c_s'' = \rho_s(ic, b, \lambda)$  и  $\delta_s = \delta_s(ic, b, \lambda)$  в соотношениях (2.14) и (2.15) являются комплексными, однако произведение  $\rho_s \delta_{s+1}$ , от которого зависит цепная дробь (2.18), — действительная величина. Таким образом, собственные значения  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, b)$  задачи Штурма—Лиувилля для у.к.с.ф.  $c$ -типа по-прежнему определяются из действительного трансцендентного уравнения (2.19) с действительными коэффициентами после подстановки  $p^2 \rightarrow -c^2$ .

Отметим также, что сходимость рядов (2.13'') для у.к.с.ф.  $c$ -типа значительно хуже, чем для у.к.с.ф.  $p$ -типа. Как показывает опыт численных расчетов, в этом случае коэффициенты разложения  $c_s''$  знакопеременны и при  $c > 1$  быстро растут по абсолютной величине. Как известно, суммирование такого ряда приводит к большим вычислительным погрешностям. Поэтому вместо суммирования рядов (2.13), (2.22), (2.25) после замены  $p \rightarrow ic$  предпочтительнее вычислить собственные значения  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, b)$  из уравнения  $F^{(n)}(ic, b, \lambda)$  и затем найти функцию  $E_{mq}(c, b, \eta)$  непосредственным интегрированием уравнения (1.14б), решая для него задачу Коши с найденным  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, b)$  и начальными условиями для функции и ее производной вблизи особых точек  $\eta = \pm 1$ . Эти начальные условия легко найти из разложений (2.22) и (2.22').

**3. Разложение р. к. с. ф. в ряды.** Уравнение (1.28) для р. к. с. ф.  $p$ -типа после выделения особенностей в точках  $\xi = 1$  и  $\xi = \infty$

$$P_{mk}(p, a; \xi) = (\xi^2 - 1)^{m/2} e^{-p(\xi-1)} f(\xi) \quad (2.28)$$

приводит к уравнению для функции  $f(\xi)$

$$(\xi^2 - 1)f''(\xi) + [-2p(\xi^2 - 1) + 2(m+1)\xi]f'(\xi) + [-\lambda + m(m+1) + 2p\sigma\xi]f(\xi) = 0, \quad (2.29)$$

где введено обозначение

$$\sigma = \frac{a}{2p} - (m + 1). \quad (2.30)$$

Если разложение

$$f(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} g_s u_s(\xi) \quad (2.31)$$

приводит к трехчленным рекуррентным соотношениям (2.3) для коэффициентов  $g_s = g_s(p, a, \lambda)$ , то собственные значения  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a)$  находятся из условия равенства нулю соответствующей цепной дроби (2.6):

$$F^{(\xi)}(p, a, \lambda) = 0. \quad (2.32)$$

Практически единственное разложение р. к. с. ф., которое используют в настоящее время при численных расчетах, предложено Jaffé (1934). Ряд (2.31) в этом случае принимает вид

$$f(\xi) = (\xi + 1)^\sigma \sum_{s=0}^{\infty} g_s x^s, \quad (2.33)$$

где

$$x = (\xi - 1) / (\xi + 1). \quad (2.34)$$

Подстановка (2.33) в уравнение (2.29) дает

$$\left\{ x(1 - x^2) \frac{d^2}{dx^2} - [(2\sigma + m - 1)x^2 + 2(2p - \sigma + 1)x - (m + 1)] \frac{d}{dx} + \right. \\ \left. + [\sigma(\sigma + m)x + \sigma(2p + m + 1) + m(m + 1) - \lambda] \right\} \sum_{s=0}^{\infty} g_s x^s = 0, \quad (2.35)$$

откуда следуют рекуррентные соотношения (2.3) со значениями коэффициентов

$$\alpha_s = (s + 1)(s + m + 1), \\ \beta_s = 2s^2 + (2s + m + 1)(2p - \sigma) - a - m(m + 1) + \lambda = \\ = 2s(s + 2p - \sigma) - (m + \sigma)(m + 1) - 2p\sigma + \lambda, \quad (2.36) \\ \gamma_s = (s - 1 - \sigma)(s - m - 1 - \sigma).$$

Для разложений Яффе

$$\left| \frac{\alpha_{s-1} \gamma_s}{\beta_{s-1} \beta_s} \right|_{s \rightarrow \infty} = \frac{1}{4} \left( 1 - \frac{4p}{s} \right) + O\left( \frac{p^2}{s^2} \right), \quad (2.37)$$



т. е. цепная дробь (2.6) сходится при всех  $p > 0$ . Отношение коэффициентов

$$\frac{g_{s+1}}{g_s} \underset{s \rightarrow \infty}{=} 1 - 2 \sqrt{\frac{p}{s}} + O\left(\frac{p}{s}\right) \quad (2.38)$$

свидетельствует о том, что разложение Яффе сходится во всей области определения  $1 \leq \xi < \infty$ .

Функцию  $f(\xi)$  можно разлагать по присоединенным полиномам Лагерра

$$f(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} g_s L_{s+m}^m(x), \quad x = 2p(\xi - 1). \quad (2.39)$$

В этом случае приходим к трехчленным рекуррентным соотношениям (2.3) с коэффициентами

$$\begin{aligned} \alpha_s &= -(s+m+1) \left[ \frac{a}{2p} - (s+1) \right] = (s+m+1)(s-m-\sigma), \\ \beta_s &= -(2s+m+1) \left[ \frac{a}{2p} - (s+m+1) \right] + \\ &\quad + 2p(2s+m+1) - (s+m)(m+1) - a + \lambda, \\ \gamma_s &= -s \left[ \frac{a}{2p} - (s+m) \right] = s(s-1-\sigma). \end{aligned} \quad (2.40)$$

С точки зрения вычисления собственных значений разложения (2.33) и (2.39) эквивалентны, поскольку цепная дробь (2.6) зависит только от  $\beta_s$  и произведений  $\alpha_s \gamma_{s+1}$ . Сравнивая выражения (2.36) и (2.40), легко видеть, что для обоих разложений значения  $\beta_s$  и произведения  $\alpha_s \gamma_{s+1}$  совпадают между собой. Это влечет за собой идентичность цепных дробей, им соответствующих.

Однако в практических вычислениях разложение Яффе предпочтительнее, как вследствие простоты базисных функций, так и ввиду большей устойчивости рекуррентного процесса при вычислении коэффициентов разложения собственных функций на ЭВМ. Разложение (2.39) удобнее для нахождения асимптотики функций  $\Pi_{mk}(p, a; \xi)$  и соответствующих им собственных значений при  $p \gg 1$ .

В некоторых частных случаях, например при описании атома водорода в сфероидальных координатах, используют разложение  $f(\xi)$  по степеням  $(\xi-1)^s$ :

$$f(\xi) = \sum_{s=0}^{\infty} g_s (\xi-1)^s, \quad (2.41)$$

которое приводит к рекуррентным соотношениям (2.3) с коэффициентами

$$\begin{aligned}\alpha_s &= 2(s+1)(s+m+1), \\ \beta_s &= -(s+m)(s+m+1) + 2p(2s+m+1) - a + \lambda, \\ \gamma_s &= a - 2p(s+m) = 2p(\sigma - s + 1).\end{aligned}\quad (2.42)$$

Разложение (2.41) сходится при всех  $\xi \in [1, \infty)$ , что следует из соотношения

$$\frac{g_{s+1}}{g_s} \underset{s \rightarrow \infty}{\sim} \frac{8p}{s}, \quad (2.43)$$

которому удовлетворяют его коэффициенты. В численных расчетах это разложение пока не использовалось.

Разложение

$$f(\xi) = (\xi + 1)^\sigma \sum_{s=0}^{\infty} g_s (\xi + 1)^{-s} \quad (2.44)$$

также приводит к трехчленным рекуррентным соотношениям (2.3) с коэффициентами

$$\begin{aligned}\alpha_s &= 2p(s+1), \\ \beta_s &= -(s-m-\sigma)(s-m-1-\sigma) + 2p(2s-\sigma) + \lambda, \\ \gamma_s &= -2(s-1-\sigma)(s-m-1-\sigma).\end{aligned}\quad (2.45)$$

В вычислениях разложение (2.44) не использовалось.

Р. к. с. ф.  $c$ -типа  $\Pi_m(c, a, \lambda; \xi)$  при  $\xi \rightarrow \infty$  осциллируют, и все приведенные разложения при  $p = ic$  неэффективны. В этом случае функции  $\Pi_m(c, a, \lambda; \xi)$  удобнее находить как решения задачи Коши для дифференциального уравнения (1.36) при выбранном значении  $\lambda$  с начальными условиями для функции и ее производной, заданных вблизи особой точки  $\xi \approx 1$ , например, разложением (2.41).

**4. Полиномы, связанные с у. к. с. ф. и р. к. с. ф.** Рассмотрим решение рекуррентной системы уравнений (2.3) при специальных значениях параметров  $p, b$  (или  $p, a$ ), когда один из коэффициентов  $\gamma_{s+1}$  обращается в нуль:

$$\gamma_{s+1} = 0, \quad s = r \geq 0. \quad (2.46)$$

Матрица  $A$  становится блочной с нулевым блоком под диагональю:

$$Ag = \left\| \begin{array}{cccc|cccc} -\beta_0 & \alpha_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \gamma_1 & -\beta_1 & \alpha_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \gamma_r & -\beta_r & \alpha_r & 0 & 0 & \dots \\ \hline \dots & \dots & \dots & 0 & -\beta_{r+1} & \alpha_{r+1} & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{array} \right\| \begin{array}{c} g_0 \\ g_1 \\ \dots \\ g_r \\ g_{r+1} \\ \dots \end{array} =$$

$$= \left\| \begin{array}{c|c} A_r & B_r \\ \hline 0 & \bar{A} \end{array} \right\| \mathbf{g} = 0. \quad (2.47)$$

Здесь  $A_r$  — квадратная матрица порядка  $r+1$ ,  $B_r$  — бесконечная прямоугольная матрица, у которой отличен от нуля только один матричный элемент  $\{B_r\}_{r1} = \alpha_r$ , а  $\bar{A}$  — бесконечная квадратная матрица. Определитель матрицы  $A$  факторизуется на два сомножителя:

$$\det A = \det A_r \det \bar{A} \quad (2.48)$$

(Гантмахер, 1967, стр. 59). Цепная дробь, отвечающая определителю  $A_r$ , конечна. Поскольку собственные значения у.к.с.ф. и р.к.с.ф. не вырождены, в нуль может обращаться поочередно один из сомножителей в (2.48): либо

$$\det A_r = 0, \quad \det \bar{A} \neq 0, \quad (2.49)$$

либо

$$\det A_r \neq 0, \quad \det \bar{A} = 0. \quad (2.50)$$

Выделим у вектора  $\mathbf{g}$  первые  $r+1$  компонент

$$\mathbf{g} = (g_0, g_1, \dots, g_r; g_{r+1}, \dots) = (\mathbf{g}_r; \bar{\mathbf{g}}).$$

Система уравнений (2.47) эквивалентна двум системам

$$A_r \mathbf{g}_r + \bar{B}_r \bar{\mathbf{g}} = 0, \quad (2.51)$$

$$\bar{A} \bar{\mathbf{g}} = 0, \quad (2.52)$$

где  $\bar{B}_r \bar{\mathbf{g}}$  — вектор размерности  $r+1$ , у которого отлична от нуля лишь  $(r+1)$ -я компонента:

$$\bar{B}_r \bar{\mathbf{g}} = (0, \dots, 0, \alpha_r g_{r+1}). \quad (2.53)$$

В случае (2.49) однородная система алгебраических уравнений (2.52) имеет только нулевое решение  $\bar{\mathbf{g}} = 0$ ,

следовательно,  $g_{r+1}=0$ . Система (2.51) становится однородной. Из равенства нулю определителя  $A_r$  находится  $r+1$  различных собственных значений у. к. с. ф. (или р. к. с. ф.)  $\lambda_i, i=0, 1, \dots, r$ . Им соответствует  $r+1$  линейно независимых векторов  $g_r^{(i)}$  являющихся ненулевым решением системы  $A_r g_r=0$ . Векторы  $g^{(i)}$  представляются в форме

$$g^{(i)} = (g_r^{(i)}; 0, \dots), \quad i = 0, 1, \dots, r, \quad (2.54)$$

и  $r+1$  функций  $u^{(i)}$  (у. к. с. ф. или р. к. с. ф.), отвечающих этим векторам, определяются конечной суммой базисных функций

$$u^{(i)} = \sum_{s=0}^r g_s^{(i)} u_s, \quad i = 0, 1, \dots, r. \quad (2.55)$$

В случае (2.50) из равенства  $\det \bar{A}=0$  находим бесконечное число собственных значений у. к. с. ф. (или р. к. с. ф.)  $\lambda_l, l=l_0, l_0+1, \dots$  Им соответствуют ненулевые бесконечномерные векторы  $\bar{g}^{(l)}$ . Следовательно, векторы  $g^{(l)} = (g_r, \bar{g}^{(l)})$  содержат бесконечное число отличных от нуля компонент. Рассматривая последовательно решение систем (2.51), (2.52), получаем, что если  $g_{r+1}^{(l)} \neq 0$  то вектор  $g_r^{(l)}$  отличен от нуля, и функция  $u^{(l)}$  представляется бесконечным рядом, в котором суммирование начинается от нуля. Если  $g_{r+1}^{(l)}=0$ , то вектор  $g_r$  равен нулю, и суммирование в бесконечном ряде для  $u^{(l)}$  начинается с  $r+2$ .

Если при некотором выборе параметров  $p, a$  ( $p, b$ ) уравнение  $\gamma_{s+1}=0$  имеет два корня  $r, t$

$$\gamma_{r+1}=0, \quad \gamma_{t+1}=0, \quad t > r \geq 0, \quad (2.56)$$

то определитель матрицы  $A$  факторизуется на три сомножителя

$$\det A = \det A_t \det \bar{A}, \quad \det A_t = \det A_r \det \bar{A}_t. \quad (2.57)$$

Здесь  $A_t, A_r$  — матрицы порядков  $t+1, r+1$ , выделяемые из бесконечномерной матрицы  $A$  по правилу (2.47), а  $\bar{A}_t$  — матрица порядка  $t-r$ , причем

$$A_t = \begin{vmatrix} A_r & B_r' \\ 0 & \bar{A}_t \end{vmatrix}.$$

Исследование, аналогичное предыдущему, показывает, что если

$$\det A_t = 0, \quad \det \bar{A}_t \neq 0, \quad (2.58)$$

то  $t+1$  — линейно независимых векторов  $g^{(j)}$  сводятся к конечномерным векторам  $g_r^{(j)}$  размерности  $t+1$

$$g^{(j)} = (g_r^{(j)}, 0), \quad j = 0, 1, \dots, t. \quad (2.59)$$

Обращение в нуль определителя матрицы  $A_t$  происходит либо за счет ее блока  $A_r$

$$\det A_r = 0, \quad \det \bar{A}_r \neq 0, \quad (2.60)$$

либо за счет блока  $\bar{A}_t$

$$\det A_r \neq 0, \quad \det \bar{A}_t = 0. \quad (2.61)$$

В случае (2.60)  $r+1$  линейно независимых векторов  $g_i^{(i)}$  сводится к векторам меньшей размерности

$$g_i^{(i)} = (g_r^{(i)}, 0), \quad i = 0, 1, \dots, r. \quad (2.62)$$

В случае (2.61)  $t-r$  линейно независимых векторов  $g_r^{(j)}$  имеют отличные от нуля компоненты.

Векторам (2.59), (2.62) отвечают функции  $u^{(i)}$ ,  $u^{(j)}$ , представимые конечными суммами

$$u^{(i)} = \sum_{s=0}^r g_s^{(i)} u_s, \quad i = 0, 1, \dots, r, \quad (2.63)$$

$$u^{(j)} = \sum_{s=0}^t g_s^{(j)} u_s, \quad j = r+1, \dots, t. \quad (2.64)$$

Если обращается в нуль один из коэффициентов  $\alpha_s$

$$\alpha_s = 0, \quad s = r \geq 0, \quad (2.65)$$

то матрица  $A$  становится блочной с нулевым блоком над диагональю, и ее определитель также факторизуется на два сомножителя (2.48). Повторяя предыдущие рассуждения, получаем, что в случае (2.50) вектор  $g$  имеет вид  $g = (0, \bar{g})$ , где  $\bar{g} \neq 0$ , и функция  $u$  определяется бесконечным рядом базисных функций. В случае (2.49) из равенства нулю определителя  $A_r$  находится  $r+1$  собственных значений  $\lambda_i$ ,  $i = 0, 1, \dots, r$ . Им соответствует  $r+1$  линейно независимых векторов  $g_r^{(i)}$ , удовлетворяющих уравнению  $A_r g_r = 0$ . Если  $r$ -я компонента  $g_r^{(i)}$

вектора  $\bar{g}_r^{(i)}$  отлична от нуля, то  $\bar{g} \neq 0$  и  $u^{(i)} = \sum_{s=0}^{\infty} g_s^{(i)} u_s$ . Если  $r$ -я компонента  $g_r^{(i)}$  для некоторого вектора  $g_r^{(i)}$  с номером  $i=i_0$  равна нулю, то  $\bar{g}=0$  и функция  $u^{(i)}$  представляется конечной суммой  $u^{(i)} = \sum_{s=0}^{r-1} g_s^{(i)} u_s$ . Таким образом, равенство (2.65) не является достаточным условием обрыва рядов.

Найдем соотношения между параметрами  $p, b(p, a)$ , при которых у. к. с. ф. и р. к. с. ф. сводятся к полиномам.

Условие (2.46) представления у. к. с. ф.  $p$ -типа конечной суммой базисных функций для степенного разложения (2.13) имеет вид

$$\delta_{r+1} = b + 2p(r+1+m) = 0, \quad r \geq 0. \quad (2.66)$$

Положим

$$b = -2pn, \quad (2.67)$$

где  $n=0, 1, \dots$  — целое число. Разрешая условия (2.66) относительно  $r$ , получаем

$$r = n - m - 1, \quad n \geq m + 1. \quad (2.68)$$

Согласно (2.55)  $n-m$  различных у. к. с. ф., собственные значения которых являются корнями определителя матрицы  $A_r$ , сводятся к полиномам степени  $n-m-1$

$$E_{mq}(p, -2pn; \eta) = (1 - \eta^2)^{m/2} e^{-p(1+\eta)} \mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta), \quad (2.69)$$

$$\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta) = \sum_{s=0}^{n-m-1} c_s (1 + \eta)^s. \quad (2.70)$$

Число нулей полинома  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$  на отрезке  $[-1, 1]$  совпадает с числом нулей у. к. с. ф. и не превышает степени полинома

$$q \leq n - m - 1. \quad (2.71)$$

Индекс  $q$  в неравенстве (2.71) может принимать  $n-m$  различных значений, и поскольку полиномов тоже  $n-m$ , достаточно задать индекс  $q$  при данных  $n$  и  $m$ , чтобы однозначно назвать полином.

Из свойства преобразования у. к. с. ф. при замене  $b \rightarrow -b$  (1.20) следует, что при

$$b = 2pn, \quad q \leq n - m - 1 \quad (2.72)$$

у. к. с. ф. выражается через тот же полином  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$   
 $\Xi_{mq}(p, 2pn; \eta) =$

$$= C(1 - \eta^2)^{m/2} e^{-p(1-\eta)} \mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(-\eta) \quad (C = \text{const}). \quad (2.73)$$

Таким образом, условия сведения у. к. с. ф. к полиномам  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}$  приобретают вид

$$b = \pm 2pn, \quad q \leq n - m - 1. \quad (2.74)$$

Из неравенства (2.74) вытекает, что при  $n=0$  полиномиальных решений для у. к. с. ф.  $p$ -типа нет, следовательно, никогда не сводятся к полиномам сплюснутые угловые сфероидальные функции. К полиномам никогда не сводятся также у. к. с. ф.  $s$ -типа, поскольку для них уравнение  $\gamma_{s+1}=0$  решений не имеет.

Условия (2.46) обрыва степенного ряда Яффе для р. к. с. ф. (2.33) имеют вид

$$\gamma_{s+1} = \left(s - \frac{a}{2p} + m + 1\right) \left(s - \frac{a}{2p} + 1\right) = 0, \quad s \geq 0. \quad (2.75)$$

При целом

$$a/(2p) = n, \quad n = 0, 1, \dots \quad (2.76)$$

и

$$n \leq m \quad (2.77)$$

уравнение (2.75) имеет единственный корень

$$t = n - 1 \geq 0. \quad (2.78)$$

Согласно (2.55)  $n$  различных р. к. с. ф., собственные значения которых являются корнями определителя матрицы  $A_t$ , представляются с помощью полиномов степени  $n-1$

$$\Pi_{mk}(p, 2pn; \xi) = \left(\frac{\xi - 1}{\xi + 1}\right)^{m/2} e^{-p(\xi-1)} \mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi), \quad (2.79)$$

$$\mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi) = \sum_{s=0}^{n-1} g_s (\xi - 1)^s (\xi + 1)^{n-s-1}. \quad (2.80)$$

Число нулей р. к. с. ф.  $k$  не превосходит степени полинома

$$k \leq n - 1. \quad (2.81)$$

Индекс  $k$  принимает  $n$  значений и при данных  $n, m$  однозначно нумерует  $n$  полиномов  $\mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi)$ .

Если

$$n \geq m+1, \quad (2.82)$$

то уравнение (2.75) имеет два корня  $r$  и  $t$

$$r = n - m - 1 \leq t = n - 1. \quad (2.83)$$

Согласно (2.63), (2.64)  $n$  различных р.к.с.ф., собственные значения которых являются корнями определителей матриц  $A_r$  и  $\bar{A}_t$ , сводятся к полиномам. Возвращаясь от переменной Яффе  $x = (\xi - 1)/(\xi + 1)$  к переменной  $\xi$  в разложении (2.33), удобно выделять разными способами полиномы по  $\xi$ , отвечающие (2.63), (2.64) соответственно; получаем

$$\Pi_{mk}(p, 2pn; \xi) = (\xi^2 - 1)^{m/2} e^{-p(\xi-1)} \mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi), \quad k \leq n - m - 1, \quad (2.84)$$

$$\Pi_{mk}(p, 2pn; \xi) = \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^{n/2} e^{-p(\xi-1)} \mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi), \quad n - m \leq k \leq n - 1, \quad (2.85)$$

где  $\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi)$  — полином степени  $n-m-1$

$$\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi) = \sum_{s=0}^{n-m-1} g_s (\xi - 1)^s (\xi + 1)^{n-m-s-1}, \quad (2.86)$$

а  $\mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi)$  определяется формулой (2.80).

Полиномы  $\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi)$  и  $\mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi)$  при  $k \leq n-m-1$  связаны соотношениями

$$\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi) = (\xi + 1)^{-m} \mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi), \quad k \leq n - m - 1, \quad (2.87)$$

вытекающими из определений (2.80), (2.86) с учетом (2.63), (2.64). При  $m=0$  полиномы  $\mathcal{F}_{0k}^{n-1}(\xi)$  и  $\mathcal{G}_{0k}^{n-1}(\xi)$  совпадают.

Индекс  $k$  при данных  $n$  и  $m$  однозначно нумерует полиномы  $\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi)$ ,  $\mathcal{G}_{mk}^{n-1}(\xi)$ .

При выполнении неравенств (2.81), (2.77) заведомо выполнено условие  $n-m \leq k \leq n-1$ , содержащееся в (2.85). Поэтому формулы (2.84), (2.85) охватывают все случаи сведения р.к.с.ф. к полиномам для разложения Яффе (2.33) при обращении в нуль коэффициентов  $\gamma_s$ .

Р.к.с.ф.  $\Pi_{mk}(p, 2pn; \xi)$ , определяемые формулами (2.85), (2.80), при аналитическом продолжении по аргументу на отрезок  $[-1, 1]$  дают решения углового урав-



нения с параметром  $b = -2pn$ , расходящиеся в точке  $\xi = -1$ . Р. к. с. ф.  $\Pi_{mk}(p, 2pn; \xi)$ , определяемые формулами (2.84), (2.86), при аналитическом продолжении по аргументу на отрезок  $[-1, 1]$  дают решения углового уравнения (1.14) с параметром  $b = -2pn$ , регулярные в точках  $\xi = \pm 1$ . Следовательно, с точностью до нормировки  $\Pi_{mk}(p, 2pn; \xi)$  совпадают с у. к. с. ф.

$$\Pi_{mk}(p, 2pn; \xi) = C \Xi_{mq}(p, -2pn; \eta) \quad (2.88)$$

( $C = \text{const}$ ),  $\xi = \eta \in [-1, \infty)$ ,  $k \leq n - m - 1$ ,  $q \leq n - m - 1$ , причем

$$\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 2pn) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, -2pn). \quad (2.89)$$

С точностью до нормировки совпадают также полиномы  $\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi)$ ,  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$ , определенные формулами (2.70), (2.86)

$$\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi) = C \mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta) \quad (C = \text{const}). \quad (2.90)$$

Поскольку при изменении индексов  $k, q$  при данных  $n$  и  $m$  перебираются все полиномы  $\mathcal{F}^{n-m-1}$ , как для у. к. с. ф., так и для р. к. с. ф., индексы  $k$  и  $q$  в равенствах (2.88), (2.89), (2.90) связаны соотношением

$$q + k = n - m - 1. \quad (2.91)$$

Все нули полиномов  $\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi)$ ,  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$  находятся, таким образом, на полуоси  $[-1, \infty)$ , причем  $k$  нулей принадлежат радиальной функции, а  $q = n - k - m - 1$  нулей — угловой.

Из равенства (2.88) следует свойство двойной ортогональности у. к. с. ф. и р. к. с. ф. при  $a = -b = 2pn$ ,

Таблица 11а

Примеры полиномов  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$

$n$	$q$	$\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2pn)$	$\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$
$m + 1$	0	$m(m+1)$	$C_0$
$m + 2$	0	$(m+1)^2 - [(m+1)^2 + 4p^2]^{1/2}$	$C_1 \left[ \eta - \frac{2p}{m(m+1) - \lambda} \right]$
$m + 2$	1	$(m+1)^2 + [(m+1)^2 + 4p^2]^{1/2}$	

Примеры полиномов  $\mathcal{F}_{mk}^{n-1}(\xi)$ 

$n$	$k$	$\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 2pn)$	$\mathcal{F}_{mk}^{n-1}(\xi)$
1	0	$-2pn$	$C'_0$
2	0	$(-2pn+1) + (4p^2+4pn+1)^{1/2}$	$C'_1 \left[ \xi^{-1} + \frac{2(m+1)}{2+2p(m-1)+\lambda} \right]$
2	1	$(-2pn+1) - (4p^2+4pn+1)^{1/2}$	

$q+k+m+1=n$ , аналогичное двойной ортогональности сфероидальных функций § 2 гл. I.

Представление у. к. с. ф. и р. к. с. ф. полиномами  $\mathcal{F}^{n-m-1}$  возникает при рассмотрении водородоподобного атома в вытянутых сфероидальных координатах (п. 2 § 8). В задаче двух кулоновских центров при специальных значениях  $Z_1, Z_2, R$  может реализоваться представление у. к. с. ф. и р. к. с. ф. через полиномы  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}$  и  $\mathcal{F}_{mk}^{n-1}$  (п. 3 § 8).

В табл. 11а и 11б приведены простейшие примеры полиномов  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$ ,  $\mathcal{F}_{mk}^{n-1}(\xi)$  и соответствующих им собственных значений  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2pn)$ ,  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 2pn)$ ;  $C_0, C_1, C'_0, C'_1$  — константы, которые определяются из условий нормировки.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ К §§ 1, 2

Частные случаи уравнений (1.14), (1.28), (1.36) известны давно, однако сколько-нибудь подробное их исследование началось только после создания квантовой механики, в связи с задачей двух центров. Одной из первых была работа Wilson (1928a, b), который ввел различные типы разложений для  $\Pi_{mk}(p, a; \xi)$  и  $\Sigma_{mq}(p, b; \eta)$ , однако неправильно полагал, что они всегда сводятся к полиномам. Подробнее эти разложения и, в частности, разложения (2.16) и (2.25) были исследованы Baber, Hassé (1935), которые доказали их сходимость. Teller (1930), McGrea, Newing (1933) обратили внимание на ошибку Wilson. Hülleraas (1931) использовал разложение (2.42), однако Jaffé (1934) выразил сомнение в его сходимости и предложил новое разложение (2.36). Hülleraas (1931, 1935), Svartholm (1936) показали эквивалентность разложений (2.36) и (2.42), но Chakravarty (1939) по-прежнему критиковал разложение Hülleraas. Helfrich, Hartmann (1965), повторив в общих чертах раннюю работу Svartholm (1936), также пришли к выводу об эквивалентности разложений (2.36) и (2.42). Среди разложений, не нашедших отражения в

тексте и практических расчетах, следует упомянуть разложения, предложенные в работах Fischer (1937) и Svartholm (1938).

Полиномиальные решения для водородоподобного атома рассмотрели Coulson, Robinson (1958). Демков (1968) проанализировал полиномиальные решения в задаче  $Z_1eZ_2$  (см. п. 3 § 8).

### § 3. Задача двух кулоновских центров в квантовой механике

**1. Основные определения. Представление решений через р. к. с. ф. и у. к. с. ф.** Задача двух центров в квантовой механике (задача  $Z_1eZ_2$ ) состоит в нахождении волновых функций электрона, движущегося в поле двух закрепленных зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$ , удаленных на расстояние  $R$ .

В безразмерных переменных соответствующее уравнение Шредингера задачи двух центров имеет вид

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_r - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}\right)\Phi(\mathbf{r}; R) = E\Phi(\mathbf{r}; R), \quad (3.1)$$

где  $r_1$  и  $r_2$  — расстояния от электрона до зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$  соответственно, а  $E$  — энергия электрона, которую надлежит либо определить (в случае  $E < 0$ , дискретный спектр задачи  $Z_1eZ_2$ ), либо задать (в случае  $E > 0$ , непрерывный спектр задачи  $Z_1eZ_2$ ). Свойства решений в этих двух случаях сильно различаются.

В вытянутых сфероидальных координатах \*)

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \varphi = \arctg \frac{y}{x} \quad (3.2)$$

координаты заряда  $Z_1$  равны  $\xi = 1$ ,  $\eta = -1$ , а координаты заряда  $Z_2$  равны соответственно  $\xi = 1$ ,  $\eta = 1$ . В дальнейшем, если это не оговорено особо, будем предполагать, что  $Z_1 > 0$  и  $Z_2 > 0$ , причем  $Z_2 \geq Z_1$ .

Одномерные уравнения по переменным  $\xi$  и  $\eta$ , возникающие при разделении переменных в уравнении (3.1) (см. введение), совпадают с уравнениями (1.28) и (1.14) для р. к. с. ф. и у. к. с. ф. соответственно при значениях параметров

$$p = \frac{R}{2}\sqrt{-2E}, \quad a = R(Z_2 + Z_1), \quad b = R(Z_2 - Z_1), \quad (3.3a)$$

\*) По установившейся традиции в квантовой механике расстояние между фокусами координатного эллипсоида (в которые помещены заряды  $Z_1$  и  $Z_2$ ) обозначают через  $R$  вместо прежнего обозначения  $d$ , которое принято, например, в радиофизике.

причем пара одномерных уравнений эквивалентна исходному уравнению (3.1) при условии равенства собственных значений  $\lambda$  в обоих уравнениях

$$\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b). \quad (3.36)$$

При  $E < 0$  параметр  $p$  вещественный и обе кулоновские сферонидальные функции относятся к  $p$ -типу. В этом случае решение трехмерной задачи (3.1) представляется в виде произведения радиальной, угловой и азимутальной частей следующим образом:

$$\begin{aligned} \Phi_j(\mathbf{r}; R) &= \Phi_{kqm}(\xi, \eta, \varphi; R) = \\ &= N_{kqm}(p, a, b) \Pi_{mk}(p, a; \xi) \Xi_{mq}(p, b; \eta) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Здесь индекс  $j = \{kqm\}$  означает набор квантовых чисел, из которых  $k$  и  $q$  совпадают с числами нулей соответствующих функций по переменным  $\xi$  и  $\eta$ , а число  $m$  принимает значения  $m = 0, 1, 2, \dots$

Нормировка  $N_{kqm}(p, a, b)$  определяется из условия

$$\begin{aligned} \int \Phi_{j'}^*(\mathbf{r}; R) \Phi_j(\mathbf{r}; R) d\mathbf{r} &= \\ &= \int \Phi_{k'q'm'}^*(\xi, \eta, \varphi; R) \Phi_{kqm}(\xi, \eta, \varphi; R) d\tau = \delta_{kk'} \delta_{qq'} \delta_{mm'}, \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$d\tau = \frac{R^3}{8} (\xi^2 - \eta^2) d\xi d\eta d\varphi.$$

Если в равенстве (3.4) использовать функции  $\bar{\Pi}_{mk}(p, a; \xi)$  и  $\bar{\Xi}_{mq}(p, b; \eta)$ , нормированные равенствами (1.15) и (1.30), то из условия (3.5) с учетом соотношений (1.24а) и (1.33а) можно выразить  $N_{kqm}(p, a, b)$  через производные по  $p$  собственных значений  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a)$  и  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)$

$$\bar{N}_{kqm}^2(p, a, b) = \frac{16p}{R^3} \left[ \frac{\partial \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)}{\partial p} - \frac{\partial \lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a)}{\partial p} \right]^{-1}. \quad (3.6)$$

В случае непрерывного спектра ( $E > 0$ ) параметр  $p$ , определенный формулой (3.3а), чисто мнимый, у. к. с. ф. и р. к. с. ф., через которые выражается решение  $\Phi(\mathbf{r}; R)$  уравнения (3.1), относятся к  $s$ -типу и удовлетворяют уравнению (1.14б) и уравнению (1.36) соответственно.

Решение  $\Phi_c(\mathbf{r}; R)$  имеет в этом случае вид

$$\begin{aligned} \Phi_c(\mathbf{r}; R) &= \Phi_{mq}(\xi, \eta, \varphi; k, R) = \\ &= N_{mq}(c, a, b) \Pi_m(c, b, \lambda_{mq}^{(n)}(c, b); \xi) \Xi_{mq}(c, b; \eta) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Здесь импульс  $k$  связан с энергией  $E$  соотношением

$$E = k^2/2, \quad (3.8)$$

а параметр  $c$  определяется равенством, которое следует из (3.3а) с учетом (3.8) после формальной замены  $p \rightarrow ic$ :

$$c = kR/2. \quad (3.9)$$

Индекс  $c = \{m, q; k\}$  обозначает набор из двух дискретных квантовых чисел  $m$  и  $q$  и непрерывного параметра  $k$ . В формуле (3.7)  $\lambda_{mq}^{(n)}(c, b)$  — собственные значения уравнения для у. к. с. ф.  $c$ -типа  $\Xi_{mq}(c, b; \eta)$ .

Нормировка решений выбирается обычно в виде

$$\int \Phi_{q'm'}^*(\xi, \eta, \varphi; k', R) \Phi_{qm}(\xi, \eta, \varphi; k, R) d\tau = \delta_{qq'} \delta_{mm'} \delta(k - k'). \quad (3.10)$$

В случае  $Z_1 + Z_2 > 0$  задача  $Z_1 e Z_2$  имеет как дискретный, так и непрерывный спектр собственных значений энергии  $E$  при всех значениях  $R$ . В случае  $Z_1 + Z_2 \leq 0$ , причем один из зарядов положителен, дискретный спектр ( $E < 0$ ) существует только при достаточно больших  $R$ , и при сближении зарядов уровни энергии непрерывно переходят в континуум ( $E > 0$ ).

**2. Дискретный спектр. Общие свойства решений.** Энергия  $E$  в уравнении (3.1) при  $E < 0$  принимает дискретный ряд значений. Для заданных индексов решения  $k, q, m$  и фиксированных  $Z_1, Z_2$  и  $R$  эти значения могут быть найдены, например, из равенства (3.3б), в котором параметры определены соотношениями (3.3а).

При фиксированных значениях  $a, b, j = \{kqm\}$  уравнение (3.3б) имеет единственное решение (если оно существует)

$$p = p_{kqm}(a, b). \quad (3.11)$$

Это утверждение следует из невырожденности набора собственных значений  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, a)$  и  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, b)$  краевых задач (1.28), (1.29) и (1.14а), а также из свойств

монотонности (1.33а) и (1.24а) собственных значений как функции параметра  $p$ .

Разрешая соотношение

$$p_{kqm}(R(Z_2 + Z_1), R(Z_2 - Z_1)) = \frac{R}{2} \sqrt{-2E} \quad (3.12)$$

относительно  $E$ , находим дискретный спектр задачи  $Z_1 e Z_2$ :

$$E_j(R) = E_{kqm}(R, Z_1, Z_2). \quad (3.13)$$

Функции  $E_j(R)$  называют *термами* задачи двух центров. Из равенства (3.12) следует, что при фиксированных значениях зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$  и заданном наборе квантовых чисел,  $j = \{kqm\}$  энергия электрона зависит только от одного непрерывного параметра  $R$  (зависимость от  $Z_1$  и  $Z_2$  в дальнейшем будем опускать).

Для волновых функций  $\Phi_j(\mathbf{r}; R)$ , соответствующих термам  $E_j(R)$ , в дальнейшем будем использовать сокращенные обозначения:

$$\Phi_j(\mathbf{r}; R) = N_j(R) \Pi_{mk}(\xi; R) \Xi_{mq}(\eta; R) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (3.14)$$

где

$$\begin{aligned} \Pi_{mk}(\xi; R) &= \Pi_{mk}(p_{kqm}(a, b), a; \xi), \\ \Xi_{mq}(\eta; R) &= \Xi_{mq}(p_{kqm}(a, b), b; \eta), \end{aligned} \quad (3.15)$$

$$\begin{aligned} N_j(R) &= N_{kqm}(p_{kqm}(a, b), a, b), \\ a &= R(Z_2 + Z_1), \quad b = R(Z_2 - Z_1). \end{aligned}$$

Числа нулей  $k$ ,  $q$ ,  $m$  радиальной, угловой и азимутальной частей решения  $\Phi_j(\mathbf{r}; R)$  называют *угловым*, *радиальным* и *азимутальным квантовыми числами* соответственно. Обычно для классификации решений вместо чисел  $k$ ,  $q$ ,  $m$  вводят их линейные комбинации:

*Главное квантовое число*

$$N = k + q + m + 1, \quad (3.16a)$$

которое пробегает ряд значений

$$N = 1, 2, 3, \dots; \quad (3.16b)$$

*орбитальное квантовое число*

$$l = q + m, \quad (3.17a)$$

которое изменяется в пределах  $0 \leq l \leq N - 1$  и обозна-

чается строчными латинскими буквами, причем ряду чисел

$$l=0, 1, 2, 3, 4, 5, \dots \quad (3.176)$$

соответствует ряд букв

$$l=s, p, d, f, g, h, \dots; \quad (3.17в)$$

азимутальное квантовое число  $m$  меняется в пределах  $0 \leq m \leq l$ , обозначается греческими буквами  $\sigma, \pi, \delta, \dots$ , которые соответствуют ряду  $m=0, 1, 2, \dots$ .

Таким образом, символ  $l\sigma$  соответствует набору сферических квантовых чисел  $j=(Nlm)$  со значениями  $N=1, l=0, m=0$ ; терм  $3d\pi$  — набору  $N=3, l=2, m=1$  и т. д.

Приведенная классификация решений сохраняет смысл при всех значениях  $R$ , при которых уравнение (3.3б) имеет решение. Это утверждение является непосредственным следствием теоремы о сохранении числа нулей  $k$  и  $q$  решений краевых задач (1.28) и (1.14) при непрерывном изменении параметра  $R$ .

Набор квантовых чисел  $j=(Nlm)$  наиболее естествен в пределе  $R \rightarrow 0$ , когда задача  $Z_1 e Z_2$  переходит в задачу о водородоподобном атоме с зарядом  $Z_1 + Z_2$ . В другом пределе  $R \rightarrow \infty$  электрон остается у одного из ядер  $Z_1$  или  $Z_2$ , и задача  $Z_1 e Z_2$  распадается на две одноцентровые задачи. В этом случае термы  $E_j(R)$  удобнее классифицировать по параболическим квантовым числам состояний атомов  $eZ_1$  и  $eZ_2$  соответственно:  $j=[nn_1n_2m]$  и  $j'=[n'n_1'n_2m]$  соответственно. Связь наборов параболических квантовых чисел с набором сферических чисел  $j=(Nlm)$  будет установлена ниже\*).

В симметричном случае  $Z_1=Z_2$  возникает дополнительная классификация решений по квантовому числу

$$\omega = (-)^q, \quad (3.18)$$

которое является собственным значением оператора  $\hat{w}$  отражения координат электрона в плоскости  $z=0$ , что эквивалентно изменению знака  $\eta$  в угловом уравнении

$$\hat{w}\Xi_{mq}(\eta; R) = \Xi_{mq}(-\eta; R) = \omega\Xi_{mq}(\eta; R). \quad (3.19)$$

\*) В дальнейшем будем использовать разные виды скобок: символ  $j=\{kqm\}$  сохраним для обозначения набора сфероидальных квантовых чисел, а символы  $j=(Nlm)$  и  $j=[nn_1n_2m]$  — для обозначения наборов сферических и параболических квантовых чисел соответственно.

Решения  $E_{mq}(\eta; R)$  делятся на симметричные ( $\omega=1$ ) и антисимметричные ( $\omega=-1$ ) в зависимости от четности числа  $q$ . Операция  $\hat{\omega}$  соответствует перестановке зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$  (рис. 15).

Трехмерные решения  $\Phi_j(\mathbf{r}; R)$ , кроме того, допускают классификацию по собственным значениям  $I$  оператора инверсии  $\hat{I}$  координат электрона

$$\hat{I}\Phi_j(\mathbf{r}; R) = \Phi(-\mathbf{r}; R) = I\Phi(\mathbf{r}; R). \quad (3.20)$$

Инверсия  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$  эквивалентна заменам  $\eta \rightarrow -\eta$ ,  $\varphi \rightarrow \varphi + \pi$ . С учетом формул (3.18), (3.19) и определения (3.4) отсюда следует хорошо известное соотношение

$$I = \omega e^{i\pi l} = (-)^l. \quad (3.21)$$

В зависимости от четности числа  $l$  все решения задачи  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1 = Z_2$  разделяются на два класса: решения, для которых  $I=1$ , называются *четными*  $\Phi_{Jg}(\mathbf{r}; R)$ , те же, для которых  $I=-1$  — *нечетными*  $\Phi_{Ju}(\mathbf{r}; R)$ .

Очевидно, четность решений целиком определяется четностью числа  $l$ . Четность состояния указывается рядом с символом термина, например:  $1s_g, 2p_{u}, 3d_{g}, 4f_{u}$  и т. д.

Отражение в любой плоскости, проходящей через ось  $z$ , эквивалентно замене  $\varphi \rightarrow -\varphi$ , что равносильно изменению знака  $m$  в азимутальной части решения (3.4). Поскольку термины  $E_{(hqm)}(R)$  не зависят от знака  $m$ , то возникает вырождение: каждому терму  $E_j(R)$  отвечают две волновые функции (3.4), различающиеся только знаком  $m$  (так называемое  $\Lambda$ -удвоение.)

### 3. Правила соответствия термов при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ .

Из физических соображений ясно, что в пределе объединенного атома, т. е. при  $R \rightarrow 0$ , термы  $E_j(R)$  непрерывно переходят в уровни энергии водородоподобного атома с зарядом  $Z_1 + Z_2$  и набором квантовых чисел  $j = (Nlm)$ , т. е. должно выполняться соотношение

$$E_{Nlm}(Z_1, Z_2, 0) = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_1 + Z_2}{N} \right)^2. \quad (3.22)$$

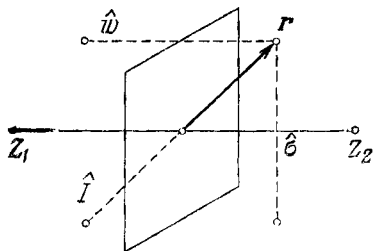


Рис. 15. Операции симметрии системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1 = Z_2$ .



Радиальная  $\Pi_{mk}(\xi; R)$  и угловая  $\Xi_{mq}(\eta; R)$  части решений задачи  $Z_1 e Z_2$  в этом пределе переходят в радиальную  $R_{Nl}(\rho)$  и угловую  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  части решений одноцентральной задачи с зарядом  $Z_1 + Z_2$  в сферических координатах

$$\begin{aligned} \Phi_j(\mathbf{r}; 0) &= N_{kqm}(0) \Pi_{mk}(\xi; 0) \Xi_{mq}(\eta; 0) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} = \\ &= R_{Nl}(\rho) Y_l^m(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (3.23)$$

где переменные обеих координатных систем при  $R \rightarrow 0$  связаны предельными соотношениями (см. введение)

$$R\xi/2 \rightarrow \rho, \quad \eta \rightarrow \cos \theta. \quad (3.24)$$

В пределе  $R \rightarrow \infty$  все термы системы  $Z_1 e Z_2$  распадаются на два класса:  $eZ_1$ -термы, которые при  $R \rightarrow \infty$  переходят в уровни электрона в поле изолированного заряда  $Z_1$  (соответствующие им волновые функции сосредоточены в окрестности  $\xi \approx 1, \eta \approx -1$ ), и  $eZ_2$ -термы, отвечающие уровням атома  $eZ_2$  (их волновые функции сосредоточены вблизи  $\xi \approx 1, \eta \approx 1$ ). При  $R \rightarrow \infty$  сферические координаты переходят в параболические, а функции  $\Pi_{mk}(\xi; R)$  и  $\Xi_{mq}(\eta; R)$  — в решения одноцентральной задачи в параболических координатах (см. § 8).

Для  $eZ_1$ -термов имеем

$$\begin{aligned} \Phi_j(\mathbf{r}; \infty) &= N_{kqm}(\infty) \Pi_{mk}(\xi; \infty) \Xi_{mq}(\eta; \infty) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} = \\ &= \frac{\sqrt{2Z_1^3}}{n^2} f_{n_1 m}(\zeta) f_{n_2 m}(\tau) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$R(\xi - 1) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \zeta, \quad R(1 + \eta) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \tau, \quad (3.26)$$

$$E_j(\infty) = E_{[n_1 n_2 m]} = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_1}{n} \right)^2, \quad n = n_1 + n_2 + m + 1. \quad (3.27)$$

Для  $eZ_2$ -термов соотношение (3.25) остается справедливым, предельный переход (3.26) изменяется на

$$R(1 - \eta) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} \tau, \quad (3.26')$$

а выражение (3.27) для уровней энергии переходит в

$$E_j(R) \rightarrow E_{[n' n_1' n_2' m]} = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_2}{n'} \right)^2, \quad n' = n_1' + n_2' + m + 1. \quad (3.27')$$

Квантовые числа  $n_1$  и  $n_2$  равны числу нулей радиальной  $f_{n_1 m}(\zeta)$  и угловой  $f_{n_2 m}(\tau)$  частей решения (3.25), которое соответствует  $eZ_1$ -термам, а  $n_1$  и  $n_2$  — числу нулей решения, отвечающего  $eZ_2$ -термам.

Наборы параболических квантовых чисел  $j = [nn_1n_2m]$  и  $j' = [n'n_1n_2m]$  отличаются от набора сферических квантовых чисел  $j = (Nlm)$  и от исходного набора сферических квантовых чисел  $j = \{kqm\}$ , однако они связаны с ними однозначными правилами соответствия (иногда их называют *корреляционными диаграммами* термов).

Для радиальных квантовых чисел справедливо равенство

$$k = n_1 = n_1', \quad (3.28)$$

которое является следствием теоремы о сохранении числа нулей решения задачи Штурма — Лиувилля, зависящей от параметра, при непрерывном его изменении. Связь угловых квантовых чисел  $q$  и  $n_2$ ,  $n_2'$  несколько сложнее, а именно при  $Z_2 > Z_1$ :

для  $eZ_1$ -термов

$$b = \begin{cases} 2n_2 + n \frac{Z_2 - Z_1}{Z_1}, & \text{если } n \frac{Z_2}{Z_1} = \text{целому числу,} \\ 2n_2 + 1 + \text{Ent} \left( n \frac{Z_2 - Z_1}{Z_1} \right), & \text{если } n \frac{Z_2}{Z_1} \neq \text{целому числу,} \end{cases} \quad (3.29)$$

для  $eZ_2$ -термов

$$q = \begin{cases} n_2', & \text{если } n_2' < n' \frac{Z_2 - Z_1}{Z_2}, \\ n_2' + 1 + \text{Ent} \left( n_2' - n' \frac{Z_2 - Z_1}{Z_2} \right), & \text{если } n_2' \geq n' \frac{Z_2 - Z_1}{Z_2}, \end{cases} \quad (3.29')$$

где  $\text{Ent}(x)$  означает целую часть от  $x$ .

Из соотношения (3.29) следует, что, как правило,  $n_2 \neq q$ . На первый взгляд этот факт находится в противоречии с теоремой о сохранении числа нулей решений краевой задачи при непрерывном изменении параметра. В действительности при  $R \rightarrow \infty$  нули угловой функции  $\Xi_{mq}(\eta; R)$  не исчезают, однако часть из них становятся несущественными для определения функции, поскольку в той области изменения аргумента  $\eta$ , где сосредоточена эта часть нулей, угловая функция экспоненциально мала.

Подробнее эти вопросы рассмотрены в § 4, при изучении асимптотики решений задачи двух центров в пределе  $R \rightarrow \infty$ .

При  $Z_1=Z_2$  отсутствует деление собственных значений  $E_J(R)$  на  $eZ_1$ - и  $eZ_2$ -термы. Угловая функция  $\Xi_{mq}(\eta; R)$  при  $R \rightarrow \infty$  является величиной одного порядка у обоих центров, и вблизи каждого из них сосредоточено одинаковое количество ее нулей, т. е.  $n_1 = n_2$ .

В этом случае для четных  $q=q_s$  (симметричные решения,  $\omega=1$ ) и нечетных  $q=q_a$  (антисимметричные решения,  $\omega=-1$ ) имеют место очевидные соотношения

$$q_s = 2n_2, \quad q_a = 2n_2 + 1. \quad (3.30a)$$

При классификации решений по собственным значениям оператора инверсии  $\hat{I}$  (3.20) справедливы равенства

$$q = q_g = 2n_2 + \frac{1 - (-)^m}{2}, \quad q = q_u = 2n_2 + \frac{1 + (-)^m}{2} \quad (3.30б)$$

для четных ( $I=1$ ) и нечетных ( $I=-1$ ) решений соответственно.

**4. Алгоритм вычисления термов и волновых функций.** Волновые функции задачи двух центров выражаются через у. к. с. ф. и р. к. с. ф.  $p$ -типа  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$  и  $\Pi_{mk}(p, a; \xi)$ , определенные формулами (3.15) при значениях параметров (3.3а). При реализации изложенных в § 2 алгоритмов решения соответствующих уравнений (1.14а) и (1.28а) следует учитывать ограничения, диктуемые трехмерностью исходного уравнения (3.1).

Как известно, при разделении переменных в сферических координатах вначале определяется константа разделения  $\lambda$  из углового уравнения, а затем уже из радиального уравнения, при подстановке в него полученного значения  $\lambda$ , находится энергия  $E$ .

В задаче двух центров уравнения для радиальной и угловой функций необходимо решать совместно, поскольку искомая энергия  $E$  и константа разделения  $\lambda$  входят в оба уравнения равноправно.

Допустимые значения  $p$  и  $\lambda$  находим, как решения системы уравнений (2.35) и (2.22):

$$F_{N_1+1}^{(\xi)}(p, a, \lambda) = 0, \quad F_{N_2+1}^{(\eta)}(p, b, \lambda) = 0, \quad (3.31)$$

где числа членов  $N_1$  и  $N_2$  цепных дробей (2.6) и (2.18) взяты достаточно большими, чтобы обеспечить заданную точность вычисления  $p$  и  $\lambda$ .

