

Т.В. Круглова, А.Д. Быков, О.В. Науменко

Применение обобщенного преобразования Эйлера для суммирования ряда Данхэма двухатомных молекул

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 23.08.2001 г.

Известное преобразование рядов Эйлера применяется для вычисления суммы ряда Данхэма двухатомных молекул. В качестве аппроксимирующей функции, применяемой в методе Эйлера, используется выражение для энергии осциллятора Кратцера – точно решаемой модельной задачи квантовой механики. Преобразованный ряд содержит главную часть – асимптотически правильное выражение при больших значениях вращательных и колебательных квантовых чисел, и дополнительную часть, зависящую от новых переменных, которые меньше 1 при любых значениях квантовых чисел. Новое представление ряда Данхэма может оказаться полезным при вычислении уровней энергии высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний двухатомных молекул в тех случаях, когда известны только несколько первых членов разложения теории возмущений.

Для решения некоторых задач атмосферной спектроскопии необходимо рассчитывать высоковозбужденные колебательно-вращательные (КВ) состояния двухатомных молекул и радикалов. Частоты КВ-переходов двухатомных молекул, как правило, представляются рядами по степеням колебательного $(v + 1/2)$ и вращательного $J(J + 1)$ квантовых чисел – рядами Данхэма. С теоретической точки зрения такое представление является результатом применения теории возмущений (ТВ) для расчета уровней энергии.

Обычно наблюдаемые значения центров линий используются как исходные данные для определения методом наименьших квадратов коэффициентов ряда Данхэма. В дальнейшем полученный таким образом ряд применяется для предсказания положения линий с большими значениями v и J или восстановления функции потенциальной энергии молекулы [1]. Очевидно, что ряд Данхэма, определяемый в ТВ, имеет ограниченную область сходимости – он может расходиться при достаточно больших значениях квантового числа углового момента J . Ввиду этого необходимо применение специальных методов суммирования расходящихся рядов при расчетах высоковозбужденных состояний двухатомных молекул.

В настоящее время имеется значительное число работ (см., например, [2–9]), посвященных применению различных методов суммирования при расчете КВ-спектров двухатомных молекул. В [2–6] был предложен метод расчета высоких уровней энергии двухатомных молекул, основанный на «нелинейаризации» и « $1/N$ -разложении» и дающий хорошее согласие с экспериментальными данными для ряда молекул, даже для колебательно-вращательных уровней энергии, близких к энергии диссоциации. В [7–9] использован специальный вариант ТВ, позволяющий получить рациональные аппроксимации КВ-уровней

энергии двухатомных молекул. Проведенные вычисления для молекул H_2 и HBr показали значительное улучшение расчетов уровней энергии высоковозбужденных состояний по сравнению с традиционным подходом.

Цель данной работы – получить новое представление ряда Данхэма, используя другой подход, так называемое «обобщенное преобразование Эйлера» [10]. В качестве аппроксимирующей функции, необходимой в методе Эйлера, используется известное решение задачи об осцилляторе Кратцера [11], имеющее правильную асимптотическую зависимость от колебательного и вращательного квантовых чисел. Это позволяет использовать при суммировании ряда Данхэма некоторую априорную информацию о КВ-энергии двухатомной молекулы, содержащуюся в аппроксимирующей функции, корректно моделируя высокие члены разложения Данхэма. Преобразование Эйлера «вычленяет» главную часть КВ-энергии; как следствие, преобразованный ряд обладает лучшими свойствами и сходится при больших значениях квантового числа J .

Новое представление ряда теории возмущений для двухчастичных систем может оказаться полезным в тех случаях, когда известно только несколько первых членов разложения, что ограничивает применение других методов суммирования. С другой стороны, новое представление ряда Данхэма может улучшить «обработку» КВ-спектров двухатомных молекул.