Коэффициенты разложения радиальных (2.33) и угловых (2.22) функций системы  $Z_1 e Z_2$  при  $R=0,1$ ,  $Z_1=1$ ,  $Z_2=2$

1sσ			
s	$g_s$	$c_s$	$c'_s$
0	i	i	8,17368(-1)
1	3,67094(-4)	1,66177(-1)	2,99301(-1)
2	4,29893(-5)	2,48844(-1)	6,58778(-2)
3	1,04473(-5)	3,07417(-3)	1,04811(-2)
4	3,49560(-6)	3,18145(-4)	1,30825(-3)
5	1,40710(-6)	2,81799(-5)	1,34417(-4)
6	6,40070(-7)	2,17667(-6)	1,17374(-5)
7	3,17850(-7)	1,48883(-7)	8,91196(-7)
8	1,68689(-7)	9,13135(-9)	5,98579(-8)
9	9,43506(-8)	5,08399(-10)	3,60448(-9)
10	5,50791(-8)	2,57657(-11)	1,96704(-10)
15	8,79940(-8)	1,23830(-16)	8,00092(-16)
20	1,72125(-9)	1,01556(-18)	8,49484(-19)

2pσ			
s	$g_s$	$c_s$	$c'_s$
0	i	i	-1,00028
1	7,25315(-1)	-9,55788(-1)	7,55971(-1)
2	1,57912(-5)	-9,53349(-2)	1,65878(-1)
3	1,42304(-6)	-6,63487(-3)	1,87477(-2)
4	2,90403(-7)	-3,67202(-4)	1,47812(-3)
5	8,61181(-8)	-1,70163(-5)	0,05566(-5)
6	3,17753(-8)	-6,80360(-7)	4,56006(-6)
7	1,35389(-8)	-2,39547(-8)	1,95425(-7)
8	6,38298(-9)	-7,54050(-10)	7,29999(-9)
9	3,23804(-9)	-2,14957(-11)	2,41901(-10)
10	1,73110(-9)	-5,71294(-13)	7,21807(-12)
15	—	-2,55294(-16)	2,63087(-16)
20	—	-1,22089(-17)	1,24939(-17)

Коэффициенты разложения радиальных (2.33) и угловых (2.22) функций системы  $Z_1 e Z_2$  при  $R=5$ ,  $Z_1=1$ ,  $Z_2=2$

1sσ			
s	$g_s$	$c_s$	$c'_s$
0	1	1	2,43923(-4)
1	8,37168(-3)	2,69409(-1)	1,28533(-3)
2	5,66899(-5)	1,05850(-1)	4,91265(-3)
3	1,77982(-6)	4,60343(-2)	1,41094(-2)
4	-1,54887(-8)	2,10254(-2)	3,20873(-2)
5	-5,39864(-7)	9,89760(-3)	6,01965(-2)
6	-2,25286(-6)	4,76213(-3)	9,59847(-2)
7	-3,11128(-5)	2,33233(-3)	1,33007(-1)
8	-1,06387(-4)	1,16032(-3)	1,62920(-1)
9	-3,47146(-4)	5,85491(-4)	1,78782(-1)
10	-1,08640(-3)	2,99088(-4)	1,77670(-1)
15	—	1,07906(-5)	5,08021(-2)
20	—	2,54120(-7)	2,98715(-3)
30	—	1,35390(-11)	3,57730(-7)
40	—	8,92350(-17)	1,61354(-12)
2pσ			
s	$g_s$	$c_s$	$c'_s$
0	1	1	-3,92648
1	1,10068(-1)	-3,86763	-4,44624
2	1,57875(-4)	-4,01817	-4,13215
3	1,95350(-6)	-3,83283	-3,54347
4	1,20819(-7)	-3,46108	-2,81530
5	1,20271(-7)	-2,91082	-2,03331
6	3,27784(-7)	-2,25382	-1,30584
7	8,95271(-7)	-1,60052	-7,26584(-1)
8	2,34824(-6)	-1,04337	-3,34446(-1)
9	5,93301(-6)	-6,26368(-1)	-1,11543(-1)
10	1,44974(-5)	-3,47714(-1)	-9,06173(-3)
15	—	-6,54519(-3)	5,74052(-3)
20	—	-3,01228(-5)	6,01875(-5)
30	—	-2,79038(-11)	1,33434(-10)
40	—	-1,14668(-18)	9,33501(-18)

Для того чтобы из множества корней системы (3.31) выделить собственные значения  $p_j(R)$  и  $\lambda_j(R)$ , соответствующие фиксированному набору квантовых чисел  $j = \{kq\pi\}$  и заданному  $R$ , ее вначале решают при  $R \ll 1$ , используя в качестве начального приближения для

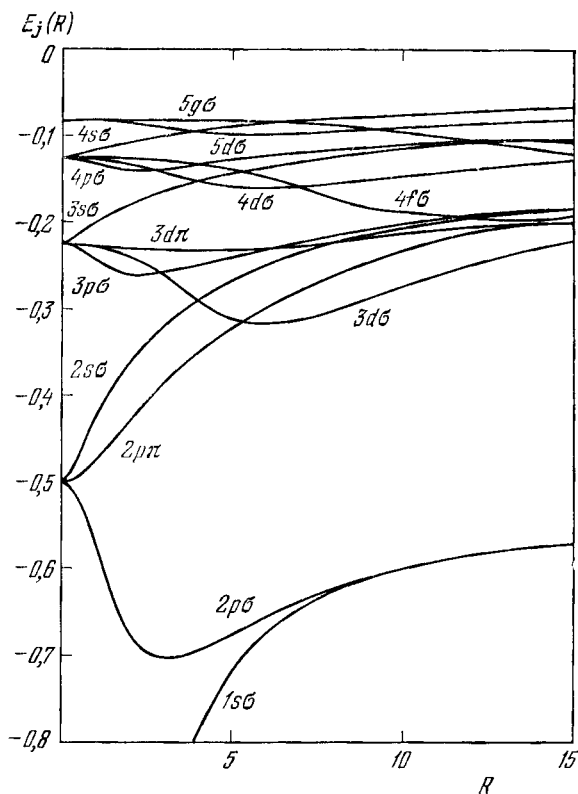


Рис. 16. Термы  $E_j(R)$  молекулярного иона водорода  $\text{H}_2^+$ .

$p_j(R)$  и  $\lambda_j(R)$  их разложения при  $R \rightarrow 0$  (см. § 5). Увеличивая затем значение  $R$  с некоторым шагом  $\Delta R$  и решая на каждом шагу систему (3.31), можно найти  $p_j(R)$  и  $\lambda_j(R)$  при произвольном  $R$ .

Радиальная и угловая части волновой функции (3.14) находятся с помощью разложений (2.28), (2.33) и (2.22), (2.22'), в которых коэффициенты  $g_s$ ,  $c_s$  и  $c'_s$  вычисляются из рекуррентных соотношений (2.3) и (2.14) со значе-

ниями  $\alpha_s, \beta_s, \gamma_s$  и  $\rho_s, \kappa_s, \delta_s$ , задаваемыми формулами (2.36) и (2.23). Вследствие накопления вычислительных погрешностей, начиная с некоторого  $s > n_1$  коэффициенты  $g_s$  начинают монотонно возрастать в противоречии

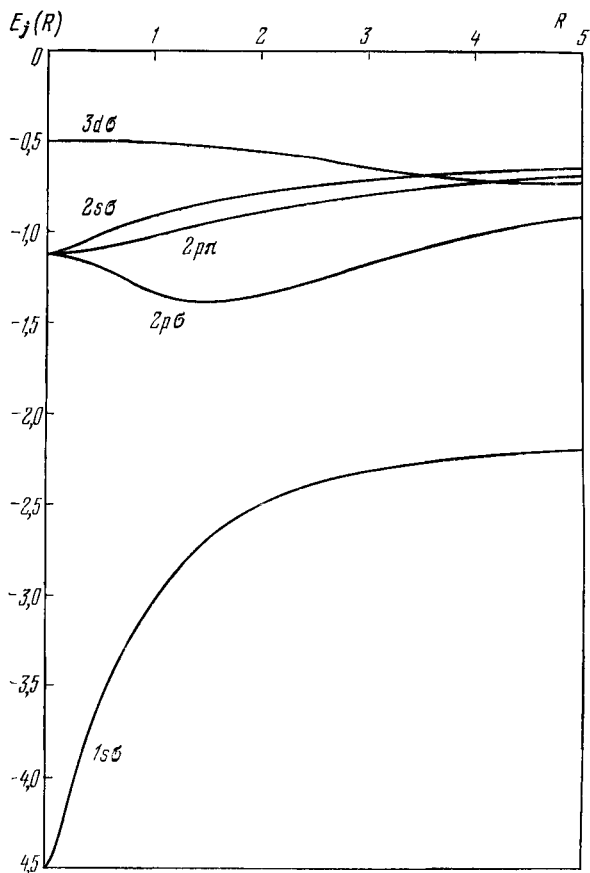


Рис. 17. Термы  $E_j(R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1=1, Z_2=2$ .

с оценкой (2.38). При суммировании ряда (2.33) такие коэффициенты следует отбрасывать.

Изложенный алгоритм решения задачи  $Z_1 e Z_2$  позволил вычислить термы  $E_{kqm}(R)$  с относительной точностью  $\sim 10^{-12}$  и найти соответствующие им волновые функции  $\Pi_{mk}(\xi; R)$  и  $\Xi_{mq}(\eta; R)$  с точностью  $\sim 10^{-10}$ . Для этого в

цепных дробях (3.31) достаточно положить  $N_1 \approx 50$  и  $N_2 \approx 100$ . Другие подробности реализации алгоритмов вычисления можно найти в работах Bates и др. (1953),

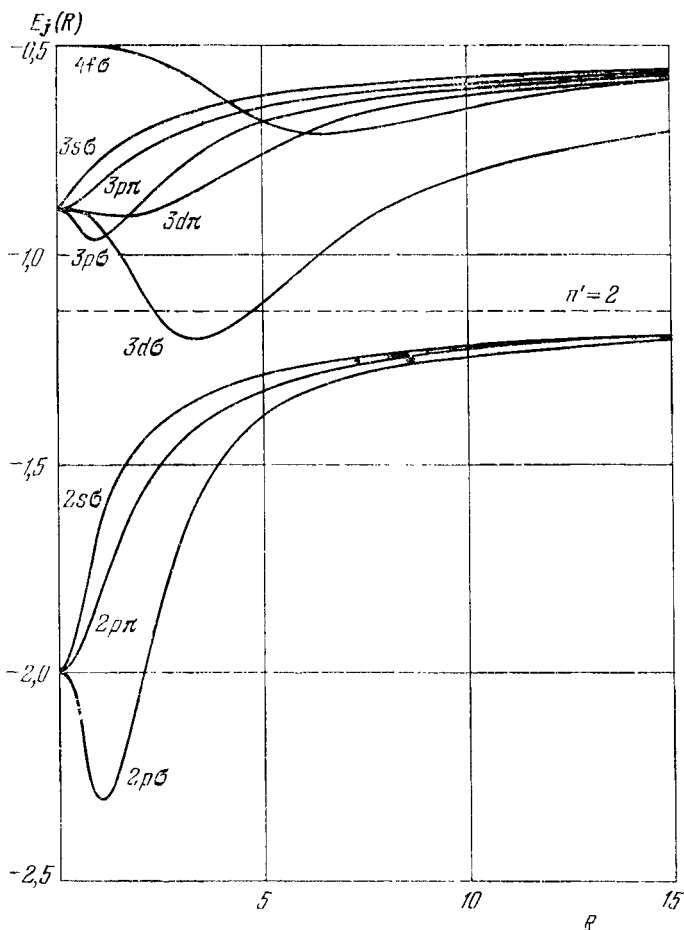


Рис. 18а. Термы  $E_j(R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1=1$ ,  $Z_2=3$ .

Реек (1965а, б), Пономарева и Пузыниной (1968, 1970), Power (1973).

В табл. 12а, 12б представлены коэффициенты  $g_s$ ,  $c_s$  и  $c'_s$  разложений (2.33), (2.22) и (2.22') для волновых функций  $\Pi_{mk}(\xi; R)$  и  $\Xi_{mq}(\eta; R)$ , соответствующих тер-



мам  $1s\sigma\{k=q=m=0\}$  и  $2p\sigma\{k=0, q=1, m=0\}$  системы  $Z_1=1, Z_2=2$  при  $R=0,1$  и  $R=5,0$ . Числа в круглых скобках обозначают степени десяти, на которые следует умножать стоящие перед ними величины. Возрастающие

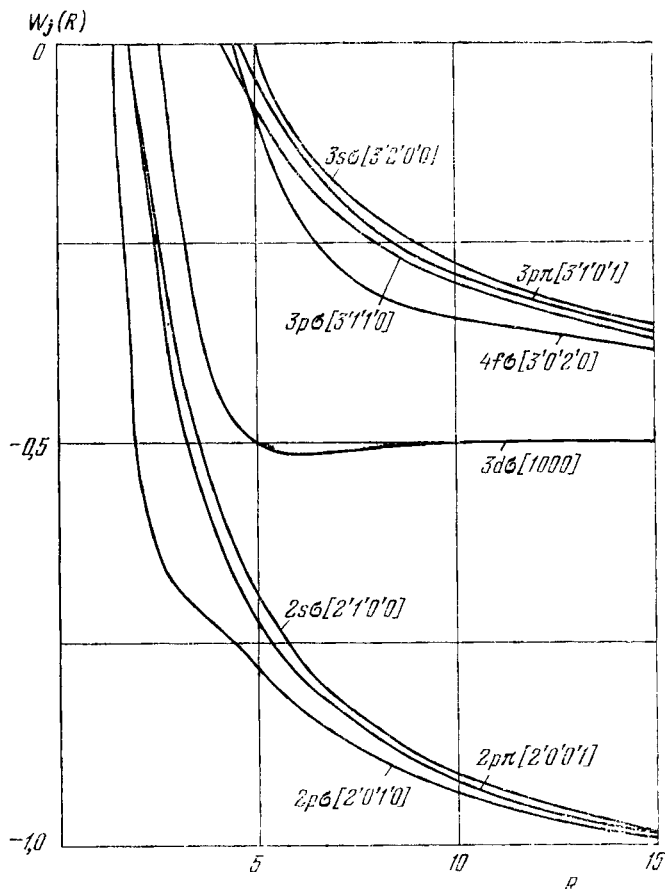


Рис. 186. Полная энергия  $W_j(R)$  системы  $Z_1eZ_2$  при  $Z_1=1, Z_2=3$ .

коэффициенты  $g_s$  при вычислении функций следует отбрасывать.

На рис. 16, 17, 18а, 19а, 20а, 21 представлены термы  $E_j(R)$  для систем  $Z_1=1, Z_2=1, 2, 3, 4, 5, -1$ , вычисленные с помощью изложенного алгоритма. При  $R \rightarrow 0$  значения  $E(R)$  совпадают с величинами (3.22).

На рис. 186, 196, 206, 22 приведены также графики полной энергии  $W_j(R)$  систем  $Z_1 e Z_2$ , включающей энергию отталкивания зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$  при  $Z_1=1$ ,  $Z_2=3, 4, 5, 7$ ,

$$W_j(R) = E_j(R) + \frac{Z_1 Z_2}{R}. \quad (2.32)$$

Параболические квантовые числа  $eZ_1$ - и  $eZ_2$ -термов приведены справа в квадратных скобках. Значения термов  $W_j(R)$  при  $R \rightarrow \infty$  стремятся к величинам (3.27) и (3.27').

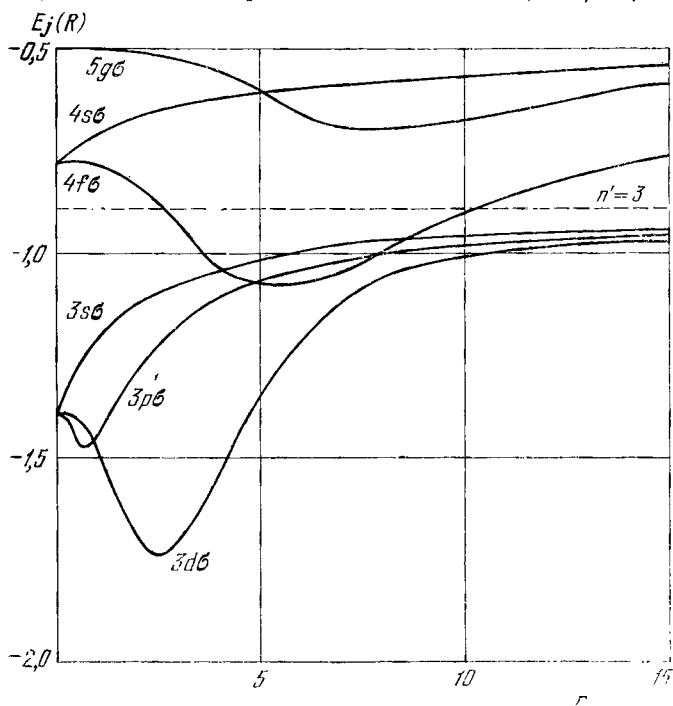


Рис. 19а. Термы  $E_j(R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1=1$ ,  $Z_2=4$ .

особенности дискретного спектра. Дискретный спектр

**5. Пересечения и квазипересечения термов и другие задачи двух центров** может содержать как конечное, так и бесконечное число состояний — в зависимости от характера убывания потенциальной энергии при  $R \rightarrow \infty$ , который в свою очередь зависит от суммарного заряда  $Z_1 + Z_2$ . В системе  $Z_1 e Z_2$  с положительным зарядом

$Z_1 + Z_2 > 0$  число состояний дискретного спектра бесконечно, причем вблизи границы непрерывного спектра  $E=0$  имеет место характерное кулоновское сгущение уровней (3.22). При  $Z_1 + Z_2 < 0$ , но  $Z_1 > 0$  либо  $Z_2 > 0$  дискретный спектр существует только при достаточно больших  $R$ , а число уровней конечно. В случае  $Z_1 + Z_2 = 0$  состояния дискретного спектра существуют лишь при значениях  $R > 0,639/Z_1$  и число их бесконечно; уровни

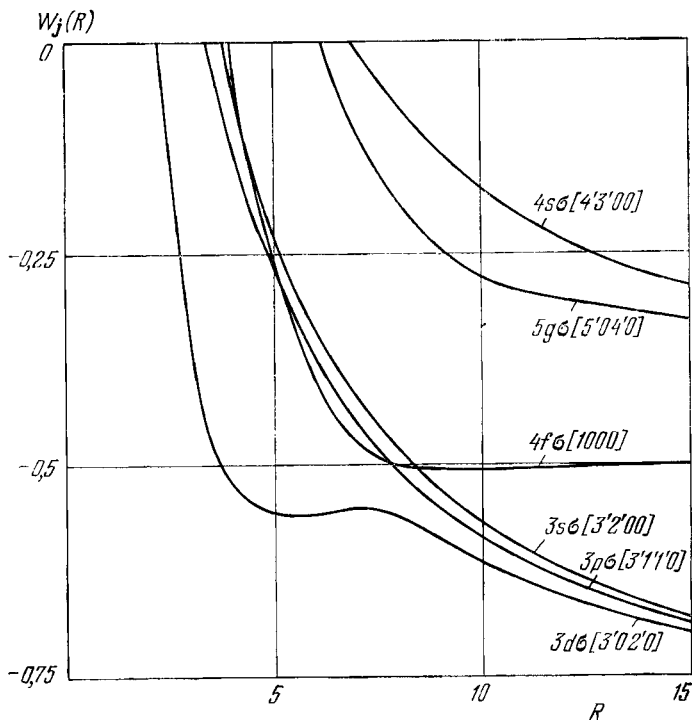


Рис. 196. Полная энергия  $W_j(R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1=1, Z_2=4$ .

этой системы экспоненциально сгущаются к границе континуума (см. § 7).

В отличие от собственных значений  $\lambda_{mk}^{(s)}(p, a)$  и  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, b)$  одномерных краевых задач Штурма — Лиувилля (1.28a) и (1.14a), которые являются монотонными функциями параметра  $p$ , термы  $E_j(R)$  трехмерной задачи (3.1) — немонотонные функции  $R$ .

Термы с различными наборами  $j = \{kqm\}$  и  $j' = \{k'q'm'\}$  могут пересекаться между собой при некоторых конечных  $R$ . Для этого необходимо, чтобы различались одновременно по крайней мере два квантовых числа из наборов  $j$  и  $j'$ , например  $k \neq k'$  и  $q \neq q'$ . Термы,

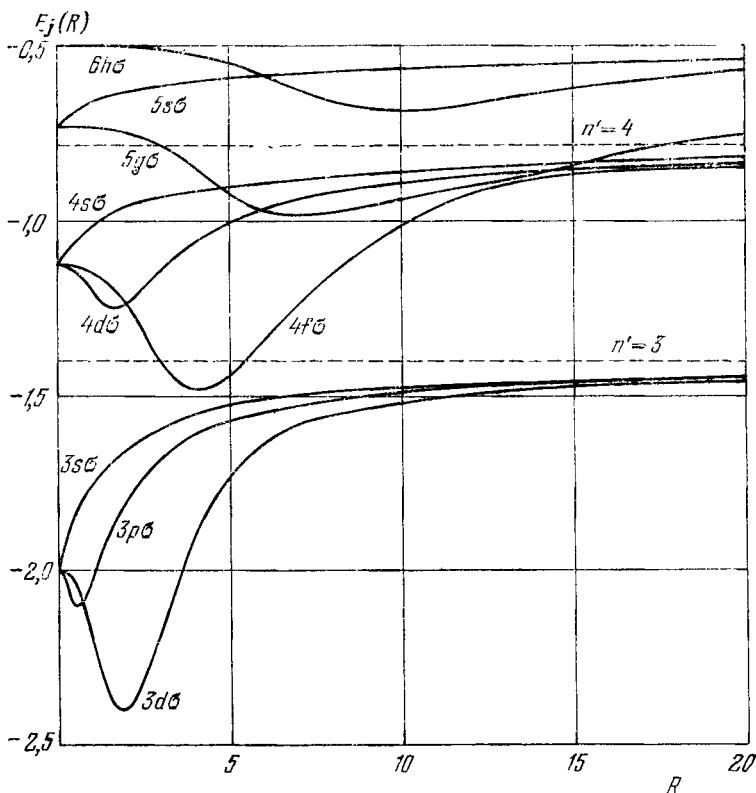


Рис. 20а. Термы  $E_j(R)$  системы  $Z_1eZ_2$  при  $Z_1=1, Z_2=5$ .

различающиеся только одним квантовым числом, пересекаться не могут. В самом деле, предположим обратное и допустим, что термы  $E_j(R)$  и  $E_{j'}(R)$  пересекаются при некотором значении  $R=R_0$ , причем  $m=m', k=k'$ , но  $q \neq q'$ . Тогда собственные значения радиального уравнения равны между собой

$$\lambda_{mk}^{(\epsilon)}(p_{kqm}(R_0), R_0(Z_2 + Z_1)) = \lambda_{m'k}^{(\epsilon)}(p_{kq'm}(R_0), R_0(Z_2 + Z_1)),$$

поскольку по условию  $p_{kqm}(R_0) = p_{k'q'm}(R_0)$ . Из уравнения (3.36), определяющего значение термов  $E_j(R_0)$  в точке  $R_0$ , следует также равенство собственных значений углового уравнения

$$\lambda_{mq}^{(n)}(p_{kqm}(R_0), R_0(Z_2 - Z_1)) = \lambda_{mq'}^{(n)}(p_{kq'm}(R_0), R_0(Z_2 - Z_1)),$$

и поскольку при  $q \neq q'$  такое равенство невозможно, то

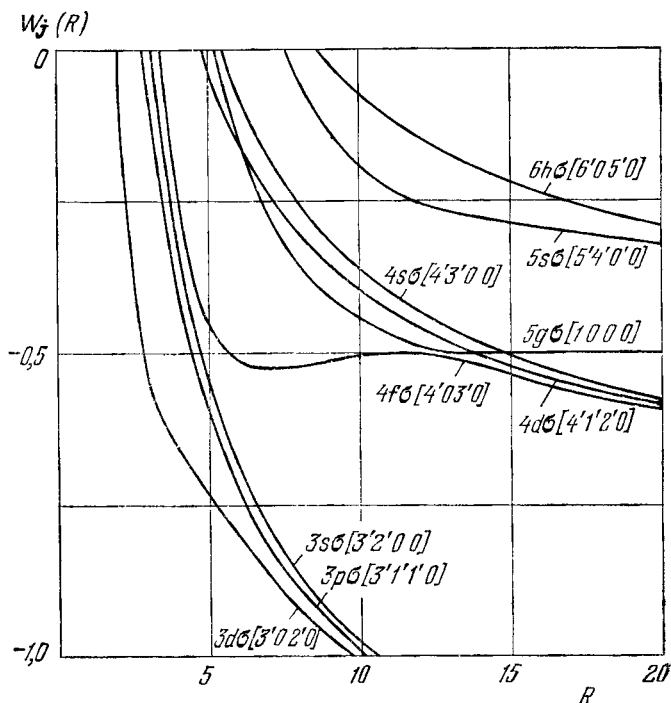


Рис. 206. Полная энергия  $W_j(R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1=1$ ,  $Z_2=5$ .

неверно и исходное предположение о возможности равенства  $E_j(R_0) = E_{j'}(R_0)$  при  $m=m'$ ,  $k=k'$ , но  $q \neq q'$ .

Долгое время факт пересечения термов в задаче  $Z_1 e Z_2$  привлекал внимание в связи с теоремой Неймана — Вигнера, одна из формулировок которой состоит в следующем: термы одинаковой симметрии квантовой системы, зависящие от непрерывного параметра, могут пересекаться только в том случае, если система обладает

дополнительной симметрией по сравнению с геометрической. Такая дополнительная симметрия в задаче  $Z_1 e Z_2$  имеется, поскольку с оператором гамильтона  $H$  системы коммутируют не только оператор  $\hat{L}_z$  поворота вокруг оси  $z$  и оператор инверсии  $\hat{I}$  (при  $Z_1=Z_2$ ), но также оператор константы разделения  $\hat{\Lambda}$  (см. п. 1 § 8). (Возможность разделения переменных в задаче  $Z_1 e Z_2$  в вытянутых сфероидальных координатах обусловлена существованием этого набора попарно коммутирующих

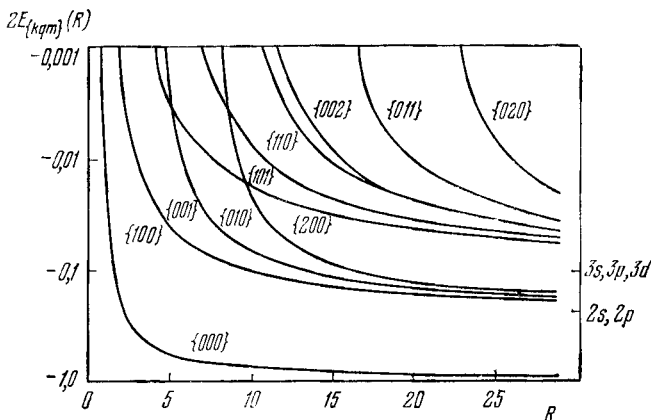


Рис. 21. Термы  $E_j(R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1=-1$ ,  $Z_2=1$ .

операторов, см. § 8). Поэтому в системе  $Z_1 e Z_2$  термы с одинаковыми значениями  $m$  и  $l$  могут пересекаться между собой (рис. 16, где  $3d\sigma_g$ - и  $2s\sigma_g$ -термы  $H_2^+$  пересекаются в точке  $R_0 \approx 3,3$ ). Напомним, что пересекающиеся термы должны отличаться по крайней мере двумя квантовыми числами из трех.

Кроме пересечений термов, в системе  $Z_1 e Z_2$  возможны квазипересечения термов  $E_j(R)$ . Характерным их признаком является одновременное сближение термов  $E_j(R)$  и констант разделения  $\lambda_j(R)$ , соответствующих двум наборам квантовых чисел  $j$  и  $j'$ , в некоторой малой окрестности  $R \approx R_0 \gg 1$  (рис. 20б и 23, где изображены термы и константы разделения системы  $Z_1=1$ ,  $Z_2=5$ . Квазипересекаются термы  $5g\sigma$  и  $4f\sigma$  при  $R \approx 13$ ).

В отличие от пересечения термов, которое возможно лишь в том случае, когда по крайней мере два кванто-

вых числа из наборов  $j$  и  $j'$  отличны между собой (например,  $n_1 \neq n_1', q \neq q'$ ), квазипересечения существуют только для термов, у которых лишь угловые квантовые

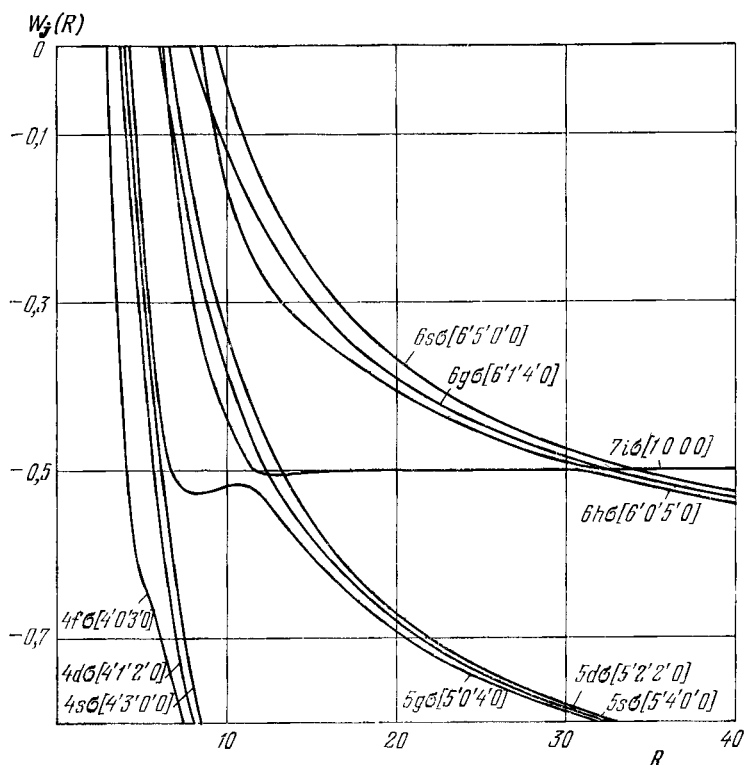


Рис. 22. Полная энергия  $W_j(R)$  системы  $Z_1eZ_2$  при  $Z_1=1, Z_2=7$ .

числа из наборов  $j$  и  $j'$  различаются на единицу, т. е. необходимо выполнение условий

$$n_1 = n_1' = k, \quad q = q' + 1, \quad m = m'. \quad (3.33)$$

Волновые функции  $\Phi_j(r; R)$  и  $\Phi_{j'}(r; R)$ , соответствующие термам  $E_j(R)$  и  $E_{j'}(R)$ , в окрестности квазипересечения  $R \approx R_0$  различаются между собой примерно так же, как симметричное и антисимметричное решения, соответствующие одному и тому же значению энергии в системе  $Z_1eZ_2$  при  $Z_1=Z_2=1$ . На рис. 24 и 25, где изображены волновые функции системы  $Z_1=1, Z_2=5$ ,

в точке квазипересечения  $R_0 \approx 13$ . Отмеченная аналогия не случайна, поскольку и расщепление термов в точках квазипересечения, и расщепление симметричного и антисимметричного термов системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1 = Z_2 = 1$

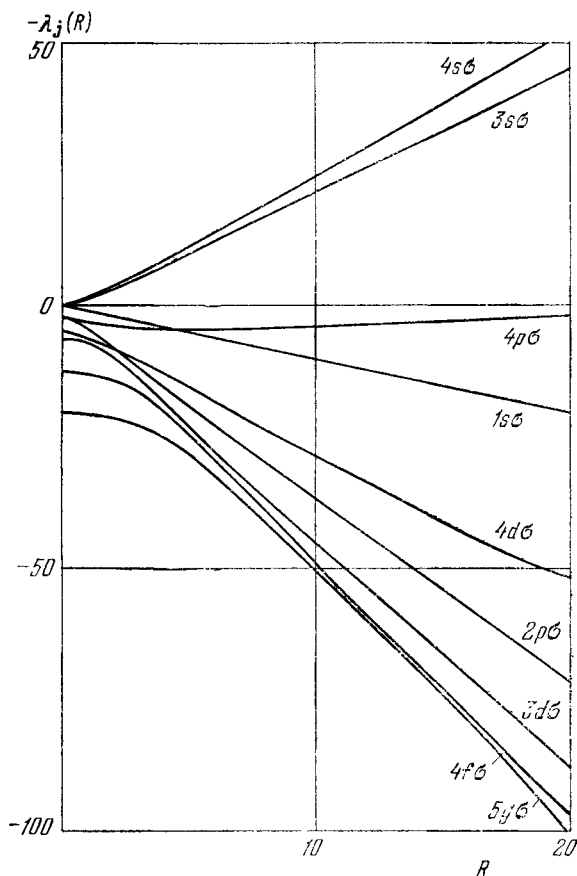


Рис. 23. Константы разделения  $-\lambda_j(R)$  для различных состояний системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1 = 1$ ,  $Z_2 = 5$  как функции межцентрового расстояния  $R$ .

определяются обменными квантовомеханическими эффектами при совпадении энергий в двух потенциальных ямах, разделенных барьером.

В асимптотической области  $R \gg 1$  волновые функции  $\Phi_j(r; R)$  и  $\Phi_{j'}(r; R)$ , соответствующие  $eZ_1$ - и  $eZ_2$ -термам,



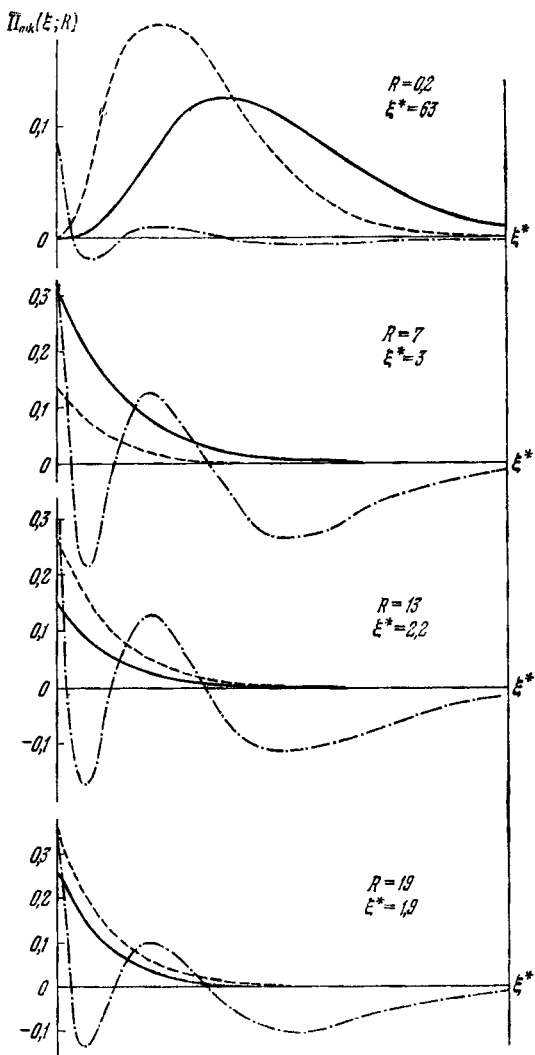


Рис. 24. Радиальные волновые функции  $\Pi_{mk}(\xi; R)$  системы  $Z_1eZ_2$  при  $Z_1=1$ ,  $Z_2=5$  при различных межцентровых расстояниях  $R$  для термов  $5g\sigma$  ( $j=\{040\}$ ), сплошная кривая,  $eZ_1$ -терм),  $4f\sigma$  ( $j=\{03'0\}$ ), пунктир,  $eZ_2$ -терм) и  $4s\sigma$  ( $j=\{3'00\}$ ), штрих-пунктир,  $eZ_2$ -терм). Функции не нормированы, масштаб по оси абсцисс различен и определяется граничной точкой  $\xi^*=1+10/p$ .

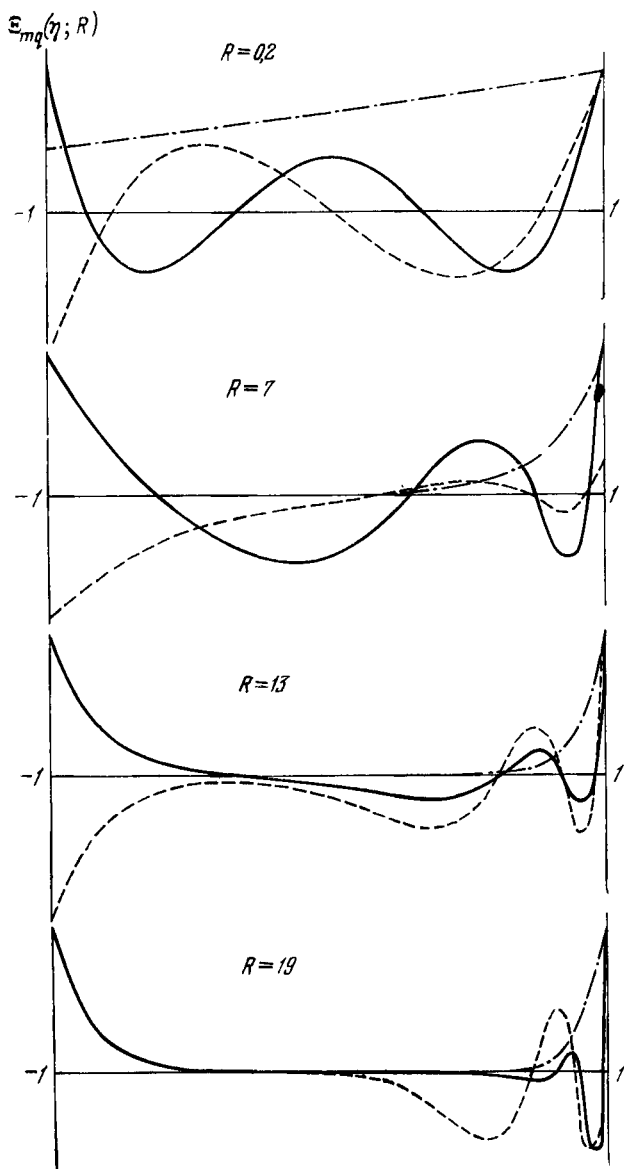


Рис. 25. Угловые функции  $\Xi_{mq}(\eta; R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1=1, Z_2=5$  (обозначения см. на рис. 24). Функции нормированы условием  $\Xi_{mq}(1; R) \equiv 1$ .

сосредоточены у каждого из центров  $Z_1$  и  $Z_2$ , а для термов  $E_j(R)$  и  $E_{j'}(R)$  справедливы асимптотические разложения по степеням  $1/R$  (см. § 4). Характерной особенностью квазипересечений является тот факт, что по обе стороны от точки квазипересечения  $R \approx R_0$  ветви кривых, принадлежащих различным термам (например,  $4f\sigma$  и  $5g\sigma$  на рис. 20б), представляются одной и той же

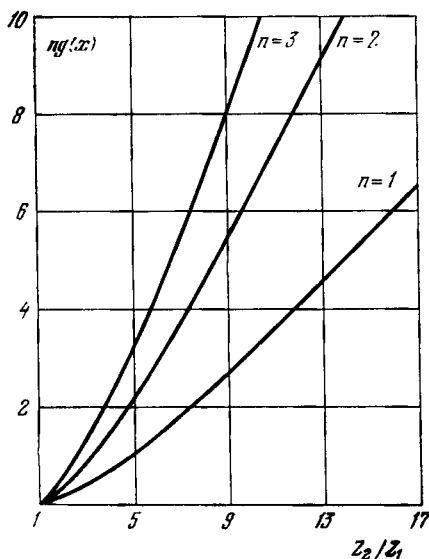


Рис. 26. Графики функций  $ng(x)$ , определенных формулами (3.34), при различных значениях  $n$ ,  $x = (Z_2/Z_1)^{1/2}$ .

асимптотической формулой (если не учитывать экспоненциально малых поправок). Волновая функция  $\Phi_j(r; R)$   $eZ_1$ -терма, которая при  $R > R_0$  сосредоточена в окрестности заряда  $Z_1$  при  $\eta \approx -1$  (терм  $5g\sigma$  на рис. 20б), при уменьшении  $R$ , в области  $R < R_0$ , сохраняет число нулей неизменным (т. е. по-прежнему соответствует  $eZ_1$ -терму), однако сосредоточена вблизи заряда  $Z_2$  при  $\eta \approx 1$ , что характерно для волновых функций  $eZ_2$ -термов. В области  $R \approx R_0$  волновые функции квазипересекающихся термов делокализованы и имеют одинаковый порядок величины вблизи каждого из зарядов  $Z_1$  и  $Z_2$  (рис. 25,  $R=13$ ).

В связи с тем, что понятие квазипересечения не удастся определить достаточно строго (см. § 4), их число в системе  $Z_1 e Z_2$  можно оценить только приближенно. В частности, для  $e Z_1$ -терма с квантовыми числами  $n, n_1$

число  $r_0$  квазипересечений с  $e Z_2$ -термами оценивается по формуле (Пононарев, 1968)

$$r_0 = \text{Ent}[ng(x)], \quad (3.34)$$

$$g(x) = (x-1)(x+1 - \sqrt{1+2x}), \quad x = (Z_2/Z_1)^{1/2}.$$

Из рис. 26, на котором изображены функции  $ng(x)$  при различных  $n$ , следует, что для терма  $n=1$  первое квазипересечение ( $r_0=1$ ) возможно только при  $Z_2/Z_1=5$ .

Аналитические формулы, определяющие положение точек квазипересечения  $R_0$ , значения энергии термов  $E_0 \approx E_f(R_0)$  и величину расщепления  $\delta E = E_f(R_0) - E_f(R_0)$  в этих точках, а также волновые функции системы  $Z_1 e Z_2$ , приведены в § 4.

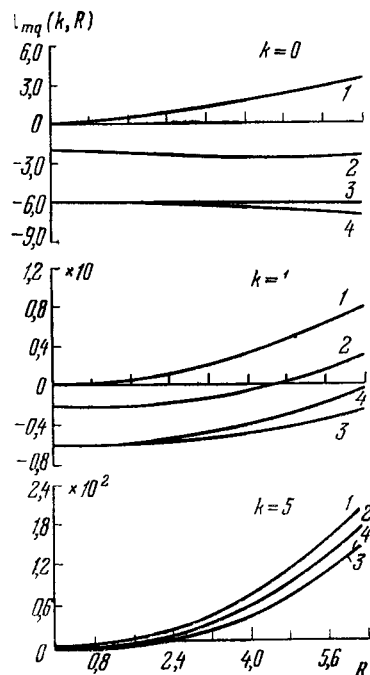


Рис. 27. Константы разделения  $-\lambda_{mq}(k, R) = -\lambda_{mq}(\eta)(c, b)$  в угловом уравнении для волновых функций непрерывного спектра задачи  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_2 - Z_1 = 1$  для различных наборов  $m, q$  и значений  $k$ .

**6. Непрерывный спектр \*).** При  $E > 0$  решения уравнения Шредингера (3.1) представляются через кулоновские сфероидальные функции  $s$ -типа по формуле (3.7)

$$\Phi_c(\mathbf{r}; R) = N_c(k, R) \Pi_{mq}(\xi; k, R) \Xi_{mq}(\eta; k, R) \frac{e^{\pm im\phi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad (3.35)$$

\*) Авторы благодарны Л. Н. Сомову, выполнившему расчеты к п. 6.

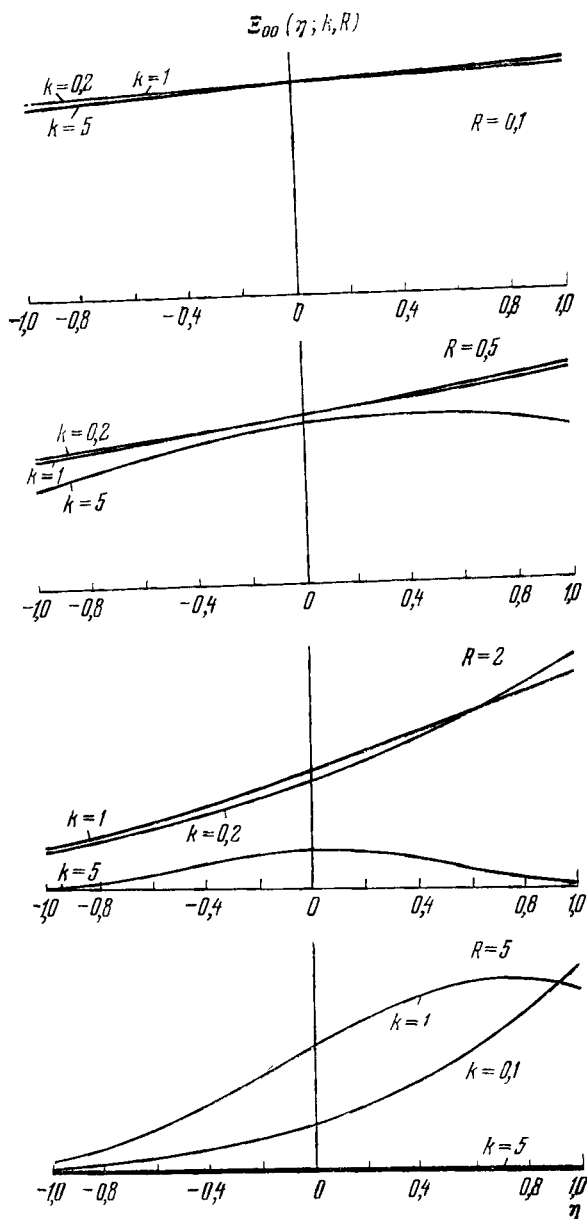


Рис. 28. Угловая функция  $\Xi_{00}(\eta; k, R)$  непрерывного спектра задачи двух центров для различных значений  $k$ .

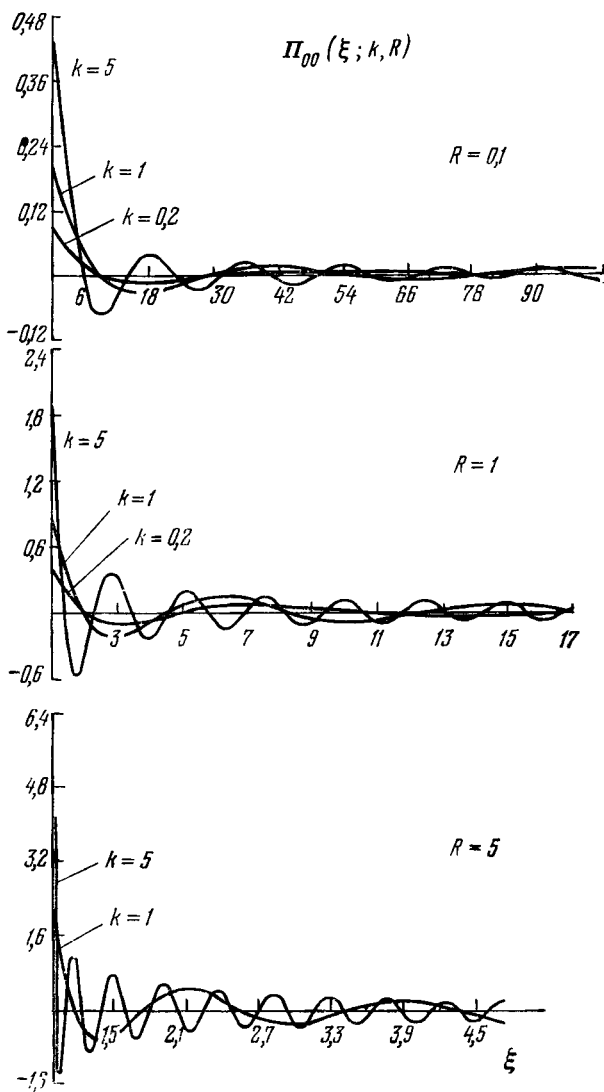


Рис. 29. Радиальные функции  $\Pi_{00}(\xi; k, R)$  непрерывного спектра задачи двух центров, нормированные условием (3.37); масштаб по оси абсцисс различен для разных  $R$ .

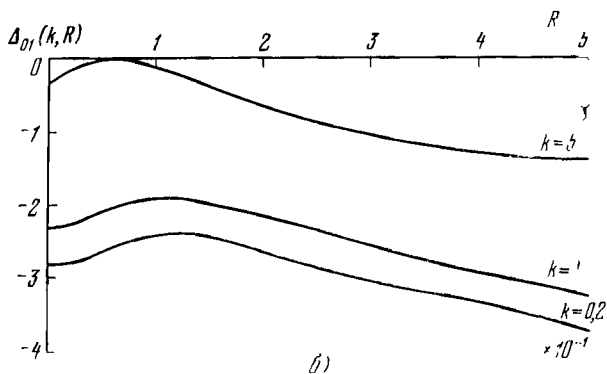
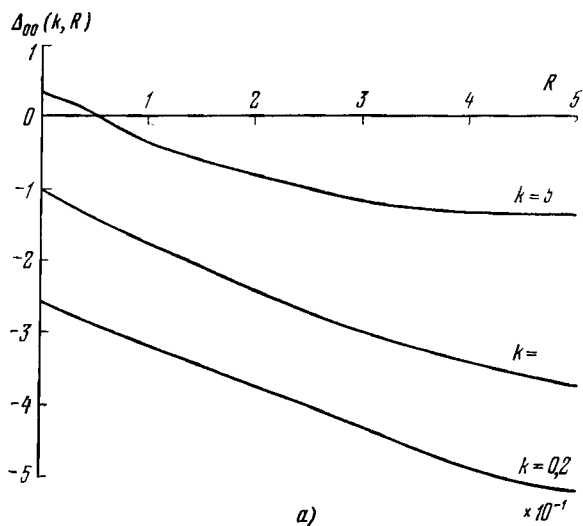


Рис. 30. Фазы рассеяния  $\Delta_{0q}(k, R)$  на двух кулоновских центрах с зарядами  $Z_1=1$ ,  $Z_2=2$  как функции  $R$  для фиксированных  $k$ . При  $k=0,2$  значения фаз уменьшены в 10 раз. а)  $q=0$ , б)  $q=1$ ;

$$\Delta_{mq}(k, 0) = \arg \Gamma \left( q + m + 1 - i \frac{Z_1 + Z_2}{k} \right), \text{ см. (1.46).}$$

Результаты вычислений состояний молекулярного иона водорода  $H_2^+$ 

Источник	Состояния	Значения аргумента $R_H (\Delta R)_k$	Число верных знаков	Примечания
Bates и др. (1953)	$1s\sigma, 2p\sigma$ $2s\sigma, 3s\sigma, 3p\sigma, 4p\sigma$ $3d\sigma, 4f\sigma, 2p\pi, 3d\pi$	$0(0,2)5(0,5)9$ $0(0,2)5(0,5)10$	5 5	Приведены также константы разделения $\lambda$ и коэффициенты разложения $g, n, c$ , волновых функций
Wallis and Hulbert (1954)	$1s\sigma, 2s\sigma, 3s\sigma$ $2p\sigma, 3p\sigma, 3d\sigma$ $4p\sigma, 4d\sigma, 4f\sigma$ $2p\pi, 3p\pi, 3d\pi$	$0(5)15(10)45$	8	Приведены также константы разделения $\lambda$
Wind (1965)	$1s\sigma$	$0(0,05)20$	7	
Peek (1965a) Peek (1965b)	$1s\sigma, 2p\sigma$	$0,10(0,01)1(0,05)30$ $1(0,5)30$	13 13	Приведены также константы разделения $\lambda$



Bates and Reid (1968)	70 состояний с $n \leq 5$ $l \leq 9$ $m \leq 4$ $n_1 \leq 4$ $N \leq 10$	0 (0,25n) 3n (0,5n) 7n (1n) 10n (2n) 20n (4n) 52n	6	Приведены величины $F = -En^2$ как функции $s = R/n$
Teller and Sahlin (1970)	1 sσ, 2 sσ, 3 sσ 2 pσ, 3 pσ, 3 dσ 4 pσ, 4 fσ, 2 pπ, 3 dπ	0 (0,25) 2,5 (0,5) 10 (2) 14	6	Приведены $E_f(R)$ , $\lambda$ , $\partial E_f(R)/\partial R$ , $N_f(R)$ , $g$ , и $c_s$
Madsen and Peek (1971)	$\left. \begin{array}{l} 1 s\sigma, 2 p\sigma_u \end{array} \right\} n=1$ $\left. \begin{array}{l} 2 s\sigma_g, 3 p\sigma_u \\ 3 d\sigma_g, 4 f\sigma_u \\ 2 p\pi_u, 3 d\pi_g \end{array} \right\} n=2$ $\left. \begin{array}{l} 3 s\sigma_g, 4 p\sigma_u \\ 4 d\sigma_g, 5 f\sigma_u \\ 5 g\sigma_g, 6 h\sigma_u \\ 3 p\pi_u, 4 d\pi_g \\ 4 f\pi_u, 5 g\pi_g \\ 3 d\delta_g, 4 f\delta_u \end{array} \right\} n=3$	1 (0,5) 90  1 (0,5) 90 (1) 150	13  13	Приведены также кон- станты разделения $\lambda$

где

$$\begin{aligned} \Pi_{mq}(\xi; k, R) &= \Pi_m(c, a, \lambda_{mq}^{(\eta)}(c, b); \xi), \\ \Xi_{mq}(\eta; k, R) &= \Xi_{mq}(c, b; \eta), \end{aligned} \quad (3.36)$$

$$c = kR/2, \quad a = R(Z_2 + Z_1), \quad b = R(Z_2 - Z_1),$$

$$\lambda_{mq}(k, R) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(c, b). \quad (3.36a)$$

Собственные значения  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(c, b)$  и угловые функции  $\Xi_{mq}(\eta; k, R)$  такой системы совпадают с угловой частью волновых функций непрерывного спектра водородоподобного атома с зарядом  $Z_2 - Z_1$  в сферических координатах.