1. Обобщенное преобразование Эйлера

В данном разделе для удобства читателя кратко приводятся основные соотношения метода Эйлера [10, 12, 13]. Пусть функции $f(z)$ соответствует разложение

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} f_n z^n \quad (1)$$

и известна ее некоторая оценка – аппроксимирующая функция

$$g(z) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n z^n = g_0 + g_1 z + g_2 z^2 + \dots \quad (2)$$

Пусть также выполняется

$$a_n = f_n/g_n \rightarrow 1 \quad (3)$$

при $n \rightarrow \infty$. Тогда исходный ряд (1), который может быть расходящимся, можно преобразовать в сходящийся (или сходящийся быстрее, если ряд (1) сходится медленно) следующим образом:

$$f_0 + f_1 z + f_2 z^2 + \dots = a_0 g(z) + (a_1 - a_0) g_1 z + (a_2 - a_0) g_2 z^2 + (a_3 - a_0) g_3 z^3 + \dots \quad (4)$$

Воспользуемся далее тем, что [10]:

$$\begin{aligned} g_1 z &= g'(z) z - 2g_2 z^2 - 3g_3 z^3 - \dots - ng_n z^n + \dots, \\ 2g_2 z^2 &= g''(z) z^2 - 6g_3 z^3 - 12g_4 z^4 - \dots - \\ &\quad - n(n-1) g_n z^n + \dots, \\ n! g_n z^n &= g^{(n)}(z) z^n - g_{n+1} z^{n+1} - \dots, \end{aligned} \quad (5)$$

и преобразуем ряд, исключая поочередно коэффициенты g_n из преобразованного ряда. Получим

$$\begin{aligned} f(z) &= a_0 g(z) + (a_1 - a_0) z g'(z) + \\ &\quad + (a_2 - 2a_1 + a_0) z^2 g''(z)/2! + \\ &\quad + (a_3 - 3a_2 + 3a_1 - a_0) z^3 g'''(z)/3! + \dots + \\ &\quad + (a_n - na_{n-1} + \dots) z^n g^{(n)}(z)/n!. \end{aligned} \quad (6)$$

Если условие (3) выполняется, то коэффициенты преобразованного ряда стремятся к нулю. Если также оказывается возможным ввести новую переменную

$$Z = \sqrt[n]{z^n g^{(n)}(z)} \leq 1, \quad (7)$$

слабо зависящую от n , то преобразованный ряд является степенным по Z и часто оказывается сходящимся.

Преобразование Эйлера ранее успешно применялось для суммирования расходящихся рядов теории возмущений в некоторых квантово-механических задачах, например, для вычисления уровней энергии ангармонического осциллятора, расчетов эффекта Штарка и Зеемана для атома водорода в сильных полях, суммирования $1/Z$ -разложения в теории атомов (см., например, [12, 13]). Как известно [14], метод Эйлера является регулярным, т.е. он дает правильные значения сумм для сходящихся рядов.

Преобразованный по Эйлеру ряд можно представить в виде

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n D_n \frac{z^n}{n!} \frac{d^n}{dz^n} g(z); \quad (8)$$

$$D_n = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} a_r, \quad a_i = f_i/g_i.$$

Рассмотрим в качестве примера аппроксимирующую функцию $g(z)$ вида

$$g(z) = 1/(1+z) = 1 - z + z^2 - \dots,$$

$$g_n = (-1)^n, \quad z g'(z) = \frac{-z}{(1+z)^2},$$

$$\frac{z^2 g''(z)}{2!} = \frac{z^2}{(1+z)^3}, \dots \quad (9)$$

Тогда исходный ряд (1) преобразуется к следующему выражению:

$$f(z) = \frac{1}{1+z} \times \left[f_0 + (f_1 + f_0) \left(\frac{z}{1+z} \right) + (f_2 + 2f_1 + f_0) \left(\frac{z}{1+z} \right)^2 + \dots \right]. \quad (10)$$

В (10) можно ввести новую переменную $Z = z/(1+z)$, которая, очевидно, меньше единицы при $z > 0$. Часто преобразование с аппроксимирующей функцией (9) и переход к новой переменной обеспечивают лучшую сходимость исходного ряда [12].

2. Ряд Данхэма двухатомных молекул и осциллятор Кратцера

Применение теории возмущений для вычисления колебательно-вращательных уровней энергии двухатомных молекул приводит к выражению вида

$$E(J, v) = \sum_{n,m} Y_{nm} (v + 1/2)^n [J(J+1)]^m, \quad (11)$$

где v – колебательное квантовое число; J – квантовое число углового момента, а коэффициенты ряда Y_{nm} называются коэффициентами Данхэма. Они определенным образом связаны с коэффициентами разложения потенциальной функции в ряд по степеням смещений из равновесного положения [1]. Выражение (11) можно также представить в виде

$$E(x, y) = \sum_m c_m(y) x^m, \quad (12)$$

где $c_m(y)$ есть некоторые функции, которым соответствует разложение

$$c_m(y) = \sum_{n=0} Y_{nm} y^n \quad (13)$$

и

$$y = v + 1/2; \quad x = J(J+1); \quad E(0, 0) = 0. \quad (14)$$

Если коэффициенты разложения (11) известны, то функции $c_m(y)$, представленные в (13) рядами, можно определить, используя подходящие методы, например метод Паде или Паде–Эрмита. Далее мы будем считать их заданными, представляя либо суммами (13), либо конечными выражениями, определенными с помощью некоторого метода суммирования, либо величинами, определяемыми из экспериментальных данных.

Формула Кратцера [11] описывает колебательно-вращательные уровни энергии двухатомной молекулы с потенциальной функцией

$$V(r) = \frac{A}{r^2} - \frac{B}{r}. \quad (15)$$

Уравнение Шредингера для радиальной части волновой функции с этим потенциалом имеет точное решение и уровни энергии есть значения следующей функции, которую мы будем называть функцией Кратцера:

$$\begin{aligned} K(J, v) - a [v + 1/2 + \sqrt{J(J+1) + b}]^{-2} + \\ + a [1/2 + \sqrt{b}]^{-2} = -a [y + \sqrt{x+b}]^{-2} + \\ + a [1/2 + \sqrt{b}]^{-2}; \\ a = B^2 \mu / (2\hbar^2); \quad b = 1/4 + 2A\mu / \hbar^2. \end{aligned} \quad (16)$$

Здесь μ – приведенная масса; энергия отсчитывается от нулевого уровня $v = 0$, $J = 0$. Константы a и b можно также выразить через энергию диссоциации E_d и равновесное расстояние r_e :

$$a = 2E_d^2 r_e^2 \mu / \hbar^2; \quad b = 1/4 + 2E_d r_e^2 \mu / \hbar^2.$$

Формулу (16) можно использовать для преобразования ряда Данхэма к более удобному виду, так чтобы преобразованный ряд имел лучшие свойства сходимости и соответствующая ему функция имела правильную асимптотику при больших значениях v и J .

Формула Кратцера дает качественно правильную асимптотическую зависимость – уровни энергии сосредоточены в интервале, определяемом глубиной потенциальной ямы, в то же время асимптотическое поведение ряда Данхэма при больших значениях $y = v + 1/2$ зависит от знака старшего члена, сохраняемого в разложении (13).

3. Преобразованный ряд Данхэма

Используя формулы (8) и (16) для преобразования ряда (11), после некоторых длинных, но простых вычислений можно получить следующее выражение:

$$\begin{aligned} E(x, y) = K(x, y) d_v(y) - [a/(y + \sqrt{x+b})^2] Z_1(x) \times \\ \times Z_2(x, y) \sum_{n=0}^{\infty} d_n(y) \varphi_n(x, y) Z_1^n(x), \end{aligned} \quad (17)$$

где $Z_1(x) = x/(x+b)$ и

$$\varphi_n(x, y) = \sum_{m=0}^n p_{nm} Z_2^m(x, y) \quad (18)$$

– полиномы степени n от переменной $Z_2(x, y) = \sqrt{x+b}/(y + \sqrt{x+b})$. Общая формула для $\varphi_n(x, y)$ выглядит довольно громоздкой и здесь не приводится; первые несколько значений даны ниже:

$$\begin{aligned} \varphi_0(x, y) &= 1, \\ \varphi_1(x, y) &= \frac{1}{4} [1 + 3Z_2(x, y)], \\ \varphi_2(x, y) &= \frac{1}{8} [1 + 3Z_2(x, y) + 4Z_2^2(x, y)], \\ \varphi_3(x, y) &= \frac{1}{64} [5 + 15Z_2(x, y) + 24Z_2^2(x, y) + 5Z_2^3(x, y)], \\ \varphi_4(x, y) &= \frac{1}{128} [7 + 21Z_2(x, y) + 36Z_2^2(x, y) + \\ &+ 40Z_2^3(x, y) + 24Z_2^4(x, y)]. \end{aligned} \quad (19)$$