Собственные значения  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(c, b)$  вычисляются из равенства нулю цепной дроби (2.19) с коэффициентами  $\rho_s, \kappa_s, \delta_s$  (2.15), в которых произведена замена  $p \rightarrow ic$ . Волновые функции (3.36) находятся затем непосредственным интегрированием уравнений (1.146) и (1.36).

На рис. 27 и 28 представлены константы разделения  $\lambda_{mq}(k, R)$  и угловые функции  $\Xi_{mq}(\eta; k, R)$  задачи  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1 = 1, Z_2 = 2$ .

Радиальные функции  $\Pi_{mq}(\xi; k, R)$ , изображенные на рис. 29, нормированы асимптотическим равенством

$$\begin{aligned} \Pi_{mq}(\xi; k, R) &= \frac{1}{c\xi} \cos\left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{q+m+1}{2} \pi + \right. \\ &\quad \left. + \Delta_{mq}(k, R)\right) + O\left(\frac{1}{\xi^2}\right). \end{aligned} \quad (3.77)$$

При такой нормировке у. к. с. ф. и р. к. с. ф. трехмерная волновая функция (3.7) нормирована условием (3.10), если положить

$$N_c(k, R) = k \sqrt{\frac{2}{\pi}}. \quad (3.38)$$

На рис. 30 а, б изображены фазы  $\Delta_{mq}(k, R)$ , которые необходимы для вычисления сечения рассеяния на двух кулоновских центрах (см. § 1 гл. II и § 3 гл. III).

**7. Сведения о таблицах.** В настоящее время накоплен большой опыт численных расчетов термов  $E_j(R)$  и волновых функций  $\Phi_j(r; R)$  задачи двух центров. Практическая реализация изложенных алгоритмов на ЭВМ для расчетов состояний молекулярного иона водорода

$H_2^+$  началась с работы Bates и др. (1953); наиболее полные результаты получили Madsen, Peek (1971).

В табл. 13 систематизированы результаты, достигнутые к настоящему времени.

Задачу  $Z_1eZ_2$  при  $Z_1 \neq Z_2$  впервые рассмотрели Bates and Carson (1956), которые вычислили пять низших состояний системы  $HeH^{++}$  ( $Z_1=1, Z_2=2$ ) в интервале значений  $R=0(0,25)1(0,5)5$ . В работах Пономарева и Пузыниной (1966, 1970) этот алгоритм усовершенствован и вычислены термы систем  $Z_1eZ_2$  при  $Z_1=1, Z_2=3, 4, 5, 6, 7, 8$  (Пономарев и Пузынина, 1967а, б). В настоящее время создано несколько программ для вычисления термов и волновых функций задачи  $Z_1eZ_2$  при произвольных  $Z_1$  и  $Z_2$ , в частности Helfrich und Hartmann (1970), Power (1973), Aubert и др. (1974 а, б).

Десять низших термов конечного диполя ( $Z_1=1, Z_2=-1$ ) вычислено в работе Wallis и др. (1960).

Алгоритмы для вычисления собственных значений и волновых функций непрерывного спектра задачи  $Z_1eZ_2$  развиты в работах (Shimizu, 1961, Пономарев и Сомов, 1975).

#### § 4. Асимптотические разложения решений задачи двух кулоновских центров при $R \rightarrow \infty$

1. Асимптотические разложения  $\Xi_{mq}(p, 2p\beta; \eta)$  и  $\Pi_{mk}(p, 2p\alpha; \xi)$  и соответствующих им собственных значений  $\lambda$  при  $p \rightarrow \infty$ . При неограниченном возрастании межцентрового расстояния  $R$  и фиксированных номерах собственных значений  $k, q, m$  к бесконечности стремятся параметры  $p, a$  и  $p, b$

$$p = (-2E)^{1/2} R/2 \rightarrow \infty, \quad (4.1)$$

$$a = (Z_2 + Z_1)R \rightarrow \infty, \quad b = (Z_2 - Z_1)R \rightarrow \pm \infty.$$

Введем обозначения

$$\alpha = \frac{a}{2p} = \frac{Z_2 + Z_1}{\sqrt{-2E}}, \quad \beta = \frac{b}{2p} = \frac{Z_2 - Z_1}{\sqrt{-2E}} \quad (4.2)$$

и будем считать  $\alpha$  и  $\beta$  величинами порядка единицы. Для построения асимптотических разложений решений задачи  $Z_1eZ_2$  по большому параметру  $R$  необходимы следующие асимптотические разложения р. к. с. ф. и у. к. с. ф. по большому параметру  $p$

$$\Pi_{mk}(p, 2p\alpha; \xi), \quad p \rightarrow \infty, \quad m = O(1), \quad k = O(1), \quad \alpha = O(1), \quad (4.3)$$

$$\Xi_{mq}(p, 2p\beta; \eta), \quad p \rightarrow \infty, \quad m = O(1), \quad q = O(1), \quad \beta = O(1). \quad (4.4)$$

С помощью преобразований

$$U(\xi) = (\xi^2 - 1)^{1/2} \bar{\Pi}_{m_k}(p, 2p\alpha; \xi), \quad (4.5)$$

$$V(\eta) = (1 - \eta^2)^{1/2} \bar{\Xi}_{m_q}(p, 2p\beta; \eta) \quad (4.6)$$

уравнения для р. к. с. ф. и у. к. с. ф. (1.28), (1.14) приводятся к нормальному виду — отправной точке построения асимптотических разложений

$$U''(\xi) + \left[ -p^2 + \frac{2p(\alpha\xi - \nu)}{\xi^2 - 1} + \frac{1 - m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right] U(\xi) = 0, \quad (4.7)$$

$$V''(\eta) + \left[ -p^2 + \frac{2p(\beta\eta + \nu)}{1 - \eta^2} + \frac{1 - m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right] V(\eta) = 0. \quad (4.8)$$

Здесь введено обозначение

$$\nu = \lambda/(2p). \quad (4.9)$$

Простое вычисление по теории возмущений показывает, что при выполнении условий, указанных в (4.3), (4.4), справедлива оценка  $\nu = O(1)$ .

На границах интервалов определения функции  $U(\xi)$ ,  $V(\eta)$  обращаются в нуль

$$U(\xi)|_{\xi=1} = 0, \quad U(\xi) \xrightarrow[\xi \rightarrow \infty]{} 0, \quad (4.10)$$

$$V(\eta)|_{\eta=\pm 1} = 0. \quad (4.11)$$

Нормировка функций  $U(\xi)$  и  $V(\eta)$  следует из нормировки р. к. с. ф. и у. к. с. ф.

$$\int_1^{\infty} (\xi^2 - 1)^{-1} U^2(\xi) d\xi = 1, \quad (4.12)$$

$$\int_{-1}^1 (1 - \eta^2)^{-1} V^2(\eta) d\eta = 1. \quad (4.13)$$

Асимптотические разложения  $U(\xi)$  и  $V(\eta)$  при  $p \rightarrow \infty$  можно строить обоими способами, указанными в предварительных замечаниях § 5 гл. I. При вычислениях по теории возмущений уравнения (4.7), (4.8) удобно рассматривать как одномерные уравнения Шредингера с энергией  $-p^2$  и потенциалами  $u(\xi)$  и  $v(\eta)$

соответственно

$$u(\xi) = -\frac{2p(\alpha\xi - \nu)}{\xi^2 - 1} - \frac{1 - m^2}{(\xi^2 - 1)^2}, \quad (4.14)$$

$$v(\eta) = -\frac{2p(\beta\eta + \nu)}{1 - \eta^2} - \frac{1 - m^2}{(1 - \eta^2)^2}. \quad (4.15)$$

Разложим потенциалы  $u(\xi)$ ,  $v(\eta)$  на простейшие дроби:

$$\begin{aligned} u(\xi) &= \left[ -p(\alpha + \nu) + \frac{m^2 - 1}{4} \right] \frac{1}{\xi + 1} + \frac{m^2 - 1}{4} \frac{1}{(\xi + 1)^2} + \\ &+ \left[ -p(\alpha - \nu) + \frac{m^2 - 1}{4} \right] \frac{1}{\xi - 1} + \frac{m^2 - 1}{4} \frac{1}{(\xi - 1)^2} = \\ &= u_-(\xi) + u_+(\xi), \quad (4.16) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} v(\eta) &= \left[ p(\beta - \nu) + \frac{m^2 - 1}{4} \right] \frac{1}{1 + \eta} + \frac{m^2 - 1}{4} \frac{1}{(1 + \eta)^2} + \\ &+ \left[ -p(\beta + \nu) + \frac{m^2 - 1}{4} \right] \frac{1}{1 - \eta} + \frac{m^2 - 1}{4} \frac{1}{(1 - \eta)^2} = \\ &= v_-(\eta) + v_+(\eta). \quad (4.17) \end{aligned}$$

В каждом из потенциалов  $u(\xi)$  и  $v(\eta)$  выделены слабые  $u_+(\xi)$ ,  $u_-(\xi)$ ,  $v_+(\eta)$ ,  $v_-(\eta)$ , имеющие в точках  $\xi, \eta = \pm 1$  полюсные особенности первого и второго порядков. Коэффициенты при особенностях второго порядка (центробежных) одинаковы и определяются азимутальным квантовым числом  $m$ . Коэффициенты при особенностях первого порядка (кулоновских), т. е. вычеты потенциалов  $u(\xi)$ ,  $v(\eta)$  в точках  $\pm 1$ , зависят от всех параметров р. к. с. ф. в случае (4.16) и у. к. с. ф. в случае (4.17).

В качестве потенциала невозмущенной задачи в радиальном уравнении берется  $u_+(\xi)$ . В угловом уравнении в качестве потенциала невозмущенной задачи нужно брать либо  $v_-(\eta)$ , либо  $v_+(\eta)$ . Детальные расчеты этим методом в литературе отсутствуют.

Для построения асимптотических разложений  $U(\xi)$  и  $V(\eta)$  здесь используется метод эталонного уравнения (§ 5 гл. I).

Рассмотрим угловое уравнение (4.8). При  $p \rightarrow \infty$  оно имеет следующие точки перехода: полюсы потенциала  $v(\eta)$  при  $\eta = \pm 1$  (4.15) и близкие к ним точки

поворота

$$\eta_- = -1 + \frac{1}{\rho}(-\beta + \nu), \quad \eta_+ = 1 - \frac{1}{\rho}(\beta + \nu). \quad (4.18)$$

Эталонным уравнением вблизи каждого полюса является уравнение для функций Уиттекера с измененным масштабом (5.66) гл. I. Решение строится в двух перебивающихся интервалах изменения  $\eta$

$$\mathcal{D}_- = [-1, \eta_1], \quad \mathcal{D}_+ = [\eta_2, 1], \quad \eta_2 < \eta_1. \quad (4.19)$$

Около левого полюса  $\eta \in \mathcal{D}_-$  решение уравнения (4.8) представляется в виде

$$V_-(\eta) = C[z'_-(\eta)]^{-1/2} M_{\chi, m/2}(2\rho z_-(\eta)), \quad (4.20)$$

где  $C = \text{const}$ , а  $M_{\chi, m/2}(2\rho z)$  — регулярная в нуле функция Уиттекера (см. (5.67) гл. I); индекс  $\chi$  остается пока неопределенным. Функция  $M_{\chi, m/2}(2\rho z)$ , согласно (5.67) гл. I, обращается в нуль при  $z=0$ ,  $m > -1/2$ . Поскольку по определению  $m \geq 0$ , для выполнения граничного условия (4.11) при  $\eta = -1$  достаточно положить

$$z_-(\eta) |_{\eta=-1} = 0. \quad (4.21)$$

Применение рекуррентной процедуры, подобно изложенной в § 5 гл. I и проиллюстрированной на примере построения асимптотики в у.с.ф. при  $c \rightarrow \infty$ , после довольно громоздких вычислений приводит к следующей асимптотической формуле для масштабного преобразования  $z_-(\eta)$ :

$$\begin{aligned} z_-(\rho, \beta, \chi; \eta) = & 1 + \eta + \frac{1}{\rho} \left\{ (\chi + \beta) \ln \left( \frac{1-\eta}{2} \right) \right\} + \\ & + \frac{1}{\rho^2} \left\{ \frac{\chi(\chi + \beta)}{1+\eta} \ln \left( \frac{1-\eta}{2} \right) - \frac{(\chi + \beta)^2 + \tau}{2(1-\eta)} + \right. \\ & + \frac{1}{4} [(\chi + \beta)^2 + \tau] + \frac{1}{2} \chi(\chi + \beta) \left. \right\} + \frac{1}{\rho^3} \left\{ - \frac{\chi(\chi + \beta)^2}{(1+\eta)^2} \times \right. \\ \times \ln^2 \left( \frac{1-\eta}{2} \right) & + \frac{(3\chi^2 + \tau)(\chi + \beta)}{2(1+\eta)^2} \ln \left( \frac{1-\eta}{2} \right) - \frac{\chi[(\chi + \beta)^2 + \tau]}{2(1-\eta)} - \\ & - \frac{(\chi + \beta)((\chi + \beta)^2 + \tau + 1)}{4(1-\eta)^2} + \frac{(3\chi^2 + \tau)(\chi + \beta)}{4(1+\eta)} + \\ & + \frac{1}{16} (10\chi^3 + 18\chi^2\beta + 9\chi\beta^2 + 2\tau\beta + \beta^3 + 6\tau\chi + \chi + \beta) \left. \right\} + \\ & + O\left(\frac{1}{\rho^4}\right), \quad (4.22) \end{aligned}$$

где  $\tau = (1-m^2)/4$ .

Из условий разрешимости рекуррентного процесса на каждом этапе находится асимптотическое разложение собственных значений  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta)$

$$\begin{aligned} \lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta; -1, \chi) = & 2p(2\chi + \beta) - \{2\chi\beta + \\ & + \frac{1}{2}(4\chi^2 + 1 - m^2)\} - \frac{1}{8p}\{2\chi(4\chi^2 + 1 - m^2) + (12\chi^2 + 1 - \\ & - m^2)\beta + 4\chi\beta^2\} + \frac{1}{64p^2}\{-80\chi^4 - 40\chi^2 + 24\chi^2m^2 - \\ & - (1 - m^2)^2 - (80\chi^2 + 20 - 12m^2)2\chi\beta - (96\chi^2 + \\ & + 8(1 - m^2))\beta^2 - 16\chi\beta^3\} + \frac{1}{p^3}[\lambda_{-}^{(n)}]_3 + \frac{1}{p^4}[\lambda_{-}^{(n)}]_4 + \\ & + \frac{1}{p^5}[\lambda_{-}^{(n)}]_5 + O\left(\frac{1}{p^6}\right). \quad (4.23) \end{aligned}$$

Дополнительные аргументы собственного значения  $-1, \chi$  указывают, что данное разложение  $\lambda_{mq}^{(n)}$  соответствует эталонной функции вблизи левого центра  $\eta = -1$  с индексом  $\chi$ . Коэффициенты  $[\lambda_{-}^{(n)}]_{3,4,5}$  приведены в табл. 14. При вычислении коэффициентов разложения (4.23) достаточно знать лишь разложение  $z_{-}(\eta)$  в ряд Тейлора около  $\eta = -1$ , что является общей чертой метода эталонного уравнения § 5 гл. I.

Определяемая формулами (4.20), (4.22) функция  $V_{-}$  имеет  $q_{-}$  нулей на промежутке  $-1 < \eta < \eta_{-}$

$$q_{-} = \text{Ent}\left(\chi - \frac{m+1}{2}\right) \Theta\left(\chi - \frac{m+1}{2}\right), \quad (4.24)$$

где  $\text{Ent } x$  — целая часть  $x$ , а  $\Theta(x)$  — ступенчатая функция,

$$\Theta(x) = \begin{cases} 1, & x \geq 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases} \quad (4.25)$$

Формула (4.24) вытекает из свойств функции Уиттекера  $M_{\chi, m/2}(x)$  (Бейтмен, Эрдейи, 1967, т. 1, стр. 277).

Вблизи правого центра решение углового уравнения имеет вид, аналогичный (4.20), но с другим масштабным преобразованием  $z_{+}(\eta)$  и с другим параметром  $\chi'$ . Переход от левого центра к правому в разложениях

Коэффициенты степенного разложения  
 собственного значения  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta; -1, \chi)$   
 в формуле (4.23) (обозначение:  $s = 2\chi = 2n_2 + m + 1$ )

$[\lambda_{-}^{(n)}]_3$	$\frac{-1}{512} \left\{ s(33s^4 + 114s^2 - 46s^2m^2 + 37 + 13m^4 - 50m^2) + \right.$ $+ (165s^4 + 342s^2 - 138s^2m^2 + 37 + 13m^4 - 50m^2)\beta +$ $\left. + (284s^2 + 292 - 156m^2)s\beta^2 + [192s^2 + 64(1 - m^2)]\beta^3 + 40s\beta^4 \right\}$
$[\lambda_{-}^{(n)}]_4$	$\frac{1}{1024} \left\{ -63s^6 - 340s^4 - 239s^2 - 14 + 100s^4m^2 - 39s^2m^4 + \right.$ $+ 230s^2m^2 + 2m^6 - 18m^4 + 30m^2 - (378s^4 + 1360s^2 + 478 -$ $- 400s^2m^2 - 460m^2 + 78m^4)s\beta - (845s^4 + 1810s^2 +$ $+ 209 - 630s^2m^2 - 250m^2 + 41m^4)\beta^2 - (860s^2 + 900 -$ $\left. - 460m^2)s\beta^3 - [384s^2 + 128(1 - m^2)]\beta^4 - 56s\beta^5 \right\}$
$[\lambda_{-}^{(n)}]_5$	$\frac{-1}{8192} \left\{ s(527s^6 + 4139s^4 + 5221s^2 + 1009 - 939s^4m^2 + \right.$ $+ 465s^2m^4 - 3750s^2m^2 - 53m^6 + 635m^4 - 1591m^2) +$ $\left. + (3689s^6 + 20695s^4 + 15663s^2 + 1009 - 4695s^4m^2 + 1395s^2m^4 - \right.$ $- 11250s^2m^2 - 53m^6 + 635m^4 - 1591m^2)\beta + (10128s^4 +$ $+ 37640s^2 + 14072 - 9520s^2m^2 - 11640m^2 + 1440m^4)s\beta^2 +$ $+ (13750s^4 + 30140s^2 + 3630 - 9780s^2m^2 - 4140m^2 +$ $+ 510m^4)\beta^3 + (9520s^2 + 10080 - 5040m^2)s\beta^4 + [3072s^2 +$ $\left. + 1024(1 - m^2)]\beta^5 + 336s\beta^6 \right\}$

(4.22), (4.23) осуществляется заменами

$$\eta \rightarrow -\eta, \quad \beta \rightarrow -\beta, \quad \chi \rightarrow \chi',$$

$$z_+(p, \beta, \chi', \eta) = z_-(p, -\beta, \chi', -\eta), \quad (4.26)$$

$$\lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta; 1, \chi') = \lambda_{mq}^{(n)}(p, -2p\beta; -1, \chi'). \quad (4.27)$$

Число нулей функции  $V_+(\eta)$  на промежутке  $\eta_+ < \eta < 1$  определяется формулой, аналогичной (4.24)

$$q_+ = \text{Ent} \left( \chi' - \frac{m+1}{2} \right) \Theta \left( \chi' - \frac{m+1}{2} \right). \quad (4.28)$$

Для каждого собственного значения  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta)$  построены два асимптотических разложения, которые за-



висят от индексов  $\chi$  и  $\chi'$  соответственно. Приравнивая эти разложения

$$\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2p\beta) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2p\beta; -1, \chi) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2p\beta; 1, \chi'), \quad (4.29)$$

находим соотношение, которое связывает индексы  $\chi$  и  $\chi'$ . Подставив в (4.29) разложения (4.23), (4.27) и разрешая получившееся уравнение относительно  $\chi'$ , получаем

$$\chi' = \chi + \beta. \quad (4.30)$$

Хотя разложения для  $\lambda_{mq}^{(\eta)}$  известны, согласно (4.23), с точностью до  $O(p^{-6})$ , связь индексов (4.30) справедлива с точностью до  $O(p^{-n})$ , где  $n$  — сколь угодно большое целое положительное число. Доказательство этого утверждения (Комаров, Славянов, 1969) основывается на знании точного решения одноцентральной кулоновской задачи.

Таким образом, в двух перекрывающихся областях  $\mathcal{D}_-$  и  $\mathcal{D}_+$  построена асимптотика решения (4.8), зависящая от индексов  $\chi$  и  $\chi'$  эталонных функций. Потребуем, чтобы функции  $V_-(\eta)$  и  $V_+(\eta)$  совпадали в интервале перекрывания  $\mathcal{D}_-$  и  $\mathcal{D}_+$ , т. е. при  $\eta_2 < \eta < \eta_1$ ,

$$V_-(\eta) = CV_+(\eta), \quad C = \text{const}. \quad (4.31)$$

Равенство (4.31) эквивалентно обращению в нуль определителя Вронского функций  $V_-(\eta)$ ,  $V_+(\eta)$

$$V'_-(\eta)V_+(\eta) - V_-(\eta)V'_+(\eta) = 0. \quad (4.32)$$

Подставляя в условие (4.32) найденные разложения функций  $V_-(\eta)$  и  $V_+(\eta)$  и используя асимптотику функций Уиттекера (5.68) гл. I, получаем трансцендентное уравнение, связывающее индексы  $\chi$  и  $\chi'$

$$\begin{aligned} & \left[ \frac{1}{\pi} \operatorname{tg} \pi \left( \chi - \frac{m+1}{2} \right) \right] \left[ \frac{1}{\pi} \operatorname{tg} \pi \left( \chi' - \frac{m+1}{2} \right) \right] = \\ & = (4p)^{2(\chi+\chi')} e^{-4p} \left\{ \Gamma \left( \chi + \frac{1+m}{2} \right) \Gamma \left( \chi + \frac{1-m}{2} \right) \times \right. \\ & \times \left. \Gamma \left( \chi' + \frac{1+m}{2} \right) \Gamma \left( \chi' + \frac{1-m}{2} \right) \right\}^{-1} \{ 1 + O(p^{-1}) \}. \quad (4.33) \end{aligned}$$

Для краткости мы не привели здесь дальнейшие поправки в правой части (4.33), известные с точностью до

$O(p^{-3})$ . Они будут учтены лишь в окончательных формулах.

Равенства (4.30), (4.33) представляют собой систему двух уравнений относительно  $\chi$  и  $\chi'$ . Обозначим правую часть уравнения (4.33) через  $\delta^2$ . Поскольку  $\delta^2$  экспоненциально стремится к нулю при  $p \rightarrow \infty$ , систему (4.30), (4.33) можно решать методом итераций. Пренебрегая  $\delta^2$ , получаем две серии решений, соответствующих обращению в нуль одного из тангенсов в (4.33); либо

$$\chi_0 = n_2 + \frac{m+1}{2}, \quad \chi'_0 = n_2 + \frac{m+1}{2} + \beta, \quad (4.34)$$

либо

$$\begin{aligned} \chi'_0 = n'_2 + \frac{m+1}{2}, \quad \chi_0 = n'_2 + \frac{m+1}{2} - \beta, \quad (4.34') \\ \chi = \chi_0 + \delta\chi, \quad \chi' = \chi'_0 + \delta\chi'. \end{aligned}$$

Здесь  $n_2$  и  $n'_2$  пробегает значения  $0, 1, 2, \dots$

Способ вычисления первой итерации системы (4.30), (4.33) зависит от того, близко ли  $\beta$  к целому числу.

Когда значения  $\beta$  не попадают в малые окрестности целых чисел, поправки  $\delta\chi$  и  $\delta\chi'$  находятся независимо и имеют порядок  $O(p^{2(\chi_0 + \chi'_0)} e^{-4p})$ .

Когда значения  $\beta$  близки к целым числам, возникают две возможности. Если  $\chi - \frac{m+1}{2}$  и  $\chi' - \frac{m+1}{2}$  — целые числа разных знаков, то  $\delta^2 = 0$ , и уравнение (4.33) выполняется во всех порядках по  $p$ .

Когда значения  $\beta$  попадают в малые окрестности целых чисел  $\beta \approx n'_2 - n_2$ , т. е.  $\chi - \frac{m+1}{2}$  и  $\chi' - \frac{m+1}{2}$  близки к целым неотрицательным числам  $n_2, n'_2$ , то оба тангенса в уравнении (4.33) равноправны. Воспользовавшись формулой для тангенса суммы (разности), после несложных преобразований получаем

$$\delta\chi = -\frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \pm \left[ \left( \frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \right)^2 + \delta^2 (n_2, n'_2, m, p) \right]^{1/2}, \quad (4.35)$$

$$\delta\chi' = \frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \pm \left[ \left( \frac{1}{2\pi} \operatorname{tg} \pi\beta \right)^2 + \delta^2 (n_2, n'_2, m, p) \right]^{1/2}. \quad (4.35')$$

В формулах (4.35), (4.35')  $\delta(n_2, n'_2, m, p)$  равно

$$\delta(n_2, n'_2, m, p) = \frac{(4p)^{n_2+n'_2+m+1} e^{-2p}}{[n_2! (n_2+m)! n'_2! (n'_2+m)!]^{1/2}} \times \\ \times \left\{ 1 - \frac{1}{4p} \left[ \chi_0^2 + \chi_0'^2 + 4\chi_0\chi_0' + \frac{1-m^2}{2} \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{32p^2} \left[ \left( \chi_0^2 + \chi_0'^2 + 4\chi_0\chi_0' + \frac{1-m^2}{2} \right)^2 - 2\chi_0^3 - 18\chi_0^2\chi_0' - \right. \right. \\ \left. \left. - 18\chi_0\chi_0'^2 - 2\chi_0'^3 - 2\chi_0 - 2\chi_0' - 3(1-m^2)(\chi_0 + \chi_0') \right] + \right. \\ \left. + O\left(\frac{1}{p^3}\right) \right\}, \quad (4.36)$$

где  $\chi_0 = n_2 + (m+1)/2$ ,  $\chi_0' = n'_2 + (m+1)/2$ . В малой окрестности  $\beta \approx n_2 - n_2$ , где выполнено неравенство

$$\frac{1}{2\pi} |\operatorname{tg} \pi\beta| \approx \frac{1}{2} |\beta - (n'_2 - n_2)| \leq \delta(n_2, n'_2, m, p), \quad (4.37)$$

равенства (4.35), (4.35') определяют два набора  $\delta\chi$  и  $\delta\chi'$ , которые меняются местами при изменении знака  $\beta - (n'_2 - n_2)$ . При отходе  $\beta$  от целочисленного значения  $n_2 - n_2$

$$\frac{1}{2\pi} |\operatorname{tg} \pi\beta| \gg \delta(n_2, n'_2, m, p), \quad (4.38)$$

в соотношении (4.35) нужно оставлять только положительное значение квадратного корня, а в соотношении (4.35') — только отрицательное.

Асимптотика у. к. с. ф.  $\bar{\Xi}_{mq}(p, 2p\beta; \eta)$ , удовлетворяющая в первом порядке по  $p$  условиям непрерывности (4.31) и нормировки (4.13), в области  $\mathcal{D}_-$  имеет вид \*)

$$\bar{\Xi}_{mq}(p, 2p\beta; \eta) = \\ = \left\{ \frac{d_-}{\Gamma(m+1)} \left[ \frac{2\Gamma\left(\chi + \frac{1+m}{2}\right)}{\Gamma\left(\chi + \frac{1-m}{2}\right)} \right]^{1/2} \frac{M_{\chi, m/2}\left(2p(1+\eta) + 2(\chi+\beta)\ln \frac{1-\eta}{2}\right)}{\sqrt{1-\eta^2}} \right\} \times \\ \times \{1 + O(p^{-1})\}, \quad \eta \in \mathcal{D}_-, \quad (4.39)$$

\*) Оценка в формулах (4.39) не является равномерной по  $\eta$ ; она выполняется всюду, кроме малых окрестностей нулей у. к. с. ф. Аналогичное замечание справедливо для поправок в окрестностях нулей функций в других приближенных формулах. В дальнейшем мы на этом вопросе останавливаться не будем.

в области  $\mathcal{D}_+$  имеет вид

$$\begin{aligned} \bar{\Xi}_{mq}(p, 2p\beta; \eta) = \\ = \left\{ \frac{d_+}{\Gamma(m+1)} \left[ \frac{2\Gamma\left(\chi' + \frac{1+m}{2}\right)}{\Gamma\left(\chi' + \frac{1-m}{2}\right)} \right]^{1/2} \frac{M_{\chi', m/2}\left(2p(1-\eta) + 2(\chi' + \beta) \ln \frac{1+\eta}{2}\right)}{\sqrt{1-\eta^2}} \times \right. \\ \left. \times \{1 + O(p^{-1})\}, \quad \eta \in \mathcal{D}_+. \quad (4.39') \right. \end{aligned}$$

Коэффициенты  $d_-$  и  $d_+$  определяются соотношениями

$$d_-^2 + d_+^2 = 1, \quad (4.40)$$

$$\begin{aligned} d_- = \left| \frac{\sin \pi (2\chi' - m - 1)}{\sin \pi (2\chi - m - 1) + \sin \pi (2\chi' - m - 1)} \right|^{1/2} \times \\ \times \operatorname{sgn} \left[ \frac{-\cos \pi \left(\chi - \frac{m+1}{2}\right)}{\sin \pi \left(\chi' - \frac{m+1}{2}\right)} \right], \quad (4.41) \end{aligned}$$

$$d_+ = \left| \frac{\sin \pi (2\chi - m - 1)}{\sin \pi (2\chi - m - 1) + \sin \pi (2\chi' - m - 1)} \right|^{1/2}, \quad (4.41')$$

где  $\operatorname{sgn} x$  — знак  $x$ .

Знаки в формулах (4.41), (4.41') выбраны так, чтобы у. к. с. ф. была всегда положительной при  $\eta = +1$ . Учет поправок в аргументах функций Уиттекера нужен лишь при  $\eta_2 < \eta < \eta_1$ .

У. к. с. ф.  $\bar{\Xi}_{mq}(p, 2p\beta; \eta)$  и собственные значения  $\lambda_{mq}^{(n)}$ , соответствующие найденным  $\chi$  и  $\chi'$ , обладают следующими свойствами.

*Нулевое приближение  $\chi_0, \chi'_0$  к решению системы (4.30), (4.33) определяет степенную зависимость  $\lambda_{mq}^{(n)}$  и  $\bar{\Xi}_{mq}(p, 2p\beta; \eta)$  от  $p$ .*

Когда  $\beta$  — нецелое и выполняется (4.38), имеются две серии собственных значений:  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta; -1, n_2 + \frac{m+1}{2})$  задается формулой (4.23), и  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta; 1, n_2 + \frac{m+1}{2})$  задается формулами (4.23), (4.27). Учет экспоненциально малых поправок  $\delta\chi, \delta\chi'$  в этом случае является превышением точности. Подставляя в коэффициенты волновой функции  $d_-$  и  $d_+$  (4.41), (4.41') значения

$\chi_0, \chi_0'$  из (4.34), зависящие от индекса  $n_2$ , получаем оценки

$$\begin{aligned} d_- &= \operatorname{sgn} \sin \pi \beta + O(p^{2(2n_2+m+1+\beta)} e^{-4p}), \\ d_+ &= O(p^{2(2n_2+m+1+\beta)} e^{-4p}). \end{aligned} \quad (4.42)$$

Соответствующая собственная функция в основном сосредоточена в области  $\mathcal{D}_-$ , где выражается через полиномы Лагерра (2.26а), имеющие  $n_2$  нулей вблизи  $\eta = -1$ , и экспоненциально мала в области  $\mathcal{D}_+$ . Поэтому собственные состояния, зависящие от индекса  $n_2$  из (4.34), естественно назвать *состояниями левого центра* ( $\eta = -1$ ).

Подставляя в коэффициенты волновой функции  $d_-$  и  $d_+$ , значения  $\chi_0, \chi_0'$  из (4.34'), зависящие от индекса  $n_2'$ , получаем оценки

$$\begin{aligned} d_- &= O(p^{2(2n_2'+m+1-\beta)} e^{-4p}), \\ d_+ &= 1 + O(p^{2(2n_2'+m+1-\beta)} e^{-4p}). \end{aligned} \quad (4.42')$$

Собственная функция в этом случае в основном сосредоточена в области  $\mathcal{D}_+$ , где выражается через полиномы Лагерра, имеющие  $n_2$  нулей вблизи  $\eta = 1$ , и экспоненциально мала в области  $\mathcal{D}_-$ . Состояния, зависящие от индекса  $n_2'$  из (4.34'), будем называть *состояниями правого центра* ( $\eta = 1$ ).

Индексы  $n_2, n_2'$ , от которых зависят решения (4.34), (4.34') системы трансцендентных уравнений (4.30), (4.33), выражаются через число нулей у.к.с.ф.  $q$  и параметр  $\beta$ . Определив  $n_2$  или  $n_2'$  по заданным  $q$  и  $\beta$ , выясняем, к какому из двух асимптотических типов относится рассматриваемая у.к.с.ф.

Полное число нулей  $q$  внутри промежутка  $-1 < \eta < 1$  находится с помощью (4.24), (4.28) и связано с индексами  $n_2, n_2'$  следующими соотношениями:

$$q = n_2 + [1 + n_2 + \operatorname{Ent} \beta] \Theta(n_2 + \beta), \quad n_2 \leq q, \quad (4.43)$$

$$q = n_2' + [1 + n_2' + \operatorname{Ent}(-\beta)] \Theta(n_2' - \beta), \quad n_2' \leq q. \quad (4.43')$$

Единица в квадратных скобках в (4.43), (4.43') учитывает, что, кроме нулей, расположенных вблизи  $\eta = \pm 1$ , возможно появление у функции  $\Xi_{mq}(p, 2p\beta; \eta)$  еще одного нуля в подбарьерной области  $\eta_- < \eta < \eta_+$ . При фиксиро-

рованном  $q$  и  $\beta$  нецелом, в целых числах разрешимо либо (4.43), либо (4.43'), поскольку  $\text{Ent}(-\beta) = -\text{Ent} \beta - 1$ .

Формально выражая из (4.43), (4.43')  $n_2$  и  $n'_2$ , получаем

$$n_2 = \begin{cases} q, & -\beta > q, \\ \frac{1}{2}(q + \text{Ent}(-\beta)), & |\beta| < q, \end{cases} \quad (4.43a)$$

$$n'_2 = \begin{cases} \frac{1}{2}(q + \text{Ent} \beta), & |\beta| < q, \\ q, & \beta > q. \end{cases} \quad (4.43'a)$$

Если определяемое соотношениями (4.43a) число  $n_2$  — целое, то данное состояние является состоянием левого центра. Если определяемое соотношениями (4.43'a) число  $n'_2$  — целое, то данное состояние является состоянием правого центра. Как видно из соотношений (4.43a), (4.43'a), деление состояний на два типа в зависимости от того, около какого центра локализована волновая функция, существенно зависит от соотношения между величиной  $\beta$  и числом нулей у. к. с. ф. Если выполняется неравенство  $-\beta > q$ , то имеется только серия состояний левого центра, если  $\beta > q$ , то только серия состояний правого центра, если  $|\beta| < q$ , то имеются обе серии. С ростом  $\beta$  нули у. к. с. ф.  $\Xi_{mq}(p, 2p\beta; \eta)$  при целочисленных  $|\beta| < q$  переходят из окрестности  $\eta = -1$  в окрестность  $\eta = +1$ . При каждом таком переходе состояние левого центра становится состоянием правого центра и наоборот.

Если  $\beta$  близко к целому числу  $n'_2 - n_2$  так, что выполняется неравенство (4.37), то учет только нулевого приближения  $\chi_0, \chi'_0$  является недостаточным. Собственные значения

$$\begin{aligned} & \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2p(n'_2 - n_2); -1, n_2 + (m+1)/2) \\ \text{и} & \lambda_{mq'}^{(\eta)}(p, 2p(n'_2 - n_2); 1, n'_2 + (m+1)/2) \end{aligned}$$

совпадают во всех порядках по  $p$ , а соотношения (4.43), (4.43') не позволяют однозначно связать индексы  $q, q'$  и  $n_2, n'_2$ . Поскольку кратных собственных значений в одномерной самосопряженной задаче Штурма — Лиувилля быть не может, при вычислении собственных значений необходим учет экспоненциально малых добавок  $\delta\chi$  и  $\delta\chi'$ .

Приращение любой величины  $f$ , зависящей от  $\chi$ ,  $\chi'$ , возникающее, за счет добавок  $\delta\chi$ ,  $\delta\chi'$ , находится с помощью дифференцирования по индексам  $n_2$ ,  $n_2'$

$$f(\chi) \approx f(\chi_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial \chi} \right|_{\chi=\chi_0} \delta\chi = f(\chi_0) + \frac{\partial f(\chi_0)}{\partial n_2} \delta\chi, \quad (4.44)$$

$$f(\chi') \approx f(\chi'_0) + \left. \frac{\partial f}{\partial \chi'} \right|_{\chi'=\chi'_0} \delta\chi' = f(\chi_0) + \frac{\partial f(\chi_0)}{\partial n_2'} \delta\chi', \quad (4.44')$$

где  $\delta\chi$  и  $\delta\chi'$  в окрестности  $\beta \approx n_2' - n_2$  определены формулами (4.35), (4.35').

Соседние по  $q$  собственные значения  $\lambda$ , которые при  $\beta = n_2' - n_2$  без учета добавок  $\delta\chi$ ,  $\delta\chi'$  совпадали, при учете этих добавок оказываются раздвинутыми на экспоненциально малую величину; поэтому точки

$$\beta = n_2' - n_2 \quad (4.45)$$

называются *точками квазипересечения*. Разность собственных значений в этих точках, найденная с помощью (4.44), (4.44'), равна

$$\begin{aligned} \lambda_{mq+1}^{(n)}(p, 2p(n_2' - n_2)) - \lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p(n_2' - n_2)) = \\ = \frac{2(4p)^{n_2+n_2'+m+2} e^{-2p}}{[n_2!(n_2+m)!n_2'!(n_2'+m)!]^{1/2}} \times \\ \times \left[ 1 - \frac{1}{4p} [\chi_0^2 + \chi_0'^2 + 4\chi_0\chi_0' + 2\chi_0' + 2\chi_0 + 2\tau] + \right. \\ \left. + \frac{1}{32p^2} [(\chi_0^2 + \chi_0'^2 + 4\chi_0\chi_0' + \tau) \times \right. \\ \left. \times (\chi_0^2 + \chi_0'^2 + 4\chi_0\chi_0' + 2\tau - 4) + 2\chi_0^3 + 2\chi_0'^3 + 2\chi_0'\chi_0^2 + \right. \\ \left. + 2\chi_0\chi_0'^2 - 2\chi_0 - 2\chi_0' - 4\tau(\chi_0' + \chi_0)] + O(p^{-3}) \right], \quad (4.46) \end{aligned}$$

где  $\chi_0 = n_2 + (m+1)/2$ ,  $\chi_0' = n_2' + (m+1)/2$ ,  $\tau = (1 - m^2)/4$ , а индексы  $q$ ,  $n_2$ ,  $n_2'$  связаны соотношением

$$q = n_2 + n_2'. \quad (4.47)$$

В точках квазипересечения для коэффициентов волновой

функции  $d_-$  и  $d_+$  справедливы оценки

$$\begin{aligned} d_- &= 2^{-1/2} \left( \operatorname{sgn} \delta \chi (-1)^{n_2+n_2'+1} + O\left(p^{n_2+n_2'+m+1} e^{-2p}\right) \right), \\ d_+ &= 2^{-1/2} \left( 1 + O\left(p^{n_2+n_2'+m+1} e^{-2p}\right) \right). \end{aligned} \quad (4.48)$$

Две у. к. с. ф.  $\bar{\Xi}_{mq}(p, 2p(n_2' - n_2); \eta)$  и  $\bar{\Xi}_{mq+1}(p, 2p(n_2' - n_2); \eta)$   $q = n_2 + n_2'$ , соответствующие квазипересекающимся собственным значениям, имеют порядок  $O(1)$  как в окрестности  $\eta = -1$ , так и в окрестности  $\eta = +1$  (кроме малых окрестностей нулей функций). Они различаются наличием дополнительного нуля в подбарьерной области у одной из них. Функция, не имеющая нуля в подбарьерной области, имеет там нуль производной. Деление на состояния левого и правого центра в точках квазипересечения и вблизи них таким образом пропадает.

При  $\beta = 0$  у. к. с. ф. переходят в сплюснутые угловые сфероидальные функции, асимптотика которых при  $p \rightarrow \infty$  построена в § 5 гл. I. Все разложения для у. к. с. ф. в настоящем параграфе при  $\beta = 0$  сводятся к соответствующим разложениям для с. у. с. ф. в § 5 гл. I. Квазипересечению собственных значений у. к. с. ф. при  $\beta = 0$  отвечает экспоненциальное сближение собственных значений симметричных и антисимметричных с. у. с. ф. При целых  $|\beta| > q$  у. к. с. ф. отвечают одноцентрковой кулоновской задаче п. 2 § 8.

Поведение собственных значений  $\nu = (2p)^{-1} \lambda_{0q}^{(\eta)}(p, 2p\beta)$  в зависимости от  $\beta$  при  $p \rightarrow \infty$  изображено на рис. 31.

Обратимся теперь к радиальному уравнению (4.7). Его решение представляется в виде

$$U(\xi) = C[y'(\xi)]^{-1/2} M_{\kappa, m/2}(2py(\xi)) \quad (C = \text{const}). \quad (4.49)$$

Из условия убывания функции  $U(\xi)$  при  $\xi \rightarrow \infty$  следует, что

$$\kappa = k + (m+1)/2, \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad (4.50)$$

где  $k$  — число нулей р. к. с. ф. Функция Уиттекера при выполнении (4.50) выражается через полиномы Лагерра (2.26а).

Замены  $\xi \rightarrow -\eta$ ,  $p \rightarrow -p$ ,  $\alpha \rightarrow -\beta$  переводят радиальное уравнение (4.7) в окрестности  $\xi = 1$  с граничным условием  $U(1) = 0$  в угловое уравнение (4.8) в окрестности  $\eta = -1$  с граничным условием  $V(-1) = 0$ . Поэтому



разложения для масштабного преобразования радиального уравнения  $y(\xi)$  и собственного значения  $\lambda_{mk}^{(\xi)}$  получаются с помощью разложений (4.21), (4.23)

$$y(\rho, \alpha, \kappa, \xi) = z_-( -\rho, -\alpha, \kappa, -\xi), \quad (4.51)$$

$$\lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, 2\rho\alpha) = \lambda_{mk}^{(\eta)}\left(-\rho, -2\rho\alpha; -1, k + \frac{m+1}{2}\right). \quad (4.52)$$

Таким образом, асимптотика р. к. с. ф. при  $\rho \rightarrow \infty$  строится с помощью асимптотики у. к. с. ф.

Нормированные в первом порядке по  $\rho$  р. к. с. ф. имеют вид

$$\begin{aligned} \bar{\Pi}_{mk}(\rho, 2\rho\alpha; \xi) = \\ = \frac{1}{m!} \left[ \frac{2(k+m)!}{k!(\xi^2-1)} \right]^{1/2} M_{k+\frac{m+1}{2}, \frac{m}{2}}(2\rho(\xi-1)) \left[ 1 + O\left(\frac{1}{\rho}\right) \right]. \end{aligned} \quad (4.53)$$

В табл. 11а и 11б (§ 2) приведены собственные значения  $\lambda_{mq}^{(\eta)}$ , соответствующие представлению у. к. с. ф. через

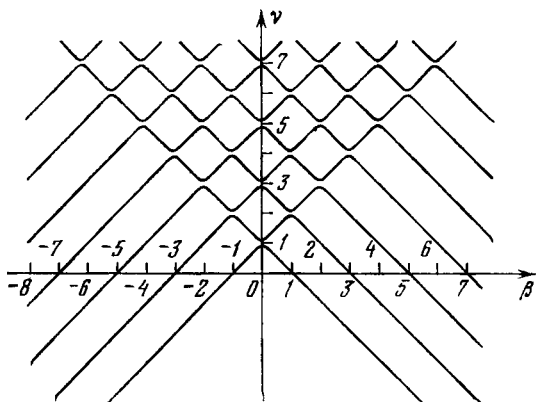


Рис. 31. Схематическое поведение величины  $v = (2\rho)^{-1} \lambda_{0q}^{(\eta)}(\rho, 2\rho\beta)$  при  $\rho \rightarrow \infty$ .

полиномы  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}$  и р. к. с. ф. через полиномы  $\mathcal{F}_{mk}^{n-1}(\xi)$ . Для безузловых функций собственные значения имеют вид

$$\lambda_{m0}^{(\eta)} = m(m+1), \quad (4.54a)$$

$$\lambda_{m0}^{(\xi)} = -2\rho m. \quad (4.54б)$$

С помощью (4.44), (4.44') при  $q=0$  и  $\beta=-m+1$  выясняем, что собственные значения  $\lambda_{m0}^{(\eta)}(p, -2p(m+1))$  отвечают состояниям левого центра, для которых  $q=n_2=0$ . Формулы (4.23), (4.52) приводят к следующим асимптотическим разложениям:

$$\lambda_{m0}^{(\eta)}\left(p, -2p(m+1); -1, \frac{m+1}{2}\right) = m(m+1) + O\left(\frac{1}{p^6}\right), \quad (4.55a)$$

$$\lambda_{m0}^{(\xi)}(p, 2p) = -2pt + O(p^{-6}), \quad (4.55b)$$

что согласуется с (4.54a), (4.54b).

**2. Энергия системы  $Z_1 eZ_2$  при  $R \rightarrow \infty$ .** Когда межцентровое расстояние стремится к бесконечности, вытянутые сфероидальные координаты вблизи  $\xi=1$ ,  $\eta=\pm 1$  сводятся к параболическим (введение, (1.4a), (1.4б))

$$\zeta \xrightarrow{R \rightarrow \infty} (\xi - 1)R, \quad \tau_{\pm} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} (1 \mp \eta)R. \quad (4.56)$$

Задача двух кулоновских центров в пределе  $R \rightarrow \infty$  распадается на две одноцентровые кулоновские задачи с зарядами  $Z_1$  и  $Z_2$ . Каждый из атомов  $eZ_1$  и  $eZ_2$  характеризуется набором параболических квантовых чисел  $n, n_1, n_2, m$  и  $[n', n'_1, n'_2, m]$ , которые связаны соотношениями

$$n = n_1 + n_2 + m + 1, \quad n' = n'_1 + n'_2 + m + 1. \quad (4.57)$$

Индексы  $n_1, n_2, n'_1, n'_2$  равны числу узлов волновых функций атомов  $eZ_1$  и  $eZ_2$  по параболическим координатам  $\zeta, \tau$ . Из соотношений (4.24), (4.28) и (4.56) видно, что введенные формулами (4.34), (4.34') индексы  $n_2, n_2'$  являются параболическими квантовыми числами атомов  $eZ_1$  и  $eZ_2$  соответственно. Число узлов р.к.с.ф.  $k$  совпадает с  $n_1$  для угловых функций левого центра и с  $n'_1$  для угловых функций правого центра.

Из равенства собственных значений р.к.с.ф. и у.к.с.ф.

$$\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 2p\alpha) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2p\beta) \quad (4.58)$$

с учетом связей параметров  $p, \alpha, \beta$  с  $R, Z_1, Z_2$  и энергией  $E$  (4.1), (4.3) получаются формулы для энергии при

$R \rightarrow \infty$  и осуществляется переход от параметра  $p$  к параметру  $R$  в разложениях р. к. с. ф. и у. к. с. ф.

Подстановка в уравнение (4.58) степенных разложений  $\lambda_{mq}^{(n)}(p, 2p\beta; -1, n_2 + (m+1)/2)$ ,  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 2p\alpha)$ , определенных формулами (4.23), (4.52), после ряда алгебраических преобразований приводит к разложению энергии по обратным степеням  $R$

$$\begin{aligned}
 E_{[nn_1n_2m]}(Z_1, Z_2, R) = & \\
 = & -\frac{Z_1^2}{2n^2} - \frac{Z_2}{R} + \frac{3Z_2n\Delta}{2R^2Z_1} - \frac{Z_2n^2}{2R^3Z_1^2}(6\Delta^2 - n^2 + 1) + \\
 & + \frac{Z_2n^3}{16Z_1^4R^4} [Z_1\Delta(109\Delta^2 - 39n^2 - 9m^2 + 59) - \\
 & - Z_2n(17n^2 - 3\Delta^2 - 9m^2 + 19)] + \frac{[E]_5}{R^5} + \frac{[E]_6}{R^6} + O\left(\frac{1}{R^7}\right), \quad (4.59)
 \end{aligned}$$

где  $\Delta = n_1 - n_2$ , а величины  $[E]_{5,6}$  приведены в табл. 15.

Формула (4.59) дает разложение по мультиполям энергии электростатического взаимодействия атома  $eZ_1$

Таблица 15

Коэффициенты степенного разложения энергии  $E_{[nn_1n_2m]}(Z_1, Z_2, R)$  в формуле (4.59) (обозначение:  $\varepsilon = nZ_2/Z_1$ )

$[E]_5$	$  \begin{aligned}  & -\frac{n^3}{64Z_1^3R^5} \{ \varepsilon(1065\Delta^4 - 594n^2\Delta^2 + 1230\Delta^2 - \\  & \quad - 234m^2\Delta^2 + 9m^4 + 33n^4 - 18n^2m^2 - \\  & \quad - 18m^2 + 105 - 138n^2) + 4\varepsilon^2\Delta(21\Delta^2 - \\  & \quad - 111n^2 + 63m^2 - 189) \}  \end{aligned}  $
$[E]_6$	$  \begin{aligned}  & -\frac{n^4}{64Z_1^4R^6} \{ \varepsilon\Delta(-2727\Delta^4 + 2076n^2\Delta^2 - 5544\Delta^2 + \\  & \quad + 1056\Delta^2m^2 - 93m^4 - 273n^4 + 78n^2m^2 + 450m^2 - \\  & \quad - 1533 + 1470n^2) + 2\varepsilon^2(-207\Delta^4 + 1044n^2\Delta^2 + 2436\Delta^2 - \\  & \quad - 576\Delta^2m^2 - 42n^2 + 371 - 162m^2 + 42m^2n^2 - \\  & \quad - 89n^4 + 15m^4) + 2\varepsilon^3\Delta(3\Delta^2 - 69n^2 - 117 - 33m^2) \}  \end{aligned}  $

с удаленным точечным зарядом  $Z_2$  ( $eZ_1$ -термы). Разложение (4.59) может быть получено по обычной теории возмущений; степень  $Z_2$  указывает, в каком порядке теории возмущений сосчитан данный мультипольный момент атома  $eZ_1$ . Серия термов, соответствующих атому  $eZ_2$ , получается из формулы (4.59) заменами  $Z_1 \leftrightarrow Z_2$ ,  $n \rightarrow n'$ ,  $\Delta \rightarrow \Delta'$ ,  $n_2 \rightarrow n_2$ .

Переход от параметра  $p$  к параметру  $R$  для  $eZ_1$ -термов осуществляется с помощью формулы

$$\begin{aligned}
 p = & \frac{RZ_1}{2n} + \frac{nZ_2}{2Z_1} - \frac{n^2Z_2}{4Z_1^3R} (3\Delta Z_1 + nZ_2) + \\
 & + \frac{Z_2n^3}{4Z_1^5R^3} [Z_1^2(6\Delta^2 + 1 - m^2) + 3Z_1Z_2n\Delta + Z_2^2n^2] + \\
 & + \frac{Z_2n^4}{32Z_1^7R^3} [Z_1^3\Delta(39n^2 - 109\Delta^2 - 59 + 9m^2) + \\
 & + Z_1^2Z_2n(25n^2 - 69\Delta^2 + 11 - 9m^2) + 36Z_1Z_2^2n^2\Delta + 10Z_2^3n^3] + \\
 & + \frac{[p]_4}{R^4} + \frac{[p]_5}{R^5} + O\left(\frac{1}{R^6}\right). \quad (4.60)
 \end{aligned}$$

Величины  $[p]_4$ ,  $[p]_5$  приведены в табл. 16.

С большей точностью известно степенное разложение для энергии  $1s\sigma_g$  и  $2p\sigma_u$  состояний молекулярного иона водорода ( $Z_1=Z_2=1$ )

$$\begin{aligned}
 E_{000}(1, 1, R) = & -\frac{1}{2} - \frac{9}{4R^4} - \frac{16}{2R^6} - \frac{213}{4R^7} - \frac{7755}{64R^8} - \\
 & - \frac{1773}{2R^9} - \frac{86\,049}{16R^{10}} - O\left(\frac{1}{R^{11}}\right). \quad (4.61)
 \end{aligned}$$

Квазипересечению собственных значений  $\lambda_{mq+1}^{(\eta)}$  и  $\lambda_{mq}^{(\eta)}$ , определяемому соотношениями (4.45), отвечает квазипересечение энергетических термов, у которых  $n_1 = n_1'$ , а  $n_2$  и  $n_2'$  удовлетворяют условию

$$\beta = (Z_2 - Z_1)(-2E)^{-1/2} = n_2' - n_2. \quad (4.62)$$

В малой окрестности (4.37) точек квазипересечения необходимо учитывать экспоненциальные добавки к энергии. Случаи равных и неравных зарядов существенно различаются.

При  $Z_1=Z_2$  независимо от межцентрового расстояния имеет место равенство  $\beta \equiv 0$ , и условие (4.37) всегда вы-

полнено при достаточно больших  $R$ . Термы симметричного и антисимметричного по отношению к инверсии в начале координат состояний близки всюду в асимптотической области. Их разность находится с помощью (4.36), (4.44), (4.59)

$$E_{[nn_1n_2m]u} - E_{[nn_1n_2m]g} = (-1)^m 2 \frac{\partial E_{[nn_1n_2m]}}{\partial n_2} \delta(n_2, n_2, m, p). \quad (4.63)$$

Переходя в разложении  $\delta(n_2, n_2, m, p)$  (4.36) от параметра  $p$  к параметру  $R$  по формуле (4.60) для молекуляр-

Таблица 16

Коэффициенты разложения  $p(R)$  для  $eZ_1$ -термов в формуле (4.60) (обозначение:  $\varepsilon = nZ_2/Z_1$ )

$[p]_4$	$\frac{n^5 Z_2}{128 Z_1^5} \{ 1065 \Delta^4 - 594 n^2 \Delta^2 + 1023 \Delta^2 - 234 m^2 \Delta^2 +$ $+ 9 m^4 - 18 n^2 m^2 + 33 n^4 - 18 m^2 - 105 - 138 n^2 +$ $+ 4 \varepsilon \Delta (54 m^2 + 202 \Delta^2 - 162 n^2 - 118) +$ $+ 4 \varepsilon^2 (129 \Delta^2 - 29 n^2 - 7 + 9 m^2) + 240 \varepsilon^3 \Delta + 56 \varepsilon^4 \}$
$[p]_5$	$\frac{n^6 Z_2}{128 Z_1^6} \{ \Delta (2727 \Delta^4 - 2076 n^2 \Delta^2 + 5544 \Delta^2 -$ $- 1056 \Delta^2 m^2 + 93 m^4 + 273 n^4 - 78 n^2 m^2 -$ $- 450 m^2 + 1533 - 1470 n^2) + \varepsilon (2421 \Delta^4 - 3012 n^2 \Delta^2 -$ $- 3192 \Delta^2 + 864 \Delta^2 m^2 - 70 n^2 - 629 +$ $+ 306 m^2 - 102 n^2 m^2 + 219 n^4 - 21 m^4) +$ $+ \varepsilon^2 \Delta (1722 \Delta^2 - 786 n^2 - 138 + 318 m^2) +$ $+ \varepsilon^3 (1038 \Delta^2 - 182 n^2 - 34 + 54 m^2) + 420 \varepsilon^4 \Delta + 84 \varepsilon^5 \}$

ного иона водорода, получаем

$$E_{[nn_1n_2m]u}(1, 1, R) - E_{[nn_1n_2m]g}(1, 1, R) =$$

$$= (-1)^m \frac{2 (2R/n)^{n-\Delta} e^{-(R/n+n)}}{n^3 n_2! (n_2 + m)!} \left\{ 1 + \right.$$

$$\left. + \frac{n}{4R} (3n^2 + 8n\Delta - 3\Delta^2 - 1 + m^2) + \right.$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{n^2}{32R^2} [(3n^2 + 8n\Delta - 3\Delta^2 - 1 + m^2)^2 - 48n^2 - 48n\Delta - \\
& - 28n^3 - 52n^2\Delta - 84n\Delta^2 - 28n + 4nm^2 + 20\Delta^3 + \\
& + 20\Delta - 12\Delta m^2] + \frac{[E_u - E_g]_3}{R^3} + O\left(\frac{1}{R^4}\right). \quad (4.64)
\end{aligned}$$

Коэффициент  $[E_u - E_g]_3$  приведен в табл. 17.

Таблица 17

Коэффициент разложения  $[E_u - E_g]_3$  в формуле (4.64)

$[E_u - E_g]_3$	$ \begin{aligned} & \frac{n^3}{384} \{ (3n^2 + 8n\Delta - 3\Delta^2)^3 - 252n^5 - 1140n^4\Delta - \\ & - 1752n^3\Delta^2 - 1368n^2\Delta^3 + 1236n\Delta^4 - \\ & - 180\Delta^5 - 781n^4 + 208n^3\Delta + 2994n^2\Delta^2 + 1584n\Delta^3 - \\ & - 357\Delta^4 + 600n^3 + 1968n^2\Delta - 1320n\Delta^2 - 240\Delta^3 - 267n^2 + \\ & + 1848n\Delta - 693\Delta^2 - 300n - 60\Delta - 75 + m^2 [3(3n^2 + \\ & + 8n\Delta - 3\Delta^2)^2 - 48n^3 - 168n^2\Delta - 576n\Delta^2 + 168\Delta^3 + 186n^2 - \\ & - 240n\Delta + 294\Delta^2 - 96n + 96\Delta + 103] + m^4 [3(3n^2 + 8n\Delta - \\ & - 3\Delta^2) + 12n - 36\Delta - 29] + m^6 \} \end{aligned} $
-----------------	---

Разность термов  $1s\sigma_g$  и  $2p\sigma_u$  известна с точностью до  $O(R^{-8}e^{-R})$

$$\begin{aligned}
& E_{[1000]u}(1, 1, R) - E_{[1000]g}(1, 1, R) = \\
& = 4Re^{-R-1} \left[ 1 + \frac{1}{2R} - \frac{25}{8R^2} - \frac{131}{48R^3} - \frac{3923}{384R^4} - \frac{145399}{3840R^5} - \right. \\
& \left. - \frac{5219189}{46080R^6} - \frac{509102915}{645120R^7} - \frac{37749539911}{10321920R^8} + O\left(\frac{1}{R^9}\right) \right]. \quad (4.65)
\end{aligned}$$

Когда заряды центров различны,  $\beta = \beta(E(R))$  является функцией межцентрового расстояния. Разделение решений углового уравнения на функции левого и правого центров, согласно соотношениям (4.43), (4.43'), в этом случае зависит от  $R$ . Условие квазипересечения с (4.62) определяет общую с точностью до экспоненциальных поправок энергию квазипересекающихся термов и приводит

к уравнению для нахождения координат квазипересечения  $R_{n_2 n_2'}^{km}$ ,

$$E_{[nn_1 n_2 m]}(Z_1, Z_2, R_{n_2 n_2'}^{km}) = E_{[n' n_1' n_2' m]}(Z_2, Z_1, R_{n_2 n_2'}^{km}) = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_2 - Z_1}{n_2' - n_2} \right)^2, \\ n_1 = n_1' = k. \quad (4.66)$$

Значения энергии, при которых происходят квазипересечения, образуют кулоновскую серию, отвечающую заряду  $Z_2 - Z_1$  и главному квантовому числу  $n_2' - n_2$ . При этом возможно своеобразное вырождение, когда разность  $n_2' - n_2$  одинакова у нескольких пар квазипересекающихся термов.

Смысл равенств (4.66) требует уточнения. Разложения  $E_{[nn_1 n_2 m]}(Z_1, Z_2, R)$ ,  $E_{[n' n_1' n_2' m]}(Z_2, Z_1, R)$  являются асимптотическими. При фиксированном  $R = R_{n_2 n_2'}^{km}$  последующие члены разложений могут оказаться больше предыдущих; в таких случаях асимптотические ряды следует обрывать. Поэтому понятие «координата квазипересечения» вводится формулами (4.66) приближенно, причем характер приближения зависит от индексов  $k, m, n_2, n_2'$  и зарядов.

Поскольку  $E_{[nn_1 n_2 m]}$  и  $E_{[n' n_1' n_2' m]}$  известны приближенно, в (4.66) содержатся три равенства. Находить  $R_{n_2 n_2'}^{km}$  из равенств (4.66) можно по-разному. Один из возможных способов состоит в замене трех равенств (4.66) одним

$$\frac{1}{2} \left[ E_{[nn_1 n_2 m]}(Z_1, Z_2, R_{n_2 n_2'}^{km}) + E_{[n' n_1' n_2' m]}(Z_2, Z_1, R_{n_2 n_2'}^{km}) \right] = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_2 - Z_1}{n_2' - n_2} \right)^2, \quad (4.67)$$

которое симметрично по отношению к одновременной перестановке  $Z_2 \leftrightarrow Z_1$ ,  $n_2' \leftrightarrow n_2$  и учитывает, что квазипересечения образуют кулоновскую серию. Отбрасывая в уравнении (4.67) члены порядка  $O(R^{-2})$ , получаем перво-

начальное приближение

$$\left[ R_{n_2 n_2'}^{km} \right]_0 = (Z_2 + Z_1) \left\{ \left( \frac{Z_2 - Z_1}{n_2' - n_2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{Z_2^2}{n_2'^2} + \frac{Z_1^2}{n_2^2} \right) \right\}^{-1}. \quad (4.68)$$

Первая итерация уравнения (4.67) дает

$$\left[ R_{n_2 n_2'}^{km} \right]_1 = \left[ R_{n_2 n_2'}^{km} \right]_0 - \frac{3 (Z_2 n_2 \Delta + Z_1 n_2' \Delta')}{2 Z_2 Z_1 (Z_2 + Z_1)}. \quad (4.69)$$

Поправочный член в (4.69) следует оставлять только при условии его малости по сравнению с начальным приближением. Аналогично строятся следующие поправки. Итерационный процесс решения (4.67) имеет смысл только до тех пор, пока поправки  $(s+1)$ -го приближения много меньше поправок  $s$ -го приближения.

Экспоненциальные расщепления термов в точках квазипересечения находятся с помощью дифференцирования по правилам (4.44), (4.44') степенных разложений (4.59) для  $eZ_1$ - и  $eZ_2$ -термов. При пользовании отрезками асимптотических рядов одна и та же разность термов в точках квазипересечения может быть представлена различными формулами, имеющими приблизительно одинаковую точность. Дифференцируя по индексам  $n_2, n_2'$  по лусумму энергий  $eZ_1$ - и  $eZ_2$ -термов, получаем для разности термов формулу, симметричную по отношению к одновременной замене  $Z_2 \leftrightarrow Z_1, n_2' \leftrightarrow n_2$

$$\begin{aligned} & \left[ E_{\{k, q+1, m\}} (Z_1 Z_2 R) - E_{\{k, q, m\}} (Z_1, Z_2, R) \right]_{R=R_{n_2 n_2'}^{km}} = \\ & = \left\{ \frac{Z_2^2}{n_2^3} + \frac{Z_1^2}{n_2'^3} - \frac{3}{2 Z_2 Z_1 R^2} \left[ (n - \Delta) Z_2^2 + (n' - \Delta') Z_1^2 \right] + \dots \right\} \times \\ & \quad \times \delta(n_2, n_2', m, p) \Big|_{R=R_{n_2 n_2'}^{km}}. \quad (4.70) \end{aligned}$$

Здесь  $q = n_2' + n_2$ ,

$$p \Big|_{R=R_{n_2 n_2'}^{km}} = \frac{Z_2 - Z_1}{n_2' - n_2} R_{n_2 n_2'}^{km}, \quad (4.71)$$

а  $\delta(n_2, n_2', m, p)$  определено равенством (4.36). Ряд (4.36) является асимптотическим, и в фиксированной точке  $p = p \left( R_{n_2 n_2'}^{km} \right)$  следует пользоваться соответствующим отрезком этого ряда.



Экспоненциальные добавки к энергии нужно учитывать лишь в малых окрестностях квазипересечений

$$\left| R - R_n^{km} \right| \leq \left| \frac{Z_2 + Z_1}{Z_2 - Z_1} (n_2' - n_2) \right| \frac{\delta(n_2, n_2', m, p)}{R^2} \Big|_{R=R_{n_2 n_2'}^{km}} \quad (4.72)$$

Неравенство (4.72) вытекает из (4.37).

Оценить пределы применимости и практическую точность найденных асимптотических разложений и приближенных формул типа (4.69), (4.70) можно сравнением с результатами интегрирования задачи  $Z_1 e Z_2$  на ЭВМ. В табл. 18, 19 (Дамбург, Проппин, 1968) такое сравнение

Таблица 18

Значения  $-\frac{1}{2} [E_{[1000]u}(1,1, R) + E_{[1000]g}(1,1, R)]$

R	Результаты Реек(1965)	Результаты расчета по формуле (4.61)			
		1	$n_0$	2	$n_0$
7	0,500932858	0,500000000	1	0,500937109	2
8	0,500588202	0,500577926	3	0,500603318	4
9	0,500369641	0,500368181	4	0,500370996	5
10	0,500239899	0,500239037	5	0,500239923	6
20	0,5000142285	0,5000142260	5	0,5000142277	6
30	0,50000279074	0,50000279069	5	0,50000279073	6

Таблица 19

Значения  $E_{[1000]u}(1,1, R) - E_{[1000]g}(1,1, R)$

R	Результаты Реек (1966)	Результаты подсчета по формуле (4.65)			
		1	$n_0$	2	$n_0$
5	4,7128682 (-2)	4,7253279 (-2)	4	4,6442934 (-2)	5
6	2,1325156 (-2)	2,1360140 (-2)	5	2,1253573 (-2)	6
7	9,322291 (-3)	9,328973 (-3)	5	9,319930 (-3)	6
8	3,964371 (-3)	3,964450 (-3)	7	3,963589 (-3)	8
9	1,651623 (-3)	1,651812 (-3)	7	1,651673 (-3)	8
15	6,876128 (-6)	6,876144 (-6)	7	6,876134 (-6)	8
20	6,1678 (-8)	6,167766 (-8)	7	6,167765 (-8)	8
30	4,1850 (-12)	4,185001 (-12)	7	4,185001 (-12)	8

проведено для формул (4.61), (4.65), в которых удерживалось разное число  $n_0$  членов асимптотических рядов. В каждом случае представлены два результата, которые находятся в наилучшем согласии с данными Peek (1965, 1966). Числа в круглых скобках в табл. 19 обозначают степени десяти, на которые следует умножать стоящие перед ними величины. Видно, что асимптотические формулы в состоянии обеспечить довольно хорошую точность.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Мультипольное разложение для энергии изучали Coulson (1941) (формула (4.61)) и Coulson and Gillam (1948). Интерес к экспоненциальным поправкам был стимулирован работой Herring (1962), который показал, что метод ЛКАО («линейная комбинация атомных орбиталей») дает принципиально неверное значение  $E_g - E_u$  при  $R \rightarrow \infty$ . Он нашел главный член асимптотики  $E_g - E_u$  для  $1s\sigma_g$  и  $2p\sigma_u$  состояний  $H_2^+$ . Этот же результат независимо получен Ландау и Лифшицем. Смирнов (1964) перенес рассмотрение на возбужденные состояния  $H_2^+$ , Овчинников и Суханов (1964) разработали схему построения асимптотики для  $H_2^+$  и провели вычисление нескольких членов степенного и экспоненциального разложений энергии и функций основных состояний. Они предложили удерживать в разложениях также и кратные экспоненты. Метод Овчинникова и Суханова развили Дамбург и Проппин (1968, 1971), Damburg, Propin (1968), вычисления которых являются рекордными для молекулярного иона водорода (формулы (4.64), (4.65)). Изучение иона  $H_2^+$  при  $R \rightarrow \infty$  тесно связано с анализом асимптотики при  $\rho \rightarrow \infty$  сплюснутых угловых сферических функций (§ 5, гл. I).

Комаров и Славянов (1967, 1969), Komarov and Slavyanov (1968) применили к построению асимптотики метод эталонного уравнения и провели вычисления как для одинаковых, так и для различных зарядов. Изложение в тексте в основном следует их работам.

Обширные вычисления в асимптотической области провел Power (1973), улучшивший расчетную технику. Для нахождения коэффициентов степенных поправок к  $\lambda_{mq}^{(\eta)}$  он использовал ЭВМ. Из его статьи взяты формулы (4.22), (4.23), (4.36), (4.59), (4.60). Отметим, что степенные разложения (4.59), (4.60) с точностью до  $O(R^{-7})$  и  $O(R^{-6})$  соответственно были получены в 1971 г. Дамбургом и Проппиным.

Квазипересечения энергетических термов на конечных расстояниях впервые были обнаружены при численном счете Пономаревым и Пузыниной (1967). Различные аналитические формулы, описывающие квазипересечения, даны Komarov and Slavyanov (1968), Комаровым и Славяновым (1969), Пономаревым (1968) и Power (1973). В тексте приводятся результаты Power, который предложил рассматривать при анализе квазипересечений полусумму энергий  $eZ_1$ - и  $eZ_2$ -состояний.

§ 5. Асимптотические разложения решений задачи  $Z_1 e Z_2$  при  $R \rightarrow 0$

1. Теория возмущений для оператора энергии. Когда суммарный заряд кулоновских центров  $Z = Z_2 + Z_1$  положителен и межцентровое расстояние  $R$  стремится к нулю, можно рассматривать задачу  $Z_1 e Z_2$  по теории возмущений, не проводя разделения переменных. Оператор Гамильтона системы  $Z_1 e Z_2$  представляется в виде суммы двух слагаемых

$$\hat{H} = \hat{H}^{UA} + \hat{W} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}. \quad (5.1)$$

В качестве  $\hat{H}^{UA}$  выбирают оператор Гамильтона объединенного атома (united atom)

$$\hat{H}^{UA} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{Z}{r_c}, \quad (5.2)$$

находящегося на оси  $z$  в точке  $z = z_0$

$$z_0 = \left(-\frac{1}{2} + \frac{Z_2}{Z}\right) R = \left(\frac{1}{2} - \frac{Z_1}{Z}\right) R. \quad (5.3)$$

Точку  $(0, 0, z_0)$  называют *центром зарядов*, поскольку она делит межцентровое расстояние  $R$  на два отрезка

$$R_1 = \frac{Z_2}{Z} R, \quad R_2 = \frac{Z_1}{Z} R, \quad (5.4)$$

длины которых обратно пропорциональны зарядам. Построим сферическую систему координат  $r_c, \vartheta_c, \varphi$ , начало которой находится в точке  $(0, 0, z_0)$ , а угол  $\vartheta_c$  отсчитывается от оси  $z$ . Собственные состояния оператора  $\hat{H}^{UA}$  характеризуются набором сферических квантовых чисел  $N, l, m$ ; его собственные функции представляются в виде

$$\psi_{Nlm}^{UA}(r_c) = R_{Nl}(r_c) Y_l^m(\vartheta_c, \varphi), \quad (5.5)$$

а собственные значения образуют кулоновскую серию

$$E_{Nlm}^{UA} = -\frac{Z^2}{2N^2}. \quad (5.6)$$

Функции  $R_{Nl}(r)$  определены в п. 2 § 8,  $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$  — шаровые гармоники.

Поскольку спектр оператора  $\hat{H}^{UA}$  вырожден по  $l$  и  $m$ , для применения теории возмущений вначале необходимо построить правильные функции нулевого приближения,

на которых матрица оператора возмущения  $\widehat{W}$  диагональна. Покажем, что матрица  $W_{Nlm}^{Nl'm'}$  диагональна на функциях объединенного атома  $\psi_{Nlm}^{UA}(r_c)$ , если  $z_0$  определено условием (5.3). Оператор возмущения

$$\widehat{W} = -\frac{Z_1}{|r_c + R_1|} - \frac{Z_2}{|r_c - R_2|} + \frac{Z}{r_c} \quad (5.7)$$

разлагается в ряд по полиномам Лежандра

$$\widehat{W} = \frac{Z}{r_c} - \left\{ \begin{array}{l} Z_1 \sum_{s=0}^{\infty} (-1)^s R_1^s r_c^{-s-1} P_s(\cos \vartheta_c), \quad r_c > |R_1| \\ Z_1 \sum_{s=0}^{\infty} (-1)^s R_1^{-s-1} r_c^s P_s(\cos \vartheta_c), \quad r_c < |R_1| \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{l} Z_2 \sum_{s=0}^{\infty} R_2^s r_c^{-s-1} P_s(\cos \vartheta_c), \quad r_c > |R_2| \\ Z_2 \sum_{s=0}^{\infty} R_2^{-s-1} r_c^s P_s(\cos \vartheta_c), \quad r_c < |R_2| \end{array} \right\}. \quad (5.8)$$

Коэффициент при  $r_c^{-2} P_1$  для  $r_c > \max\{|R_1|, |R_2|\}$  равен  $-Z_1 R_1 + Z_2 R_2$  и обращается в нуль вследствие условия (5.4). Оценка всех получающихся интегралов с функциями (5.5) показывает, что матрица  $\widehat{W}$  диагональна при  $R \rightarrow 0$ , т. е.

$$W_{Nlm}^{Nl'm'} = \int \psi_{Nlm}^{UA*}(\mathbf{r}) \widehat{W} \psi_{Nl'm'}^{UA}(\mathbf{r}) dV = \delta_{ll'} \delta_{mm'} [W_{Nlm}^{Nlm}]_2 (1 + O(R^2)). \quad (5.9)$$

Главный член  $[W_{Nlm}^{Nlm}]_2$  разложения диагонального матричного элемента  $\widehat{W}$  при  $l \neq 0$  определяется разложением  $\widehat{W}$  (5.8) для  $r_c > \max\{|R_1|, |R_2|\}$ , в котором интегрирование по  $r$  ведется от нуля,

$$[W_{Nlm}^{Nlm}]_2 = -[Z_1 R_1^2 + Z_2 R_2^2] \int |\psi_{Nlm}^{UA}(\mathbf{r})|^2 r^{-3} P_2(\cos \vartheta) dr = -2Z_1 Z_2 Z^2 \frac{[l(l+1) - 3m^2] R^2}{N^3 l(l+1)(2l-1)(2l+1)(2l+3)}. \quad (5.10)$$

Вычисление  $[W_{N00}^{N00}]_2$  требует учета в разложении (5.8) как  $r_c > \max\{|\mathbf{R}_1|, |\mathbf{R}_2|\}$ , так и  $r_c < \min\{|\mathbf{R}_1|, |\mathbf{R}_2|\}$ . Результат такого вычисления

$$[W_{N00}^{N00}]_2 = -2Z_1 Z_2 Z^2 \frac{R^2}{3N^3} \quad (5.11)$$

формально получается из равенства (5.10), если справа положить в нем  $m=0$ , а затем, сократив на  $l$ , взять  $l=0$ .

Формулы (5.6), (5.10) определяют два первых члена разложения энергии системы  $Z_1 e Z_2$  при малых  $R$

$$\begin{aligned} E_{Nlm}(Z_1, Z_2, R) = \\ = -\frac{Z^2}{2N^2} - \frac{2Z_1 Z_2 [l(l+1) - 3m^2]}{N^3 l(l+1)(2l-1)(2l+1)(2l+3)} (ZR)^2 + O((ZR)^2). \end{aligned} \quad (5.12)$$

Вычисления энергии во втором порядке теории возмущений для произвольных зарядов и квантовых чисел не проводились. Для основного состояния системы  $Z_1 e Z_1$  с одинаковыми зарядами после громоздких выкладок получается следующее выражение для энергии во втором порядке теории возмущений:

$$\begin{aligned} E_{000}^{11}(Z_1, Z_1, R) = Z^2 \left[ -\frac{1}{2} + \frac{1}{6} (ZR)^2 - \frac{1}{6} (ZR)^3 + \right. \\ \left. + \frac{43}{2160} (ZR)^4 - \frac{1}{36} (ZR)^5 \ln ZR + \dots \right]. \end{aligned} \quad (5.13)$$

Разложение (5.13), полученное во втором порядке теории возмущений, очевидно, не является асимптотическим при малых  $ZR$ ; первые три слагаемых в формуле (5.13) совпадают с асимптотическим разложением  $E$ , однако в коэффициенты последующих членов асимптотического разложения вносят вклад высшие порядки теории возмущений. Весьма интересен сам факт появления логарифмических поправок, показывающих, что энергия не является аналитической функцией  $ZR$ .

При вычислениях в более высоких порядках теории возмущений естественно использовать функцию Грина кулоновского поля (см., например, Базь и др., 1971, стр. 141).

**2. Разложения у. к. с. ф. и р. к. с. ф., необходимые для анализа системы  $Z_1 e Z_2$  при  $R \rightarrow 0$ .** Поведение решений задачи  $Z_1 e Z_2$  при  $R \rightarrow 0$  можно изучать с помощью соответствующих разложений у. к. с. ф. и р. к. с. ф.

Когда межцентровое расстояние стремится к нулю, а квантовые числа и заряды фиксированы, параметры  $p$ ,  $a$ ,  $b$  также стремятся к нулю

$$p = R(-2E)^{1/2}/2 \xrightarrow{R \rightarrow 0} 0, \quad (5.14)$$

$$a = (Z_2 + Z_1) R \xrightarrow{R \rightarrow 0} 0, \quad b = (Z_2 - Z_1) R \xrightarrow{R \rightarrow 0} 0. \quad (5.15)$$

Введем обозначения

$$\frac{a}{2p} = \frac{Z_2 + Z_1}{\sqrt{-2E}} = \frac{Z}{\sqrt{-2E}} \equiv \alpha = \sigma + m + 1, \quad (5.16)$$

$$\frac{b}{2p} = \frac{Z_2 - Z_1}{\sqrt{-2E}} \equiv \beta. \quad (5.17)$$

Энергия выражается через параметр  $\alpha$  по формуле

$$E = -Z^2/(2\alpha^2). \quad (5.18)$$

Из разложения (5.12) для энергии в первом порядке теории возмущений следует, что при фиксированных зарядах и квантовых числах  $\alpha$  и  $\beta$  — величины порядка единицы, причем

$$\alpha = N + O((ZR)^2), \quad N — \text{целое}, \quad N \geq k + m + 1.$$

Разность  $\alpha - N$  естественно назвать *квантовым дефектом*.

Для построения асимптотических разложений задачи  $Z_1 e Z_2$  при малых межцентровых расстояниях требуются следующие разложения у.к.с.ф. и р.к.с.ф. по малому параметру  $p$ :

$$\Xi_{mq}(p, 2p\beta; \eta), \quad p \rightarrow 0, \quad m = O(1), \quad q = O(1), \quad \beta = O(1), \quad (5.19)$$

$$\Pi_{mk}(p, 2p\alpha; \xi), \quad p \rightarrow 0, \quad m = O(1), \quad k = O(1), \\ \alpha = N + O(p^2), \quad N \geq k + m + 1. \quad (5.20)$$

Напомним, что при  $\alpha = N$  р.к.с.ф. выражается через полиномы  $\mathcal{F}_{mk}^{N-m-1}(\xi)$  (п. 4 § 2).

Разложения (5.19), (5.20) в настоящее время известны лишь для основного состояния системы  $Z_1 e Z_2$  ( $k = q = m = 0$ ). Разложение (5.19) можно строить с помощью варианта теории возмущений, который применялся в § 4 гл. I для построения разложений в. у. с. ф. (с. у. с. ф.) при малых  $c$  ( $p$ ). Для отыскания разложения (5.20) можно применять метод, которым в § 8 построена асимптотика  $\Pi_{mk}(p, 0; \xi)$  при  $p \rightarrow 0$ .

**3. Основное состояние системы  $Z_1 e Z_2$  при малых  $R$ .**  
 Ряд для у. к. с. ф.  $\Xi_{00}(p, 2p\beta; \eta)$  по степеням малого параметра  $p$  получается с помощью разложения по полиномам Лежандра методом, изложенным в § 4 гл. I. Соответствующая у. к. с. ф. представляется пятью первыми членами ряда по полиномам Лежандра.

Вычисления дают следующую формулу для собственного значения:

$$\lambda_{00}^{(\eta)}(p, 2p\beta) = (1 - \beta^2) \left[ \frac{2}{3} p^2 - \frac{2}{135} p^4 (1 + 11\beta^2) + O(p^6) \right]. \quad (5.21)$$

Для построения асимптотики  $\Pi_{00}(p, 2p(1+\sigma); \xi)$  при  $p \rightarrow 0$ ,  $\sigma = O(p^2)$  используется разложение Яффе (2.33)

$$\Pi_{00}(p, 2p(1+\sigma); \xi) = e^{-p\xi} (1 + \xi)^\sigma \sum_{s=0}^{\infty} g_s x^s, \quad x = \frac{\xi - 1}{\xi + 1}, \quad (5.22)$$

где  $g_s$  удовлетворяют трехчленным рекуррентным соотношениям (2.3) с коэффициентами (2.36). Собственное значение  $\lambda_{00}^{(\xi)}(p, 2p(1+\sigma))$  определяется наименьшим корнем векового уравнения

$$\det A = \begin{vmatrix} D - \sigma^2 & 1^2 & 0 & \dots \\ \sigma^2 & D - \sigma^2 - 2(1+2p-\sigma) & 2^2 & \dots \\ 0 & 1 - \sigma^2 & D - \sigma^2 - 4(2+2p-\sigma) & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \end{vmatrix} = 0, \quad (5.23)$$

где

$$D = \sigma(1+2p) + \sigma^2 - \lambda. \quad (5.24)$$

Для наименьшего корня уравнения (5.23) справедлива оценка  $D = O(\sigma^2) = O(p^4)$ , которую можно получить, например, сопоставляя определителю  $\det A$  бесконечную цепную дробь. Для того чтобы найти главный член разложения  $D$ , во всех матричных элементах, кроме  $\{A\}_{00}$ , пренебрежем величинами  $D$  и  $\sigma^2$ . Оставшийся определитель дает для  $D$  представление в виде цепной дроби

$$D = \sigma^2 \left[ 1 - \frac{1}{2(1+2p)} - \frac{1}{2(1+2p/2)} - \frac{1}{2(1+2p/3)} - \dots \right] = \sigma^2 B(p). \quad (5.25)$$

Дробь  $B(p)$  встречается при разложении в бесконечную цепную дробь интегральной показательной функции и равна

$$B(p) = 4pe^{4p} \int_{4p}^{\infty} e^{-t} t^{-1} dt \quad (5.26)$$

(Wall, 1948, стр. 367). При малых  $p$  из (5.26) получаем

$$B(p) = -4p \ln 4p\gamma + o(p), \quad (5.27)$$

где  $\ln \gamma$  — постоянная Эйлера. Разложение для собственного значения  $\lambda_{00}^{(\xi)}(p, 2p(1+\sigma))$  имеет вид

$$\lambda_{00}^{(\xi)}(p, 2p(1+\sigma)) = \sigma(1+2p) + \sigma^2(1+4p \ln 4p\gamma) + o(p^5). \quad (5.28)$$

Р. к. с. ф. основного состояния с точностью до  $o(p^4)$  представляется в виде

$$\Pi_{00}(p, 2p(1+\sigma); \xi) = e^{-p\xi} (1+\xi)^\sigma [1 + \sigma^2 \text{Li}_2(x) + o(p^4)], \quad (5.29)$$

где  $x = (\xi-1)/(\xi+1)$  — переменная Яффе, а  $\text{Li}_2(x)$  — дилогарифм Эйлера

$$\text{Li}_2(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{x^n}{n^2} = - \int_0^x \ln(1-x) \frac{dx}{x} \quad (5.30)$$

(Бейтмен, Эрдейи, 1967, т. 1, стр. 46).

Еще один поправочный член в формуле (5.29) приведен в статье Vuers-Brown and Steiner (1966); он выражается через громоздкие интегралы.

Находить энергию как функцию параметров  $Z_1, Z_2, R$  из равенства

$$\lambda_{00}^{(\eta)}(p, 2p\beta) = \lambda_{00}^{(\xi)}(p, 2p(1+\sigma)) \quad (5.31)$$

удобно в два этапа, определив сперва зависимость от  $Z_1, Z_2, R$  квантового дефекта  $\sigma$ . Окончательно из (5.21), (5.28), (5.31) получается разложение

$$\begin{aligned} E_{000}(Z_1, Z_2, R) = & -\frac{1}{2} Z^2 + \frac{2}{3} Z_1 Z_2 (ZR)^2 - \\ & - \frac{2}{3} Z_1 Z_2 (ZR)^3 + \frac{2}{5} Z_1 Z_2 \left(1 - \frac{64Z_1 Z_2}{27Z^2}\right) (ZR)^4 - \\ & - \frac{8}{45} Z_1 Z_2 \left[ \frac{5Z_1 Z_2}{Z^2} \ln(2RZ\gamma) + 1 - \frac{199Z_1 Z_2}{12Z^2} \right] (ZR)^5 + \\ & + o((ZR)^5). \quad (5.32) \end{aligned}$$



Сравнение формул (5.13) и (5.30) показывает, что члены, пропорциональные  $(ZR)^2$ ,  $(ZR)^3$ , в обоих разложениях совпадают. Последующие поправки различаются коэффициентами; формула (5.13), полученная во втором порядке теории возмущений, является менее точной. Поскольку в разложении (5.30) содержится логарифмический член, энергия при малых расстояниях  $R$  является неаналитической функцией параметра  $ZR$ . Практическая точность формулы первого порядка теории возмущений (5.12) и формулы (5.30) одинакова: при  $ZR < 0,1$  погрешность не превышает одного процента, но быстро растет с ростом параметра  $ZR$ .

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Morse and Stueckelberg (1929) предложили строить разложения энергии при малых межцентровых расстояниях по теории возмущений, не производя разделения переменных. Бете (1935) вывел формулу (5.12) для молекулярного иона водорода  $H_2^+$ . Baber and Hassé (1935) обобщили результат Бете для произвольных зарядов, поместив по совету Гайтлера объединенный атом в центр зарядов. Levine (1964) рассчитала во втором порядке теории возмущений энергию основного состояния  $H_2^+$ . Идея решения углового уравнения при  $p \rightarrow 0$  итерациями принадлежит Hulleagaas (1931). Подробный анализ углового и радиального уравнения для основного состояния  $Z_1eZ_2$  провели Byers-Brown and Steiner (1966), обнаружившие логарифмические добавки к энергии. Точность разложений (5.12), (5.32) обсуждали Byers-Brown, Power (1970), Chang (1973).

## § 6. Квазиклассическая асимптотика решений задачи $Z_1eZ_2$

По аналогии с результатами § 6 гл. I квазиклассические асимптотики у. к. с. ф. и р. к. с. ф.  $p$ -типа, соответствующие дискретному спектру задачи  $Z_1eZ_2$ , можно представить в виде (6.10) гл. I, где значения квазиимпульсов для радиального и углового решений соответственно равны

$$p(\xi) = \left[ -p^2 + \frac{-\lambda + a\xi}{\xi^2 - 1} - \frac{m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right]^{1/2}, \quad (6.1a)$$

$$p(\eta) = \left[ -p^2 + \frac{\lambda + b\eta}{1 - \eta^2} - \frac{m^2}{(1 - \eta^2)^2} \right]^{1/2}. \quad (6.1б)$$

Качественный ход функций  $v(\xi) = -[p(\xi)]^2$  и положение точек поворота  $\xi_i$  представлены на рис. 32. Квазиклассическая асимптотика решения радиального уравнения

(1.28) в области  $\xi_1 < \xi < \xi_2$ , где  $[p(\xi)]^2 > 0$ , имеет вид

$$\bar{\Pi}_{mk}(\xi; R) = N_{mk} [(\xi^2 - 1)p(\xi)]^{-1/2} \cos \left( \int_{\xi_1}^{\xi} p(\xi) d\xi - \frac{\pi}{4} \right), \quad (6.2)$$

а в областях  $1 \leq \xi < \xi_1$  и  $\xi > \xi_2$  экспоненциально затухает:

$$\bar{\Pi}_{mk}(\xi; R) = \frac{1}{2} N_{mk}^{(l)} [(\xi^2 - 1)p(\xi)]^{-1/2} \exp \left\{ - \left| \int_{\xi_i}^{\xi} p(\xi) d\xi \right| \right\}, \quad (6.3)$$

причем  $N_{mk}^{(1)} = N_{mk}$ , а  $N_{mk}^{(2)} = (-)^k N_{mk}$ .

Нормировка  $N_{mk}$  находится из условия

$$\frac{1}{2} N_{mk}^2 \int_{\xi_1}^{\xi_2} \frac{d\xi}{(\xi^2 - 1)p(\xi)} = 1. \quad (6.4)$$

Интеграл в (6.4) выражается через полные эллиптические

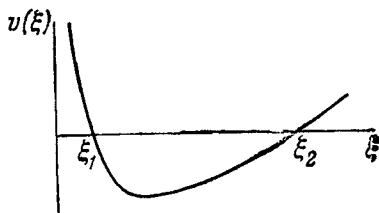


Рис. 32. Эффективный потенциал,  $v(\xi) = -[p(\xi)]^2$  радиального уравнения (1.28);  $\xi_1$  и  $\xi_2$  — корни квазิมпульса (6.1а).

ские интегралы. В предельных случаях  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$  из (6.4) получаем:

при  $R \rightarrow 0$

$$N_{mk} \approx \left( \frac{2l+1}{\pi} \right)^{1/2}, \quad (6.5a)$$

при  $R \rightarrow \infty$

$$N_{mk} \approx \left( \frac{4p}{\pi} \right)^{1/2}, \quad (6.5b)$$

Угловые части решений выглядят существенно по-разному в зависимости от соотношения между  $p$  и  $\lambda$ . В

пределе  $R \rightarrow \infty$  функция  $v(\eta) = -[p(\eta)]^2$  имеет вид кривой  $I$  на рис. 33, а и четыре действительных корня  $\eta_i$  (при  $m=0$  корни  $\eta_1 = -1$ ,  $\eta_4 = 1$ , а общий вид функции  $v(\eta) = -[p(\eta)]^2$  изображен на рис. 33, б). В области

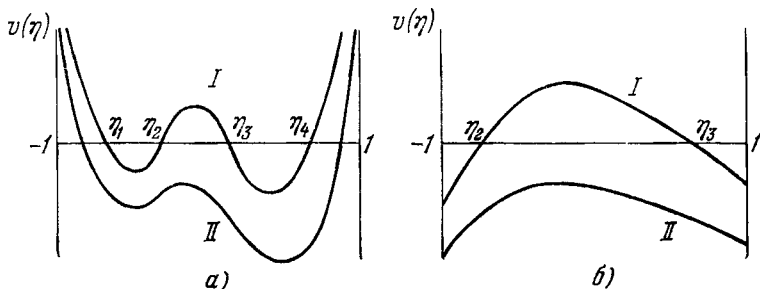


Рис. 33. Эффективный потенциал  $v(\eta) = -[p(\eta)]^2$  углового уравнения (1.14), соответствующий квазимпульсу (6.16). Кривые  $I$  и  $II$  отвечают предельным случаям  $p \gg 1$  и  $p^2 \ll 1$ . а) Случай  $m \neq 0$ , б) случай  $m = 0$ .

$\eta_1 < \eta < \eta_2$  для значений  $\eta$ , удовлетворяющих неравенствам  $m^2/(\lambda - b) \ll 1 - \eta^2 \ll (\lambda - b)/p^2$ , квазиклассическое решение равно

$$\bar{E}_{mq}(\eta; R) = N_{mq} [(1 - \eta^2) p(\eta)]^{-1/2} \cos \left( \int_{\eta_1}^{\eta} p(\eta) d\eta - \frac{\pi}{4} \right), \quad (6.6)$$

$$N_{mq} = N_{mk} = \left( \frac{2l + 1}{\pi} \right)^{1/2},$$

где нормировка  $N_{mq}$  вычисляется из соотношения

$$\frac{1}{2} N_{mq}^2 \int_{\eta_1}^{\eta_2} \frac{d\eta}{(1 - \eta^2) p(\eta)} = 1. \quad (6.7)$$

В области  $\eta_3 < \eta < \eta_4$  при значениях  $m^2/(\lambda + b) \ll \ll 1 - \eta^2 \ll (\lambda + b)/p^2$  справедливы выражения, аналогичные (6.6) и (6.7) с заменами  $\eta_1 \rightarrow \eta_3$ ,  $\eta_2 \rightarrow \eta_4$ ,  $N_{mq} \rightarrow N'_{mq}$ .

В остальных областях изменения  $\eta$ , где  $[p(\eta)]^2 < 0$ , решения имеют вид затухающей экспоненты

$$\begin{aligned} \bar{E}_{mq}(\eta; R) = \\ = \frac{1}{2} N_{mq}^{(i)} [(1 - \eta^2) p(\eta)]^{-1/2} \exp \left\{ - \left| \int_{\eta_i}^{\eta} p(\eta) d\eta \right| \right\}, \quad (6.8) \end{aligned}$$

причем

$$N_{mq}^{(1)} = (-)^q N_{mq}, \quad N_{mq}^{(2)} = (-)^{n_2} N_{mq}^{(1)}, \quad N_{mq}^{(3)} = (-)^{n_2'} N_{mq}',$$

$$N_{mq}^{(4)} = N_{mq}', \quad N_{mq} = N_{mk} = (4p/\pi)^{1/2},$$

а числа  $n_2$  и  $n_2'$  совпадают с параболическими квантовыми числами и равны числу нулей волновой функции  $\Xi_{mq}(\eta; R)$  в каждой из потенциальных ям на рис. 33, а.

В пределе  $R \rightarrow 0$  функция  $-[p(\eta)]^2$  имеет вид  $II$  на рис. 33, а и 33, б, а волновые функции представляются функциями (6.6) и (6.8) (для  $m=0$   $\eta_1=-1$ ,  $\eta_4=1$ ).

В частном случае  $b=0$  формулы (6.6) и (6.8) дают асимптотику с. у. с. ф.  $\bar{S}_{ml}(p, \eta)$ .

Нормировка  $\bar{N}_J(R)$  решений (3.4), представленных через функции  $\bar{\Pi}_{mk}$  и  $\bar{\Xi}_{mq}$ , определяемая из условия (3.5), при  $R \rightarrow 0$

$$\bar{N}_J(R) \approx \left[ \frac{32p^3}{R^3 a (2l+1)} \right]^{1/2}, \quad (6.9a)$$

при  $R \rightarrow \infty$  для  $eZ_1$ -термов

$$\bar{N}_J(R) \approx \left( \frac{4p}{R^3 n} \right)^{1/2}. \quad (6.9б)$$

Для  $eZ_2$ -термов нормировка (6.9б) отличается заменами

$$n \rightarrow n', \quad p \rightarrow p' = \frac{R}{2} \left[ -2E_{n_1' n_2' m}(R) \right]^{1/2}.$$

Термы  $E_{kqm}(R)$  и собственные значения  $\lambda_{mk}^{(\xi)}$  и  $\lambda_{mq}^{(\eta)}$  находятся из квазиклассических условий квантования, которые для случая  $I$  рис. 33, а имеют вид

$$\int_{\xi_1}^{\xi_2} p(\xi) d\xi = \pi \left( k + \frac{1}{2} \right), \quad (6.10a)$$

$$\text{ctg} \left( \int_{\eta_1}^{\eta_2} p(\eta) d\eta \right) \text{ctg} \left( \int_{\eta_3}^{\eta_4} p(\eta) d\eta \right) =$$

$$= \text{tg}^2 \left[ \frac{1}{2} \arctg \exp \left\{ - \int_{\eta_2}^{\eta_3} |p(\eta)| d\eta \right\} \right]. \quad (6.10б)$$

В случае II рис. 33, б условие (6.10б) принимает вид

$$\begin{aligned} \cos \left( \int_{\eta_1}^{\eta_2} p(\eta) d\eta \right) = \\ = - \left[ 1 + \exp \left\{ 2 \left| \int_{-y}^y \operatorname{Re} p(\eta) d\eta \right| \right\} \right]^{-1/2} \cos \left( \int_{-y}^y |\operatorname{Im} p(\eta)| d\eta \right), \end{aligned} \quad (6.10в)$$

где  $y$  — мнимая часть комплексно-сопряженных корней  $\eta_{2,3} = x \pm iy$ . Оба соотношения (6.10б) и (6.10в) переходят друг в друга при  $y=0$ , т. е. при условии  $\eta_2 = \eta_3$ , которое реализуется на вершине барьера, разделяющего ямы на рис. 33, а. Из трансцендентных уравнений (6.10а), (6.10б) в пределе  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$  можно получить разложения для констант разделения  $\lambda_{mk}^{(\xi)}$  и  $\lambda_{mq}^{(\eta)}$ , которые с точностью  $O(\kappa^{-2})$  и  $O(\chi^{-2})$  в каждом члене разложения по степеням  $p$  совпадают с асимптотическими разложениями (4.23) и (4.52):

при  $R \rightarrow \infty$  для  $eZ_1$ -решений имеем

$$\begin{aligned} \lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 2p\alpha) = -2p(2\kappa - \alpha) - \kappa(2\kappa - 2\alpha - m) + \\ + \frac{\kappa}{2p}(2\kappa^2 - 3\kappa\alpha + \alpha^2 - m^2) + o(p^{-2}), \end{aligned} \quad (6.11)$$

$$\begin{aligned} \lambda_{mq}^{(\eta)}(p, 2p\beta) = 2p(2\chi + \beta) - \chi(2\chi + 2\beta - m) - \\ - \frac{\chi}{2p}(2\chi^2 + 3\chi\beta + \beta^2 - m^2) + o(p^{-2}). \end{aligned}$$

Здесь  $\kappa = n_1 + \frac{m+1}{2}$ ,  $\chi = n_2 + \frac{m+1}{2}$ ,  $\alpha = \frac{a}{2p}$ ,  $\beta = \frac{b}{2p}$ , а параметры  $p$ ,  $a$ ,  $b$  определены формулами (3.3а). Из равенства  $\lambda_{mk}^{(\xi)} = \lambda_{mq}^{(\eta)}$  следует разложение для  $E_J(R)$ , которое с точностью до членов  $\sim R^{-2}$  включительно совпадает с асимптотическим разложением (4.59). Формулы для  $eZ_2$ -решений получаются из (6.11) заменами  $\beta \rightarrow -\beta$ ,  $n_2 \rightarrow n_2'$ .

В пределе  $R \rightarrow 0$  из условий квантования (6.10в) находим разложение

$$\begin{aligned} \lambda_{mk}^{(\xi)} = \left[ \frac{a}{2p} - (k + 1/2) \right]^2 + O(p^2), \\ \lambda_{mq}^{(\eta)} = (l + 1/2)^2 + \frac{p^2}{2} - \frac{b^2}{8(l + 1/2)^2} + O(p^4) \end{aligned} \quad (6.12)$$

и

$$E_{Nlm}(R) = \\ = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_1 + Z_2}{N} \right)^2 - R^2 \frac{Z_1 Z_2 (Z_1 + Z_2)^2}{4N^3 (l + 1/2)^5} [(l + 1/2)^2 - 3m^2]. \quad (6.13)$$

Выражение (6.13) для энергии с точностью  $O(l^{-2})$  совпадает с асимптотическим разложением (5.12). Точность разложений (6.11) — (6.13) возрастает с увеличением числа нулей решений  $k$  и  $q$ . Однако даже для основного состояния  $k=q=m=0$  они дают хорошее приближение для энергии в предельных случаях  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$ . Как показывает опыт численных расчетов, и в области конечных  $R$  термы  $E_j(R)$  задачи  $Z_1 e Z_2$  определяются из трансцендентных уравнений (6.10) с точностью не хуже 5% (Герштейн и др., 1965).

Подчеркнем, что в формулы (6.2), (6.8) следует подставлять не разложения (4.23), а «менее точные» разложения (6.11) и (6.12), ибо именно они обеспечивают аналитичность квазиклассических решений в особых точках уравнений.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Частный случай задачи двух центров — молекулярный ион водорода  $\text{H}_2^+$  — был рассмотрен в диссертации Pauli (1922) на основе старой боровской теории еще до создания квантовой механики. Ранние попытки использовать метод ВКБ для решения задачи (Willstätter, 1931, Van Engers, Kramer, 1933, Hellmig, 1937), были неудачными, поскольку в этих работах при переходе от уравнений (1.14) и (1.28) к уравнениям вида (6.1) гл. I использовались преобразования (6.8а) гл. I, которые приводили к неверным результатам для квазиимпульсов. (Они отличались от выражений (6.1) заменой  $m^2 \rightarrow m^2 - 1$ , что приводило к логарифмическим расходимостям фазовых интегралов (6.10) при  $m=0$  и к неаналитичности решений (6.3) и (6.8) в особых точках уравнений  $\xi=1$  и  $\eta=\pm 1$ .) Последовательное квазиклассическое решение задачи было найдено Герштейном и др. (1965) при использовании преобразования (6.8) гл. I, которое приводит к выражениям (6.1) для квазиимпульсов  $p(\xi)$  и  $p(\eta)$ . (Отметим, что эти выражения для квазиимпульсов совпадают с каноническими импульсами в методе Гамильтона — Якоби.) Одно из квазиклассических решений предложено Bates, Reid (1968).

Фох, Turner (1966) применили метод ВКБ для оценки расстояния  $R_{00}$ , при котором основной терм электрона в поле конечного диполя выходит в сплошной спектр. Асимптотика угловой функции задачи  $Ze(-Z)$  при  $b \rightarrow \infty$ , построенная в § 7, является асимптотикой квазиклассического типа.

## § 7. Слабосвязанные состояния в поле конечного диполя

**1. Постановка задачи.** Поведение уровней энергии в потенциальной яме при  $E \rightarrow 0$ , т. е. вблизи границы сплошного спектра, определяется характером убывания потенциала. Система двух кулоновских центров, у которых заряды равны по величине и противоположны по знаку, т. е. когда

$$Z_2 = Z = -Z_1, \quad a = 0, \quad b = 2ZR, \quad (7.1)$$

называется *конечным диполем*. Потенциал конечного диполя на бесконечности убывает как  $O(r^{-2})$ . Известно, что в сферически симметричном поле  $C \cdot r^{-2}$  уровни при  $C \leq -1/4$  экспоненциально сгущаются к границе континуума (Базь и др., 1971, стр. 525). Аналогичный эффект имеет место и для потенциала конечного диполя. Вычисление термов по стандартным схемам § 3 приводит к картине термов, изображенной на рис. 21, 34 (Wallis и др., 1960). Численные расчеты не удается провести для значений  $E \rightarrow 0$  из-за того, что нормировочный интеграл для радиальной функции быстро растет с приближением энергии к границе континуума. Термы выходят в сплошной спектр при конечных межцентровых расстояниях. Точки выхода термов в сплошной спектр, отмеченные на рис. 34 стрелками, соединены пунктиром с результатами расчета Wallis и др. (1960). В данном параграфе исследуются особенности сгущения уровней при  $E \rightarrow 0$  и их выхода в сплошной спектр, т. е. область спектра, отмеченная на рис. 34 пунктиром.