Отметим, что коэффициенты полиномов таковы, что

$$\sum_{m=0}^n p_{nm} = 1.$$

Колебательно зависимые параметры $d_n(y)$ вычисляются согласно формуле

$$d_n(y) = \sum_{i=0}^{n+1} (-1)^i \binom{n+1}{i} \frac{c_i(y)}{g_i(y)}, \quad (20)$$

где

$$g_i(y) = \frac{1}{i!} \frac{\partial^i}{\partial x^i} K(x, y) \Big|_{x=0} \quad (21)$$

– коэффициенты разложения функции Кратцера в ряд Тейлора по степеням переменной x . Первые несколько функций $d_n(y)$ представлены ниже:

$$\begin{aligned} d_v(y) &= \frac{1}{a} \frac{c_0(y)}{a(y + \sqrt{b}) - (1/2 + \sqrt{b})} (y + \sqrt{b})(1/2 + \sqrt{b}), \\ d_0(y) &= d_v(y) - \frac{1}{a} c_1(y) (y + \sqrt{b})^3 \sqrt{b}, \\ d_1(y) &= d_0(y) - \frac{1}{a} c_1(y) (y + \sqrt{b})^3 \sqrt{b} - \frac{4b^{3/2}}{a} \times \\ &\times \frac{c_2(y) (y + \sqrt{b})^4}{(y + 4\sqrt{b})}. \end{aligned} \quad (22)$$

Общая формула для $d_n(y)$ легко получается из (20). Отметим, что поскольку $c_0(1/2) = 0$, то слагаемое с $d_v(y)$ не имеет сингулярности при $v = 0$.

В настоящей статье дан общий анализ преобразованного ряда (17), использование нового представления ряда Данхэма для расчета высоковозбужденных уровней энергии двухатомных молекул будет представлено в последующих статьях.

Первый член преобразованного ряда (17) содержит функцию Кратцера $K(x, y)$ и, следовательно, имеет правильную асимптотику при больших значениях колебательных и вращательных квантовых чисел¹. Очевидно, что это слагаемое дает большую часть колебательно-вращательной энергии. Множитель $d_v(y)$ представляет отношение величин $c_0(y) \approx \omega$ и $g_0(y) = K(0, v + 1/2)$ – чисто колебательных членов в разложении энергии по степеням параметра $x = J(J + 1)$. Этот множитель можно рассматривать как «поправку», учитывающую неточное воспроизведение аппроксимантом – функцией Кратцера – колебательной энергии молекулы².

Второе слагаемое в (17), очевидно, представляет поправки к вращательной энергии молекулы. Переменные $Z_1(x)$ и $Z_2(x, y)$ всегда меньше единицы при $x \geq 0, y > 1/2$. Безразмерный параметр $b \approx 2D r_{em}^2 / \hbar^2$ обычно порядка 10^3 (например, для HI $b = 3830,5$).

Таким образом, при $J \sim 100$ переменная $Z_1(x)$ имеет величину около 0,7. Переменная $Z_2(x, y)$ при практически значимых величинах x и y близка к единице (для молекулы HI при $x = 0 \dots 10000, y = 0,5 \dots 10,5$ величина $Z_2(x, y)$ находится в пределах 0,99–0,86), для более высоких колебательных состояний она уменьшается. Переход к новым переменным при преобразовании ряда (17) обеспечивает лучшие свойства сходимости преобразованного ряда, если только коэффициенты ряда не возрастают катастрофически быстро с ростом n .

4. О сходимости преобразованного ряда

Рассмотрим далее условия сходимости ряда (17). Очевидно, что радиус сходимости преобразованного ряда зависит от того, насколько правильно функция Кратцера (16) воспроизводит зависимость энергии от вращательного квантового числа. Можно видеть, что функции $\phi_n(x, y)$ положительны и меньше 1 при всех значениях J . Тогда радиус сходимости ряда

$$\sum_{n=0}^{\infty} |d_n(y)| Z_1^n(x) \quad (23)$$

является нижней границей радиуса сходимости ряда (17). Коэффициенты $d_n(y)$ представляют, согласно (20), комбинацию отношений $c_i(y)/g_i(y)$ – колебательного, вращательного и центробежных членов в разложениях по степеням $J(J + 1)$. В тех случаях, когда потенциал Кратцера достаточно хорошо воспроизводит внутримолекулярный потенциал, формула Кратцера (16) также должна достаточно хорошо воспроизводить первые производные от энергии по переменной $x = J(J + 1)$, тогда как производные высокого порядка, по-видимому, воспроизводятся с большей ошибкой. Разумно предположить, что значения

¹ При условии правильного асимптотического поведения $c_0(y)$ при $y \rightarrow \infty$.

² Напомним, что в нашем подходе величины $c_n(y)$ – эмпирические параметры.

$d_n(y)$ увеличиваются с ростом n не быстрее, чем n^L , и можно ввести оценку вида (справедливую, по крайней мере, для некоторой совокупности колебательных состояний)

$$|d_n(y)| \leq n^L \varepsilon, \quad (24)$$

где ε – некоторая величина. Тогда ряд (23) сводится к

$$\sum_{n=0}^{\infty} n^L Z_1^n(x). \quad (25)$$

Как известно, (25) сходится при $Z_1(x) < 1$ и любом целом L , следовательно, сходится и исходный ряд (17).

Таким образом, если отношение производных $c_i(y)/g_i(y)$ есть ограниченная величина при всех n или растет не слишком быстро с ростом n , то преобразованный ряд сходится при всех $x = J(J + 1)$.

В качестве иллюстрации возможности оценок типа (24) на рис. 1,а приведена зависимость параметров $d_n(y)$ молекулы HI от квантового числа $y = v + 1/2$ и на рис. 1,б – зависимость этих величин от n ($n = 1 \dots 3$)

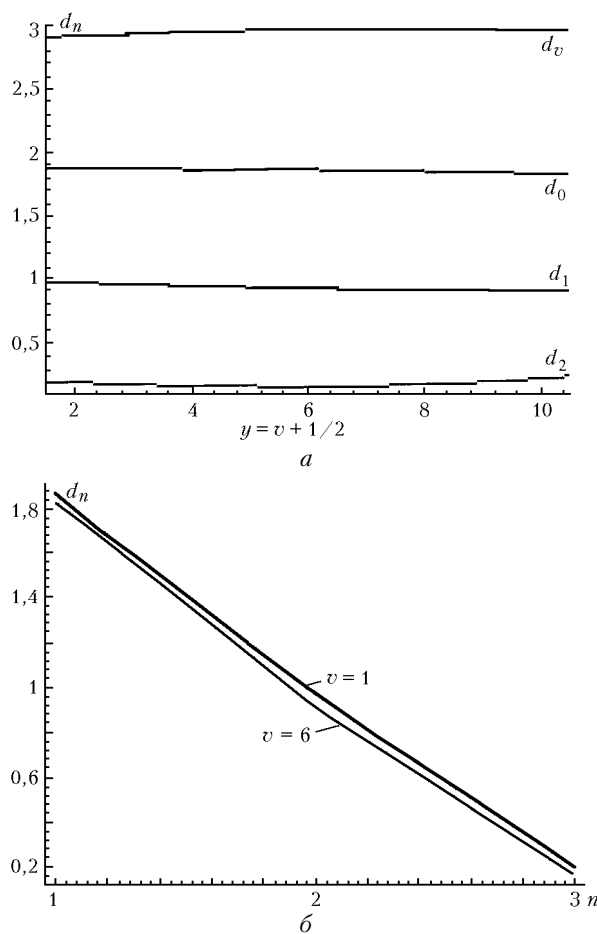


Рис. 1

для $v = 1$ и $v = 6$. Можно видеть, что зависимость от колебательного квантового числа и зависимость от индекса n хорошо аппроксимируются линейными функциями, кроме того, все $d_n(y)$ – положительные

величины. Все молекулярные и спектроскопические постоянные молекулы HI, необходимые для расчета, взяты из справочника [15].