Исследование границы сплошного спектра в поле конечного диполя требует построения следующих асимптотик р. к. с. ф. и у. к. с. ф.:

$$P_{mh}(p, 0; \xi), \quad p \rightarrow 0, \quad m = O(1), \quad k = O(1), \quad (7.2)$$

$$E_{mq}(p, b; \eta), \quad p \rightarrow 0, \quad m = O(1), \quad q = O(1), \quad b \text{ — любое.} \quad (7.3)$$

**2. Асимптотика р. к. с. ф.  $P_{mh}(p, 0; \xi)$  и собственных значений  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 0)$  при  $p \rightarrow 0$ .** Уравнение (1.28) для  $P_{mh}(p, 0; \xi)$  не содержит параметра  $a$ , зависящего от зарядов, и совпадает с уравнением (1.29) гл. I для с. у. с. ф.  $S_{mi}(p, \eta)$ , рассматриваемым на промежутке  $[1, \infty)$ .

Однако собственные значения р. к. с. ф.  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, 0)$  и с. у. с. ф.  $\lambda_m(\rho)$  различны, и поэтому р. к. с. ф. при  $a=0$  не являются аналитическим продолжением с. у. с. ф. на полюсь  $[1, \infty)$  (см. для сравнения определения радиальных сфероидальных функций § 1 гл. I).

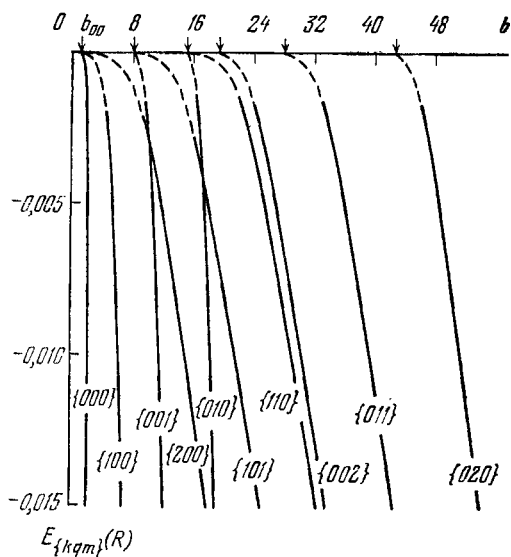


Рис. 34. Термы  $E_{\{kqm\}}(R)$  системы  $Z_1 e Z_2$  при  $Z_1 = -1, Z_2 = 1$  вблизи границы сплошного спектра.

Из общих свойств р. к. с. ф. следует, что любое собственное значение  $\lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, 0)$  с конечными номерами  $m, k$  при  $\rho \rightarrow 0$  стремится снизу к критическому значению  $-1/4$  (см. (1.47)), поэтому удобно ввести обозначение

$$\lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, 0) = -1/4 - \sigma_{mk}^2, \quad \sigma_{mk} \rightarrow 0 \text{ при } \rho \rightarrow 0. \quad (7.4)$$

Для краткости индексы величины  $\sigma_{mk}$  будем опускать. Подстановка

$$U(\xi) = C(\xi^2 - 1)^{1/2} \Pi_{mk}(\rho, 0; \xi) \quad (C = \text{const}) \quad (7.5)$$

приводит уравнение (1.28) к нормальному виду

$$U''(\xi) + \left[ -\rho^2 - \frac{\lambda}{\xi^2 - 1} + \frac{1 - m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right] U(\xi) = 0. \quad (7.6)$$



Функция  $U(\xi)$  удовлетворяет граничным условиям

$$U(\xi)|_{\xi=0} = 0, \quad U(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} 0. \quad (7.7)$$

Разобьем полуось  $[1, \infty)$  на два перекрывающихся промежутка

$$\mathcal{D}_1 = [1, \xi_1], \quad \mathcal{D}_\infty = [\xi_\infty, \infty], \quad \xi_\infty < \xi_1. \quad (7.8)$$

При  $\rho \rightarrow 0$  в области  $\mathcal{D}_1$  уравнение (7.6) можно приближенно заменить уравнением

$$\mathcal{P}''(\xi) + \left[ \frac{1/4 + \sigma^2}{\xi^2 - 1} + \frac{1 - m^2}{(\xi^2 - 1)^2} \right] \mathcal{P}(\xi) = 0, \quad (7.9)$$

действительным решением которого, удовлетворяющим граничному условию (7.7) при  $\xi=1$  является функция

$$\mathcal{P}(\xi) = (\xi^2 - 1)^{1/2} P_{-1/2+i\sigma}^m(\xi). \quad (7.10)$$

Линейно независимое с ним действительное решение есть

$$Q(\xi) = (\xi^2 - 1)^{1/2} Q_{-1/2+i\sigma}^m(\xi). \quad (7.11)$$

Здесь  $P_{-1/2+i\sigma}^m(\xi)$ ,  $Q_{-1/2+i\sigma}^m(\xi)$  — функции Лежандра первого и второго родов

$$P_\nu^m(\xi) = \frac{(-1)^m \Gamma(\nu + 1)}{\pi \Gamma(\nu - m + 1)} \int_0^\pi \frac{\cos m\varphi \, d\varphi}{[\xi^2 + \sqrt{\xi^2 - 1} \cos \varphi]^{\nu+1}}, \quad (7.12)$$

$$Q_\nu^m(\xi) = \frac{(-1)^m \Gamma(\nu + 1)}{\Gamma(\nu - m + 1)} \int_0^\infty \frac{\operatorname{ch} mt \, dt}{[\xi^2 + \sqrt{\xi^2 - 1} \operatorname{ch} t]^{\nu+1}}$$

(Градштейн, Рыжик, 1971, стр. 1015).

Функции  $P_{-1/2+i\sigma}^m(\xi)$ ,  $Q_{-1/2+i\sigma}^m(\xi)$  при  $m=0$  называются функциями конуса.

С помощью функций  $\mathcal{P}(\xi)$ ,  $Q(\xi)$  стандартным методом перейдем от дифференциального уравнения (7.6) к интегральному. Для решения  $U_1(\xi)$ , удовлетворяющего граничному условию (7.7), при  $\xi=1$  получаем интегральное уравнение Вольтерра

$$U_1(\xi) = \mathcal{P}(\xi) + \frac{\rho^2}{\omega_1} \int_1^\xi G_1(\sigma; \xi, \xi') U_1(\xi') \, d\xi'. \quad (7.13)$$

Функция Грина  $G_1(\sigma; \xi, \xi')$  имеет вид

$$G_1(\sigma; \xi, \xi') = \mathcal{P}(\xi') Q(\xi) - \mathcal{P}(\xi) Q(\xi'), \quad (7.14)$$

а  $\omega_1$  — определитель Вронского функций  $\mathcal{P}(\xi)$ ,  $Q(\xi)$ .  
Итерационный ряд для уравнения (7.13)

$$U_1(\xi) = \mathcal{P}(\xi) + \frac{p^2}{\omega_1} \int_1^{\xi} G_1(\sigma; \xi, \xi') \mathcal{P}(\xi') d\xi' + \dots \quad (7.15)$$

имеет вид разложения по степеням малого параметра  $p^2$  с коэффициентами, зависящими от  $\xi$ . Ряд (7.15) сходится при любых конечных  $\xi$ , т. е. верхней границей области  $\mathcal{D}_1 = [1, \xi_1]$  может быть любое конечное  $\xi_1$ . При  $p \rightarrow 0$  в области  $\xi \in \mathcal{D}_\infty$  уравнение (7.6) приближенно совпадает с уравнением

$$f''(x) + \left[ -1 + \frac{1/4 + \sigma^2}{x^2} \right] f(x) = 0, \quad (7.16)$$

в котором сделано масштабное преобразование

$$x = p\xi. \quad (7.17)$$

Линейно независимыми решениями уравнения (7.16) являются функции

$$f(\sigma, x) = x^{1/2} I_{i\sigma}(x), \quad g(\sigma, x) = x^{1/2} K_{i\sigma}(x), \quad (7.18)$$

где  $I_{i\sigma}(x)$  — модифицированная функция Бесселя первого рода

$$I_\nu(x) = \sum_{s=0}^{\infty} \frac{(x/2)^{2s+\nu}}{s! \Gamma(s+\nu+1)}, \quad (7.19)$$

а  $K_{i\sigma}(x)$  — функция Макдональда,

$$K_\nu(x) = \frac{\pi}{2 \sin(\nu\pi)} [I_{-\nu}(x) - I_\nu(x)] \quad (7.20)$$

(Бейтмен, Эрдейи, 1967, т. 2, стр. 13). Функция  $K_{i\sigma}(x)$  при  $x \rightarrow \infty$  убывает по экспоненте.

Дифференциальное уравнение (7.6) с граничным условием (7.7) при  $\xi \rightarrow \infty$  эквивалентно интегральному уравнению Вольтерра

$$U_\infty(\xi) = g(\sigma, x) -$$

$$- \frac{p^2}{\omega_\infty} \int_x^\infty G_\infty(\sigma; x, x') v(\sigma, p, x') U_\infty\left(\frac{x'}{p}\right) dx', \quad x = p\xi. \quad (7.20)$$

Функция Грина  $G_\infty(\sigma; x, x')$  имеет вид, аналогичный (7.14)

$$G_\infty(\sigma; x, x') = g(\sigma, x')f(\sigma, x) - g(\sigma, x)f(\sigma, x'), \quad (7.21)$$

$\omega_\infty$  — вронскиан функций  $g(\sigma, x)$ ,  $f(\sigma, x)$ , а потенциал  $v(\sigma, \rho, x)$  определяется формулой

$$v(\sigma, \rho, x) = -\frac{1/4 + \sigma^2}{x^2(x^2 - \rho^2)} - \frac{1 - m^2}{(x^2 - \rho^2)^2}. \quad (7.22)$$

Итерационный ряд для уравнения (7.20)

$$U_\infty(\xi) = g(\sigma, x) + \frac{\rho^2}{\omega_\infty} \int_0^x G_\infty(\sigma; x, x') v(\sigma, \rho, x') g(\sigma, x') dx' + \dots \quad (7.23)$$

сходится при  $x = p\xi > \rho$ , следовательно, нижней границей интервала  $\mathcal{D}_\infty = [\xi_\infty, \infty)$  может быть выбрано число, сколь угодно близкое к единице:  $\xi_\infty = 1 + 0$ .

Разлагая  $v(\sigma, \rho, x)$  в ряд по степеням  $\rho$

$$v(\sigma, \rho, x) = \sum_{s=0}^{\infty} v_s(\sigma, x) \rho^{2s}, \quad (7.24)$$

получаем из (7.23)  $U_\infty(\xi)$  в виде разложений по малому параметру  $\rho$  с коэффициентами, зависящими от  $x$ .

Построенные решения  $U_1(\xi)$  и  $U_\infty(\xi)$  должны быть линейно зависимыми в области перекрывания  $\mathcal{D}_1$  и  $\mathcal{D}_\infty$ , т. е. при  $\xi_\infty < \xi < \xi_1$ , следовательно, должно выполняться равенство

$$U_1(\xi) = CU_\infty(\xi) \quad (C = \text{const}) \quad (7.25)$$

и равенство ему эквивалентное

$$U_1'(\xi)U_\infty(\xi) - U_1(\xi)U_\infty'(\xi) = 0. \quad (7.26)$$

Введем переменную  $y$

$$y = \rho^{1/2}\xi = \rho^{-1/2}x$$

со следующей областью изменения

$$y = O(1). \quad (7.27)$$

В области (7.27) справедливы одновременно итерационные ряды для интегральных уравнений (7.13), (7.20). Перестроим итерационные ряды (7.15), (7.23) в области (7.27) так, чтобы они имели вид разложений по малому

параметру  $p$  с коэффициентами, зависящими от  $y$ . Воспользовавшись асимптотикой функций Лежандра, асимптотикой интегралов в (7.15) при  $\xi \rightarrow \infty$  и разложением функций Бесселя и интегралов в (7.23) при  $x \rightarrow 0$ , получаем в области (7.27) решения  $U_1(\xi)$ ,  $U_\infty(\xi)$  в одинаковом функциональном виде. Приведем для краткости лишь главные члены разложения  $U_1(\xi)$ ,  $U_\infty(\xi)$

$$U_1(\xi) = C_1 y^{1/2} \cos(\sigma \ln y + [\Phi_1]_0(1 + o(p))), \quad (7.28a)$$

$$U_\infty(\xi) = C_\infty y^{1/2} \cos(\sigma \ln y + [\Phi_\infty]_0(1 + o(p))). \quad (7.28b)$$

Здесь  $C_1$ ,  $C_\infty$  — константы,  $y = p^{1/2} \xi$ , а фазы  $[\Phi_1]_0$ ,  $[\Phi_\infty]_0$  имеют вид

$$[\Phi_1]_0 = -\frac{\sigma}{2} \ln p + \sigma \ln 2 + \arg \frac{\Gamma(i\sigma)}{\Gamma(1/2 + i\sigma - m)}, \quad (7.29a)$$

$$[\Phi_\infty]_0 = \frac{\sigma}{2} \ln p - \sigma \ln 2 - \arg \Gamma(1 + i\sigma) - \frac{\pi}{2}. \quad (7.29b)$$

Можно показать, что условие (7.26) эквивалентно равенству двух тангенсов

$$\operatorname{tg} \Phi_1 = \operatorname{tg} \Phi_\infty, \quad (7.30)$$

где фазы  $\Phi_1$ ,  $\Phi_\infty$ , как функции параметров  $m$ ,  $\sigma$ ,  $p$  определяются с помощью интегральных уравнений (7.13), (7.20) в виде разложений по малому параметру  $p$ . Поправочные члены в этих разложениях содержат не только степенные по  $p$  поправки, но также и поправки вида  $p^s \ln p$ .

Из равенства (7.30) следует, что разность фаз  $\Delta$

$$\Delta \equiv \Phi_1 - \Phi_\infty \quad (7.31)$$

должна быть равна целому числу, умноженному на  $\pi$

$$\Delta = \pi k, \quad k — \text{целое}. \quad (7.32)$$

Приведем два старших члена разложения  $\Delta$  по параметру  $p$  в зависимости от  $m$ ,  $p$ ,  $\sigma$

$$\Delta_m(p, \sigma) = \Delta_m^0(p, \sigma) + \Delta_m^1(\sigma) p^2 \ln p + O(p^2), \quad (7.33)$$

где

$$\Delta_m^0 = -\sigma \ln p + \sigma \omega(\sigma, m), \quad (7.34)$$

$$\Delta_m^1 = \frac{(m^2 - \sigma^2 - 5/4)}{4\sigma(1 + \sigma^2)}, \quad (7.35)$$

$$\omega(\sigma, m) = 2 \ln 2 + \frac{1}{\sigma} \left[ 2 \arg \Gamma(1 + i\sigma) - \arg \Gamma\left(\frac{1}{2} + i\sigma - m\right) \right]. \quad (7.36)$$

При получении формул (7.33) — (7.35), для функций  $U_1(\xi)$ ,  $U_\infty(\xi)$  использованы внеинтегральные члены и первые итерации интегральных уравнений (7.13), (7.20), в которых оставлены два старших члена в области (7.27) при  $p \rightarrow 0$ . Выражения для логарифмических производных функций  $U_1(\xi)$ ,  $U_\infty(\xi)$  в области (7.27) с точностью до  $O(p^2)$  приведены в статье Абрамова, Комарова (1972).

Учитывая, что для собственной функции  $\Delta_m(p, \sigma) = \pi k$  получаем из (7.33) спектральное равенство, связывающее  $\sigma_{mk} = [-1/4 - \lambda_{mk}^{(\xi)}]^{1/2}$  и  $p$ :

$$-\ln p = \frac{\pi(k+1)}{\sigma} - \omega(\sigma, m) - \frac{m^2 - \sigma^2 - 5/4}{4\sigma^2(1 + \sigma^2)} \ln^2 p + o(p^2). \quad (7.37)$$

Входящее в формулу (7.37) целое неотрицательное число  $k$  равно числу нулей р. к. с. ф.

Спектральную связь  $\sigma$  и  $p$  (7.37) при малых  $p$  удобно представить в виде, разрешенном относительно  $\ln p$

$$-\ln p = \frac{\pi(k+1)}{\sigma} - \omega(\sigma, m) + \frac{m^2 - \sigma^2 - 5/4}{4\sigma^2(1 + \sigma^2)} \left[ \frac{\pi(k+1)}{\sigma} - \omega(\sigma, m) \right] \exp \left[ -\frac{2\pi(k+1)}{\sigma} + 2\omega(\sigma, m) \right] + o \left( \exp \left[ -\frac{2\pi(k+1)}{\sigma} \right] \right). \quad (7.38)$$

Разложение (7.38) дает приближение тем лучше, чем больше отношение  $k/\sigma$ . Главный член в правой части соотношения (7.38) приводит к оценке

$$p^2 = \exp \left[ -\frac{2\pi(k+1)}{\sigma} + 2\omega(\sigma, m) \right] \left( 1 + o \left( \exp \left[ -\frac{4\pi(k+1)}{\sigma} \right] \right) \right). \quad (7.39)$$

Даваемое этой формулой экспоненциальное сгущение уровней  $p^2(\sigma)$  при  $\sigma \rightarrow 0$  объясняется свойствами уравнения (7.6) при  $\xi \rightarrow \infty$ . Аналогичное сгущение уровней

имеет место в уравнении Шредингера с потенциалом  $-(1/4 + \sigma^2)r^{-2}$ , в котором уровни энергии определяются равенством (Базь и др., 1971, стр. 525)

$$E_n = E_0 \exp\left(-\frac{2\pi n}{\sigma}\right), \quad n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (7.40)$$

Различие заключается в том, что в поле  $-(1/4 + \sigma^2)r^{-2}$  дискретный спектр простирается до  $-\infty$  («падение на центр»), в то время как спектр  $p^2(\sigma)$  задачи (7.6), (7.7) ограничен снизу, поскольку, в отличие от  $n$ , значения  $k$  неотрицательные.

Волновая функция  $\Pi_{mk}(p, 0; \xi)$ , удовлетворяющая условию нормировки (1.31), представляется в виде

$$\begin{aligned} \Pi_{mk}(p; 0, \xi) = & \\ = & \begin{cases} P_{-1/2+i\sigma}^m(\xi)(1+o(p)), & \xi \in \mathcal{D}_1, \\ (-1)^k \left| \Gamma\left(\frac{1}{2} - m + i\sigma\right) \right| \sqrt{\frac{\pi\xi}{2(\xi^2 - 1)}} K_{i\sigma}(p\xi)(1+o(p)), & \xi \in \mathcal{D}_\infty, \end{cases} \end{aligned} \quad (7.41)$$

где  $\sigma$  и  $p$  связаны соотношением (7.37).

Как обычно, формулы, описывающие поведение дискретных собственных значений вблизи границы сплошного спектра, позволяют найти в сплошном спектре поведение фаз рассеяния вблизи от границы. Можно показать, что величина  $\Delta$ , определенная равенством (7.31), совпадает при  $-p^2 \rightarrow c^2 > 0$  с фазой рассеяния решения радиального уравнения  $\chi_m(c, 0, \lambda)$  (1.37). Формула (7.33) дает разложение  $\chi_m(c, 0, \lambda)$  при  $c \rightarrow 0$

$$\chi_m(c, 0, \lambda) = \Delta_m(p, \sigma) \Big|_{p=ic}, \quad \sigma^2 = -1/4 - \lambda. \quad (7.42)$$

**3. Асимптотика у. к. с. ф.  $\Xi_{mq}(p, b; \eta)$  и  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)$  при  $b \rightarrow \infty$ .** Угловые кулоновские сферические функции в области, определяемой условиями (7.3), не сводятся ни к каким более простым функциям. Уравнение для у. к. с. ф. в этой области без дополнительных предположений можно интегрировать лишь численно (см. п. 4 § 3).

Для получения аналитических формул, описывающих качественно поведение энергетических уровней в поле конечного диполя вблизи границы сплошного спектра, положим  $b$  большим параметром, а  $p$  будем считать

ограниченным. Асимптотика у. к. с. ф. при  $b \rightarrow \infty$  строится методом эталонного уравнения (§ 5 гл. I).

Уравнение (1.14) с помощью замены

$$V(\eta) = (1-\eta^2)^{1/2} \Xi_{mq}(p, b; \eta) \quad (7.43)$$

приводится к нормальному виду

$$V''(\eta) + \left[ -p^2 + \frac{b\eta + \lambda}{1-\eta^2} + \frac{1-m^2}{(1-\eta^2)^2} \right] V(\eta) = 0. \quad (7.44)$$

На границах интервала  $\eta \in [-1, 1]$  функция  $V(\eta)$  обращается в нуль

$$V(\eta) |_{\eta=\pm 1} = 0. \quad (7.45)$$

При  $b \rightarrow \infty$  уравнение (7.44) имеет полюсы в каждом из центров и точку поворота, которая близка к  $\eta=0$ . Эффективный потенциал уравнения (7.44)

$$v(\eta) = -\frac{b\eta + \lambda}{1-\eta^2} - \frac{1-m^2}{(1-\eta^2)^2}$$

схематически изображен на рис. 35. Решение  $V(\eta)$  строится в двух перекрывающихся промежутках

$$\mathcal{D}_0 = [-1 + \varepsilon, \eta_0], \quad \eta_0 > 0;$$

$$\mathcal{D}_1 = [\eta_1, 1], \quad 0 < \eta_1 < \eta_0. \quad (7.46)$$

В окрестности  $\eta=1$  ( $\eta \in \mathcal{D}_1$ ) эталонным является уравнение

$$W_1''(y) + \left[ \frac{b}{y} + \frac{1-m^2}{4y^2} \right] W_1(y) = 0, \quad (7.47)$$

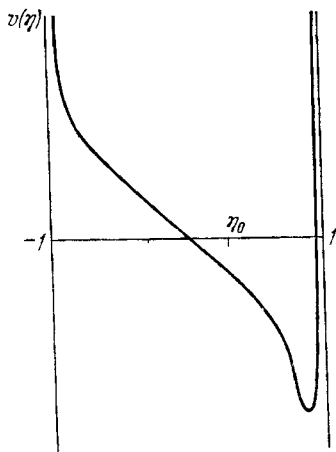


Рис. 35. Эффективный потенциал  $v(\eta)$  в уравнении (7.44).

решение которого, обращающееся в нуль при  $y=0$ , выражается через функцию Бесселя первого рода (4.55) гл. I

$$W_1(y) = y^{1/2} J_m(2b^{1/2}y). \quad (7.48)$$

Решение исходного уравнения (7.44) строится в виде

$$V_1(\eta) = [y'(\eta)]^{-1/2} W_1(y(\eta)). \quad (7.49)$$

Граничное условие (7.45) при  $\eta=1$  будет выполнено,

если положить  $y(1) = 0$ . Применяя рекуррентную процедуру, описанную в § 5 гл. I, находим масштабное преобразование

$$y(\eta) = y_0(\eta) + b^{-1}y_1(\eta) + O(b^{-2}),$$

$$y_0(\eta) = \left[ \frac{1}{2} \int_1^\eta \eta^{1/2} (1 - \eta^2)^{-1/2} d\eta \right]^2, \quad (7.50)$$

$$y_1(\eta) = y_0^{1/2}(\eta) \int_1^\eta \left[ \frac{1}{4} \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{1/2} \{y_0(\eta), \eta\} - \frac{1}{2} (1 - m^2) \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{1/2} \left[ (1 - \eta^2)^{-2} - \frac{1}{4} y_0'(\eta) y_0^{-2}(\eta) \right] + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} p^2 \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{1/2} - \frac{1}{2} \lambda \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{-1/2} \right] d\eta,$$

где  $\{y, \eta\} = -\frac{3}{2} \left( \frac{y''}{y'} \right)^2 + \frac{y'''}{y'}$  — производная Шварца.

В области  $\mathcal{D}_0$  в качестве эталонного уравнения выбирается уравнение Эйри

$$W_0''(z) + bzW_0(z) = 0, \quad (7.51)$$

общим решением которого является линейная комбинация функций Эйри  $Ai$  и  $Bi$  (Лебедев, 1963)

$$W_0(z) = Ai(-b^{1/3}z) + d Bi(-b^{1/3}z). \quad (7.52)$$

Волновая функция  $V_0(\eta)$  при  $\eta \in \mathcal{D}_0$  представляет в виде

$$V_0(\eta) = [z'(\eta)]^{-1/2} W_0(z(\eta)). \quad (7.53)$$

Масштабное преобразование  $z(\eta)$  строится по общим правилам § 5 гл. I

$$z(\eta) = z_0(\eta) + b^{-1}z_1(\eta) + O(b^{-2}),$$

$$z_0(\eta) = \left[ \frac{3}{2} \int_0^\eta \eta^{1/2} (1 - \eta^2)^{-1/2} d\eta \right]^{2/3}, \quad (7.54)$$

$$z_1(\eta) = z_0^{-1/2}(\eta) \int_0^\eta \left[ -\frac{1}{4} \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{1/2} \{z_0(\eta), \eta\} + \right. \\ \left. + \frac{1 - m^2}{2} \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{-3/2} - \frac{p^2}{2} \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{1/2} + \right. \\ \left. + \frac{\lambda}{2} \eta^{-1/2} (1 - \eta^2)^{-1/2} \right] d\eta.$$



В области перекрывания  $\mathcal{D}_0$  и  $\mathcal{D}_1$ , т. е. при  $\eta_1 < \eta < \eta_0$  решения  $V_1(\eta)$  и  $V_0(\eta)$  должны быть линейно зависимыми

$$V_0(\eta) = CV_1(\eta) \quad (C = \text{const}). \quad (7.55)$$

Условие (7.55) удобно представить в виде

$$V_0^*(\eta) V_1(\eta) - V_0(\eta) V_1^*(\eta) = 0. \quad (7.56)$$

Подставляя в равенство (7.56) разложения  $V_1(\eta)$  и  $V_0(\eta)$  и используя асимптотики функций Эйри и Бесселя при больших аргументах, получаем трансцендентное уравнение, определяющее  $d$  как функцию  $m, p, b, \lambda$

$$d = \text{ctg}(\delta_0 + \delta_1 b^{-1/2} + O(b^{-3/2})), \quad (7.57)$$

$$\delta_0(b) = b^{1/2} (2\pi)^{3/2} \Gamma^{-2}(1/4) - \frac{m\pi}{2} - q\pi, \quad q = 0, 1, \dots, \quad (7.58)$$

$$\delta_1(b) = \frac{\Gamma^2(1/4)}{4(2\pi)^{1/2}} \left( -\frac{m^2}{2} + \frac{5}{12} + \lambda - \frac{2}{3} p^2 \right). \quad (7.59)$$

Граничное условие (7.45) при  $\eta = -1$  будет выполнено с экспоненциальной точностью, если положить постоянную  $d$  в линейной комбинации (7.52) равной нулю

$$d = 0. \quad (7.60)$$

Собственные значения  $\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, b)$  находятся из условия (7.60), где  $d$  определено формулой (7.57). Получающееся спектральное равенство удобно представить в виде, разрешенном относительно большого параметра  $b$ :

$$b(\lambda, p) = \frac{\Gamma^4(1/4)}{32\pi} (2q + m + 1)^2 \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{6m^2 - 5 - 12\lambda + 8p^2}{3\pi(2q + m + 1)^2} + O([2q + m + 1]^{-4}) \right\}. \quad (7.61)$$

Целое неотрицательное число  $q$ , входящее в равенства (7.59), (7.61), равно числу нулей у. к. с. ф. При постановке задачи не делалось никаких специальных предположений о величине  $q$ . Из формулы (7.61) вытекает, что при  $b \rightarrow \infty$  справедлива оценка  $q = O(b^{1/2})$ , т. е. в этом случае число нулей у. к. с. ф.  $q$  также

является большим параметром. Следовательно, асимптотика у. к. с. ф. при  $b \rightarrow \infty$ ,  $m = O(1)$  является асимптотикой квазиклассического типа (§ 6). Формула (7.61) тем точнее, чем больше осцилляций совершает волновая функция.

**4. Энергетический спектр системы вблизи  $E=0$ .** Энергия  $E$  как функция межцентрового расстояния  $R$  и заряда  $Z$  находится из системы равенств

$$p^2 = -\frac{1}{2}ER^2, \quad b = 2ZR, \quad (7.62)$$

$$\lambda_{mq}^{(n)}(p, b) = \lambda_{mk}^{(k)}(p, 0) = -1/4 - \sigma^2.$$

Когда  $\lambda = -1/4$  ( $\sigma = 0$ ),  $p = 0$ , дискретный спектр в радиальном уравнении пропадает. Термы  $E(-Z, Z, R)$  при этом условии выходят в сплошной спектр. Координаты  $R_{qm}$  точек выхода термов в сплошной спектр и соответствующие им значения удвоенного критического дипольного момента  $b_{qm} = 2ZR_{qm}$  определяются из условия

$$2ZR_{qm} = b(\lambda, p) \Big|_{\substack{\lambda = -1/4 \\ p = 0}} = b_{qm}. \quad (7.63)$$

С помощью равенства (7.61) получаем для  $b_{qm}$  приближенную формулу

$$b_{qm} = \frac{\Gamma^4(1/4)}{32\pi} (2q + m + 1)^2 \times \\ \times \left\{ 1 + \frac{2}{3\pi} \frac{3m^2 - 1}{(2q + m + 1)^2} + O(|2q + m + 1|^{-4}) \right\}. \quad (7.64)$$

Точки  $R_{qm}(b_{qm})$  при фиксированном заряде  $Z$  распределены квадратично по  $q$ . При  $R < R_{00}$  ( $b < b_{00}$ ) энергетических уровней в системе нет вовсе.

Crawford (1967) проинтегрировал численно угловое уравнение (7.44) при  $\lambda = -1/4$  с помощью разложения по функциям Лежандра (2.13) и нашел все значения  $b_{qm} < 100$ .

В табл. 20 сравниваются значения  $b_{qm}$ , полученные по формуле (7.64), с результатами расчета Кроуфорда. В каждой клетке табл. 20 на верхней строке приведен результат Кроуфорда, на нижней — значение  $b_{qm}$ , вычисленное по формуле (7.64). Как и следовало ожидать, лучше совпадают  $b_{qm}$  с большими  $q$ , однако и для  $q = 0$  расхождение не слишком велико.

Уровни энергии в окрестности точек  $R_{qm}$  описываются приближенной формулой

$$E_{kqm}(-Z, Z, R) \approx -\frac{2}{R^2} \exp \left[ -\frac{\Gamma^2(1/4)(k+1)}{2[Z(R-R_{qm})]^{1/2}} + 2\omega(0, m) \right], \quad (7.65)$$

которая получается при подстановке в (7.62) равенств (7.39), (7.61) с учетом (7.4), (7.64).

В формуле (7.65) отброшенные члены имеют вид кратных экспонент. В показателе экспоненты не учтены

Таблица 20

Значения удвоенного критического дипольного момента  $b_{qm} < 100$

$q \backslash m$	0	1	2	3	4	5
0	1,278630 1,35	7,583946 7,61	19,05805 19,49	35,724466 36,99	57,58641 60,10	84,64391 88,89
1	15,09391 15,11	28,22423 28,24	46,79707 47,09	70,67038 71,37	99,79020 101,39	
2	42,60181 42,61	62,60340 62,62	88,13252 88,30			
3	83,85461 83,88					

члены порядка  $O([Z(R-R_{qm})]^{1/2})$ , а коэффициент при  $(R-R_{qm})^{1/2}$  вычислен с точностью до  $O([2q+m+1]^{-2})$ .

Соотношение (7.39) с хорошей точностью описывает спектр радиальной задачи в окрестности критической точки  $\rho=0, \sigma=0$ . Однако величина  $\rho(\sigma)$ , согласно формуле (7.39), экспоненциально зависит от  $\sigma$ . Поэтому даже небольшая погрешность при вычислении  $\sigma$  из спектрального равенства (7.61) для угловой задачи приводит к большой ошибке при вычислении энергии. Подчеркнем еще раз, что в спектральной области, определяемой условиями (7.3), у. к. с. ф. не сводятся ни к каким более простым известным функциям.

При  $R > R_{00}$  в любом сколь угодно малом энергетическом интервале вблизи  $E=0$ , имеется бесконечное

число уровней. Термы, у которых  $q$  и  $m$  одинаковы, а  $k$  — любые, выходят в сплошной спектр при одном и том же  $R=R_{qm}$ . Формула (7.65) показывает, что в этой точке они касаются прямой  $E=0$  таким образом, что все производные  $\frac{\partial^s}{\partial R^s} E_{kqm}(R)$  ( $s=0, 1, \dots$ ) при  $R=R_{qm} \neq 0$  равны нулю. Внутри группы с одинаковыми  $q$  и  $m$  термы с большим радиальным числом  $k$  подходят к критической точке более полого.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Численно термы конечного диполя вычисляли Wallis, Herman, Milnes (1960). Наиболее близко к границе сплошного спектра подходит вариационный расчет Turner, Anderson, Fox (1968). Fermi, Teller (1947) впервые указали, что связанные состояния в поле диполя существуют, только если дипольный момент превосходит критическое значение  $b_{00}/2=0,639$  ат. ед. В дальнейшем ряд авторов независимо обсуждали этот вопрос; его история изложена Turner и др. (1968). Наиболее подробные результаты получил Crawford (1967), вычисливший значения критического удвоенного дипольного момента  $b_{qm} < 100$ .

Поведение основного энергетического терма в зависимости от  $R$  вблизи критической точки рассматривал Wightman (1950). Он обратил внимание на то, что терм приближается к границе сплошного спектра очень полого. Вследствие этого критическая величина дипольного момента не имеет физически строго определенного значения, так как даже очень слабое возмущение приводит к значительному ее изменению.

Изложение в данном параграфе следует работе Абрамова и Комарова (1972).

## § 8. Связь задачи $Z_1 e Z_2$ с одноцентровой кулоновской задачей

**1. Оператор константы разделения.** Хорошо известно, что задача двух кулоновских центров допускает разделение переменных в вытянутых сфероидальных координатах как в классической, так и в квантовой механике. *Возможность разделения переменных в задаче  $Z_1 e Z_2$  связана с высокой внутренней симметрией кулоновского поля* (Coulson, Joseph, 1967). Покажем это, построив с помощью интегралов движения одноцентровой кулоновской задачи оператор, собственными значениями которого являются значения константы разделения в задаче  $Z_1 e Z_2$ .

Гамильтониан одноцентровой кулоновской задачи имеет вид

$$h = \frac{P^2}{2} - \frac{Z}{r}, \quad r^2 = \sum_{i=1}^3 x_i^2. \quad (8.1)$$

Согласно идее Фока (1935) движение частицы в кулоновском поле при отрицательной энергии эквивалентно свободному движению на поверхности 4-сферы. Шесть компонент углового 4-момента являются интегралами движения. Если выразить последние через 3-координаты и 3-импульсы, то оказывается, что три компоненты 4-момента являются компонентами углового 3-момента

$$\mathcal{L}_{ij} = x_i P_j - x_j P_i, \quad i=1, 2, 3, \quad (8.2)$$

а три оставшиеся компоненты 4-момента образуют известный вектор Рунге — Ленца

$$A_i = -\frac{1}{P_0} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 (\mathcal{L}_{ij} P_j - P_j \mathcal{L}_{ji}) - \frac{Z x_i}{r} \right\}, \quad (8.3)$$

где

$$P_0 = (-2E)^{1/2}. \quad (8.4)$$

С гамильтонианом (8.1) одновременно коммутируют квадрат полного момента

$$L^2 = \sum_{i < j=1}^3 \mathcal{L}_{ij}^2, \quad (8.5)$$

его третья компонента  $L_3 = \mathcal{L}_{12}$  и третья компонента вектора Рунге — Ленца  $A_3$ . Следовательно, для произвольного числа  $R \geq 0$  справедливо равенство

$$[h, L^2 \pm R P_0 A_3] = 0, \quad (8.6)$$

где квадратные скобки означают коммутатор.

Поместим заряд  $Z_1$ , создающий кулоновское поле, в точку с координатами  $(0, 0, -R/2)$  и рассмотрим преобразование соотношения (8.6) при заменах

$$\begin{aligned} Z &\rightarrow Z_1, \quad x_i \rightarrow x'_i = x_i + \frac{1}{2} R \delta_{i3}, \\ r^2 &\rightarrow r_1^2 = \sum_{i=1}^3 x_i'^2 = x_1^2 + x_2^2 + (x_3 + R/2)^2. \end{aligned} \quad (8.7)$$

Операторы  $h$ ,  $L^2$ ,  $A_3$  при заменах (8.7) преобразуются

следующим образом:

$$h \rightarrow h' = \frac{P^2}{2} - \frac{Z_1}{r_1}, \quad (8.8)$$

$$\begin{aligned} L^2 \rightarrow L'^2 &= \sum_{i < j=1}^3 (x'_i P_j - x'_j P_i)^2 = \\ &= L^2 + \frac{1}{4} R^2 (P^2 - P_3^2) + \sum_{j=1}^2 (\mathcal{L}_{3j} P_j - P_j \mathcal{L}_{j3}), \end{aligned} \quad (8.9)$$

$$\begin{aligned} A_3 \rightarrow A'_3 &= -\frac{1}{P_0} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{j=1}^2 (\mathcal{L}_{3j} P_j - P_j \mathcal{L}_{j3}) - \frac{(x_3 + R/2) Z_1}{r_1} \right\} - \\ &\quad - \frac{R}{2P_0} (P^2 - P_3^2), \end{aligned} \quad (8.10)$$

и поэтому для линейной комбинации  $L'^2 + RP_0 A'_3$  имеем

$$L'^2 + RP_0 A'_3 = L^2 + \frac{1}{4} R^2 (P^2 - P_3^2) + \frac{RZ_1}{r_1} \left( x_3 + \frac{R}{2} \right). \quad (8.11)$$

Равенство (8.6), записанное для преобразованных операторов  $h'$  и  $L'^2 + RP_0 A'_3$ , приобретает вид

$$\left[ \frac{P^2}{2} - \frac{Z_1}{r_1}, L^2 + \frac{1}{4} R^2 P_3^2 + \frac{RZ_1 x_3}{r_1} \right] = 0. \quad (8.12)$$

Если поместить заряд  $Z_2$ , создающий кулоновское поле, в точку с координатами  $(0, 0, R/2)$ , т.е. сделать замены

$$Z \rightarrow Z_2, \quad x_i \rightarrow x'_i = x_i - \frac{1}{2} R \delta_{i3}, \quad (8.13)$$

$$r \rightarrow r_2 = \sum_{i=1}^3 x_i'^2 = x_1^2 + x_2^2 + (x_3 - R/2)^2,$$

то, повторяя выкладки (8.8) — (8.12), получаем

$$\left[ \frac{P^2}{2} - \frac{Z_2}{r_2}, L^2 + \frac{1}{4} R^2 P_3^2 - \frac{RZ_2 x_3}{r_2} \right] = 0. \quad (8.14)$$

Найдем интегралы движения в задаче  $Z_1 e Z_2$ , гамильтониан которой есть

$$H = \frac{P^2}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, \quad (8.15)$$

где  $r_1$  и  $r_2$  определены соотношениями (8.7), (8.13).

Очевидно, что третья компонента момента  $L_3$ , которая не содержит координаты  $x_3$ , коммутирует с гамильтонианом (8.15), т. е. остается интегралом движения и в двухцентрковой задаче.

Еще один интеграл движения следует из равенств (8.12), (8.14), которые могут быть представлены в виде

$$\left[ \frac{P^2}{2}, RZ_1 \frac{x_3}{r_1} \right] - \left[ \frac{Z_1}{r_1}, L^2 + \frac{1}{4} R^2 P_3^2 \right] = 0, \\ \left[ \frac{P^2}{2}, -RZ_2 \frac{x_3}{r_2} \right] - \left[ \frac{Z_2}{r_2}, L^2 + \frac{1}{4} R^2 P_3^2 \right] = 0;$$

откуда получаем коммутационное соотношение

$$\left[ \frac{P^2}{2} - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}, L^2 + \frac{1}{4} R^2 P_3^2 + RZ_1 \frac{x_3}{r_1} - RZ_2 \frac{x_3}{r_2} \right] = 0. \quad (8.16)$$

Таким образом, величина

$$\Lambda \equiv L^2 + \frac{1}{4} R^2 P_3^2 + RZ_1 \frac{x_3}{r_1} - RZ_2 \frac{x_3}{r_2} - \frac{1}{2} R^2 H \quad (8.17)$$

является интегралом движения в задаче  $Z_1 e Z_2$ . Оператор  $\Lambda$  коммутирует также с третьей компонентой углового момента, поэтому операторы  $H, L_3, \Lambda$  могут быть диагонализированы одновременно. Соответствующее представление и отвечает разделению переменных в вытянутых сфероидальных координатах; общая собственная функция операторов  $H, L_3, \Lambda$  представляется в виде

$$P_{mk}(p, a; \xi) \Xi_{mq}(p, b; \eta) e^{\pm im\varphi}, \quad (8.18)$$

где  $p, a, b$  связаны с  $Z_1, Z_2, R, E$  соотношениями (3.3а).

Оператор  $\Lambda$ , собственным значением которого является константа разделения  $\lambda$ , может быть выражен в дифференциальной форме (Erikson, Hill, 1949, Coulson, Joseph, 1967, Кривченков, Либерман, 1968)

$$\Lambda = \frac{1}{\xi^2 - \eta^2} \left\{ (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \xi} (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \xi} - \right. \\ \left. - (\xi^2 - 1) \frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} \right\} + \left[ \frac{1}{\xi^2 - 1} - \frac{1}{1 - \eta^2} \right] \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \\ + RZ_1 \frac{\xi\eta + 1}{\xi + \eta} - RZ_2 \frac{\xi\eta - 1}{\xi - \eta}. \quad (8.19)$$

**2. Водородоподобный атом в сфероидальных координатах.** Водородоподобный атом с зарядом ядра  $Z$  можно рассматривать как частный случай системы  $Z_1 e Z_2$ , когда заряд одного из центров, например правого ( $x_3 = R/2$ ), равен нулю, а  $Z_1 = Z$ . В результате разделения переменных в вытянутых сфероидальных координатах приходим к уравнениям вида (1.14), (1.28), в которых надо положить  $a = -b = ZR$ .

Одноцентровая кулоновская задача допускает разделение переменных в трех системах координат: сферической, параболической и вытянутой сфероидальной, причем первые две координатные системы являются предельными случаями третьей (см. § 1 введения). Поэтому решения водородоподобной задачи в сфероидальных координатах можно найти, не обращаясь к уравнениям (1.14), (1.28) при  $a = -b$ . Построим такие решения, воспользовавшись известными решениями той же задачи в других координатных системах (Coulson, Joseph, 1967).

Волновая функция водородоподобного атома в сферических координатах  $\psi_{nlm}(r_1)$  является собственной функцией для операторов:

$$L_3 \psi_{nlm} = \pm m \psi_{nlm}, \quad (8.20a)$$

$$L^2 \psi_{nlm} = l(l+1) \psi_{nlm}, \quad (8.20б)$$

$$(L^2 + A^2) \psi_{nlm} = (n-1)(n+1) \psi_{nlm} \quad (8.20в)$$

и с учетом нормировки имеет вид

$$\psi_{nlm}(r_1) = R_{nl}(r_1) Y_l^m(\theta_1, \varphi),$$

$$R_{nl}(r) = \frac{2Z^{3/2}}{n^{l+2} (2l+1)!} \left[ \frac{(n+l)!}{(n-l-1)!} \right]^{1/2} \times \\ \times (2Zr)^l e^{-Zr/nF} \left( -n+l+1, 2l+2, \frac{2Zr}{n} \right). \quad (8.21)$$

В соотношениях (8.20), (8.21) числа  $n > l \geq m$  — целые,  $n$  — главное квантовое число, так что  $P_0 = Z/n$ ,  $Y_l^m(\theta, \varphi)$  — сферическая функция, а  $F(\alpha, \gamma, z)$  — вырожденная гипергеометрическая функция, которая в равенстве (8.21) сводится к полиномам Лагерра.

Из свойств алгебры  $O_4$  (Englefield, 1972, стр. 56) следует, что ненулевые матричные элементы третьей компоненты вектора Рунге—Ленца с точностью до



несущественного фазового множителя в этом представлении определяются формулой

$$(A_3)_{n,l,m}^{n,l+1,m} = (A_3)_{n,l+1,m}^{n,l,m} = \left\{ \frac{(n+l+1)(n-l-1)(l+m+1)(l-m+1)}{(2l+1)(2l+3)} \right\}^{1/2}. \quad (8.22)$$

Волновая функция рассматриваемой водородоподобной системы в сфероидальных координатах  $\Phi_{nkqm}(r_1)$  является собственной для набора операторов

$$L_3 \Phi_{nkqm} = \pm m \Phi_{nkqm}, \quad (8.23a)$$

$$(L^2 + RP_0 A_3) \Phi_{nkqm} = \lambda \Phi_{nkqm}, \quad (8.23б)$$

$$(L^2 + A^2) \Phi_{nkqm} = (n-1)(n+1) \Phi_{nkqm}, \quad (8.23в)$$

где целые неотрицательные  $k$  и  $q$  — сфероидальные квантовые числа, причем

$$k+q+m+1=n. \quad (8.24)$$

При разложении  $\Phi_{nkqm}(r_1)$  по системе  $\psi_{nlm}(r_1)$  индексы  $n$  и  $m$  остаются фиксированными, в то время как  $l$  меняется в конечных пределах от  $m$  до  $n-1$ , так что

$$\Phi_{nkqm} = \sum_{l=m}^{n-1} c_{qi}^{(n,m)} \psi_{nlm}. \quad (8.25)$$

Подстановка этого разложения в (8.23б) приводит к системе линейных однородных алгебраических уравнений порядка  $n-m$  для коэффициентов  $c_{qi}^{(n,m)}$  ( $l=m, \dots, n-1$ , а  $q$  и  $m$  — фиксированные)

$$(A_3)_{n,l-1,m}^{nlm} c_{q,l-1}^{(n,m)} + \frac{\lambda - l(l+1)}{RP_0} c_{qi}^{(n,m)} + (A_3)_{n,l+1,m}^{nlm} c_{q,l+1}^{(n,m)} = 0. \quad (8.26)$$

Не нулевое решение системы (8.26) существует при значениях  $\lambda$ , равных корням ее определителя.

Преобразование (8.25) является унитарным, поэтому для его коэффициентов при фиксированных  $n, m, R$  выполняются соотношения

$$\sum_{l=m}^{n-1} c_{qi}^{(n,m)} c_{q'i}^{(n,m)} = \delta_{qq'}. \quad (8.27)$$

Предельные значения  $c_{qi}^{(n,m)}$  при  $R \rightarrow 0$  и  $R \rightarrow \infty$  известны. При  $R \rightarrow 0$  сфероидальный базис переходит

в сферический, так что в этом пределе один из коэффициентов  $c_{q,l}^{(n,m)}$  стремится к единице, а остальные к нулю

$$c_{ql}^{(n,m)} \xrightarrow{R \rightarrow 0} \delta_{q+m,l}. \quad (8.28)$$

При  $R \rightarrow \infty$  сфероидальный базис переходит в параболический. Волновая функция водородоподобного атома в параболических координатах  $F_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}_1)$  является собственной для набора операторов

$$(L_3 + A_3) F_{n_1 n_2 m} = (-n_1 + n_2 + m) F_{n_1 n_2 m}, \quad (8.29a)$$

$$(L_3 - A_3) F_{n_1 n_2 m} = (n_1 - n_2 + m) F_{n_1 n_2 m}, \quad (8.29б)$$

$$(L^2 + A^2) F_{n_1 n_2 m} = (n - 1)(n + 1) F_{n_1 n_2 m}, \quad (8.29в)$$

где целые неотрицательные  $n_1, n_2$  — параболические квантовые числа, так что

$$n_1 + n_2 + m + 1 = n. \quad (8.30)$$

Нормированные функции  $F_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r})$  имеют вид

$$F_{n_1 n_2 m}(\mathbf{r}) = \frac{(2Z^3)^{1/2}}{n^2} f_{n_1 m} \left( \frac{Z\zeta}{n} \right) f_{n_2 m} \left( \frac{Z\tau}{n} \right) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \quad (8.31)$$

Здесь  $\zeta, \tau$  — параболические координаты, определенные формулами (1.3) введения, а функции  $f_{n_1 m}, f_{n_2 m}$  связаны с вырожденной гипергеометрической функцией

$$f_{sm}(\rho) = \frac{1}{m!} \left[ \frac{(s+m)!}{s!} \right]^{1/2} F(-s, m+1, \rho) e^{-\rho/2} \rho^{m/2}. \quad (8.32)$$

Переход от параболических координат к сферическим для кулоновских волновых функций осуществляется с помощью коэффициентов Клебша — Гордона (Stone, 1956; Tarter, 1970; Englfield, 1972)

$$(-1)^{n_1} F_{n_1 n_2 m} = \sum_{l=m}^{n-1} (j_1 j_2 m_1 m_2 | lm) \psi_{nlm}, \quad (8.33)$$

$$j_1 = j_2 = \frac{n-1}{2}, \quad m_1 = \frac{-n_1 + n_2 + m}{2},$$

$$m_2 = \frac{n_1 - n_2 + m}{2}.$$

Отсюда следует предельное соотношение для коэффициентов  $c_{ql}^{(n,m)}$  при  $R \rightarrow \infty$

$$c_{ql}^{(n,m)} \xrightarrow{R \rightarrow \infty} (-1)^k (j_1 j_2 m_1 m_2 | lm), \quad (8.34)$$

$$j_1 = j_2 = \frac{n-1}{2}, \quad m_1 = \frac{-k+q+m}{2}, \quad m_2 = \frac{k-q+m}{2}.$$

Фазовые множители в предельных соотношениях (8.28), (8.34) соответствуют определениям радиальных и угловых кулоновских сфероидалных функций (1.31), (1.19).

При произвольных значениях квантовых чисел  $k, q, m$  функция  $\Phi_{nkqm}(\mathbf{r}_1)$ , определяемая формулой (8.25) как конечная линейная комбинация кулоновских функций в сферических координатах, представляется в виде произведения одноцентровых кулоновских сфероидалных функций

$$\Phi_{nkqm} = \Pi_{mk}(p, 2pn; \xi) \Xi_{mq}(p, -2pn; \eta) \frac{e^{\pm im\varphi}}{\sqrt{2\pi}},$$

$$p = ZR/(2n). \quad (8.35)$$

Связь между параметрами  $a$  и  $p$  одноцентровых кулоновских сфероидалных функций соответствует кулоновской серии уровней

$$a = ZR = 2pn = nR(-2E)^{1/2}, \quad E = -\frac{Z^2}{2n^2}. \quad (8.36)$$

Переход в линейной комбинации (8.25) от сферических координат  $r_1, \vartheta_1 = \arccos \hat{\mathbf{R}}r_1, \varphi$  к вытянутым сфероидалным координатам  $\xi, \eta, \varphi$  осуществляется с помощью соотношений

$$r_1 = \frac{R}{2}(\xi + \eta), \quad \cos \vartheta_1 = \frac{\xi\eta + 1}{\xi + \eta}, \quad \varphi = \varphi. \quad (8.37)$$

Поскольку  $r_1, \cos \vartheta_1$  не меняются при замене  $\xi \leftrightarrow \eta$ , из формулы (8.25) получаем, что одноцентровые угловые и радиальные кулоновские сфероидалные функции при этом преобразовании переходят друг в друга, т. е.

$$\Xi_{mq}(p, -2pn; \eta) = C \Pi_{mk}(p, 2pn; \xi), \quad \eta = \xi \in [-1, \infty),$$

$$C = \text{const}, \quad (8.38)$$

а для собственных значений справедливо тождество

$$\lambda_{mq}^{(\eta)}(p, -2pn) = \lambda_{mk}^{(\xi)}(p, 2pn), \quad (8.39)$$

где  $k+q+m+1=n$ .

Линейная комбинация (8.25) функций (8.21) определяет одноцентровые у. к. с. ф. и р. к. с. ф. в следующем функциональном виде:

$$P_{mk}(\rho, 2\rho n; \xi) = (\xi^2 - 1)^{m/2} e^{-\rho(\xi-1)} \mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi), \quad (8.40a)$$

$$E_{mq}(\rho, -2\rho n; \eta) = C(1 - \eta^2)^{m/2} e^{-\rho(1+\eta)} \mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta), \quad (8.40b)$$

где  $C = \text{const}$ .

Согласно (8.38)  $\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}(\xi)$ ,  $\mathcal{F}_{mq}^{n-m-1}(\eta)$  — один и тот же полином степени  $n-m-1$ , имеющий  $k$  нулей на промежутке  $[1, \infty)$  и  $q$  нулей на промежутке  $[-1, 1]$ .

Формулы (8.38) — (8.40) были получены независимо из анализа рекуррентных соотношений между коэффициентами рядов для у. к. с. ф. и р. к. с. ф. в § 2. Данное рассмотрение показывает, что представление у. к. с. ф. и р. к. с. ф. через полиномы  $\mathcal{F}_{mk}^{n-m-1}$  реализуется в одноцентральной кулоновской задаче и дает, таким образом, другой способ построения этих полиномов.

Набор функций водородоподобного атома в сфероидальных координатах (8.23) при фиксированном  $n$  не образует полной системы в  $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ . Ядро оператора проектирования на этот набор не зависит от коэффициентов преобразования (8.25) и равно (Демков, Комаров, 1965)

$$\begin{aligned} \rho_n(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}'_1) &= \sum_{k+q+m+1=n} \Phi_{nkqm}(\mathbf{r}_1) \Phi_{nkqm}(\mathbf{r}'_1) = \\ &= \sum_{l \geq m=0}^{n-1} \psi_{nlm}(\mathbf{r}_1) \psi_{nlm}(\mathbf{r}'_1) = \\ &= \frac{1}{4\pi} \frac{1}{x-y} \left( \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\partial}{\partial x} \right) xy R_{n0}(x) R_{n0}(y). \end{aligned} \quad (8.41)$$

Здесь векторы  $\mathbf{r}_1$ ,  $\mathbf{r}'_1$  отсчитываются от точки, в которой находится заряд, создающий кулоновское поле, функция  $R_{nl}(x)$  определена формулой (8.21), а координаты  $x \geq y \geq 0$  задаются равенствами

$$2x = r_1 + r'_1 + |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|, \quad 2y = r_1 + r'_1 - |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'_1|. \quad (8.42)$$

Собственные функции водородоподобного атома в сфероидальных координатах при положительной энергии в литературе не обсуждались.

3. Элементарные решения в задаче  $Z_1 e Z_2$ . При произвольных значениях параметров  $\rho$ ,  $a$ ,  $b$  у.к.с.ф. и р.к.с.ф. представляются бесконечными рядами. В п.4 § 2 показано, что при специальном выборе этих параметров у.к.с.ф. и р.к.с.ф. выражаются через полиномы

$$\begin{aligned} & \Pi_{mk}(\rho, 2\rho n_+; \xi) = \\ & = \begin{cases} (\xi^2 - 1)^{m/2} e^{-\rho(\xi-1)} \mathcal{F}_{mk}^{n_+ - m - 1}(\xi), & k \leq n_+ - m - 1, \\ \left(\frac{\xi - 1}{\xi + 1}\right)^{m/2} e^{-\rho(\xi-1)} \mathcal{G}_{mk}^{n_+ - 1}(\xi), & n_+ - m \leq k \leq n_+ - 1, \end{cases} \end{aligned} \quad (8.43a)$$

$$(8.43b)$$

$$\begin{aligned} \Xi_{mq}(\rho, -2\rho n_-; \eta) &= (1 - \eta^2)^{m/2} e^{-\rho(1+\eta)} \mathcal{F}_{mq}^{n_- - m - 1}(\eta), \\ & q \leq n_- - m - 1. \end{aligned} \quad (8.44)$$

В задаче двух кулоновских центров можно подобрать значения параметров  $Z_1$ ,  $Z_2$ ,  $R = R_{kq}^n$  так, чтобы радиальная и угловая функции представлялись в виде (8.43а), (8.43б), (8.44)

$$\begin{aligned} & \Phi_{kqm}(r; R_{kq}^n) = \\ & = \text{const } \Pi_{mk}(\rho, 2\rho n_+; \xi) \Xi_{mq}(\rho, -2\rho n_-; \eta) e^{\pm im\varphi} \end{aligned} \quad (8.45)$$

(Демков, 1968). Построим такие наборы.

Параметр  $a$  радиальной функции (8.43) отвечает кулоновской серии уровней, соответствующей заряду  $Z_2 + Z_1$

$$\begin{aligned} a &= (Z_2 + Z_1) R = 2\rho n_+ = n_+ R (-2E)^{1/2}, \\ E &= -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_2 + Z_1}{n_+} \right)^2, \end{aligned} \quad (8.46)$$

а параметр  $b$  угловой функции (8.44) — кулоновской серии уровней, соответствующей заряду  $Z_1 - Z_2 > 0$

$$\begin{aligned} b &= (Z_2 - Z_1) R = -2\rho n_- = -n_- R (-2E)^{1/2}, \\ E &= -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_2 - Z_1}{n_-} \right)^2. \end{aligned} \quad (8.47)$$

Необходимое условие сведения угловых и радиальных функций в задаче  $Z_1 e Z_2$  к полиномам состоит в совпадении энергетических уровней, взятых из серии (8.46), (8.47)

$$E = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_2 + Z_1}{n_+} \right)^2 = -\frac{1}{2} \left( \frac{Z_2 - Z_1}{n_-} \right)^2. \quad (8.48)$$

Межцентровые расстояния  $R_{kq}^m$ , при которых волновая функция задачи  $Z_1 e Z_2$  представляется в виде (8.45), находятся из равенства собственных значений у.к.с.ф. и р.к.с.ф.

$$\lambda_{mk}^{(\xi)}(\rho, 2\rho n_+) = \lambda_{mq}^{(\eta)}(\rho, -2\rho n_-). \quad (8.49)$$

Когда  $\Pi_{mk}(\rho, 2\rho n_+; \xi)$  выражается через полином  $\mathcal{F}_{n_+}^{n_+ - m - 1}(\xi)$  (8.43а), радиальная и угловая части функции (8.45) совпадают с одноцентровыми р.к.с.ф. и у.к.с.ф. В волновой функции  $\Phi_{kqm}(\mathbf{r})$  (8.43а), (8.45) системы  $Z_1 e Z_2$  сделаем замены

$$\xi \leftrightarrow \eta, \quad n_+ \leftrightarrow n_- \quad (\text{т. е. } a \leftrightarrow -b). \quad (8.50)$$

По свойству (8.38) угловая и радиальная части функции (8.45) при этом преобразовании меняются местами. Преобразованная функция  $\bar{\Phi}_{k'q'm}(\mathbf{r})$  также является собственной для задачи двух кулоновских центров, заряды которой  $Z'_1, Z'_2$  определяются условием  $a \leftrightarrow -b$  и равны

$$Z'_1 = Z_1, \quad Z'_2 = -Z_2. \quad (8.51)$$

Уравнение (8.49) при преобразовании (8.50) остается неизменным, благодаря свойству (8.39). Следовательно, для решений типа (8.43а), (8.45) справедливо свойство взаимности: если при  $R = R_{kq}^m$  существует элементарное решение для системы с зарядами  $Z_1, Z_2$  и энергией  $E$ , то при том же межцентровом расстоянии  $R_{kq}^m$  и той же энергии  $E$  имеется элементарное решение для системы с зарядами  $Z_1, -Z_2$  (Демков, 1968). Общее число таких частных решений при  $m=0$  равно

$$n_- \text{Ent} \left( \frac{n_+ - n_- + 1}{2} \right) - 1.$$

В табл. 21 приведены наборы  $Z_1, Z_2, R$  (заряды целые), отвечающие простейшим элементарным решениям. В решениях 3, 10, 14 этой таблицы радиальная функция строилась в форме (8.43а), в остальных решениях — в форме (8.43б). Индексы  $n_+, n_-$  в четвертом и пятом столбцах указаны для  $Z_2 > 0$ . При  $Z_2 < 0$  значения  $n_+, n_-$  следует переставить местами,  $n_+ \leftrightarrow n_-$ .

№	$Z_1$	$Z_2$	$n_+$	$n_-$	$E$	Состояние		$R_{kq}$
						$Z_2 > 0$	$Z_2 < 0$	
1	5	1	3	2	-2	$3p\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{10}/3$
2	5	3	4	1	-2	$3s\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{10}$
3	5	3	4	1	-2	—	$2p\pi$	2,519
4	3	1	4	2	-1/2	$4p\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{3}$
5	7	1	4	3	-2	$4p\sigma$	$3p\sigma$	0,726
6	7	1	4	3	-2	$4d\sigma$	$3d\sigma$	2,241
7	7	1	4	3	-2	$4d\pi$	$3p\pi$	$\sqrt{7}/3$
8	3	2	5	1	-1/2	$4s\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{15}$
9	3	2	5	1	-1/2	—	$2p\pi$	3,335
10	7	3	5	2	-2	$4s\sigma$	$3p\sigma$	3,991
11	7	3	5	2	-2	$4p\sigma$	$3d\sigma$	5,330
12	7	3	5	2	-2	$5p\sigma$	$2p\sigma$	0,735
13	7	3	5	2	-2	$4p\pi$	$3d\pi$	$\sqrt{21}$
14	7	3	5	2	-2	—	$3p\pi$	3,313

Для системы  $Z_1 e Z_1$  с одинаковыми зарядами параметр  $b$  угловой функции равен нулю. У. к. с. ф. при  $b=0$  никогда не сводится к полиномам. Хотя при некоторых  $R$  возможно сведение радиальных кулоновских сфероидалных функций к одноцентровым, элементарные решения типа (8.44) в этом случае отсутствуют. Аналогичная ситуация имеет место для конечного диполя  $Z_2 = -Z_1$ , где равен нулю параметр  $a$  р. к. с. ф.

**4. Кулоновские серии в системе  $Z_1 e Z_2$ .** Энергия  $E_{kqm}(Z_1, Z_2, R)$  задачи  $Z_1 e Z_2$  является сложной функцией параметров  $Z_1, Z_2, R$  и квантовых чисел  $k, q, m$ , которую при произвольных значениях  $Z_1, Z_2, R, k, q, m$  можно представить лишь в виде числовых таблиц. Однако известны четыре характерные значения  $R$ , при которых имеют место аналитические формулы для энергии, причем каждый раз при этом возникает кулоновская серия уровней:

I при  $R \rightarrow \infty$

$$E_1 = -\frac{Z_1^2}{2n^2}, \quad E_2 = -\frac{Z_2^2}{2n'^2},$$

II при  $R \gg 1$  в точках квазипересечения

$$E = -\frac{(Z_2 - Z_1)^2}{2(n'_2 - n_2)^2},$$

III при  $R \sim 1$  волновые функции выражаются через полиномы в точках, где энергия системы подчиняется условию

$$E = -\frac{(Z_2 + Z_1)^2}{2n_+^2} = -\frac{(Z_2 - Z_1)^2}{2n_-^2},$$

IV при  $R=0$ , где задача при  $Z_2 + Z_1 > 0$  вновь вырождается

$$E = -\frac{(Z_2 + Z_1)^2}{2N^2}.$$

Отмеченные закономерности имеют, по-видимому, общую причину, которая пока не выяснена.



## ОБЗОР ФИЗИЧЕСКИХ ПРИЛОЖЕНИЙ

**§ 1. Применения сфероидальных функций, связанные с разделением переменных в акустических и электродинамических задачах**

**1. Обзор литературы.** Сфероидальные функции широко используются в задачах дифракции электромагнитных и акустических волн с граничными условиями, заданными на поверхности вытянутого или сплюснутого эллипсоида, в предельном случае — диска. Наиболее полно эти задачи рассмотрены в книгах Meixner, Schäfer (1954), Иванова (1968), Bowman, Senior, Uslenghi (1969).

Более простой является проблема акустической дифракции, поскольку она связана со скалярным уравнением Гельмгольца. Акустическая дифракция на диске рассматривалась в работах Kotani (1933), Bouwkamp (1947, 1950), Spence (1948), Meixner, Fritze (1949) и ряда других авторов. В силу принципа Бабинне одновременно решалась задача и о круглом отверстии в плоском экране. С задачей дифракции тесно связана проблема изучения акустических волн колеблющейся круглой мембраной (Meixner, Fritze, 1949). Более общей задаче о рассеянии на сфероиде посвящены работы Spence, Granger (1951), Senior (1960), Клещева и Шейбы (1970). В работах Kazarinoff, Ritt (1959), Sleeman (1969a, 1969b), Бобича и Григорьевой (1974) точное решение приводилось к виду, удобному для выделения коротковолновой асимптотики, и исследовалось волновое поле в зоне тени. Те же вопросы в частном случае диска решал Hansen (1964). Goodrich, Kazarinoff (1963) исследовали случай сильно вытянутых сфероидов, а Goodrich, Kazarinoff, Weston (1963) — случай сильно сплюснутых. Значительная часть общих формул, относящихся к скалярной дифракции, выписана в § 7 гл. I. Более полная сводка относящихся сюда результатов содержится в монографии Bowman, Senior, Uslenghi (1969).

Задачи дифракции электромагнитных волн на сфероидах и дисках значительно труднее акустических. Разделение переменных в уравнениях Максвелла удается выполнить, либо когда поле не зависит от угла  $\varphi$ , как это было показано в § 3 введения, либо когда рассматривается частный случай сфероида — диск.

В задаче дифракции наклонно падающей плоской волны на диске, которую решали Meixner (1948), Meixner, Andrejewski (1950), Flammer (1953), Белкина (1957б), переменные разделяются, поскольку при отражении от диска плоская волна не меняет поляризации и поле по существу носит скалярный характер. Однако и в этих

благоприятных случаях не всегда удается разделить переменные в граничном условии, что приводит к бесконечным системам алгебраических уравнений для коэффициентов разложения поля по сфероидальным функциям.

В этом параграфе в качестве примера рассматривается классическая задача, допускающая полное разделение переменных в сфероидальных координатах: дифракция электромагнитной волны, порождаемой электрическим вертикальным диполем, расположенным на оси идеально проводящего сфероида. Эту задачу рассматривали Meixner (1953), Hatcher, Leitner (1954), Белкина (1957) и др. Рассеяние на диске электромагнитной волны, создаваемой горизонтальным магнитным диполем, исследовали Leitner, Spence (1950), Белкина (1957) и др. Сфероидальные функции использовались и при расчете рассеяния плоской электромагнитной волны на вытянутом сфероиде (Siegel и др. 1956), причем направление волны совпадало с осью сфероида. В этой задаче нет полного разделения переменных, однако получившиеся при этом бесконечные линейные алгебраические системы решались достаточно эффективно численными методами. Большой фактический материал по электромагнитной дифракции на дисках и сфероидах содержится в книгах Иванова (1968) и Wompa, Senior, Uslenghi (1969). Иванов рассматривал дифракцию не только на одном сфероиде, но и на двух сфероидах (Иванов, 1968), двух дисках (Иванов, 1964, 1965). При этом для коэффициентов разложения по сфероидальным функциям получаются бесконечные алгебраические системы уравнений.

Большое число работ (Chu, Stratton, 1941a, b, Page, 1944, Марков, Дуленков и Осипович, 1965) посвящено изучению вынужденного электромагнитного излучения от сфероидаальной антенны. Этот круг вопросов подробно разбирается в книге Schelkiefoff (1952) и статье Wait (1966). Из проблем, привлечших внимание за последние годы, особо отметим распространение электромагнитных волн в средах с комплексной диэлектрической постоянной и сфероидаальными границами раздела (Wait, 1966, Lytle, Schultz, 1969, Макаров и Терешенко, 1972). Часть трудностей здесь связана с недостаточной информацией о поведении сфероидаальных функций при комплексных значениях параметра.

Резонансные свойства сфероидаальных полостей, т. е. собственные колебания и собственные частоты, исследовались Nimita (1951), в высокочастотном приближении — Вайнштейном (1965а, б) Славяновым (1974). В этом параграфе получена асимптотика собственных частот колебаний типа «прыгающего мячика» внутри сплюснутого эллипсоида.

Квантовомеханические применения сфероидаальных функций обсуждаются в §§ 3, 4. Здесь укажем только на задачу о сфероидаальной потенциальной яме (Rainwater, 1950; Granger и Spence, 1951). В работе Gupta (1968) сфероидаальные функции применяются к проблеме распространения нейтронов.

**2. Поле вертикального электрического диполя, расположенного на оси вытянутого сфероида.** Рассмотрим задачу о симметричном возбуждении идеального проводящего вытянутого сфероида, заданного уравнением  $\xi = \xi_0$ , элементарным электрическим диполем, располо-

женным на оси сфероид в точке  $\xi = \xi_1$ ,  $\eta = 1$  и имеющим момент  $D$ , направленный вдоль оси сфероид. Как следует из § 3 введения электромагнитное поле в такой задаче полностью определяется магнитной компонентой  $H_\varphi$ , которая разлагается в ряд по сфероидальным функциям с азимутальным индексом  $m = 1$ .

Полное поле  $H_\varphi$  складывается из первичного поля диполя

$$H_\varphi^0 = -\frac{k^2 D}{4\pi} \frac{e^{ik|r-r'|}}{|r-r'|} \left(1 - \frac{1}{ik|r-r'|}\right) \sin \vartheta, \quad (1.1)$$

где  $r$  — радиус-вектор точки наблюдения,  $r'$  — радиус-вектор источника,  $\vartheta$  — угол между  $r'$  и  $r$ , и дифрагированного поля  $H_\varphi^1$ . На поверхности сфероид должно выполняться условие

$$E_\eta|_{\xi=\xi_0} = -\frac{1}{ic\sqrt{\xi^2 - \eta^2}} \frac{\partial}{\partial \xi} [V\sqrt{\xi^2 - 1} H_\varphi] \Big|_{\xi=\xi_0} = 0 \quad (1.2)$$

и, кроме того, дифрагированное поле должно удовлетворять условию излучения.

Первичное поле диполя  $H_\varphi^0$  разложим в ряд по сфероидальным функциям

$$H_\varphi^0 = \sum_{l=1}^{\infty} A_l \bar{S}_{1l}(c, \eta) R_{1l}(c, \xi_<) R_{1l}^{(3)}(c, \xi_>),$$

$$\xi_< = \min(\xi, \xi_1), \quad \xi_> = \max(\xi, \xi_1). \quad (1.3)$$

Коэффициенты  $A_l$  могут быть найдены следующим образом. Устремим точку наблюдения на бесконечность т. е.  $r \rightarrow \infty$ ,  $\xi \rightarrow \infty$ . Из равенства

$$|r - r'| = r - \frac{d}{2} \xi_1 \cos \vartheta + O\left(\frac{1}{r}\right)$$

и асимптотической формулы (1.22) гл. I следует

$$H_\varphi^0 = -\frac{k^2 D}{4\pi} \cdot \frac{e^{ikr}}{r} e^{-ic\xi_1 \cos \vartheta} \sin \vartheta \left[1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right] =$$

$$= \sum_{l=1}^{\infty} A_l \bar{S}_{1l}(c, \cos \vartheta) R_{1l}(c, \xi_1) \frac{e^{ikr}}{kr} (-i)^{l+1} \left[1 + O\left(\frac{1}{r}\right)\right]. \quad (1.4)$$

Если домножить равенство (1.4) на  $\bar{S}_{1l}(c, \cos \vartheta) \sin \vartheta$  и

проинтегрировать по  $\vartheta$  от 0 до  $\pi$ , то с учетом интегрального тождества (2.10) гл. I получаются следующие выражения для коэффициентов:

$$A_l = - \frac{k^3 D i^{l+1}}{4\pi \sqrt{\xi_1^2 - 1} \kappa_{1l}(c)}, \quad (1.5)$$

где коэффициенты  $\kappa_{1l}(c)$  определены в гл. I формулой (2.11).

Дифрагированное поле  $H_\Phi^1$  также представляется в виде ряда по сферическим функциям

$$H_\Phi^1 = \sum_{l=1}^{\infty} B_l \bar{S}_{1l}(c, \eta) R_{1l}^{(3)}(c, \xi) R_{1l}^{(3)}(c, \xi_1). \quad (1.6)$$

Коэффициенты  $B_l$  находятся из граничного условия (1.2), которому удовлетворяет суммарное поле  $H_\Phi^0 + H_\Phi^1$ :

$$B_l = -A_l \frac{\xi_0 R_{1l}(c, \xi_0) + (\xi_0^2 - 1) R'_{1l}(c, \xi_0)}{\xi_0 R_{1l}^{(3)}(c, \xi_0) + (\xi_0^2 - 1) R_{1l}^{(3)'}(c, \xi_0)}. \quad (1.7)$$

Таким образом, для полного поля  $H_\Phi$  получается следующее выражение:

$$\begin{aligned} H_\Phi = & - \frac{k^3 D}{4\pi \sqrt{\xi_1^2 - 1}} \left[ \sum_{l=1}^{\infty} \frac{i^{l+1}}{\kappa_{1l}(c)} \bar{S}_{1l}(c, \eta) R_{1l}(c, \xi_{<}) \times \right. \\ & \times R_{1l}^{(3)}(c, \xi_{>}) - \sum_{l=1}^{\infty} \frac{i^{l+1}}{\kappa_{1l}(c)} \bar{S}_{1l}(c, \eta) R_{1l}^{(3)}(c, \xi_1) \times \\ & \left. \times \frac{\xi_0 R_{1l}(c, \xi_0) + (\xi_0^2 - 1) R'_{1l}(c, \xi_0)}{\xi_0 R_{1l}^{(3)}(c, \xi_0) + (\xi_0^2 - 1) R_{1l}^{(3)'}(c, \xi_0)} R_{1l}^{(3)}(c, \xi) \right]. \quad (1.8) \end{aligned}$$

Важной характеристикой является диаграмма направленности  $f(\vartheta)$ , характеризующая зависимость дифрагированного поля от угла  $\vartheta$  в дальней волновой зоне. С точностью до несущественных множителей она равна

$$\begin{aligned} f(\vartheta) = & \sum_{l=1}^{\infty} \frac{\bar{S}_{1l}(c, \cos \vartheta)}{\kappa_{1l}(c)} \times \\ & \times R_{1l}^{(3)}(c, \xi_1) \frac{\xi_0 R_{1l}(c, \xi_0) + (\xi_0^2 - 1) R'_{1l}(c, \xi_0)}{\xi_0 R_{1l}^{(3)}(c, \xi_0) + (\xi_0^2 - 1) R_{1l}^{(3)'}(c, \xi_0)}. \quad (1.9) \end{aligned}$$

Графики диаграмм направленности при различных значениях параметров приводятся в монографии Bowman, Senior, Uslenghi (1969). В предложенном выводе формулы (1.8) использовалось известное выражение для поля электрического диполя (1.1). Можно было бы исходить из неоднородного уравнения для потенциала Абрагама (см. введение (3.11)) и строить разложение функции Грина по сфероидальным функциям аналогично тому, как это было сделано в § 7 гл. I.

**3. Собственные колебания типа «прыгающего мячика» внутри сплюснутого сфероида.** Среди всех высокочастотных собственных колебаний резонаторов наибольшее значение имеют колебания типа «прыгающего мячика», сосредоточенные в окрестности минимального диаметра, и колебания типа «шелчущей галереи», сосредоточенные в окрестности геодезических на границе резонатора. Такие колебания общего вида для произвольной области интенсивно исследуются в последнее время в связи с потребностями техники лазеров (Вайнштейн, 1966, Бабич и Булдырев, 1972). Простейшей моделью колебаний типа «прыгающего мячика», где можно провести детальное исследование, являются высокочастотные колебания, сосредоточенные вблизи малой оси сплюснутого эллипсоида вращения.

Будем исходить из скалярной краевой задачи внутри эллипсоида, заданного уравнением  $\xi = \xi_0$ :

$$(\Delta + k^2)u = 0, \quad (1.10)$$

$$u|_{\xi=\xi_0} = 0. \quad (1.11)$$

По методу разделения переменных в сплюснутых сфероидальных координатах собственные функции  $u_{mlq}(\xi, \eta, \varphi)$  ищутся в виде

$$u_{mlq}(\xi, \eta, \varphi) = R_{ml}(p, i\xi) S_{ml}(p, \eta) e^{\pm im\varphi}, \quad (1.12)$$

где  $p = kd/2$ ,  $d$  — расстояние между фокусами эллипсоида ( $d = \sqrt{a^2 - b^2}$ ,  $a$  и  $b$  — соответственно большая и малая оси эллипсоида).

Локализация функции  $u_{mlq}$  в окрестности малой оси эллипсоида при больших  $p$  отвечает локализации функции  $S_{ml}(p, \eta)$  в окрестности точек  $\eta = \pm 1$ . Как следует из асимптотических формул § 5 гл. I, это происходит при малых значениях индексов  $m$  и  $l$ . Оставшийся индекс  $q$  должен быть большим.

Произведем разбиение функций  $u_{mlq}(\xi, \eta, \varphi)$  на два типа: симметричные относительно плоскости  $xy$  и антисимметричные.

Спектр собственных волновых чисел  $k = k_{mlq}$  в соответствии с (1.11) находится из условия

$$R_{ml}\left(\frac{kd}{2}, i\xi_0\right) = R_{ml}\left(\frac{kd}{2}, i\frac{b}{d}\right) = 0. \quad (1.13)$$

Используя асимптотические формулы (5.101) и (5.105) гл. I, получим из (1.13) следующее дисперсионное уравнение для собственных волновых чисел  $k$ , отвечающих симметричным решениям:

$$\frac{kb}{2} = \frac{2q+1}{2} \pi + 2\chi \operatorname{arctg} \frac{b}{d} + \frac{2(\chi^2 + \tau)b}{k(b^2 + d^2)} + \\ + \frac{4}{k^2 d^2} \left[ \frac{\chi(1 + \chi^2 + \tau)bd^3}{b^2 + d^2} + \frac{\chi(\chi^2 + \tau)bd}{2(b^2 + d^2)} \right] + O(k^{-3}). \quad (1.14)$$

Параметры  $\chi$  и  $\tau$  определяются так же, как в § 5 гл. I:

$$\tau = \frac{1 - m^2}{4}, \quad \chi = \begin{cases} \frac{l+1}{2}, & l - m \text{ четное,} \\ \frac{l}{2}, & l - m \text{ нечетное.} \end{cases}$$

Дисперсионное уравнение, отвечающее несимметричным решениям, отличается от (1.14) заменой  $(2q+1)/2$  на  $q$ . Индекс  $q$  равен числу геометрооптических полуволн, укладывающихся вдоль оси вращения эллипсоида.

Введем безразмерный параметр  $g$ , часто употребляемый в квазиоптических задачах

$$g = \frac{d^2 - b^2}{d^2 + b^2} = 1 - \frac{b}{R},$$

где  $R$  — радиус кривизны поверхности эллипсоида на его оси. Решая итерациями уравнение (1.14) и аналогичное уравнение в антисимметричном случае, получим следующее асимптотическое разложение для волновых чисел:

$$k_{mlq} = \frac{q\pi}{b} + \frac{2\chi}{b} \arccos g + \frac{2(\chi^2 + \tau)(1-g)}{\pi q b} + \\ + \frac{2\sqrt{1-g^2}}{\pi^2 q^2 b} \left[ \chi(\chi^2 + \tau + 1)(1-g) + \chi(\chi^2 + \tau) \frac{1-g}{1+g} \right] - \\ - \frac{4\chi(\chi^2 + \tau)(1-g) \arccos g}{\pi^2 q^2 b} + O(q^{-3}). \quad (1.15)$$

Видно, что если ограничиться двумя главными членами в (1.15), то имеется вырождение по  $l$  и  $m$ , связанное с симметрией вращения. Кроме того, если параметр  $\alpha = \frac{1}{\pi} \arccos g$  рационален, то есть дополнительное вырождение, имеющее динамическую природу и играющее важную роль во всех общих построениях для колебаний типа «прыгающего мячика» (см. Бабиц и Булдырев, 1972). Оба типа вырождения снимаются последующими слагаемыми асимптотического разложения.

## § 2. Применения сфероидальных функций, связанные с интегральными уравнениями

**1. Принцип неопределенности в оптике и радиотехнике.** В квантовой механике хорошо известен принцип неопределенности Гейзенберга, согласно которому нельзя одновременно задать точно координату и импульс частицы. В оптике и радиотехнике часто используют следующий принцип неопределенности: для очень кратковременных сигналов нельзя одновременно сохранить спектр, близкий к монохроматическому. По существу принцип неопределенности справедлив для любых двух величин, связанных между собой преобразованием Фурье.

В оптике и радиотехнике обычно применяется следующая конкретная количественная формулировка принципа неопределенности. Пусть функция  $f(t)$  описывает временной сигнал, а функция  $F(\omega)$  — его спектральную характеристику. Определим среднеквадратичную длительность сигнала

$$\langle T \rangle^2 = \min_{t_0} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (t - t_0)^2 |f(t)|^2 dt}{\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt} \quad (2.1)$$

и среднеквадратичную ширину спектра  $\langle \Omega \rangle$

$$\langle \Omega \rangle^2 = \min_{\omega_0} \frac{\int_{-\infty}^{\infty} (\omega - \omega_0)^2 |F(\omega)|^2 d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega} . \quad (2.2)$$

Тогда, как можно доказать, выполняется неравенство

$$\langle T \rangle \langle \Omega \rangle \geq 1/2, \quad (2.3)$$

причем знак равенства достигается в том случае, когда сигнал и его частотная характеристика одновременно имеют форму гауссовой кривой.

Такая формулировка принципа неопределенности, однако, не является исчерпывающей. Во-первых, можно ввести отличные от  $\langle T \rangle$  и  $\langle \Omega \rangle$  меры сосредоточенности сигнала и спектра. Во-вторых, на сигнал и спектр могут быть наложены априорные ограничения, которые приводят к увеличению постоянной в неравенстве (2.3). Например, бывают сигналы, имеющие заведомо конечную длительность, или приборы, плохо пропускающие слишком высокие и слишком низкие частоты и т. д.

Здесь мы приведем примеры полезных на практике формулировок принципа неопределенности, где используются сфероидальные функции и связанные с ними величины. Пусть, например, сигнал имеет конечную длительность, т. е.

$$f(t) = \begin{cases} f(t), & |t| < T/2, \\ 0, & |t| > T/2, \end{cases} \quad (2.4)$$

так что

$$\int_{-T/2}^{T/2} |f(t)|^2 dt = \int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt. \quad (2.5)$$

Для простоты выбран симметричный промежуток времени. В качестве *меры сосредоточенности частотной характеристики сигнала* возьмем не среднеквадратичную ширину спектра  $\langle \Omega \rangle$ , а величину  $\beta$ , которая при каждом фиксированном частотном интервале  $\Omega$  определена следующим образом:

$$\beta^2 = \frac{\int_{-\Omega}^{\Omega} |F(\omega)|^2 d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega}. \quad (2.6)$$

Одна из возможных формулировок *принципа неопределенности* состоит в том, что для всех сигналов  $f(t)$



выполняется неравенство

$$\beta \leq \mu_0(c) / \sqrt{2\pi}, \quad (2.7)$$

где  $c = \Omega T/2$ , а  $\mu_0(c)$  — наибольшее по модулю собственное значение интегрального уравнения (2.21) гл. I, связанного с преобразованием Фурье в конечных пределах.

Доказательство принципа неопределенности в такой форме состоит в исследовании экстремальных свойств функционала (2.6) для  $\beta^2$ . Перейдем в (2.6) обратным преобразованием Фурье от функции  $F(\omega)$  к функции  $f(t)$ . Тогда выражение для  $\beta^2$  преобразуется к виду

$$\begin{aligned} \beta^2 &= \frac{\int_{-\Omega}^{\Omega} d\omega \int_{-T/2}^{T/2} e^{-i\omega t} f(t) dt \int_{-T/2}^{T/2} e^{i\omega\tau} \overline{f(\tau)} d\tau}{2\pi \int_{-T/2}^{T/2} |f(t)|^2 dt} = \\ &= \frac{\int_{-T/2}^{T/2} dt \int_{-T/2}^{T/2} \frac{\sin \Omega(t-\tau)}{t-\tau} f(t) \overline{f(\tau)} d\tau}{\pi \int_{-T/2}^{T/2} |f(t)|^2 dt} \end{aligned}$$

Введем безразмерные переменные  $x = t(2\Omega)^{1/2}T^{-1/2}$ ,  $x' = \tau(2\Omega)^{1/2}T^{-1/2}$  и безразмерный параметр  $c = \Omega T/2$ . В новых переменных окончательно имеем

$$\beta = \frac{\int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} \frac{\sin \sqrt{c}(x-x')}{x-x'} f(x) \overline{f(x')} dx dx'}{\pi \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} |f(x)|^2 dx}. \quad (2.8)$$

Числитель получившегося выражения можно интерпретировать как квадратичную форму  $(Bf, f)$ , порожденную интегральным оператором  $B$  (ср. (2.27) гл. I)

$$(Bf)(x) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} \frac{\sin \sqrt{c}(x-x')}{x-x'} f(x') dx'. \quad (2.9)$$

Известно, что максимальное значение квадратичной формы  $(Bf, f)$  на единичной сфере  $\|f\| = 1$  равно максимальному собственному значению оператора  $B$ .

Используя обозначения, принятые в § 2 гл. I, получим

$$\beta_{\max} = \mu_0(c) / \sqrt{2\pi}, \quad (2.10)$$

что и доказывает неравенство (2.7). Максимальное значение достигается, если в качестве сигнала  $f(t)$  на промежутке  $(-T/2, T/2)$  взять сфероидальную функцию

$$f(t) = \begin{cases} S_{01}(c, 2t/T), & |t| < T/2, \\ 0, & |t| > T/2. \end{cases} \quad (2.11)$$

Случай сигнала с финитным спектром исследуется аналогично.

Можно сформулировать в тех же терминах и более общий принцип неопределенности. Пусть при фиксированном выборе временного интервала  $(-T/2, T/2)$  мерой сосредоточенности сигнала  $f(t)$  на этом интервале служит величина  $\alpha$

$$\alpha^2 = \frac{\int_{-T/2}^{T/2} |f(t)|^2 dt}{\int_{-\infty}^{\infty} |f(t)|^2 dt}, \quad 0 < \alpha < 1. \quad (2.12)$$

Соответственно для каждого частотного интервала  $(-\Omega, \Omega)$  мерой сосредоточенности на нем спектра  $F(\omega)$  служит величина  $\beta$

$$\beta^2 = \frac{\int_{-\Omega}^{\Omega} |F(\omega)|^2 d\omega}{\int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega}, \quad 0 < \beta < 1. \quad (2.13)$$

Тогда для всех сигналов выполняется неравенство

$$\arccos \alpha + \arccos \beta \geq \arccos (\mu_0(c) / \sqrt{2\pi}), \quad (2.14)$$

где снова  $\mu_0(c)$  — максимальное собственное значение интегрального уравнения (2.27) гл. I. Сигнал  $f(t)$ , на котором реализуется знак равенства (при  $\alpha^2 + \beta^2 > 1$ ), выражается через сфероидальные функции

$$f(t) = \begin{cases} \frac{\alpha \sqrt{2\pi}}{\mu_0} S_{00}(c, 2t/T), & |t| < T/2, \\ \left[ \frac{2\pi(1-\alpha^2)}{2\pi - \mu_0^2} \right]^{1/2} S_{00}(c, 2t/T), & |t| > T/2. \end{cases} \quad (2.15)$$

Доказательство принципа неопределенности в такой форме приведено в книге Хургина и Яковлева (1971). На рис. 36 показана допустимая область изменения  $\alpha$  и  $\beta$  при фиксированном значении  $c=1$ .

**2. Восстановление структуры объекта по изображению.** В оптике и других разделах физики процесс измерения или наблюдения состоит в том, что сигнал  $g$  от объекта поступает в измерительный прибор, который регистрирует изображение  $f$ . С точки зрения математики этот процесс можно отождествить с действием некоторого оператора  $H$  из пространства объектов в пространство изображений. Обычно считают, что оператор  $H$  — линейный интегральный оператор с симметричным разностным ядром, так что процесс измерения можно описать с помощью уравнения

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} h(x-x') g(x') dx'. \quad (2.16)$$

Функция  $h(x-x')$  называется *аппаратной функцией прибора*. Очевидно, что аппаратная функция есть изображение точечного источника типа дельта-функции. В том случае, если сигнал от объекта конечен, т. е.  $g(x) \equiv 0$  при  $|x| > a$ , интегральное уравнение (2.16) принимает вид

$$f(x) = \int_{-a}^a h(x-x') g(x') dx'.$$

Часто дополнительно рассматривают внесение прибором в изображение собственных помех  $\varepsilon(x)$ , называемых *измерительными шумами*, что приводит к уравнению

$$f(x) = \int_{-a}^a h(x-x') g(x') dx' + \varepsilon(x). \quad (2.17)$$

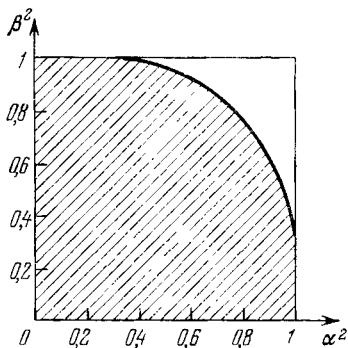


Рис. 36. Допустимая область изменения меры сосредоточенности сигнала  $\alpha$  и его спектра  $\beta$  в соответствии с принципом неопределенности (2.14) при  $c=1$ .

Можно рассматривать и шумовой фон в пространстве объектов.

Важнейшими задачами теории линейных приборов являются *восстановление сигнала по изображению* и *учет влияния шумов на точность восстановления сигнала*. С математической точки зрения эти задачи сводятся к решению уравнений Фредгольма первого рода с проведением последующих оценок для этого решения. Здесь нет возможности подробно остановиться на всех аспектах этой сложной проблемы\*), которую исследовали различными методами. Рассмотрим лишь частный случай, когда для решения ее могут быть применены сфероидальные функции.

Пусть оптический прибор, формирующий изображение, состоит из телескопической системы линз и диафрагмы в виде бесконечной щели ширины  $2a$ . Считаем, что система линз действует как идеальный оптический

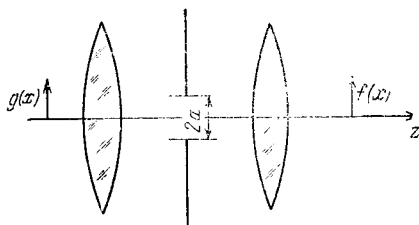


Рис. 37. Формирование изображения по Фраунгоферу.

прибор, т. е. без учета диафрагмы объект и изображение одинаковы. Тогда аппаратная функция определяется действием диафрагмы. Подобное формирование изображения в оптике называется *дифракцией Фраунгофера* на щели. В дальнейшем рассмотрении исключим координату  $z$  вдоль щели и перейдем к двумерной постановке задачи на плоскости  $x, y$  (рис. 37). Поскольку объект и изображение в этом случае характеризуются одной координатой на фокальных прямых, соответствующее интегральное уравнение теории измерений является одномерным. В курсах оптики (см., например, Борн и Вольф, 1973) доказывается, что аппаратная функция для рассматриваемого процесса при условии, что от

\*) Как известно, задача решения уравнений Фредгольма первого рода является некорректной и требует определенной регуляризации.

различных точек источника идет когерентное излучение, представляется следующим образом:

$$h(x - x') = \frac{\sin \frac{x - x'}{d}}{\pi(x - x')}. \quad (2.18)$$

Здесь  $d$  — так называемое *расстояние разрешения по Рэлею*.

Введем безразмерный параметр  $c = a/d$  и перейдем к новым безразмерным переменным, сохранив для них старые обозначения

$$\sqrt{c} \frac{x}{a} \rightarrow x, \quad \sqrt{c} \frac{x'}{a} \rightarrow x'.$$

В таких переменных основное уравнение для процесса измерения без шумов имеет вид

$$f(x) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} \frac{\sin \sqrt{c}(x - x')}{\pi(x - x')} g(x') dx'. \quad (2.19)$$

В § 2 гл. I показано, что нормированные собственные функции  $\psi_l(c, x)$  однородного уравнения Фредгольма второго рода с тем же ядром, что и в (2.19), выражаются через с. у. с. ф.

$$\psi_l(c, x) = |c|^{-1/4} \bar{S}_{0l}(c, x/\sqrt{c}). \quad (2.20)$$

Соответствующие собственные значения в обозначениях § 2 гл. I есть  $|\mu_l(c)|^2/(2\pi)$ .

Пусть  $g_l$  и  $f_l$  — коэффициенты Фурье разложения функций  $g(x) \in \mathcal{L}_2(-\sqrt{c}, \sqrt{c})$  и  $f(x)$  на промежутке  $(-\sqrt{c}, \sqrt{c})$  по ортонормированному базису  $\psi_l(c, x)$ , т. е.

$$g_l = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} g(x) \psi_l(c, x) dx, \quad (2.21a)$$

$$f_l = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} f(x) \psi_l(c, x) dx. \quad (2.21b)$$

Тогда, подставив эти разложения в уравнение (2.19), получим формулу, связывающую коэффициенты Фурье  $g_l$  и  $f_l$ ,

$$f_l = \frac{|\mu_l^2(c)|}{2\pi} g_l. \quad (2.22)$$

Формула (2.22) устанавливает теоретическую возможность точного восстановления функции  $g(x)$ , т. е. объекта, по функции  $f(x)$ , т. е. изображению\*). Однако процесс восстановления является некорректной операцией в том смысле, что малое изменение коэффициентов  $f_l$  может приводить к большому изменению коэффициентов  $g_l$ . Это следует из того, что, как показано в § 4 гл. I, величины  $\mu_l$  быстрее, чем экспоненциально убывают по модулю с увеличением  $l$ . Практически резкое убывание начинается со значений  $l > 2c/\pi$  (см. рис. 8). Тем не менее, как показывают конкретные расчеты, ограничиваясь конечным числом членов ряда Фурье для  $g(x)$  и проводя вычисления с большой точностью, можно получить восстановление объекта по изображению, лучшее чем это определяется классическим критерием Рэлея. Конкретные примеры расчетов приведены в статье Barnes (1966).

Введение в рассмотрение измерительного шума  $\varepsilon(x)$  приводит к уравнению

$$f(x) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} \frac{\sin \sqrt{c}(x-x')}{\pi(x-x')} g(x') dx' + \varepsilon(x). \quad (2.23)$$

Здесь надо особо выделить случай, когда шум  $\varepsilon(x)$  представляется через ядро интегрального оператора в (2.23), т. е. имеет финитный спектр в промежутке  $[-\sqrt{c}, \sqrt{c}]$ . В этом случае коэффициенты Фурье  $\varepsilon_l$  шума быстро убывают и такой шум относительно мало сказывается на восстановлении сигнала. В противном случае, из формулы

$$f_l - \varepsilon_l = \frac{|\mu_l^2(c)|}{2\pi} g_l \quad (2.24)$$

следует, что коэффициенты  $g_l$ , вообще говоря, быстро растут по модулю. Таким образом, шум с нефинитным спектром приводит к значительным погрешностям при восстановлении сигнала.

**3. Задача синтеза линейной антенны.** Задача синтеза в теории антенн ставится следующим образом. Задаются расположение и форма излучающих поверхностей, так называемый *раскрыв* или *апертура* антенны. Требуется

\*) Предполагается, что решение уравнения (2.19) существует.

найти такое распределение токов по апертуре антенны, которое обеспечивало бы наилучшую аппроксимацию заданной диаграммы направленности, при дополнительном условии, чтобы отношение всей подводимой к антенне мощности к излучаемой мощности было бы не слишком велико.

Рассмотрим конкретную модель антенны в виде линейного вибратора. Апертура такой антенны представляет собой отрезок  $[-a, a]$  вдоль оси  $x$  на плоскости  $x, y$ . Пусть распределение тока по апертуре задается функцией  $f(x)$ . Вне апертуры токов нет, так что функция  $f(x)$  доопределяется на всю действительную ось условием  $f(x) \equiv 0, |x| > a$ .

Согласно принципу Гюйгенса поле  $U(x, y)$ , создаваемое распределением токов по апертуре, можно представить в виде интеграла

$$U(x, y) = -\frac{i}{4} \int_{-a}^a H_0^{(1)}(kR) f(x') dx', \quad (2.25)$$

где  $R = \sqrt{(x-x')^2 + y^2}$  — расстояние от точки наблюдения до источника,  $k$  — волновое число,  $H_0^{(1)}(kR)$  — функция Ханкеля первого рода. Асимптотика поля  $U(x, y)$  в дальней зоне при  $R \rightarrow \infty$  равна произведению расходящейся волны на *диаграмму направленности*  $F(u)$ . После замены в формуле (2.25) функции Ханкеля на ее асимптотику для функции  $F(u)$  получается с точностью до несущественных для нашего рассмотрения числовых множителей выражение

$$F(u) = \int_{-a}^a e^{-ikux'} f(x') dx'. \quad (2.26)$$

Здесь  $u = \sin \vartheta$ ,  $\vartheta$  — угол между радиусом-вектором точки наблюдения и осью  $y$  (рис. 38). В силу симметрии задачи в дальнейшем рассмотрим только полуплоскость

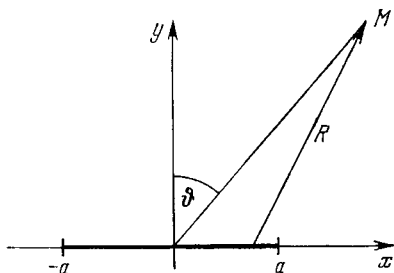


Рис. 38. Линейная антенна на плоскости.

$y \geq 0$ , так что  $\vartheta \in [-\pi/2, \pi/2]$  и  $u \in [-1, 1]$ . Множество значений  $u \in [-1, 1]$  называется *областью видимости*. В безразмерных переменных  $s = ka$ ,  $\omega = \sqrt{c}u$ ,  $t = \sqrt{c}x/a$  соотношение между диаграммой направленности  $F(\omega)$  и распределением токов  $f(t)$  примет вид

$$F(\omega) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} e^{i\omega t} f(t) dt. \quad (2.27)$$

Из свойств преобразования Фурье следует, что диаграмма направленности  $F(\omega)$  — целая функция на плоскости  $\omega$ , а на действительной оси принадлежит классу  $\mathcal{L}_2(-\infty, \infty)$ .

Значениям функции  $F(\omega)$  на действительной оси вне области видимости можно придать смысл из энергетических соображений. Величина

$$\epsilon_1 = (2\pi)^{-1} \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} |F(\omega)|^2 d\omega \quad (2.28)$$

пропорциональна излучаемой энергии; с другой стороны, в силу равенства Парсеваля величина

$$\epsilon_2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} |f(t)|^2 dt \quad (2.29)$$

пропорциональна полной энергии тока, подводимого к антенне. Таким образом, функция  $F(\omega)$  вне области видимости характеризует реактивную составляющую тока в антенне.

Введем *коэффициент сверхнаправленности*

$$Q = \frac{\epsilon_2}{\epsilon_1} = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} |F(\omega)|^2 d\omega}{\int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} |F(\omega)|^2 d\omega}, \quad (2.30)$$

который определяет, насколько данная антенна является технически реализуемой и экономически выгодной. Проведя те же рассуждения, что и в п. 1 настоящего параграфа, можно показать, что величина  $Q$  для всех



функций  $F(\omega)$  ограничена снизу постоянной  $Q_0(c)$ , причем  $Q_0(c) \xrightarrow{c \rightarrow \infty} 1$  и  $Q_0(c) \xrightarrow{c \rightarrow 0} \infty$ .

Задача синтеза линейной антенны ставится следующим образом. Пусть в области видимости  $\omega \in [-\sqrt{c}, \sqrt{c}]$  задана некоторая диаграмма направленности  $F(\omega)$  и зафиксирован коэффициент сверхнаправленности  $Q$ . Требуется найти распределение тока по апертуре  $f(t)$  так, чтобы соответствующая ему диаграмма направленности  $F(\omega)$  — целая функция, на действительной оси принадлежащая  $\mathcal{L}_2(-\infty, \infty)$ , — доставляла минимум функционалу

$$I = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} |F(\omega) - \tilde{F}(\omega)|^2 d\omega. \quad (2.31)$$

Функционал  $I$  определяет среднеквадратичное отклонение заданной и искомой диаграмм направленности.

Поставленную вариационную задачу естественно решить, раскладывая диаграмму направленности  $F(\omega)$  по базисной системе функций. При этом наиболее простое выражение для коэффициента сверхнаправленности получается, если эта система ортогональна как на отрезке  $[-\sqrt{c}, \sqrt{c}]$ , так и на всей действительной оси. Вследствие этого удобно взять в качестве базиса систему собственных функций преобразования Фурье в конечных пределах  $\psi_l(c, \omega)$ , обладающую свойством двойной ортогональности (см. § 2 гл. I). Как известно, эти функции выражаются через в. у. с. ф., так что базисом является система в. у. с. ф. с индексом  $m=0$  и измененным масштабом

$$\psi_l(c, \omega) = (c)^{-1/4} \bar{S}_{0l}(c, \omega/\sqrt{c}).$$

Пусть функция  $F(\omega)$  принадлежит  $\mathcal{L}_2(-\sqrt{c}, \sqrt{c})$ . Тогда справедливо разложение

$$\tilde{F}(\omega) = \sum_{l=0}^{\infty} a_l \psi_l(c, \omega), \quad (2.32)$$

где сходимость понимается в смысле среднеквадратичного. Коэффициенты Фурье  $a_l$  находятся стандартным образом. Минимизирующая последовательность  $F_N(\omega)$ , приближающая искомую диаграмму направленности

$F(\omega)$ , строится в виде конечной суммы

$$F_N(\omega) = \sum_{l=0}^N b_l \psi_l(c, \omega). \quad (2.33)$$

По методу неопределенных множителей Лагранжа исходная вариационная задача сводится к нахождению минимума выражения

$$\sum_{l=0}^{\infty} |a_l|^2 - 2 \operatorname{Re} \sum_{l=0}^N (a_l, b_l) + \sum_{l=0}^N |b_l|^2 \left[ 1 + \left( \frac{2\pi}{|\mu_l|^2} - Q \right) \chi \right]. \quad (2.34)$$

Здесь использована найденная в § 2 гл. I нормировка функций  $\psi_l(c, \omega)$  на всей действительной оси  $(-\infty, \infty)$ . Величина  $\chi$  есть неопределенный множитель Лагранжа. Минимум выражения (2.34) достигается при следующих коэффициентах:

$$b_l = \frac{a_l}{1 + \left( \frac{2\pi}{|\mu_l|^2} - Q \right) \chi}, \quad (2.35)$$

где  $\mu_l(c)$  — собственные значения интегрального уравнения (2.27) гл. I. Множитель  $\chi$  находится из условия

$$\sum_{l=0}^N \frac{|a_l|^2 \left( \frac{2\pi}{|\mu_l|^2} - Q \right)}{1 - \left( \frac{2\pi}{|\mu_l|^2} - Q \right) \chi} = 0, \quad (2.36)$$

которое следует из формул (2.30), (2.33) и (2.35). Таким образом, формальная процедура нахождения минимизирующей последовательности определена. Более сложный математический вопрос, существует ли предел  $F_N(\omega)$  при  $N \rightarrow \infty$ , и будет ли он принадлежать классу допустимых диаграмм направленности, т. е. целых функций, интегрируемых с квадратом на действительной оси, здесь не обсуждается. Распределение токов по апертуре  $f_N(t)$  может быть найдено по диаграмме направленности  $F_N(\omega)$  с помощью обратного преобразования Фурье. Используя тот факт, что функции  $\psi_l(c, \omega)$  являются собственными функциями преобразования Фурье в конечных пределах, окончательно получаем

$$f_N(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t} \sum_{l=0}^N b_l \psi_l(\omega) d\omega = \sum_{l=0}^N \frac{b_l}{\mu_l} \psi_l(c, t). \quad (2.37)$$

Поскольку собственные значения  $\mu_l(c)$  близки к единице при  $l < 2c/\pi$  и быстро убывают к нулю при  $l > 2c/\pi$  (см. рис. 8), из выражения (2.35) для коэффициентов Фурье  $b_l$  следует, что число  $N$  должно быть больше, чем  $\text{Ent}(2c/\pi) + 1$ , т. е. число членов разложений (2.33) и (2.32) должно быть по меньшей мере на единицу больше, чем число полуволн, укладывающихся по длине антенны. В связи с этим при больших длинах антенны часто используют более грубые, но простые способы аппроксимации заданной диаграммы направленности.