Ряд (17) можно также приближенно суммировать следующим образом. Поскольку переменная $Z_2(x, y)$ близка к единице, то, полагая в (17) $Z_2(x, y) = 1$ и $\varphi_n(x, y) = 1$, представляя величины $d_n(y)$ в виде полинома по степеням n

$$d_n(y) = \varepsilon_0(y) + n\varepsilon_1(y) + n^2\varepsilon_2(y) + \dots + n^L\varepsilon_L(y), \quad (26)$$

получим:

$$E(x, y) \approx K(x, y) d_v(y) - [a / (y + \sqrt{x + b})^2] Z_1(x) \times \sum_{i=0}^L \varepsilon_i(y) \sum_{n=0}^{\infty} n^i Z_1^n(x). \quad (27)$$

Сумма ряда в правой части (27) легко вычисляется по формуле

$$\sum_{n=0}^{\infty} n^L Z_1^n(x) = \left(\mu \frac{d}{d\mu} \right)^L \frac{1}{1 - \mu} \Big|_{\mu=Z_1(x)}. \quad (28)$$

Таким образом, КВ-энергия двухатомной молекулы может быть представлена в виде конечного выражения. Например, при $L = 2$:

$$E(x, y) \approx K(x, y) d_v(y) - [a / (y + \sqrt{x + b})^2] Z_1(x) \times \left\{ \frac{\varepsilon_0(y)}{1 - Z_1(x)} + \frac{\varepsilon_1(y) Z_1(x)}{[1 - Z_1(x)]^2} + \frac{\varepsilon_2(y) Z_1(x) [1 + Z_1(x)]}{[1 - Z_1(x)]^3} \right\}. \quad (29)$$

При выводе (29) также предполагается, что производные от аппроксимирующей функции $\partial^n / \partial x^n K(x, y) |_{x=0}$ правильно воспроизводят знаки производных от энергии по переменной $x = J(J + 1)$. В конкретных расчетах величины $d_v(y)$ или $\varepsilon_i(y)$ можно рассматривать как некоторые колебательно зависимые параметры, определяемые при решении обратных задач. Для этого достаточно представить их в виде степенных разложений с коэффициентами, определяемыми подгонкой к измеренным центрам линий.

Заключение

Преобразование Эйлера с аппроксимирующей функцией Кратцера позволяет получить новое представление ряда теории возмущений для двухатомных молекул. Преобразованный ряд зависит от переменных $Z_1(x)$ и $Z_2(x, y)$, которые, по определению, меньше 1 для всех значений колебательных и вращательных квантовых чисел. Ряд сходится, если справедлива оценка (24).

Проведенные тестовые расчеты для первого возбужденного колебательного состояния ($v = 1$) молекулы HI показали, что преобразованный ряд (17) дает вращательные уровни с $J \leq 10$, практически совпадающие с рассчитанными по (11). Для более высоких вращательных уровней $10 \leq J \leq 20$ отличие меж-

ду двумя расчетами достигает $0,8 \text{ см}^{-1}$, при $20 \leq J \leq 30$ различие возрастает до 16 см^{-1} , при $30 \leq J \leq 100$ – до 6000 см^{-1} . При этом формула (17) предсказывает меньшую энергию, чем ряд Данхэма (рис. 2).

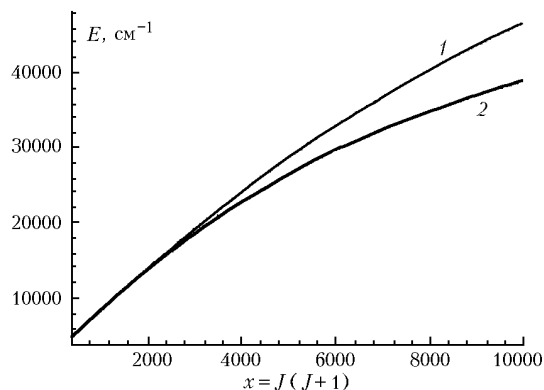


Рис. 2. Вращательные уровни энергии первого возбужденного колебательного состояния молекулы HI. Кривая 1 – расчет по формуле Данхэма, 2 – расчет с преобразованным рядом (17)

При практическом использовании преобразованного ряда Данхэма (17) коэффициенты $d_n(y)$ (для отдельного колебательного состояния) можно определять подгонкой к измеренным значениям частот переходов. Возможна также новая параметризация колебательной зависимости, представляемая равенством (26). Новая параметризация состоит в описании колебательной зависимости отношения кратцеоровской оценки производных от КВ-энергии по переменной $J(J + 1)$ к «истинным» значениям производных. По-видимому, эта задача проще, чем задача восстановления производных $c_n(y)$ по коэффициентам расходящегося ряда (11).