С помощью изложенного метода произведен расчет ряда конкретных задач, например синтез так называемой *косекансной диаграммы направленности*. Проведенные вычисления показали, что чем меньше апертура, тем менее чувствительна аппроксимация диаграммы направленности к изменению коэффициента сверхнаправленности.

**4. Собственные колебания конфокального открытого резонатора.** Развитие техники лазеров стимулировало интерес к теории квазиоптических устройств, в частности открытых резонаторов. Важную роль в этой теории играют *квасисобственные колебания (моды)*, которые можно определить как конфигурации волнового поля,

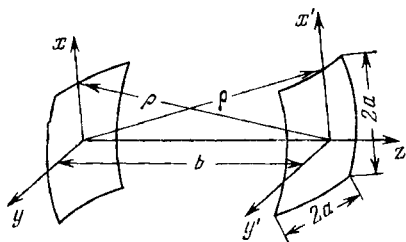


Рис. 39. Конфокальный открытый резонатор.

достаточно устойчивые во времени. С помощью сферических функций удастся описать собственные колебания часто используемого на практике так называемого *конфокального резонатора*, определение которого дано ниже.

Рассмотрим открытый резонатор, образованный двумя одинаковыми симметрично расположенными зеркалами с квадратной апертурой (рис. 39). Расстояние между зеркалами вдоль оптической оси считаем равным

$b$ , поперечный размер зеркал  $2a$ , радиус кривизны зеркал  $\rho$ , волновое число  $k$ . Предполагаем, что выполнены следующие условия:

$$kb \gg 1, \quad ka \gg 1, \quad a/b \ll 1, \quad \rho \sim b. \quad (2.38)$$

Резонатор называется *конфокальным* в случае, когда  $\rho = b$ .

Пусть волновое поле характеризуется скалярной функцией  $u$ , удовлетворяющей уравнению Гельмгольца, условию Неймана на поверхности зеркал и условию излучения. Зададим функцию  $u$  на одном из зеркал. Тогда волновое поле на другом зеркале вычисляется по принципу Гюйгенса. Согласно условию сохранения конфигурации поля при отражениях, потребуем, чтобы исходное поле воспроизводило себя на втором зеркале с точностью до комплексного множителя. С учетом ограничений на геометрию зеркал (2.38) это требование приводит в приближении Кирхгофа к интегральному уравнению

$$\sigma u(N) = -\frac{ik}{2\pi} \int_S \frac{\exp\{kR(MN)\}}{R(MN)} u(N) dS, \quad (2.39)$$

которое обычно называют *уравнением Фокса и Ли*. Здесь  $M$  и  $N$  — точки на различных зеркалах,  $R(MN)$  — расстояние между ними. Интегрирование производится по поверхности зеркала, обращенной к другому зеркалу.

Введем ось  $z$ , направленную вдоль оптической оси, и декартовы координаты на зеркалах  $x, y$  и  $x', y'$ . Тогда расстояние  $R(MN)$  в случае конфокального резонатора представляется в виде

$$R(MN) = b - \frac{xx' + yy'}{b} + O\left(\left(\frac{x^2 + y^2}{b}\right)^2\right). \quad (2.40)$$

Определим безразмерный параметр  $c$  равенством

$$c = ka^2/b. \quad (2.41)$$

При больших значениях параметра  $c$  в ядре интегрального оператора (2.39) вкладом третьего слагаемого в выражении (2.40) для  $R(MN)$  можно пренебречь. Перейдя к безразмерным переменным

$$t = x\sqrt{c}/a, \quad s = y\sqrt{c}/a,$$

представим собственные функции  $u_{nm}(t, s)$  в виде

$$u_{nm}(t, s) = \psi_n(t) \psi_m(s). \quad (2.42)$$

После разделения переменных с учетом сделанного приближения в ядре задача сведется к решению одномерного интегрального уравнения

$$\sigma_n \psi_n(t) = \int_{-\sqrt{c}}^{\sqrt{c}} e^{-itt'} \psi_n(t') dt'. \quad (2.43)$$

Собственные значения  $\sigma_{mn}$  интегрального уравнения (2.39) представляются через собственные значения  $\sigma_n$  уравнения (2.43) формулой

$$i2\pi e^{-ikb} \sigma_{mn} = \sigma_m \sigma_n. \quad (2.44)$$

Интегральное уравнение (2.43) лишь знаком в экспоненте отличается от уравнения (2.27) гл. I. Используя свойство симметрии, получаем, что собственные функции  $\psi_n(t)$  совпадают с собственными функциями преобразования Фурье в конечных пределах, введенными в § 2 гл. I и выражаются через в.у.с.ф.

$$\psi_l(t) = S_{0l} \left( \frac{ka^2}{b}, \frac{x}{a} \right). \quad (2.45)$$

Собственные значения  $\sigma_l(c)$  при четных номерах  $l$  совпадают с собственными значениями  $\mu_l(c)$  (см. § 2 гл. I), а при нечетных номерах  $l$  отличаются знаком.

Используя известные свойства сфероидальных функций, можно получить различные характеристики мод конфокального открытого резонатора. Например, важной характеристикой являются дифракционные потери за одно прохождение между зеркалами, которые задаются выражением

$$\alpha_D = 1 - \frac{|\sigma_n \sigma_m|}{2\pi} = 1 - \frac{|\mu_n \mu_m|}{2\pi}. \quad (2.46)$$

Из асимптотической формулы (5.42) гл. I следует, что при больших значениях  $c$  дифракционные потери убывают экспоненциально, а именно

$$\alpha_D = e^{-2c} \sqrt{\pi} \left\{ \frac{c^{\frac{2n+1}{2}} 2^{3n+1}}{n!} [1 + O(c^{-1})] + \frac{c^{\frac{2m+1}{2}} 2^{3m+1}}{m!} [1 + O(c^{-1})] \right\}. \quad (2.47)$$

Это свидетельствует о наличии каустик у волнового поля и о хороших резонансных свойствах открытого резонатора.

Спектр собственных частот  $k$  открытого резонатора находится из равенства (2.44). Нужно лишь учесть, что для воспроизведения поля в резонаторе приращение фазы при прохождении волны от одного зеркала к другому должно быть равным  $2\pi q$ , где  $q$  — целое число. Отсюда получаем

$$k_{qnm} = \frac{1}{b} \left[ \pi q + (m + n + 1) \frac{\pi}{2} \right]. \quad (2.48)$$

Видно, что спектр конфокального резонатора сильно вырожден\*). Это вырождение связывают с тем обстоятельством, что геометрооптические лучи в конфокальном резонаторе после четырех отражений замыкаются сами на себя. Вследствие бесконечнократного вырождения частот конфокального резонатора следует относиться с осторожностью к попыткам некоторых авторов использовать сфероидальные функции в качестве невозмущенного базиса при рассмотрении возмущений конфокального резонатора.

С помощью асимптотических свойств сфероидальных функций могут быть также вычислены такие важные характеристики волнового поля в конфокальном резонаторе, как размер светового пятна, расходимость лучевой трубки излучения и т. д. За подробностями этих вычислений мы отсылаем читателя к специальной литературе, приведенной в библиографических указаниях.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Вопросы, разобранные в этом параграфе, и близкие к ним, значительно более полно изложены в монографиях Минковича и Яковлева (1969), Хургина и Яковлева (1971), обзоре Frieden (1971). Большое число оригинальных работ собрано в книге «Функции с двойной ортогональностью в радиоэлектронике и оптике», перевод и научная обработка Размахнина и Яковлева (1971). Во всех перечисленных книгах содержится обширная библиография. В связи с этим мы здесь укажем лишь основные этапы в развитии рассмотренной группы применений сфероидальных функций. основополагающим следует считать цикл статей Slepian, Pollak (1961), Landau, Pollak

---

\*) Вырождение спектра конфокального резонатора тесно связано с вырождением в первом приближении спектра колебаний типа «прыгающего мячика», рассмотренных в предыдущем параграфе.

(1961, 1962), где было доказано свойство двойной ортогональности сфероидальных функций, сформулирован принцип неопределенности в терминах сфероидальных функций, намечены основные направления приложений. Интегральное уравнение в задаче дифракции Фраунгофера на щели было известно Мандельштаму (1948) еще в 1912 г., но в то время сфероидальные функции не были достаточно изучены. Изложение этого вопроса в настоящем параграфе базируется на статьях Barnes (1966) и Brown (1969). Последовательное применение сфероидальных функций в задаче синтеза антенн содержится в статье Rhodes (1963). Boyd, Gordon (1961) первыми рассмотрели собственные колебания открытого резонатора с помощью сфероидальных функций. Более полные сведения о роли сфероидальных функций в теории открытых резонаторов имеются в книге Вайнштейна (1966). В настоящем параграфе нет приложений сфероидальных функций к теории связи, поскольку изложение этого круга вопросов требует предварительного введения многих специальных понятий. С приложениями в теории связи читатель может ознакомиться по книге Хургина и Яковлева (1971).

### § 3. Рассеяние на потенциалах, допускающих разделение переменных в сфероидальных координатах

Задача о квантовомеханическом рассеянии частицы силовым полем  $V(r)$  состоит в нахождении амплитуды рассеяния  $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$ , которая определяет асимптотику решения уравнения Шредингера в этом поле

$$\Delta \Psi + [k^2 - 2V(r)] \Psi = 0,$$

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \underset{r \rightarrow \infty}{=} e^{ik(nn_0)} + \frac{f(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)}{r} e^{ikr}. \quad (3.1)$$

Здесь  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ ,  $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}/k$ .

Хорошо известно, что для сферически симметричного потенциала амплитуда  $f(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$  может быть представлена в виде ряда по полиномам Лежандра, коэффициенты которого связаны с фазами радиальных функций. Аналогичные разложения по соответствующим угловым функциям уравнения Шредингера справедливы и для потенциалов, допускающих разделение переменных в сфероидальных координатах. В отличие от сферически симметричного случая, информацию о рассеивающем сфероидальном потенциале несут, вообще говоря, не только фазы радиальных функций, но и угловые гармоники, которые зависят от угловой части потенциала  $b(\eta)$  и энергии столкновения. Остановимся на этом вопросе подробнее, выбрав для определенности аксиально-симметричный

потенциал

$$V = -\frac{2}{d^2} \frac{a(\xi) + b(\eta)}{\xi^2 - \eta^2}, \quad (3.2)$$

допускающий разделение переменных в вытянутых сфероидальных координатах. Сначала рассмотрим случай, когда потенциал убывает на бесконечности быстрее кулоновского, так что  $a(\xi) \rightarrow \text{const}$  при  $\xi \rightarrow \infty$ . Подставляя волновую функцию

$$\Psi_{mq}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) = X_{mq}(\xi) Y_{mq}(\eta) e^{\pm im\varphi} \quad (3.3)$$

в уравнение Шредингера, получаем для  $X_{mq}(\xi)$  и  $Y_{mq}(\eta)$  систему уравнений (2.13), (2.14) введения, в которой  $\mu = m^2$ .

Краевая задача Штурма—Лиувилля для углового уравнения (2.13) введения аналогична краевой задаче (1.14) гл. II, порождающей у. к. с. ф.  $c$ -типа. Собственные функции  $Y_{mq}(\eta)$  можно выбрать действительными, а соответствующие им собственные значения  $\lambda_{mq}(c)$  образуют дискретный невырожденный набор для широкого класса потенциалов  $b(\eta)$ .

Индекс  $q=0, 1, 2, \dots$  указывает число нулей угловой функции. Функции  $Y_{mq}(\eta)$  при различных  $q$  и одинаковом  $m$  образуют полную ортонормированную систему на отрезке  $[-1, 1]$ .

Радиальную функцию  $X_{mq}(\xi)$ , соответствующую константе разделения  $\lambda_{mq}(c)$  и конечную при  $\xi=1$ , нормируем ее асимптотикой

$$X_{mq}(\xi) \underset{\xi \rightarrow \infty}{\sim} \frac{1}{c\xi} \sin\left(c\xi - \frac{\pi(q+m)}{2} + \Delta_{mq}\right), \quad c = \frac{kd}{2}. \quad (3.4)$$

Фазовые сдвиги  $\Delta_{mq}$  характеризуют влияние потенциала на движение рассеиваемой частицы. Если потенциал отсутствует  $a(\xi) \equiv 0$ ,  $b(\eta) \equiv 0$ , то функции  $X_{mq}(\xi)$  и  $Y_{mq}(\eta)$  переходят в вытянутые сфероидальные функции  $R_{ml}(c, \xi)$ ,  $S_{ml}(c, \eta)$ ,  $l=q+m$ , для которых сдвиги фаз обращаются в нуль  $\Delta_{mq}=0$ .

Решения уравнения Шредингера  $\Psi_{mq}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$ , полученные при разделении переменных, являются собственными функциями трех коммутирующих операторов:  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}_3^2$ ,  $\hat{\Lambda}$ , собственные значения которых есть энергия  $E$ , квадрат азимутального квантового числа  $m$  и константа разделения  $\lambda$  соответственно. (Для задачи  $Z_1 e Z_2$  операторы  $\hat{H}$ ,  $\hat{L}_3^2$ ,  $\hat{\Lambda}$  приведены в п. 1 § 8 гл. II.) При положительной



энергии можно считать, что оператор  $\hat{\Lambda}$  зависит от  $c^2 = Ed^2/2$  как от параметра, и рассматривать его действие не в трехмерном координатном пространстве, а на единичной сфере с координатами  $\eta = \cos \theta'$ ,  $\varphi$

$$\hat{\Lambda} = -\frac{\partial}{\partial \eta} (1 - \eta^2) \frac{\partial}{\partial \eta} + |1 - c^2(1 - \eta^2) - b(\eta)| - \frac{1}{1 - \eta^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (3.5)$$

Собственные функции оператора  $\hat{\Lambda}$

$$\mathcal{Y}_{mq}(\mathbf{n}') = Y_{mq}(\eta) \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \quad (3.6)$$

образуют полную ортонормированную систему на этой сфере.

Найдем связь собственных функций оператора  $\hat{\Lambda}$  с собственными функциями оператора рассеяния  $S$ . Асимптотика решения  $\Psi_{mq}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  при  $r \rightarrow \infty$  с помощью (3.4), (3.6) представляется в виде

$$\Psi_{mq}(\mathbf{r}, \mathbf{k}) \underset{r \rightarrow \infty}{=} \mathcal{Y}_{mq}(\mathbf{n}') \frac{1}{2ikr} \left[ e^{i\left(kr - \frac{\pi}{2}(q+m) + \Delta_{mq}\right)} - e^{-i\left(kr - \frac{\pi}{2}(q+m) + \Delta_{mq}\right)} \right]. \quad (3.7)$$

Здесь учтено, что при удалении от рассеивающего потенциала сферические координаты переходят в сферические с центром в начале координат  $\xi \rightarrow 2r/d$ ,  $r \rightarrow \infty$ ,  $\eta = \cos \theta' \rightarrow \cos \theta$  ( $\theta$  — угол между единичным вектором  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$  и осью  $z$ ). Асимптотика любого решения уравнения Шредингера при  $E > 0$ ,  $r \rightarrow \infty$  выражается с помощью оператора рассеяния  $\hat{S}$ , действующего в координатном пространстве на единичной сфере

$$\Psi(\mathbf{r}) \underset{r \rightarrow \infty}{=} \frac{1}{2ikr} \{ e^{ikr} \hat{S} F(-\mathbf{n}) - e^{-ikr} F(\mathbf{n}) \}, \quad (3.8)$$

где  $F(\mathbf{n})$  — некоторая функция углов. Введем оператор инверсии в начале координат

$$IF(\mathbf{n}) = F(-\mathbf{n}). \quad (3.9)$$

Сравнение асимптотического выражения для  $\Psi_{mq}(\mathbf{r}, \mathbf{k})$  (3.7) с формулами (3.8), (3.9) показывает, что собственные функции оператора  $\hat{\Lambda}$  являются одновременно

и собственными функциями унитарного оператора  $\widehat{S}$

$$\widehat{S} \mathcal{Y}_{mq}(\mathbf{n}) = e^{2i\left(\Delta_{mq} - \frac{\pi}{2}(q+m)\right)} \mathcal{Y}_{mq}(\mathbf{n}). \quad (3.10)$$

Соотношение (3.10) позволяет построить разложения амплитуды рассеяния по функциям  $\mathcal{Y}_{mq}(\mathbf{n})$ .

Матричные элементы оператора рассеяния на собственных функциях оператора константы разделения равны

$$\langle mq | \widehat{S} | q' m' \rangle = e^{2i\left(\Delta_{mq} - \frac{\pi}{2}(q+m)\right)} \langle mq | \widehat{I} | q' m' \rangle. \quad (3.11)$$

В этом представлении матрица рассеяния, вообще говоря, недиагональна. Она становится диагональной, когда операторы инверсии и константы разделения коммутируют, т. е. при рассеянии на потенциалах, обладающих центром инверсии. (В этом случае  $b(\eta) = b(-\eta)$  — четная функция.)

Из соотношения между оператором  $\widehat{S}$  и оператором  $\widehat{f}$ , матричные элементы которого дают амплитуду рассеяния,

$$\widehat{S} = 1 + \frac{ik}{2\pi} \widehat{f} \quad (3.12)$$

следует выражение для амплитуды через угловые функции  $Y_{mq}(\eta)$  и фазы  $\Delta_{mq}$

$$\begin{aligned} f(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = & \frac{1}{ik} \sum_{m,q}^{\infty} (2 - \delta_{0m}) \cos m(\varphi - \varphi_0) Y_{mq}(\cos \theta) \times \\ & \times \left\{ e^{2i\left(\Delta_{mq} - \frac{\pi q}{2}\right)} Y_{mq}(-\cos \theta_0) - Y_{mq}(\cos \theta_0) \right\}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Углы  $(\theta, \varphi)$  и  $(\theta_0, \varphi_0)$  определяют ориентацию векторов  $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$ ,  $\mathbf{n}_0 = \mathbf{k}/k$  относительно оси  $z$ ;  $\cos \theta_0 \equiv \eta_0$ .

Соответствующие разложения для полного сечения  $\sigma$  и полного сечения, усредненного по ориентациям рассеивателя,  $\bar{\sigma}$  имеют вид

$$\begin{aligned} \sigma = & \frac{2\pi}{k^2} \sum_{m,q=0}^{\infty} (2 - \delta_{0m}) \left\{ Y_{mq}^2(\eta_0) + Y_{mq}^2(-\eta_0) - \right. \\ & \left. - 2 \cos(2\Delta_{mq} - \pi q) Y_{mq}(\eta_0) Y_{mq}(-\eta_0) \right\} \end{aligned} \quad (3.14)$$

и

$$\bar{\sigma} = \frac{2\pi}{k^2} \sum_{m,q=0}^{\infty} (2 - \delta_{0m}) \left\{ 1 - \cos(2\Delta_{mq} - \pi q) \times \right. \\ \left. \times \int_{-1}^1 Y_{mq}(\eta) Y_{mq}(-\eta) d\eta \right\}. \quad (3.15)$$

При наличии у потенциала центра инверсии, когда угловые функции являются собственными функциями оператора рассеяния, выражения (3.13), (3.14), (3.15) упрощаются и переходят в привычные формулы для амплитуды и сечений в  $S$ -представлении (Демков, Рудаков, 1970).

В сплюснутых сфероидальных координатах разложения (3.13)–(3.15) остаются верными, если под  $\eta$  и  $\Delta_{mq}$  понимать угловую переменную и фазу радиальной функции в сплюснутых сфероидальных координатах.

При анализе рассеяния на потенциале, имеющем кулоновское поведение на больших расстояниях, непосредственно пользоваться формулами (3.13)–(3.15) нельзя. Так же как и в центрально-симметричном поле, разбивают потенциал взаимодействия  $V$  на чисто кулоновский потенциал  $V^0$ , для которого известно точное решение, и добавочный быстро убывающий потенциал  $V'$  и представляют амплитуду рассеяния в виде суммы чисто кулоновской амплитуды и добавочного члена. Заряд, создающий кулоновское поле, удобно поместить в один из полюсов выбранной вытянутой сфероидальной системы координат; в какой именно определяется лишь соображениями удобства. Поместив кулоновский заряд в левый полюс ( $\eta = -1$ ), имеем

$$V = V_1^0 + V_1', \quad (3.16)$$

$$V_1^0 = -\frac{Z}{r_1} = -\frac{2}{d^2} \frac{a(\xi - \eta)}{\xi^2 - \eta^2}, \\ V_1' = -\frac{2}{d^2} \frac{a_1(\xi) + b_1(\eta)}{\xi^2 - \eta^2}, \quad (3.17)$$

$$a_1(\xi) = a(\xi) - a\xi, \quad b_1(\eta) = b(\eta) + a\eta. \quad (3.18)$$

Здесь  $Z = Z_1 + Z_2$  — заряд опорной одноцентральной

кулоновской задачи,

$$a = Zd,$$

причем  $a_1(\xi) \xrightarrow{\xi \rightarrow \infty} \text{const.}$

При разделении переменных в уравнении Шредингера с потенциалами  $V$  и  $V_1^{(0)}$  возникают две системы угловых функций:  $Y_{mq}(\eta)$  и  $\Xi_{mq}(c, -a; \eta)$ . Соответствующие радиальные функции  $X_{mq}(\xi)$  и  $\Pi_{mq}(\xi) = \Pi_m(c, a, \lambda_{mq}^{(\eta)}(c, a); \xi)$  имеют одинаковый асимптотический вид при  $\xi \rightarrow \infty$  и отличаются лишь фазами

$$X_{mq}(\xi) \sim \frac{1}{c\xi} \sin\left(c\xi + \gamma \ln 2c\xi - \frac{\pi}{2}(q+m) + \Delta_{mq}\right), \quad (3.19)$$

$$\Pi_{mq}(\xi) \sim \frac{1}{c\xi} \sin\left(c\xi + \gamma \ln 2c\xi - \frac{\pi}{2}(q+m) + \Delta_{mq}^0\right), \quad (3.20)$$

где  $\gamma = a/(2c) = Z/k$ ,  $c = kd/2$ .

Амплитуда рассеяния на потенциале  $V$  представляется в виде суммы двух слагаемых

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = f_1^0(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + \frac{1}{ik} \sum_{m,q=0}^{\infty} (-)^q (2 - \delta_{0m}) \cos m(\varphi - \varphi_0) \left[ e^{2i\Delta_{mq}} Y_{mq}(-\eta_0) \times \right. \\ \left. \times Y_{mq}(\eta) - e^{2i\Delta_{mq}^0} \bar{\Xi}_{mq}(c, -a; -\eta_0) \bar{\Xi}_{mq}(c, -a; \eta) \right], \quad (3.21)$$

где  $f_1^0(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)$  — хорошо известная амплитуда рассеяния в кулоновском поле  $-Z/r$ ,

$$f_1^0(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = \frac{\gamma}{k} \frac{1}{1 - (\mathbf{n}, \mathbf{n}_0)} \times \\ \times \exp\left\{i \left[ -\gamma \ln \frac{1}{2} (1 - (\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + \frac{k}{2} (\mathbf{d}, \mathbf{n} - \mathbf{n}_0) + 2\delta_0) \right]\right\}, \quad (3.22)$$

$$\delta_0 = \arg \Gamma(1 - i\gamma).$$

Можно поместить заряд опорного кулоновского потенциала в правый полюс сферической системы координат ( $\eta = +1$ ). Тогда в формуле (3.21) для амплитуды достаточно поменять знаки аргументов кулоновских функций на противоположные и домножить кулоновскую амплитуду на фазовый множитель  $\exp\{-ik(\mathbf{d}, \mathbf{n} - \mathbf{n}_0)\}$ .

Если угловые функции  $Y_{mq}(\eta)$  совпадают с у.к.с.ф.  $\bar{\Xi}_{mq}(c, -a; \eta)$ , то разложение (3.21) становится вполне аналогичным по форме соответствующему разложению в центрально-симметричном случае.

При описании рассеяния на двух кулоновских центрах формула (3.21) упрощается. Угловые функции системы  $Z_1 e Z_2$  при положительных энергиях совпадают с угловыми функциями в сфероидальных координатах водородоподобной системы с зарядом  $Z_2 - Z_1$  (п. 6 § 3 гл. II). Вводя стандартное обозначение  $b = (Z_2 - Z_1)d$ , получаем для амплитуды рассеяния на двух кулоновских центрах

$$f(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) = f_1^0(\mathbf{n}, \mathbf{n}_0) + \frac{1}{ik} \sum_{m,q=0}^{\infty} (-1)^q (2 - \delta_{0m}) \times \\ \times \cos m(\varphi - \varphi_0) \left[ e^{2i\Delta_{mq}} \bar{\Xi}_{mq}(c, b; -\eta_0) \bar{\Xi}_{mq}(c, b; \eta) - \right. \\ \left. - e^{2i\Delta_{mq}^0} \bar{\Xi}_{mq}(c, -a; -\eta_0) \bar{\Xi}_{mq}(c, -a; \eta) \right]. \quad (3.23)$$

Разложения для амплитуды рассеяния, приведенные в данном параграфе, легко обобщаются на случай неаксиально-симметричных потенциалов, допускающих разделение переменных в сфероидальных системах координат (см. (2.10), (2.11) введения). Основная формула (3.10) остается справедливой, если под  $\mathcal{U}(\mathbf{n})$  подразумевать функции вида

$$\mathcal{U}(\mathbf{n}) = Y_{\mu q}(\eta) Z_{\mu}(\varphi). \quad (3.24)$$

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Задачу рассеяния в сфероидальной системе координат изучали Stier (1932), Fisk (1936), Nagahara (1953, 1954), Hara (1969), Shimizu (1963), Takayanagi (1967), Takayanagi, Itikawa (1968), Garrett (1971), Abramov, Komarov (1973), Li (1971, 1972, 1974) и др.

Изложение в данном параграфе следует работе Абрамова и Комарова (1975). Обычно ограничиваются задачами рассеяния, угловые функции в которых совпадают со сфероидальными. В этом случае при выводе фазового разложения для амплитуды рассеяния применяют разложения плоской волны по сфероидальным гармоникам § 7 гл. I. Shimizu (1963) предложил разложения амплитуды рассеяния на дипольном потенциале по сфероидальным функциям. Такая постановка представляется излишне усложненной, так как она требует, кроме нахождения угловых функций и фаз, обращения вспомогательной бесконечной матрицы.

## § 4. Применение решений задачи двух центров в задаче трех тел, взаимодействующих по закону Кулона

Решения задачи двух центров  $\Phi_j(\mathbf{r}; R)$ , построенные в § 3 гл. II, служат базисом, по которому разлагаются решения более сложных задач, например волновые функции задачи трех тел с кулоновским взаимодействием. В этом параграфе мы кратко поясним схему решения задач подобного типа.

Стационарное уравнение Шредингера для системы трех частиц с массами  $M_1, M_2, M_3$  и зарядами  $Z_1, Z_2, -1$  после отделения координат центра инерции системы имеет вид

$$\left( -\frac{1}{2M_0} \Delta_R + \frac{Z_1 Z_2}{R} - \frac{1}{2m} \Delta_r - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2} \right) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (4.1)$$

Уравнение (4.1) записано в одной из систем координат Якоби, для которой:

$$\frac{1}{M_0} = \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2}, \quad \frac{1}{m} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{M_1 + M_2}.$$

Здесь  $\mathbf{R}$  — вектор, соединяющий заряды  $Z_1$  и  $Z_2$ ,  $\mathbf{r}$  — вектор, проведенный из центра масс частиц  $M_1$  и  $M_2$  в точку нахождения частицы с массой  $M_3$ ,  $r_1$  и  $r_2$  — расстояния до частицы  $M_3$  от частиц  $M_1$  и  $M_2$  соответственно (рис. 40).

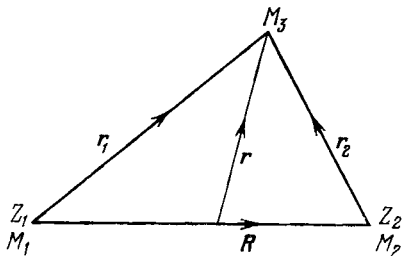


Рис. 40. Система координат и основные величины в задаче трех тел.

Из уравнения (4.1) находят либо энергию связанного состояния системы трех тел, либо матрицу, рассеивает процессы перераспределения частиц в системе трех тел при столкновениях.

Один из возможных методов решения задачи (4.1) состоит в следующем. Волновую функцию  $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  разложим по волновым функциям задачи двух центров

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \sum_j \Phi_j(\mathbf{r}; R) \psi_j(\mathbf{R}) + \sum_{q,m} \int dk \Phi_{mq}(\mathbf{r}; k, R) \psi_{mq}(\mathbf{R}) \quad (4.2)$$

(в дальнейшем интеграл по непрерывному спектру будем опускать).

Разложение (4.2) называют *адиабатическим представлением задачи трех тел*. Оно наиболее естественно при вычислении сечений рассеяния в столкновениях типа

$$(eZ_1) + Z_2 \begin{cases} (eZ_1)^* + Z_2, \\ Z_1 + (eZ_2), \end{cases} \quad (4.3)$$

в которых отсутствуют состояния трех несвязанных частиц. Особенно эффективно адиабатическое представление при малых энергиях столкновения и больших массах  $M_1$  и  $M_2$  ядер  $Z_1$  и  $Z_2$ .

В этом случае скорость электронного движения значительно больше скорости относительного движения ядер, и в нулевом приближении движение электрона с хорошей точностью можно рассматривать при неподвижных ядрах.

Движение ядер описывается при этом системой уравнений Шредингера с некоторыми эффективными потенциалами, создаваемыми усредненным движением электрона.

Подстановка разложения (4.2) в уравнение (4.1) и усреднение по координатам  $\mathbf{r}$  с учетом уравнения (3.1) гл. II приводит к бесконечной системе уравнений для функций  $\psi_j(\mathbf{R})$

$$\left[ -\frac{1}{2M} \Delta_{\mathbf{R}} + \frac{Z_1 Z_2}{R} + E_j(R) \right] \psi_j(\mathbf{R}) + \frac{1}{2M} \sum_{j'} [H_{jj'}(\mathbf{R}) + \nabla_{\mathbf{R}} Q_{jj'}(\mathbf{R}) + 2Q_{jj'}(\mathbf{R}) \nabla_{\mathbf{R}}] \psi_{j'}(\mathbf{R}) = E \psi_j(\mathbf{R}). \quad (4.4)$$

Здесь  $M = M_0/m$ ,  $E_j(R) = E_{Ntm}(R)$  — термы задачи двух центров,

$$\begin{aligned} Q_{jj'}(\mathbf{R}) &= \int d\mathbf{r} \Phi_j^*(\mathbf{r}; R) (-\nabla_{\mathbf{R}}) \Phi_{j'}(\mathbf{r}; R), \\ H_{jj'}(\mathbf{R}) &= \int d\mathbf{r} \nabla_{\mathbf{R}} \Phi_j^*(\mathbf{r}; R) \nabla_{\mathbf{R}} \Phi_{j'}(\mathbf{r}; R) \end{aligned} \quad (4.5)$$

— матричные элементы по волновым функциям задачи двух центров. Усредняя уравнения (4.4) по угловым переменным вектора  $\mathbf{R}$  перейдем к бесконечной системе

одномерных уравнений для радиальной части  $\chi(R)$  волновой функции  $\psi(R)$

$$\chi''_{\alpha}(R) + 2M[E - V_{\alpha}(R)]\chi_{\alpha}(R) = \sum_{\beta} V_{\alpha\beta}(R)\chi_{\beta}(R). \quad (4.6)$$

Здесь индексы  $\alpha$  и  $\beta$  означают набор  $j$  квантовых чисел электронного движения, а также набор квантовых чисел волновой функции, представляющей относительное движение ядер.

Оставляя в стороне довольно сложный вопрос постановки граничных условий для системы уравнений (4.6), наметим схему решения двух основных задач, упомянутых вначале.

Используя малость параметра  $1/(2M)$ , систему (4.6) можно решать, например, по теории возмущений. При отбрасывании недиагональных матричных элементов (что оправдано при  $M \gg 1$ ) система (4.6) распадается на независимые уравнения для функций  $\chi_{\alpha}(R)$ , которые представляют относительное движение ядер в эффективном потенциале

$$\begin{aligned} V_{\alpha}(R) &= E_j(R) + \frac{Z_1 Z_2}{R} + \frac{1}{2M} H_{jj}(R) + \frac{J(J+1)}{2MR^2} = \\ &= V_j(R) + \frac{J(J+1)}{2MR^2}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

где  $J$  — полный момент системы трех тел.

Такое приближение называется приближением Борна — Оппенгеймера. Оно нашло приложения при описании колебательного и вращательного спектров молекул. В приближении Борна — Оппенгеймера задача отыскания дискретного спектра системы трех тел сводится к решению одномерного уравнения Шредингера

$$\chi''_{j\nu}(R) + 2M \left[ E_{j\nu} - V_j(R) - \frac{J(J+1)}{2MR^2} \right] \chi_{j\nu}(R) = 0, \quad (4.8)$$

в котором состояния нумеруются шестью квантовыми числами: три от электронного движения  $j = (Nlm)$  и три от ядерного  $\nu = (vJm_j)$ , где  $m_j$  — проекция полного момента  $J$  на неподвижную ось  $z$ , а  $v$  — вибрационное квантовое число, равное числу нулей функции  $\chi_{j\nu}(R)$ .

Наиболее подробно изучена система  $\text{H}_2^+$  (молекулярный ион водорода), значение которого в теории молекул можно сравнить с ролью атома водорода при



расчетах атомных структур. В частности, знание свойств  $H_2^+$  необходимо при решении различных вопросов

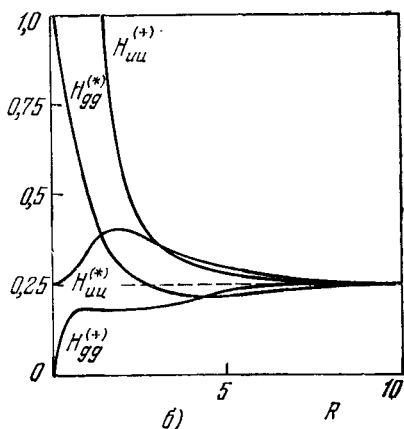
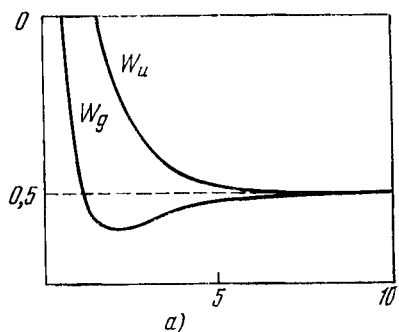


Рис. 41. Слагаемые эффективных потенциалов  $V_j(R)$  (4.7) для системы  $Z_1=Z_2=1$ . а) Полная энергия в состояниях  $1s\sigma(W_g)$  и  $2p\sigma(W_u)$ , б) диагональные матричные элементы

$$K_{ii}(R) = H_{ii}^{(+)} + \left( \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \right)^2 H_{ii}^*$$

определенные формулами (4.5).

астрофизики, физики плазмы, теории химической связи, в задачах атомной физики и т. д.

На рис. 41 изображены термы

$$W_j(R) = E_j(R) + \frac{Z_1 Z_2}{R}$$

и матричные элементы  $H_{jj}(R)$  системы  $\text{H}_2^+$  в электронных состояниях  $1s\sigma_g$ ,  $j=(100)$  и  $2p\sigma_u$ ,  $j=(210)$ . В потенциалах  $V_{100}(R) \equiv V_g(R)$  и  $V_{210}(R) \equiv V_u(R)$  при  $J=m_j=0$  существует 20 и 2 колебательных уровня соответственно. На рис. 42 и 43 представлены радиальные части волновых функций  $\chi_{j\nu}(R)$  колебательного движения ядер, соответствующие колебательным состояниям  $\nu=19$  для

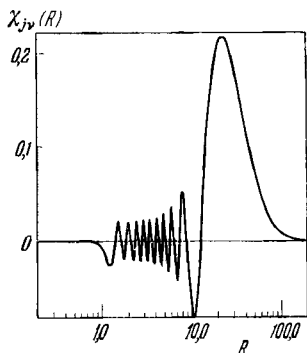


Рис. 42. Радиальная волновая функция  $\chi_{j\nu}(R)$  относительного движения ядер системы  $\text{H}_2^+$  в колебательном состоянии  $\nu=19$ ,  $\nu=(1900)$ ,  $j=(100)$ .

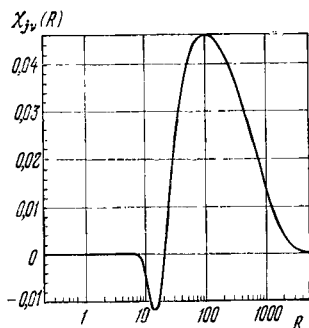
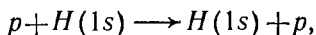


Рис. 43. Радиальная волновая функция  $\chi_{j\nu}(R)$  относительного движения ядер системы  $\text{H}_2^+$  в состоянии  $\nu=(200)$ ,  $j=(210)$ .

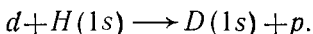
потенциала  $V_g(R)$  (Wind, 1965b, Beckel и др., 1970) и  $\nu=2$  для потенциала  $V_u(R)$ . Это состояние соответствует неглубокому минимуму потенциала  $V_u(R)$ , расположенному при  $R \approx 12,55$  (Peek, 1969). Аналогичные расчеты проведены для потенциалов  $V^j(R)$ , соответствующих электронным состояниям  $2p\pi_u$  (Beckel и др., 1973) и  $3d\sigma_g$  (Shafi, Beckel, 1973).

В задачах рассеяния, когда изучается переход системы трех тел из одного электронного состояния в другое, например возбуждение атома при столкновении с ядром, необходимо учитывать недиагональные матричные элементы  $Q_{jj'}(R)$  и  $H_{jj'}(R)$ . Такое расширение метода Борна — Оппенгеймера получило название метода возмущенных стационарных состояний (метод ВСС, или PSS — perturbed stationary states). Этим методом удается решить довольно обширный класс задач атомной и мезоатомной физики, среди которых упомянем лишь некоторые.

В атомной физике к числу таких задач относятся симметричная перезарядка протонов на атомах водорода в основном состоянии при малых энергиях столкновения ( $\epsilon \leq 5 \text{ эВ}$ )



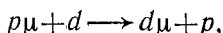
и перезарядка атомов водорода на дейтонах



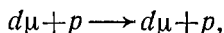
Квантовомеханический расчет этих реакций имеет большое методическое значение, поскольку это одна из немногих задач квантовой механики с реальным потенциалом, допускающая корректную постановку и достаточно точное решение.

В последнее время адиабатическое представление в задаче трех тел нашло применение в мезоатомной физике. Благодаря малой величине мезоатомов почти все мезоатомные процессы протекают внутри атомных оболочек и не осложняются влиянием электронов, как это имеет место в атомных столкновениях. Развитый метод с успехом был применен для расчета энергий связи мезомолекул, а также сечений мезоатомных процессов в смеси изотопов водорода. В частности, были рассчитаны такие реакции, как:

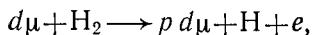
реакция перезарядки



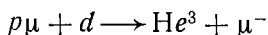
упругое рассеяние



образование мезомолекул



катализ ядерных реакций при столкновении мезоатомов



и т. д.

## БИБЛИОГРАФИЧЕСКИЕ УКАЗАНИЯ

Адиабатическое представление в квантовомеханической задаче трех тел предложили впервые Вогп, Oppenheimer (1927). Его изложения можно найти в монографиях Кронига (1935), Борна и Хуан Куна (1954). Метод ВСС подробно обсуждался в работе Bates и др. (1953) и затем развивался в работах Thorson (1969), Hunter и др.

(1966, 1967), Pack, Hirschfelder (1970a, b), Smith (1968), Матвеевко и Пономарева (1972).

Уравнения метода ВСС, последовательно учитывающие кориолисово взаимодействие электронного и ядерного движений при произвольных массах частиц, получены в работах Halpern (1969) Виноцкого и Пономарева (1974).

Матричный элемент  $H_{gg}(R)$  в уравнениях (4.4) впервые вычислил Johnson (1941) и затем, более аккуратно, Dalgarno, McCarroll (1956). Наиболее полные вычисления матричных элементов  $H_{jj}(R)$  и  $Q_{jj}(R)$  содержатся в работах Laurenzi, Fitts (1965), Hunter и др. (1966), Patterson, Becker (1967), Пономарева и Пузыниной (1967, 1976).

Обзор приложений метода ВСС в атомной физике содержится в монографиях Мотта и Месси (1969) и Никитина (1971, 1973). Детальное обсуждение процессов мезоатомной физики и подробную библиографию по этим вопросам можно найти в обзорах Зельдовича и Герштейна (1960) и Gerstein, Ponomarev (1975).

## ЛИТЕРАТУРА

Абрамов А. А., Ульянова В. И. (1961), О решении уравнений для определения уровней энергии ионизированной молекулы водорода, ЖВМ и МФ 1, 2, 351—354.

Абрамов А. А., Ульянова В. И. (1970), О вычислении уровней энергии системы: два ядра — один электрон, Теоретическая и экспериментальная химия 6, 3, 384—386.

Абрамов Д. И., Комаров И. В. (1972), Слабосвязанные состояния заряженной частицы в поле конечного диполя, ТМФ 13, 2, 209—221.

Абрамов Д. И., Комаров И. В. (1975), Метод фаз для рассеяния потенциалами, допускающими разделение переменных в сферических координатах, ТМФ 22, 2, 253—259.

Аллилуев С. П., Матвеевко А. В. (1966), Группа симметрии молекулярного иона водорода (системы с разделяющимися переменными), ЖЭТФ 51, 6, 1873—1879.

Де Альфаро В., Редже Т. (1966), Потенциальное рассеяние, «Мир», М.

Бабич В. М., Булдырев В. С. (1972), Асимптотические методы в задачах дифракции коротких волн, «Наука», М.

Бабич В. М., Григорьева Н. С. (1973), Равномерные асимптотические разложения функции, связанные со сжатым сфероидом, Записки научных семинаров ЛОМИ 34, «Наука», Л., 6—22.

Бабич В. М., Григорьева Н. С. (1974), Дифракция коротких волн на сжатом сфероиде, Записки научных семинаров ЛОМИ 42, «Наука», Л., 12—58.

Базь А. И., Зельдович Я. Б., Переломов Л. М. (1971), Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике, «Наука», М.

Бейтмен Г., Эрдейи А. (1967), Высшие трансцендентные функции, тт. 1—3, «Наука», М.

Белкина М. Г. (1957а), Асимптотические представления сферических функций с азимутальным индексом  $m=1$ , ДАН СССР 114, 6, 1185—1188.

Белкина М. Г. (1957б), Дифракция электромагнитных волн на диске, в сб. «Дифракция электромагнитных волн на некоторых телах вращения», «Сов. радио», М., 148—174.

Белкина М. Г. (1957в), Характеристики излучения вытянутого эллипсоида вращения, в сб. «Дифракция электромагнитных волн на некоторых телах вращения», «Сов. радио», М., 126—147.

Бете Г. (1935), Квантовая механика простейших систем, ОНТИ, М. — Л.

Борисов М. С., Ветчинкин С. И. (1971), Пороговая фотоионизация  $H_2^+$  в модели объединенного атома, Оптика и спектроскопия, 30, 409—412.

Борн М., Вольф Э. (1973), Основы оптики, «Наука», М.

Борн М., Хуан Кунь (1954), Динамическая теория кристаллических решеток, ИЛ, М.

Вайнштейн Л. А. (1957), Электромагнитные волны, «Сов. радио», М.

Вайнштейн Л. А. (1965а), Лучевые потоки в трехосном эллипсоиде, в сб. «Электроника больших мощностей», «Наука», М., 93—105.

Вайнштейн Л. А. (1965б), Дифракция в открытых резонаторах с софокусными зеркалами, I, II, сб. «Электроника больших мощностей», № 4, «Наука», М., 106—129, 130—147.

Вайнштейн Л. А. (1966), Открытые резонаторы и открытые волноводы, «Сов. радио», М.

Вицицкий С. И., Пономарев Л. И. (1974), Кориолисово взаимодействие в адиабатическом представлении задачи трех тел, ЯФ 20, 3, 576—588.

Гаптвахер Ф. Р. (1967), Теория матриц, «Наука», М.

Герштейн С. С., Кривченков В. Д. (1961), Термы электрона в поле двух неодинаковых кулоновских центров, ЖЭТФ 40, 5, 1491—1502.

Герштейн С. С., Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. (1965), Квазиклассическое приближение в задаче двух центров, ЖЭТФ 48, 3, 632—643.

Градштейн И. С., Рыжик И. М. (1971), Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, «Наука», М.

Дамбург Р. Я., Проппин Р. Х. (1968), Об асимптотическом разложении электронных термов молекулярного иона водорода, Изв. АН Латв. ССР, сер. физич. и техн., вып. 1, 50—59.

Дамбург Р. Я., Проппин Р. Х. (1971), Об асимптотическом разложении термов задачи с двумя кулоновскими центрами, Изв. АН Латв. ССР, сер. физ. и техн., вып. 1, 19—23.

Демков Ю. Н. (1968), Элементарные решения квантовой задачи о движении частицы в поле двух кулоновских центров, Письма ЖЭТФ 7, 3, 101—104.

Демков Ю. Н., Комаров И. В. (1965), Матрица плотности системы невзаимодействующих фермионов, Вестник ЛГУ, сер. физич., вып. 10, 18—28.

Демков Ю. Н., Рудаков В. С. (1970), Метод парциальных волн для несферического рассеивателя, ЖЭТФ 59, 6, 2035—2047.

Дупленков Д. А., Коваленко А. Н. (1965), Связанные кольцевые щелевые антенны, расположенные на вытянутом сферонде, ЖЭТФ 35, 8, 1428—1437.

Ерашевская С. П., Иванов Е. А., Пальцев А. А., Соколова Н. Д. (1973), Таблицы сфероидальных волновых функций и их первых производных I, «Наука и техника», Минск.

Зельдович Я. Б., Герштейн С. С. (1960), Ядерные реакции в холодном водороде, I, Мезонный катализ, УФН 71, 4, 581—630.

Иванов Е. А. (1964), Задача о поле магнитного диполя, расположенного соосно двум дискам, Изв. вузов, Радиофизика 7, 6, 1133—1149.

Иванов Е. А. (1965), Дифракция электромагнитных волн, излучаемых электрическим диполем на двух дисках с общей осью вращения, Диф. уравнения 1, 4, 529—534.

Иванов Е. А. (1967а), Рассеяние наклонно падающей плоской электромагнитной волны на двух соосных круговых дисках, Диф. уравнения 3, 7, 1180—1194.

Иванов Е. А. (1967б), Поле горизонтального магнитного диполя в присутствии сфероида, Диф. уравнения 3, 9, 1543—1551.

Иванов Е. А. (1968), Дифракция электромагнитных волн на двух телах, «Наука и техника», Минск.

Кармазина Л. Н. (1959), Об асимптотике волновых сфероидальных функций в сб. «Вычислит. математика» 5, М., 72—78.

Каценеленбаум Б. З. (1964), Квазиоптика миллиметровых волн, УФН 83, 1, 81—105.

Клещев А. А., Шейба Л. С. (1970), Рассеяние звуковой волны идеальными вытянутыми сфероидами, Акуст. ж. 16, 2, 264—268.

Комаров И. В. (1975), Задача двух кулоновских центров в квантовой механике, в сб. «Вопросы теории столкновений», Изд-во ЛГУ, Л., 24—48.

Комаров И. В., Славянов С. Ю. (1967), Волновые функции и электрошные термы молекулярного иона  $H_2^+$  при больших межъядерных расстояниях, ЖЭТФ 52, 5, 1368—1377.

Комаров И. В., Славянов С. Ю. (1969), Движение заряженной частицы в поле двух удаленных кулоновских центров с различными зарядами, Вестник ЛГУ 16, 30—38.

Космодамнанская Н. С., Лось В. Ф. (1969), Открытые резонаторы, образованные конфокальными зеркалами с переменным коэффициентом отражения и обобщенные гиперсфероидальные функции, в сб. «Антенны» 5, «Связь», М., 121—139.

Кривчепков В. Д., Либберман М. А. (1968), Квантовые числа задачи двух центров. Изв. вузов, Физика 8, 23—27.

Кройг Р. (1935), Полосатые спектры и строение молекул, ОНТИ, Харьков—Киев.

Кузнецов Н. В. (1970), О собственных функциях одного интегрального уравнения, Научные записки семинаров ЛОМИ 17, «Наука», Л., 66—150.

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. (1974), Квантовая механика, «Наука», М.

Лебедев Н. Н. (1963), Специальные функции и их приложения, ГИФМЛ, М. — Л.

Лось В. Ф. (1969), Некоторые асимптотические разложения обобщенных гиперсфероидальных функций, Вопросы радиоэлектроники, сер. общетехн., вып. 10, 57—75.

Макаров Г. И., Терещенко Е. Д. (1972), Распространение радиоволн в трехслойной среде со сфероидальными границами раздела, в сб. «Проблемы дифракции и распространения волн», вып. XI, Изд-во ЛГУ, Л., 77—94.

Мандельштам Л. И. (1948), О применении интегральных уравнений к теории оптического изображения, Полное собрание трудов, т. I, Изд-во АН СССР, М., 229—241.

Марков Г. Т., Дупленков Д. А., Осипович Н. Ф. (1965), Излучение вытянутой сфероидальной антенны, Изв. вузов, Радиофизика 8, 1, 142—152.

Матвеевко А. В. (1973), Осцилляции в полном сечении реакции перезарядки  $d+H(1s) \rightarrow D(1s)+p$ , ЖЭТФ 65, 6, 2168—2173.

Матвеевко А. В., Пономарев Л. И. (1969), Медленные столкновения в системе трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, II, Симметричная перезарядка, ЖЭТФ 57, 6, 2084—2094.

Матвеевко А. В., Пономарев Л. И. (1972), Медленные столкновения в системе трех тел, взаимодействующих по закону Кулона, I, Формулировка метода, ТМФ 12, 1, 64—77.

Матвеевко А. В., Пономарев Л. И. (1975), Осцилляции орбитирования в полном сечении перезарядки  $p+H(1s) \rightarrow H(1s)+p$ , ЖЭТФ 68, 3, 920—930.

Минкович Б. Н., Яковлев В. П. (1969), Теория синтеза антенны, «Сов. радио», М.

Морс Ф. М., Фешбах Г. (1958), Методы теоретической физики, ИЛ, М.

Мотт Н. Ф., Месси Г. С. (1969), Теория атомных столкновений, «Мир», М.

Никитин Е. Е. (1971), Теория элементарных атомно-молекулярных реакций, ч. I, Методы, Изд-во НГУ, Новосибирск.

Никитин Е. Е. (1973), Теория элементарных атомно-молекулярных реакций, ч. II, Процессы, Изд-во НГУ, Новосибирск.

Овчинников А. А., Суханов А. Д. (1964), К вопросу о волновых функциях и электронных терминах молекулярного иона водорода, ДАН СССР 157, 5, 1092—1095.

Пономарев Л. И. (1965), Применение метода ВКБ при асимптотическом решении уравнений, ДАН СССР 162, 5, 1023—1026.

Пономарев Л. И. (1967а), Лекции по квазиклассике, Препринт ИТФ-67-73, Киев.

Пономарев Л. И. (1967б), Об асимптотическом представлении сферидальных функций, ЖВМ и МФ 7, 1, 196—198.

Пономарев Л. И. (1968), Конфигурационное взаимодействие термов в системе  $Z_1$  и  $Z_2$ , ЖЭТФ 55, 5, 1836—1844.

Пономарев Л. И., Пузынина И. В., Пузынина Т. П. (1973), Вычисление уровней энергии мезомолекул водорода с учетом адиабатических поправок на движение ядер, ЖЭТФ 65, 1, 28—34.

Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. (1967а), Задача двух центров в квантовой механике, ЖЭТФ 52, 5, 1273—1282.

Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. (1967б), Задача двух центров квантовой механики, III, Таблицы термов, Препринт ОИЯИ Р4-3175, Дубна.

Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. (1967в), Задача двух центров квантовой механики, IV, Матричные элементы, Препринт ОИЯИ Р4-3405, Дубна.

Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. (1968), Задача двух центров квантовой механики, II, Математическая часть, ЖВМ и МФ 8, 6, 1256—1268.

Пономарев Л. И., Пузынина Т. П. (1970), Задача двух центров квантовой механики, V, Алгоритм, Препринт ОИЯИ Р4-5040, Дубна.

Пономарев Л. И., Сомов Л. Н. (1975), Задача двух центров квантовой механики, VI, Непрерывный спектр, Препринт ОИЯИ Р4-8742, Дубна.



- Размахнин М. К., Яковлев В. П. (1971) (Перевод на научная обработка), *Функции с двойной ортогональностью в радиоэлектронике и оптике*, «Сов. радио», М.
- Славянов С. Ю. (1967), Асимптотические представления для вытянутых сфероидальных функций, *ЖВМ и МФ* 7, 5, 1001—1010.
- Славянов С. Ю. (1969), Асимптотика сингулярных задач Штурма — Лиувилля по большому параметру в случае близких точек перехода, *Диф. уравнения* 5, 2, 313—325.
- Славянов С. Ю. (1974), Высокочастотные колебания типа прыгающего мячика в сплюснутом эллипсоиде вращения, *Записки научных семинаров ЛОМИ* 42, «Наука», Л., 239—243.
- Слэтер Дж. (1965), *Электронная структура молекул*, «Мир», М.
- Смирнов Б. М. (1964), Резонансная перезарядка при медленных столкновениях, *ЖЭТФ* 46, 3, 1017—1024.
- Смирнов Б. М. (1973), Асимптотические методы в теории атомных столкновений, Атомиздат, М.
- Смирнов В. И. (1974), *Курс высшей математики*, т. 3, часть 2, «Наука», М.
- Стретт М. Д. О. (1935), *Функции Ляме, Матье и родственные им в физике и технике*, ОНТИ, Харьков — Киев.
- Фламмер К. (1962), *Таблицы волновых сфероидальных функций*, ВЦ АН СССР, М.
- Фок В. А. (1935), Атом водорода и неевклидова геометрия, *Изв. АН СССР, сер. физич.* 2, 169—176.
- Фрёман Н., Фрёман П.-У. (1967), ВКБ-приближение, «Мир», М.
- Хединг Дж. (1965), *Введение в метод фазовых интегралов (метод ВКБ)*, «Мир», М.
- Хованский А. Н. (1961), *Цепные дроби*, в СМБ, *Математический анализ*, ГИФМЛ, М.
- Хургин Я. И., Яковлев В. П. (1971), *Физитные функции в физике и технике*, «Наука», М.
- Эрдейи А. (1962), *Асимптотические разложения*, Физматгиз, М.
- Abraham M. (1898), Die elektrischen Schwingungen im einen stabförmigen Leiter, behandelt nach der Maxwell'schen Theorie, *Ann. Phys.* 66, 435—472.
- Abraham M. (1899), Über einige Differentialgleichungen bei Schwingungsproblemen auftretende, *Math. Ann.* 52, 81—112.
- Abramov D. L., Komarov I. V. (1973), The peculiarities in the scattering of a charged particle by the field of a finite dipole, in «Electronic and atomic collisions», *Abstracts of papers, VIII ICPEAC Beograd* 1, 376—377.
- Abramowitz M. A. (1949), Asymptotic expansions of spheroidal wave functions, *J. Math. and Phys.* 28, 3, 195—199.
- Abramowitz M. A., Stegun I. A. (1964), *Handbook of mathematical functions*, Nat. Bur. Stand. Washington D. C., 751—771.
- Andrejewski W. (1953), Die Beugung elektromagnetischer Wellen an der leitenden Kreisscheibe und an der kreisförmigen Öffnung im leitenden ebenen Schirm, *Z. angew. Phys.* 5, 178—186.
- Arscott F. M. (1964), *Periodic differential equations*, Pergamon Press, Oxford — Edinburgh — New York — Paris — Frankfurt.

Arthures A. M. (1966), On continued fraction occurring in the theory of one-electron diatomic molecules, *J. Chem. Phys.* **45**, 2703—2704.

Aubert M., Bessis N., Bessis G. (1974a), Prolate-spheroidal orbitals for homonuclear and heteronuclear diatomic molecules, I. Basic procedure, *Phys. Rev.* **A10**, 1, 51—60.

Aubert M., Bessis N., Bessis G. (1974b), Prolate-spheroidal orbitals for homonuclear and heteronuclear diatomic molecules, II. Shielding effects for the two-electron problem. *Phys. Rev.* **A10**, 1, 61—70.

Awatani J. (1952), On the acoustic radiation pressure on a circular disc, *Mem. Inst. Sci. Industr. Res. Osaka Univ.* **9**, 24—36.

Baber W. G., Hassé H. R. (1935), The two centre problem in wave mechanics. *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **31**, 564—581.

Bailey P. B. (1965), On the perturbation treatment of the one-electron diatomic molecular ion, *Proc. Phys. Soc. London*, **85**, 1127—1131.

Barnes W. C. (1966), Object restoration in a diffraction-limited imaging system, *J. Opt. Soc. Am.* **56**, 575—578.

Bates D. R. (1951), The oscillator strengths of  $H_2^+$ ,  $1s\sigma - 2p\sigma$ , *J. Chem. Phys.* **19**, 9, 1122—1124.

Bates D. R., Carson T. R. (1956), Exact wave functions of  $HeH^{2+}$ , *Proc. Roy. Soc. London* **A234**, 207—217.

Bates D. R., Darling R. T. S., Have S. C., Stewart A. L. (1953), Properties of the hydrogen molecular ion, III. Oscillator strengths of the  $1s\sigma_g - 2p\pi_u$ ,  $2p\sigma_u - 3d\pi_g$  and  $2p\pi_u - 3d\pi_g$  transitions, *Proc. Phys. Soc. London* **A66**, 1113—1123.

Bates D. S., Darling R. T. S., Have S. C., Stewart A. L. (1954), Properties of the hydrogen molecular ion, IV. Oscillator strengths of the transitions connecting the lowest even and lowest odd  $\sigma$ -states with higher  $\sigma$ -states, *Proc. Phys. Soc. London* **A67**, 533—539.

Bates D. R., Ledsham K., Stewart A. L. (1953), Wave functions of the hydrogen molecular ion, *Phil. Trans. Roy. Soc. London* **A246**, 215—240.

Bates D. R., Massey H. S., Stewart A. L. (1953), Inelastic collisions between atoms, I. General theoretical considerations, *Proc. Roy. Soc. London* **A216**, 437—458.

Bates D. R., Öpik U., Poots G. (1953), Properties of the hydrogen molecular ion, II. Photo-ionization from the  $1s\sigma_g$ ,  $2s\sigma_g$  and  $3s\sigma_g$  states, *Proc. Phys. Soc.* **A66**, 1113—1123.

Bates D. R., Reid R. H. G. (1968), Electronic eigenenergies of the hydrogen molecular ion, in «Advances in Atomic and Molec. Phys.», v. IV, Ed. D. R. Bates, and I. Esterman, Academic Press, New York and London, 13—35.

Beckel C. L., Hansen III, B. D., Peek J. M. (1970), Theoretical study of  $H_2^+$  ground electronic state spectroscopic properties, *J. Chem. Phys.* **53**, 10, 3681—3690.

Beckel C. L., Shafi M., Peek J. M. (1973), Theoretical study of  $H_2^+$  spectroscopic properties, II. The  $3d\sigma$  electronic state, *J. Chem. Phys.* **59**, 10, 5288—5293.

Berry M. V., Mount K. E. (1972), Semiclassical approximations in wave mechanics, *Rep. Progr. Phys.* **35**, 315—397.

Bingel W. A. (1957), Eine neue Methode zur Berechnung der Elektronenterme von Molekulan, Z. Naturforsch. 12a, 59—70.

Bingel W. A. (1959), United atom treatment of the behaviour of potential energy curves of diatomic molecules for small R, J. Chem. Phys. 30, 5, 1250—1253.

Bingel W. A. (1961), Potentialkurven zweiatomiger und potentielle Energieflächen vieratomiger Molekule für kleine Kernabstände, Z. Naturforsch 16a, 668—675.

Bingel W. A. (1963), Comment on the use of united-atom expansion, J. Chem. Phys. 38, 1, 274—275.

Blanch G. (1964), Numerical evaluation of continued fractions, SIAM Rev. 6, 383—421.

Born M., Oppenheimer R. (1927), Zur Quantentheorie der Molekulan Ann. der Phys. 84, 457—484.

Bouwkamp C. J. (1947), On spheroidal wave functions of order zero, J. Math. Phys. 26, 79—92.

Bouwkamp C. J. (1950a), On the freely vibrating circular disk and the diffraction by circular disks and apertures, Physica 16, 1—16.

Bouwkamp C. J. (1950b), On the diffraction of electromagnetic waves by small circular discs and holes, Philips. Res. Rep. 5, 401—422.

Bouwkamp C. J. (1950c), On the characteristic values of spheroidal wave functions, Philips. Res. Reps 5, 87—90.

Bouwkamp C. J. (1959), On the theory of spheroidal wave functions of order zero, Proc. Koninkl. Ned. Akad. Wett. Amsterdam, 53, 931—944.

Bowman J. J., Senior T. B. A., Uslenghi P. L. E. (1969), Electromagnetic and acoustic scattering by simple shapes, North—Holland Publishing Company—Amsterdam.

Boyd G. D., Gordon J. P. (1961), Confocal multimode resonator for millimeter through optical wave length masers, Bell. Syst. Techn. J. 40, 489—508.

Brown H. A. (1969), Effect of truncation on image enhancement by prolate spheroidal functions, J. Opt. Soc. Am. 59, 2, 228—229.

Buck G. J. (1972), Radar mapping. Prolate spheroidal wave functions versus truncated inverse Fourier transform, Trans. IEEE, AP-20, 188—193.

Buck G. J., Gustinčič J. J. (1967), Resolution limitations of a finite aperture, IEEE Trans. AP-15, 376—381.

Buckingham R. A. (1961), Exactly soluble bound state problems, in D. R. Bates (ed.) «Quantum theory» 1, New York, London, Academic Press.

Van Buren A. L., Baier R. V., Hanish S., King B. J. (1972), Calculation of spheroidal wave functions, J. Acoust. Soc. Amer. 51, 1, part II, 414—416.

Burrau O. (1927), Berechnung des Energiwertes des Wasserstoff molekulan-Ions ( $H_2^+$ ) in Normalzustand, Kgl. Danske Videnskab: Selskab. Math.-fis. Medd. 7, 14, 1—18.

Byers-Brown W., Power J. D. (1970), Perturbation theory of short-range atomic interactions, Proc. Roy. Soc. London, A317, 545—574.

Byers-Brown W., Roberts R. E. (1967), On the critical binding of an electron by an electric dipole, J. Chem. Phys. 46, 5, 2006—2007.

- Byers-Brown W., Steiner E. (1966), On the electronic energy of a one-electron diatomic molecule near the united atom. *J. Chem. Phys.* **44**, 10, 3934—3940.
- Byrd P. F., Friedman M. D. (1954), *Handbook of elliptic integrals for engineers and physicists*, Berlin—Göttingen—Heidelberg.
- Carson T. R., Dalgarno A. (1955), Approximate molecular orbitals III: the  $2s\sigma_g$  and  $3d\sigma_g$  states of  $H_2^+$ , *Proc. Phys. Soc. London*, **A68**, 569—576.
- Chako N. (1957), On integral relations involving products of spheroidal functions, *J. Math. and Phys.* **36**, 62—73.
- Chakravarty S. K. (1939), Quantization under two centres of force, I. The hydrogen molecular ion, *Phil. Mag.* **28**, 423—434.
- Chang Shih-Yung (1973), Van Vleck perturbation treatment of short-range atomic interaction in  $H_2^+$  and  $HeH^{++}$ , *J. Chem. Phys.* **59**, 4, 1790—1795.
- Chao C. Y. (1929). The problem of the ionized hydrogen molecule, *Proc. Nat. Acad. Amer. Sci.* **15**, 558—565.
- Cherry T. M. (1950), Uniform asymptotics formulae for functions with transition points, *Trans. Amer. Math. Soc.* **68**, 224—257.
- Chu L. J., Stratton J. A. (1941a), Elliptic and spheroidal wave functions, *J. Math. Phys.* **20**, 259—309.
- Chu L. J., Stratton J. A. (1941b), Steady-state solutions of electromagnetic field problems, III. Forced oscillations of a prolate spheroid, *J. Appl. Phys.* **12**, 241—248.
- Cloizeaux J., Meth M. L. (1972), Some asymptotic expressions for prolate spheroidal functions and for the eigenvalues of differential and integral equations of which they are solutions, *J. Math. Phys.* **13**, 11, 1745—1754.
- Cohen M., Coulson C. A. (1961), Single-centre expansions for the hydrogen molecular ion, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **57**, 96—103.
- Cohen S., Judd D. L., Riddell R. J. (1960), Mu-meson molecules, I. Three-body problem, *Phys. Rev.* **119**, 386—397, II. Molecular-ion formation and nuclear catalysis, *Phys. Rev.* **119**, 397—411.
- Coulson C. A. (1941), The Van der Waals force between a proton and a hydrogen atom, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh* **A61**, 20—25.
- Coulson C. A., Duncanson W. (1938), Comparison of wave-functions for  $HeH^{++}$  and  $HeH^+$ , *Proc. Roy. London* **A165**, 90—115.
- Coulson C. A., Gilliam C. M. (1946—1948), The Van der Waals force between a proton and a hydrogen atom, II. Excited states, *Proc. Roy. Soc. Edinburgh* **62A**, 3, 360—368.
- Coulson C. A., Joseph A. (1967a), Spheroidal wave functions for the hydrogen atom, *Proc. Phys. Soc., London* **90**, 4, 887—893.
- Coulson C. A., Joseph A. (1967b), Constant of the motion for the two-centre Kepler problem, *Int. J. Quant. Chem.* **1**, 337—347.
- Coulson C. A., Robinson P. D. (1958), Wave functions for the hydrogen atom in spheroidal coordinates I. The derivation and properties of the functions, *Proc. Phys. Soc. London* **71**, 5, 815—827.
- Coulson C. A., Walmsley M. (1967), The minimum dipole moment required to bind an electron to a finite dipole. *Proc. Phys. Soc. London* **91**, 31—32.
- Crawford O. H. (1967), Bound states of a charged particle in a dipole field, *Proc. Phys. Soc. London* **91**, 279—284.

- Dalgarno A., Lewis J. T. (1955), The exact calculation of long-range forces between atoms by perturbation theory, Proc. Roy. Soc. London **A233**, 70—74.
- Dalgarno A., Lewis J. T. (1956), The representation of long range forces by series expansions, I. The divergence of the series, II. The complete perturbation calculation of long range forces, Proc. Phys. Soc. London **A69**, 57—64.
- Dalgarno A., Lynn N. (1956), Resonance forces at large separations, Proc. Phys. Soc. London **A69**, 821—829.
- Dalgarno A., Lynn N. (1957), An exact calculation of second order long range forces, Proc. Phys. Soc. London **A70**, 223—225.
- Dalgarno A., Lynn N., Williams, E. J. A. (1956), The oscillator strengths of the  $1s\sigma - 2s\sigma$ ,  $1s\sigma - 3d\sigma$  and  $3s\sigma - 3d\sigma$  transitions of  $\text{HeH}^{2+}$ , Proc. Phys. Soc. London **A69**, 610—614.
- Dalgarno A., McCarroll R. (1956), Adiabatic coupling between electronic and nuclear motion in molecules, Proc. Roy. Soc. London **A237**, 383—394.
- Dalgarno A., McCarroll R. (1957a), Adiabatic coupling between nuclear and electronic motion in molecules, II. Proc. Roy. Soc. London **A239**, 413—419.
- Dalgarno A., McCarroll R. (1957b), Properties of Hydrogen molecular ion, VII. Proc. Phys. Soc. **70**, 7, 501—506.
- Dalgarno A., Stewart A. L. (1956), A perturbation calculation of properties of the  $1s\sigma$  and  $2p\sigma$  states of  $\text{HeH}^{2+}$ , Proc. Roy. Soc. London **A238**, 276—285.
- Damburg R. J., Propin R. Kh. (1968a), Über asymptotische Entwicklungen oblater Sphäroidfunktionen und ihren Eigenwerte, J. reine angew. Math. **283**, 28—36.
- Damburg R. J., Propin R. Kh. (1968b), On asymptotic expansions of electronic terms of the molecular ion  $\text{H}_2^+$ , J. Phys. **B1**, ser. 2, 681—691.
- Davis P. (1952), An application of doubly orthogonal functions to a problem of approximation in two regions, Trans. Amer. Math. Soc. **72**, 104—137.
- Dingle R. B., Müller H. J. W. (1964), The form of the coefficients of the late terms in asymptotic expansions of the characteristic numbers of Mathieu and spheroidal wave functions, J. reine angew. Math. **216**, 123—133.
- Diskinson B. N. (1933), The normal state of the hydrogen molecule-ion, J. Chem. Phys. **1**, 5, 317—318.
- Eberlein W. F. (1948), Characteristic values of spheroidal wave functions, Phys. Rev. **74**, 2, 190—191.
- Einspruch N., Barlow C. (1961), The scattering of a compressional wave by a prolate spheroid, Quart. Appl. Math. **19**, 3, 253—258.
- Van Engers E. M., Kramers H. A. (1933), Zur Anwendung der Methode der Phasenintegrale auf das Wasserstoffmolekülion, Z. Phys. **82**, 328—336.
- Englefield M. L. (1972), Group Theory and the Coulomb Problem, Wiley—Interscience, New York, London, Sydney, Toronto.
- Erikson H. A., Hill E. L. (1949), A note on the one-electron states of diatomic molecules, Phys. Rev. **75**, 29—31.
- Fermi E., Teller E. (1947), The capture of negative mesotrons in matter, Phys. Rev. **72**, 399—410.

Finkelstein B. N., Horowitz G. E. (1928), Über die Energie des He-atoms und des positiven  $H_2^+$ -Ions im Normalzustande, *Z. Phys.* **48**, 118—122.

Fischer E. (1937), Some differential equations involving three — term recursion formulas, *Phil. Mag.* **24**, 245—256.

Fisk J. B. (1936), Theory of scattering of slow electrons by diatomic molecules, *Phys. Rev.* **49**, 167—173.

Flammer C. (1953), The vector wave function solution of the diffraction of electromagnetic waves by circular disks and apertures, I. Oblate spheroidal wave functions, *J. Appl. Phys.* **24**, 1218—1223, II. The diffraction problems, *J. Appl. Phys.* **24**, 1224—1231.

Flannery M. R., Opik U. (1965), The photoionization of the hydrogen molecule from the ground electronic and vibrational state, *Proc. Phys. Soc.* **86**, 491—500.

Fox K., Turner J. E. (1966), WKB treatment of bound states in an electric-dipole potential, *Am. J. Phys.* **34**, 606—610.

Frieden B. R. (1971), Evaluation, design and extrapolation method for optical signals, based on use of the prolate functions, in «Progress in Optics», North Publishing Company; Amsterdam — London, v. IX, 311—407.

Fuchs W. H. J. (1964), On the eigenvalues of an integral equation arising in the theory of band-limited signals, *J. Math. Analysis and Appl.* **9**, 317—330.

Garrett W. R. (1971), Reexamination of scattering by a pair of fixed dipolar charges, *Phys. Rev.* **4A**, 2229—2235.

Gautschi W. (1967), Computational aspects of three-term recurrence relations, *SIAM Rev.* **9**, 24—82.

Gerstein S. S., Ponomarev L. I. (1975), Mesomolecular processes induced by  $\mu^-$  mesons, in «Muon Physics», Ed. C. S. Wu, V. Hughes, Academic Press, New York.

Glaser F. M., Lassetre E. N. (1966), Momentum eigenfunction for the ground state of  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **44**, 3787—3792.

Goodrich R. F., Kazarinoff N. D. (1963), Scalar diffraction by prolate spheroids whose eccentricities are almost one, *Proc. Cambridge, Phil. Soc.* **59**, 167—183.

Goodrich R. F., Kazarinoff N. D., Weston V. H. (1963), Scalar diffraction by a thin oblate spheroid, in «Electromagnetic Theory and Antennas», Pergamon Press, Oxford, 27—38.

Granger S., Spence R. D. (1951), Energy levels of a spheroidal nuclear wall, *Phys. Rev.* **73**, 460—461.

Gupta R. K. (1968), A finite transform involving spheroidal wave function and its applications, *Proc. Nat. Inst. Sci. Indian* **A34**, 6, 289—300.

Halpern A. M. (1969), Orbital angular momentum decomposition of the three-body coupling scheme: muonic molecules and the hydrogen molecular ion, *Phys. Rev.* **186**, 14—25.

Hanish S., Baier R. V., Van Buren A. L., King B. J. (1971), Tables of radial spheroidal wave functions, U. S. Naval Research Lab. Repts. Nos. 7088, 7089, 7090, 7091, 7092, 7093, Washington, D. C.

Hansen E. B. (1964), Higher order diffraction by a circular disk, *Acta Polytech. Scandinav. Series* **33**, UDC 534, 26.

Hara S. (1969), A two center approach in the low energy electron  $H_2$  scattering, *J. Phys. Soc. Japan* **27**, 4, 1009—1019.

Hatcher E. C., Leitner A. (1954), Radiation from a point dipole located at the tip of a prolate spheroid, *J. Appl. Phys.* **25**, 1250—1253.

Hayes E. F., Parr R. G. (1967), Single-centre expansions of molecular electronic wave functions, *Suppl. Progr. Theor. Phys.* **40**, 78—105.

Helfrich K. (1971), Generalized quantum mechanical two-centre problems. III. Calculation of exact expectation values, *Theoret. Chim. Acta (Berlin)* **21**, 381—397.

Helfrich K. (1972), Constants of motion for separable one-particle problems with cylinder symmetry, *Theoret. Chim. Acta (Berlin)* **24**, 271—282.

Helfrich K., Hartmann H. (1965), Über einen Zusammenhang der nach Hylleraas and der nach Jaffe bestimmten Lösungen der Schrödinger-Gleichung für ein Elektron im Feld zweier Punktladungen, *Theoret. Chim. Acta (Berlin)* **3**, 21—30.

Helfrich K., Hartmann H. (1970), Generalized quantum mechanical two-centre problems, I, General theory and results for some two-centre Coulomb problems, *Theoret. Chim. Acta (Berlin)* **16**, 263—277.

Hellmig E. (1937), Beitrag zur Berechnung der Terme des Wasserstoffmolekülions, *Z. Phys.* **104**, 694—710.

Herring C. (1962), Critique of the Heitler — London method of calculating spin couplings at large distances, *Rev. Mod. Phys.* **34**, 631—645.

Heurtley J. C. (1964), Hyperspheroidal functions—optical resonators with circular mirrors, in «Proc. Symp. on Quasioptics», Polytechnic Press, New York.

Hirschfelder J. O., Byers-Brown W., Epstein S. T. (1964), Recent developments in perturbation theory, in «Advances in Quantum Chemistry», v. I. Ed. P. O. Lowdin, New York, Academic Press.

Hodge D. B. (1970), Eigenvalues and eigenfunctions of the spheroidal wave equation, *J. Math. Phys.* **11**, 8, 2308—2312.

Howell K. M., Schull H. (1959), Single-center expansions for one-electron systems  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **30**, 627—633.

Hughes J. W. B. (1967), Stark states and  $O(4)$  symmetry of hydrogenic atoms, *Proc. Phys. Soc. London*, **91**, 810—818.

Hunter G., Gray B. F., Pritchard H. O. (1966), Born — Oppenheimer separation for three-particle systems, I. Theory, *J. Chem. Phys.* **45**, 10, 3806—3816.

Hunter G., Pritchard H. O. (1967a), Born — Oppenheimer separation for three-particle systems, II. Two-center wavefunctions, *J. Chem. Phys.* **46**, 6, 2146—2152.

Hunter G., Pritchard H. O. (1967b), Born — Oppenheimer separation for three-particles systems, III. Applications, *J. Chem. Phys.* **46**, 6, 2153—2158.

Hunter H. E., Kirk D. B., Senior T. B. A., Wittenberg E. R. (1965), Tables of spheroidal functions for  $m=0$ , vol. I and II. Radiation Lab. Univ. of Michigan, Ann. Arbor, Mich.

Hylleraas E. A. (1931), Über die Elektronenterme des Wasserstoffmolekülions, *Z. Physik* **71**, 739—763.

Hylleraas E. A. (1935), Zur Konvergenzfrage gewisser Näherungslösungen der «ausenen» Gleichung des Zweizentrenproblems, *Z. Phys.* **93**, 582—588.

Itikawa Y., Hattory H. (1968), Tables of Prolate Spheroidal functions, Contributions from the group on atoms and molecules 2, *Japan*.

Jaffé B. M. (1973), The Schrödinger equation in orthogonal curvilinear coordinates, *Am. J. Phys.* **41**, 1206—1207.

Jaffé G. (1934), Zur Theorie des Wasserstoffmolekülions, *Z. Physik* **87**, 535—544.

Jepsen D. W., Hirschfelder J. O. (1960), Calculation of the coupling terms neglected in performing the Born—Oppenheimer separation for the hydrogen molecule ion, *J. Chem. Phys.* **32**, 5, 1323—1335.

Johnson V. A. (1941), Correction for nuclear motion in  $H_2^+$ , *Phys. Rev.* **60**, 373—377.

Jorna S., Springer C. (1971), Derivation of Green-type transitional and uniform asymptotic expansions from differential equations. V. Angular oblate spheroidal wave functions  $ps_n^r(\eta, h)$  and  $ps_n^r(\eta, h)$  for large  $h$ , *Proc. Roy. Soc. London* **A321**, 545—555.

Kazarinoff N. D., Ritt R. K. (1959), On the theory of scalar diffraction and its application to the prolate spheroid, *Ann. Phys.* **6**, 3, 277—299.

Kehl S., Helfrich K., Hartmann H. (1971), Generalized quantum mechanical two-centre problems, II. The case of equal centres, *Theoret. Chim. Acta* **21**, 44—62.

Kiefer H. M., Fradkin D. M. (1968), Comments on separability operators, invariance ladder operators and quantization of the Kepler problem in prolate-spheroidal coordinates, *J. Math. Phys.* **9**, 4, 627—633.

Komarov I. V., Slavyanov S. Yu. (1968), The two Coulomb centres problem at large centre separation, *J. Phys.* **B1**, ser. 2, 1066—1072.

Kotani M. (1963), An acoustical problem relating to the theory of Rayleigh disc. *Proc. Phys. Math. Soc. Japan*, III **15**, 30—57.

Kouri D. J., Curtiss C. F. (1965), Low-energy atomic collisions, I. The Schrödinger equation for  $H^+ - H$ , *J. Chem. Phys.* **44**, 5, 2120—2130.

Kramers H. A., Ittman C. P. (1929), Zur Quantelung des Asymmetrischen Kreisels, II. *Z. Phys.* **53**, 217—231.

Krogdahl M. K. (1944), The interaction of a proton and a hydrogen atom in its excited states, *Astrophys. J.* **100**, 311—332.

Landau H. J., Pollak H. O. (1961), Prolate spheroidal wave functions Fourier analysis and uncertainty, II. *Bell. syst. Tech. J.* **40**, 1, 65—84.

Landau H. J., Pollak H. O. (1962), Prolate spheroidal wave functions Fourier analysis and uncertainty, III. The dimension of the space of essentially time and band limited signals, *Bell. Syst. Techn. J.* **41**, 4, 1295—1336.

Laurenzi B. J. (1971), Green's function for the hydrogen molecular ion  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **55**, 6, 2681—2684.

Laurenzi B. J., Fitts D. D. (1965), Born—Oppenheimer coupling terms for the hydrogen molecule ion, *J. Chem. Phys.* **43**, 9, 3407—3408.

Leitner A. (1949), Diffraction of sound by a circular disk, *J. Acoust. Soc. Amer.* **21**, 331—334.



- Leitner A., Spence R. D. (1950), Oblate spheroidal wave functions, *J. Franklin Inst.* **249**, 299—321.
- Levine I. N. (1964a), United atom treatment of  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **41**, No. 7, 2044—2052.
- Levine I. N. (1964b), Comment on united atom expansions, *J. Chem. Phys.* **40**, 11, 3444—3445.
- Levy B. R., Keller J. B. (1960), Diffraction by a spheroid, *Can. J. Phys.* **38**, 128—144.
- Levy-Leblond, J. M. (1967). Electron capture by polar molecules, *Phys. Rev.* **153**, 1—4.
- Lewis J. T., McDowell M. R., Moiseiwitsch B. L. (1955), Properties of the hydrogen molecular ion V: transitions connecting the lowest even and lowest odd  $\pi$ -states with higher  $\sigma$ -states, *Proc. Phys. Soc., London* **A68**, 565—585.
- Li M. C. (1971), Scattering by a nonspherical potential, *J. Math. Phys.* **12**, 6, 936—944.
- Li M. C. (1972), Scattering by two charged centres, *J. Math. Phys.* **13**, 9, 1381—1386.
- Li M. C. (1973), Scattering by a spin-dependent spheroidal potential, *J. Math. Phys.* **14**, 10, 1358—1363.
- Li M. C. (1974), Spheroidal analysis of Coulomb scattering, *J. Math. Phys.* **15**, 5, 570—575.
- Lytle J., Schultz F. V., (1969), Prolate spheroidal antennas in isotropic plasma media, *IEEE Trans.* **AP-17**, 4, 496—506.
- Maclaurin R. C. (1898), On the solution of the equation  $(\Delta^2 + k^2)\psi = 0$  in elliptic coordinates and their physical applications, *Trans. Camb. Phil. Soc.* **17**, 41—108.
- Madsen M. M., Peek J. M. (1971), Eigenparameters for the lowest twenty electronic states of the hydrogen molecular ion, *Atomic data* **2**, 171—204.
- Marrak P. E. (1939), Notes on the two-centre problem in wave mechanics, I. The hyperbolic nodes of the wave equation, *Proc. Camb. Phil. Soc.* **35**, 44—55.
- Marx I. (1954), Recurrence relations for prolate spheroidal functions, *J. Math. and Phys.* **32**, 269—275.
- Matcha R. L., Pritchard R. H., Kern C. W. (1971), Prolate spheroidal expansions of the spin-orbit, spin-spin and orbit-orbit operators, *J. Math. Phys.* **12**, 7, 1155—1159.
- Matsen F. A. (1953), The united atom treatment of  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **21**, 5, 928—929.
- Matveenko A. V., Ponomarev L. I. (1972), Number of vibrational levels of the molecular hydrogen ion, *J. Phys.* **B5**, 27—28.
- McCarroll R., McDowell M. R. C. (1955), Properties of the hydrogen molecular ion VI: the total electronic orbital angular momentum of the  $1s\sigma_g$ ,  $2s\sigma_g$ , and  $3d\sigma_g$  states, *Proc. Phys. Soc. London*, **A68**, 810—815.
- McGrea W. H., Newing R. A. (1933), Boundary conditions for the wave function, *Proc. Lond. Math. Soc.* **37**, 520—534.
- McKinney P. C. (1965), Hydrogen molecular ion: solutions of the Schrödinger equation expressed as integral equations, *J. Chem. Phys.* **42**, 10, 3537—3539.
- Meixner J. (1944), Die Lameschen Wellenfunktionen des Dreiecksellipsoids, *Ber. Z. W. B.* Nr. 1952.

Meixner J. (1947), Neuere Ergebnisse über Sphäroid — Funktionen, Z. angew. Math. Mech. 25/27, 137—138.

Meixner J. (1948a), Strenge theorie der Beugung Elektromagnetischer Wellen an des vollkommen leitenden Kreisscheibe, Z. Naturforsch. 3a, 506—518.

Meixner J. (1948b), Asymptotische Entwicklung der Eigenwerte und Eigenfunktionen der Differentialgleichungen der Sphäroidfunktionen und der Matheiuschen Funktionen, Z. angew. Math. Mech. 28, 304—310.

Meixner J. (1948—1949), Reihentwicklungen vom Siegerschen Typus für die Sphäroid Funktionen, Archiv Math. 1, 432—440.

Meixner J. (1950), Reihentwicklungen von Produkten zweier Sphäroid Funktionen nach Produkten von Zylinder und Kugelfunktionen, Math. Nachr. 3, 193—207.

Meixner J. (1951), Klassifikation, Bezeichnung und Eigenschaften der Sphäroidfunktionen, Math. Nachr. 5, 1—18.

Meixner J. (1953), Theorie der Beugung elektromagnetischer Wellen an der vollkommen leitenden Kreisscheibe und verwandte Problemen, Ann. Phys. 6, 12, 227—236.

Meixner J. (1969), Einige Eigenschaften der Shpäroidfunktionen, Arch. der Math. 20, 3, 274—278.

Meixner J., Andrejewski W. (1950), Strenge Theorie der Beugung ebener electromagnetischer Wellen an der vollkommen leitenden Kreisscheibe und an der kreisförmigen Öffnung im voll kommen leitenden ebenen Schirm, Ann. Phys. (6) 7, 157—168.

Meixner J., Fritze U. (1949), Das Schallfeld in der Nähe der frei schwingenden Kolbenmembran, Z. angew. Phys. 1, 535—542.

Meixner J., Schäfke F. W. (1954), Eigenwertkarten der Sphäroid Differentialgleichung, Arch. Math. 5, 4—6, 492—505.

Meixner J., Schäfke F. W. (1954), Mathieusche Funktionen und Shpäroidfunktionen, Springer Verlag, Berlin.

Miller W. (1964), On Lie algebras and some special functions of mathematical physics, Mem. Amer. Math. Soc. 20, 30—39.

Mittleman M. H., von Holdt R. E. (1965), Theory of low energy electron scattering by polar molecules, Phys. Rev. 140A, 726—729.

Mittleman M. H., Myerscough V. P. (1966), Minimum moment required to bind a charged particle to an extended dipole, Phys. Letts. 23, 545—546.

Möglich F. (1927), Beugungserscheinungen an Körpern von ellipsoidischer Gestalt, Ann. Phys. 83, 13, 609—735.

Monroe E. (1938), On the energies associated with the two-centre problem. I. General features of the energy surface, Proc. Camb. Phil. Soc. 34, 375—381.

Morse P. M. (1935), Additional formulae for spheroidal wave functions, Proc. Nat. Acad. Sci., U. S. A. 21, 56—62.

Morse P. M., Stüeckelberg E. C. G. (1929), Diatomic molecules according to the wave mechanics. I. Electronic levels of the hydrogen molecular ion, Phys. Rev. 33, 932—947.

Müller H. J. W. (1962), Asymptotic expansions of oblate spheroidal wave functions and their characteristic numbers, J. reine angew. Math. 211, 33—47.

Müller H. J. W. (1963), Asymptotic expansions of prolate spheroidal wave functions and their characteristic numbers, J. reine angew. Math. 212, 26—48.

- Müller H. J. W. (1964), Asymptotische Entwicklungen von Sphäroidfunktionen und ihre Verwandtschaft mit Kugelfunktionen, *Z. angew. Math. Mech.* **44**, 371—374.
- Müller H. J. W. (1965), Über asymptotische Entwicklungen von Sphäroidfunktionen, *Z. Angew. Math. Mech.* **1**, 29—36.
- Murakami I., Toki M. (1971), A review on prolate spheroidal wave functions, II. *Bull. Fac. Eng. Yokohama Nat. Univ.* **20**, 47—59.
- Murakami I., Toki M., Tanaka Y. (1970), A review on prolate spheroidal wave functions, *Bull. Fac. Eng. Yokohama. Nat. Univ.* **19**, 103—125.
- Nagahara S. (1953, 1954), The scattering of slow electrons by the diatomic molecules. I. General theory, *J. Phys. Soc. Japan* **8**, 2, 165—168; II. Elastic scattering by the hydrogen molecules, *J. Phys. Soc. Japan* **9**, 1, 52—55.
- Nickolson J. W. (1925), Spheroidal wave functions, *Proc. Roy. Soc. London* **A107**, 43—60.
- Nimura T. (1951), Resonance frequency of spheroidal cavity resonator, *Sci. Rep. Res. Inst. Tohoku Univ.* **1/2**, 73—90.
- Nimura T., Watanabe Y. (1950), Tables of the spheroidal functions, *Res. Elec. Comm. Eng. Conversations Tohoku Univ.* **18**, 16—17.
- Niessen K. F. (1923), Zur Quantentheorie des Wasserstoffmolekülion, *Ann. d. Phys.* **70**, 129—134.
- Niessen K. F. (1927), Über die Ionisierungsspannung und das Viellinienspectrum von Wasserstoff, *Z. Phys.* **43**, 694—706.
- Niven C. (1881), On the conduction of heat in ellipsoids of revolution, *Phil. Trans. Roy. Soc. London*, **171**, 117—161.
- Qguchi T. (1970), Eigenvalues of spheroidal wave functions and their branch points for complex values of propagation constants *Radio Sci.* **5**, 8—9, 1207—1214.
- Pack R. T., Hirschfelder J. O. (1970a), Energy corrections to the Born—Oppenheimer approximation. The best adiabatic approximation, *J. Chem. Phys.* **52**, 2, 521—534.
- Pack R. T., Hirschfelder J. O. (1970b), Adiabatic corrections to long-range Born—Oppenheimer interatomic potentials, *J. Chem. Phys.* **52**, 8, 4198—4211.
- Page L. (1944), The electrical oscillations of a prolate spheroid, *Phys. Rev.* **65**, 98—117.
- Patel J. (1967), On the accurate wave functions of  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **47**, 2, 770—774.
- Patterson M. R., Becker R. L. (1967), Non-adiabaticity corrections to the Born—Oppenheimer approximation with calculations for mesic and electronic molecular ions, Thesis, Oak Ridge National Laboratory, U. S. A., ORNL-TM-1850.
- Pauli W. (1922), Über das Modell des Wasserstoffmolekülions, *Ann. Phys.* **68**, 177—240.
- Pavlik P. T., Blinder S. M. (1967), Relativistic effects in chemical binding: the  $H_2^+$  molecule, *J. Chem. Phys.* **46**, 2749—2751.
- Peek J. M. (1965a), On the  $^2\Sigma_g^+$  and  $^2\Sigma_u^+$  states of the hydrogen molecule ion, Sandia Corporation Report SC-RR-65-77.
- Peek J. M. (1965b), Eigenparameters for the  $1s\sigma_g$  and  $2p\sigma_u$  orbitals of  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **43**, 8, 3004—3006

- Peek J. M. (1966), The proton-hydrogen atom system at large distances. Charge transfer and the  $1s\sigma_g - 2p\sigma_u$  eigenenergies, *Phys. Rev.* **143**, 33—35.
- Peek J. M. (1969), Discrete vibrational states due only to long range forces:  $2\Sigma_u^+(2p\sigma_u)$  state of  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **50**, 10, 4595—4596.
- Peek J. M., Green T. A. (1969), Improvement in the first Born theory of electron scattering by molecular systems, II. Example of the  $1s\sigma_g - 2p\sigma_u$  transition in  $H_2^+$ , *Phys. Rev.* **183**, 202—212.
- Pettit R. H. (1965), Signal representation by prolate spheroidal wave functions, *IEEE Trans. AE s. I*, 39—42.
- Poole E. G. C. (1923), Some notes on spheroidal wave functions, *Quart. J. Math.* **49**, 309—321.
- Power J. D. (1973), Fixed nuclei two centre problem in quantum mechanics, *Phil. Trans. Roy. Soc. London A274*, No. 1246, 663—702.
- Rainwater J. (1950), Nuclear energy level argument for a spheroidal nuclear model, *Phys. Rev.* **79**, 432—434.
- Ramaker D. E., Peek J. M. (1972),  $H_2^+$  dipole strengths by asymptotic techniques, *J. Phys.* **B5**, 2175—2181.
- Ramaker D. E., Peek J. M. (1973), Dipole strengths involving the lowest twenty electronic states of  $H_2^+$ , *Atomic data* **5**, 167—184.
- Rellich F. (1937), Störungstheorie der Spektralzerlegung, I. *Math. Ann.* **113**, 600—619; II. *Math. Ann.* **113**, 677—685.
- Rhodes D. R. (1963), The optimum line source for the best mean square approximation to a given radiation pattern, *IEEE Trans. AP-11*, 440—446.
- Rhodes D. R. (1965), On some double orthogonality properties of the spheroidal and Mathieu functions, *J. Math. and Phys.* **44**, 52—56.
- Rhodes D. R. (1970), On the spheroidal functions, *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **74**, 3, 187—209.
- Ritter E. K. (1956), Solution of problems in electromagnetic wave theory on a high digital calculating machine. *Trans. IRE AP-3*, 4, 276—286.
- Roberts E. M., Foster M. R., Selig F. F. (1962), On the theory of spin-orbit and hyperfine interactions in molecules. Application to the hydrogen molecule-ion, *J. Chem. Phys.* **37**, 2, 485—490.
- Robin L. (1957—1959), *Fonctions spheriques de Legendre et fonctions spheroidales*, T. I, II, III Gauthier — Villars, Paris.
- Robinson P. D. (1958), Wave functions for the hydrogen atom in spheroidal coordinates, II. Interaction with point charge and with a dipole, *Proc. Phys. Soc. London A71*, 828—842.
- Robinson P. D. (1961),  $H_2^+$ : a problem in perturbation theory, *Proc. Phys. Soc. London* **78**, 537—548.
- Ross P. M. (1966), Wave functions and transition rates of the hydrogen molecular ion, University of Kentucky Thesis (U. Microfilms, Ann Arbor, Michigan).
- Roy S. (1970), Suggestive approximate dynamical symmetry of an electron moving in the field of many stationary nuclei, *J. Math. Phys.* **11**, 9, 2931—2935.
- Ryder R. M. (1942), The electrical oscillations of a perfectly conduction prolate spheroid, *J. Appl. Phys.* **13**, 327—343.

- Sandeman I. (1935), The mathematical representation of the energy levels of the secondary spectrum of hydrogen, III. Proc. Roy. Soc. Edinburgh 55, 72—84.
- Schärfke F. W. (1951), Über Eigenwertprobleme mit zwei Parametern, Math. Nachr. 6, 110—124.
- Schärfke F. W., Groh H. (1962), Zur Berechnung der Eigenwerte der Sphäroiddifferentialgleichung, Numer. Math. 4, 310—312.
- Schelkunoff S. A. (1952), Advanced antenna theory, John Wiley, New York.
- Schmid H. L. (1948), Störungsrechnung bei dreigliedrigen Rekursionen. I. Math. Nachr. 1, 377—398.
- Schmid H. L. (1949), Störungsrechnung bei dreigliedrigen Rekursionen, II. Math. Nachr. 2, 35—44.
- Senior T. B. A. (1960), Scalar diffraction by a prolate spheroid at low frequencies, Can. J. Phys. 38, 1632—1641.
- Senior T. B. A. (1966a), The scattering from acoustically hard and soft prolate spheroids for axial incidence, Can. J. Phys. 44, 3, 655—667.
- Senior T. B. A. (1966b), The scattering of an electromagnetic wave by a spheroid, Can. J. Phys. 44, 7, 1353—1359.
- Shafi M., Beckel C. L. (1973), Theoretical study of  $H_2^+$  spectroscopic properties, III. The  $3d\sigma_g$  electronic state, J. Chem. Phys. 59, 10, 5294—5297.
- Shibuya T., Wulfman C. E., (1965), Molecular orbitals in momentum space, Proc. Roy. Soc., London A286, 376—389.
- Shimizu M. (1961), The tables of eigenvalues and eigenvectors useful for the scattering problems in a two centre Coulomb field, Nat. Sci. Rept. Ochanomizu Univ. 12, 1—6.
- Shimizu M. (1963), Two centre Coulomb potential approximation, J. Phys. Soc. Japan 18, 6, 811—819.
- Siegel K. M., Schultz F. M., Gere B. H., Sleator E. B. (1956), The theoretical and numerical determination of the radar cross section of a prolate spheroid, Trans. IRE AP-3, 4, 266—275.
- Simons J. C., Slater J. C. (1952), Electromagnetic resonant behaviour of a confocal spheroidal cavity system in the microwave region, J. Appl. Phys. 23, 29—31.
- Sips R. (1949), Representation asymptotique des fonctions de Matheieu et des Fonctions d'ordre spheroidales, Trans. Am. Math. Soc. 66, 93—134.
- Sleeman B. D. (1969a), Integral representation associated with high-frequency non-symmetric scattering by prolate spheroids, Quart. J. Mech. and Appl. Math. 22, 4, 405—426.
- Sleeman B. D. (1969b), An diffraction at short wave lengths by a prolate spheroid, J. Inst. Math. and Appl. 5, 4, 434—442.
- Slepian D. (1964), Prolate spheroidal wave functions; Fourier analysis and uncertainty, IV. Extension to many dimensions; generalized prolate spheroidal function, Bell. Syst. Tech. J. 43, 6, 3009—3057.
- Slepian D. (1965), Some asymptotic expansions for prolate spheroidal wave functions, J. Math. and Phys. 44, 2, 99—140.
- Slepian D., Pollak H. O. (1961), Prolate spheroidal wave functions, Fourier analysis and uncertainty, Bell. Syst. Techn. J. 40, 1, 43—46.

- Slepian D., Sonnenblick E. (1965), Eigenvalues associated with prolate spheroidal wave functions of zero order, *Bell. Syst. Techn. J.* **44**, 1745—1759.
- Smith W. F. Jr. (1968), Wave functions and transition rates of  $H_2^+$  for large internuclear separation, University of Kentucky Thesis (U. Microfilms, Ann. Arbor, Michigan).
- Sowerby L. (1953), The couple on a rotating spheroid in a slow stream, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **49**, 327—332.
- Spence R. D. (1948), The diffraction of sound by circular disks and apertures, *J. Acoust. Soc. Amer.* **20**, 380—390.
- Spence R. D., Granger S. (1951), The scattering of sound from a prolate spheroid, *J. Acoust. Soc. Am.* **23**, 701—706.
- Spence R. D., Wells C. P. (1951), Vector wave functions, *Comm. Pure Appl. Math.* **4**, 95—104.
- Steenholt G. (1936), Zur numerischen Berechnung der Potentialkurven des Wasserstoffmolekülions, *Z. Phys.* **100**, 547—548.
- Stier H. C. (1932), Zur Deutung des Ramsauer Effektes beim symmetrischen Zweiatomige Molekülen, *Z. Physik* **76**, 439—470.
- Stone A. P. (1956), Some properties of Wigner coefficients and hyperspherical harmonics, *Proc. Cambr. Phil. Soc.* **52**, 424—430.
- Storruste A., Wergeland H. (1949), On two complementary diffraction problems, I. Circular hole and disk in confocal coordinates, *Norske Vid. Selsk. Forh.* **21**, 48—52, II. Transmission of sound through a circular hole, *Norske Vid. Selsk. Forh.* **11**, 43—48.
- Stratton J. A. (1935), Spheroidal functions, *Proc. Nat. Acad. Sci. USA* **21**, 51—56.
- Stratton J. A., Morse P. M., Chu L. J., Hunter R. A. (1941), Elliptic cylinder and spheroidal wave functions, John Wiley, New York.
- Stratton J. A., Morse P. M., Chu L. J., Little J. D. C., Corbato F. J. (1956), Spheroidal wave functions, John Wiley, New York.
- Streetman J. R., Matsen F. A. (1954), The united atom-separated atom treatment of  $H_2^+$ , *J. Chem. Phys.* **22**, 8, 1366—1370.
- Streifer W. (1968), Uniform asymptotic expansions for prolate spheroidal wave functions, *J. Math. Phys.* **47**, 4, 407—415.
- Stuckey M. M., Layton L. L. (1964), Numerical determination of spheroidal wave function eigenvalues and expansion coefficients, AML Report 164, US Naval Research Lab. Washington, D. C.
- Svartholm N. (1936), Über die aussere Differentialgleichung des Zweizentrenproblems, *Arkiv f. Math. Astron. och Fysik*, **35B**, No. 10.
- Svartholm N. (1938), Über das wellenmechanische Zweizentrenproblem, *Z. Physik* **111**, 186—194.
- Takayanagi K. (1967), Scattering of slow electrons by molecules, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **40**, 216—248.
- Takayanagi K., Itikawa Y. (1968), Scattering of slow electrons by polar molecules, *J. Phys. Soc. Jap.* **24**, 160—168.
- Tarter C. B. (1970), Coefficients connecting the Stark and fieldfree wave functions for hydrogen, *J. Math. Phys.* **11**, 3192—3195.
- Teller E. (1930), Über das Wasserstoffmolekülion, *Z. Physik* **61**, 458—480.

Teller E., Sahlin H. L. (1970), The hydrogen molecular ion and the general theory of electron structure, in «Physical Chemistry», v. 5, Ed. H. Eyring, New York, Academic Press, 35—124.

Thorson W. R. (1969), Asymptotic Coriolis interactions in slow atomic collisions, *J. Chem. Phys.* **50**, 4, 1702—1704.

Turner J. E., Anderson V. E., Fox K. (1968), Ground state energy eigenvalues and eigenfunctions for an electron in an electric-dipole field, *Phys. Rev.* **174**, 81—89.

Wait J. R. (1960), Some solutions for electromagnetic problems involving spheroidal, spherical and cylindrical bodies, *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **64B**, 15—32.

Wait J. R. (1966), Theories of prolate spheroidal antennas, *Radio sci.* **1**, 4, 477—512.

Wall H. S. (1948), Analytic theory of continued fractions, New York, van Nostrand.

Wallis R. F., Herman R., Milnes H. W. (1960), Energy levels of an electron in the field of a finite dipole, *J. Mol. Spectroscopy* **4**, 51—75.

Wallis R. F., Hulbert II. M. (1954), Approximation of molecular orbitals in diatomic molecules by diatomic orbitals, *J. Chem. Phys.* **22**, 5, 774—781.

Weinhold F., Chinen A. B. (1972), Variational functions for  $H_2^+$  *J. Chem. Phys.* **56**, 8, 3798—3801.

Wightman A. S. (1950), Moderation of negative mesons in hydrogen I: Moderation from high energies to capture by an  $H_2$  molecule, *Phys. Rev.* **77**, 4, 521—528.

Willstätter M. (1931), Betrachtungen über das Wentzel—Brillouinsche Näherungsverfahren in der Wellenmechanik insbesondere beim Wasserstoffmolekulation, *Ann. d. Phys.* **10**, 873—887.

Wilson A. H. (1928a), A generalized spheroidal wave equation, *Proc. Roy. Soc. London* **A118**, 617—635.

Wilson A. H. (1928b), The ionized hydrogen molecule, *Proc. Roy. Soc. London* **A118**, 635—647.

Wilson L. Y., Gallup G. A. (1966), Study of some solutions of the one-electron-two-center problem for heteronuclear cases, *J. Chem. Phys.* **45**, 2, 586—590.

Wind H. (1965a), Electron energy for  $H_2^+$  in the ground state, *J. Chem. Phys.* **42**, 7, 2371—2373.

Wind H. (1965b), Vibrational states of the hydrogen molecular ion, *J. Chem. Phys.* **43**, 9, 2956—2958.

Wulfman C. E., Takahata Yu. (1967), Noninvariance groups in molecular quantum mechanics. *J. Chem. Phys.* **47**, 488—498.

Yeh C. W. H. (1963), On the dielectric-coated prolate spheroidal antenna, *J. Math. Phys.* **42**, 68—77.

*Комаров Игорь Владимирович*  
*Пономарев Леонид Иванович*  
*Славянов Сергей Юрьевич*

**СФЕРОИДАЛЬНЫЕ И КУЛОНОВСКИЕ  
СФЕРОИДАЛЬНЫЕ ФУНКЦИИ**

М., 1976 г., 320 стр. с илл.

Редактор *Н. П. Рябенкая*  
Техн. редактор *Н. В. Кошелева*  
Корректор *Е. В. Сидоркина*

---

Сдано в набор 25/VI 1975 г. Подписано к печати  
1/III 1976 г. Бумага 84×108<sup>1</sup>/<sub>32</sub>. Физ. печ. л. 10.  
Усл.печ. л. 16,8. Уч.-изд. л. 17,95. Тираж  
5900 экз. Т-05610. Цена книги 1 р. 24 к.  
Заказ № 589

---

Издательство «Наука»  
Главная редакция физико-математической литературы  
117071, Москва, В-71, Ленинский проспект, 15

---

4-я типография изд-ва «Наука»,  
Новосибирск, 77, Станиславского, 25.