В заключение авторы выражают благодарность чл.-кор. РАН С.Д. Творогову за поддержку работы в рамках гранта РФФИ № 00-15-98589.

1. Величко Т.И., Галин В.Я., Макушкин Ю.С., Тютерев Вл.Г. Аналитические вычисления на ЭВМ в молекулярной спектроскопии. Общий алгоритм и применения к двухатомным молекулам. Новосибирск: Наука, 1986. 189 с.
2. Burenim A.V., Ryabikin M.Yu. The method for treatment of highly excited vibration-rotation states simple molecules: Diatomic molecules // J. Mol. Spectrosc. 1989. V. 136. № 1. P. 140–150.
3. Буренин А.В., Рябикин М.Ю. Асимптотически корректное описание колебательно-вращательного спектра двухатомной молекулы на примере молекулы йодистого водорода // Оптика и спектроскопия. 1990. Т. 68. Вып. 5. С. 1037–1042.
4. Буренин А.В., Рябикин М.Ю. Аналитическое описание высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний двухатомных молекул. I. Построение описания // Оптика и спектроскопия. 1995. Т. 78. Вып. 5. С. 742–748.
5. Буренин А.В., Рябикин М.Ю. Аналитическое описание высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний двухатомных молекул. II. Приложение к молекуле хлористого водорода // Оптика и спектроскопия. 1995. Т. 79. Вып. 2. С. 223–225.

6. *Рябкин М.Ю.* Методы описания колебательно-вращательных состояний двухатомных молекул с учетом асимптотических свойств потенциала взаимодействия ядер: Дис. ... канд. физ.-мат. наук. Нижний Новгород: Институт прикладной физики РАН, 1999. 159 с.
7. *Golovko V.F., Mikhailenko S.N., Tyuterev V.I.G.* Application of the Pade-form Hamiltonians for processing of vibration-rotation of diatomic and triatomic molecules // *J. Mol. Struct.* 1990. V. 218. P. 291–296.
8. *Головко В.Ф., Тютерева В.Г.* Паде-формы и молекулярная потенциальная функция. Представление по колебательным квантовым числам в двухатомных молекулах // *Оптика атмосф.* 1990. Т. 3. № 6. С. 616–621.
9. *Головко В.Ф., Михайленко С.Н., Тютерева В.Г.* Представление по вращательным квантовым числам в двухатомной молекуле // *Оптика атмосф.* 1991. Т. 4. № 5. С. 491–496.
10. *Морс Ф., Фейнбах Г.* Методы теоретической физики. Т. 1, 2. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1960.
11. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Т. 3. Нерелятивистская теория. М.: Мир, 1974. 341 с.
12. *Bhattacharyya K.* Generalized Euler transformation in extracting useful information from divergent (asymptotic) perturbation series and the construction of Pade approximants // *Int. J. Quantum Chem.* 1982. V. XXII. P. 307–330.
13. *Silverman J.N.* Generalized Euler transformation for summing strongly divergent Rayleigh-Schrodinger perturbation series: The Zeeman effect // *Phys. Rev. A.* 1983. V. 28. № 1. P. 498–501.
14. *Харди Г.* Расходящиеся ряды. М.: Изд-во иностр. лит-ры, 1951. 499 с.
15. *Хьюберт К.-П., Герцберг Г.* Константы двухатомных молекул. Ч. I. М.: Мир, 1984. 408 с.

T.V. Kruglova, A.D. Bykov, O.V. Naumenko. **Application of the generalized Euler transformation to summation of Danham series of diatomic molecules.**

The well-known «generalized Euler transformation» of divergent series is applied to summation of a Danham series of diatomic molecules. The formula for energy of Kratser oscillator – the exactly solvable quantum task, is used as the approximation function needed for series transformation. The transformed series consists of «main» part, which is asymptotically correct for high values of vibration and rotation quantum numbers, and an additional part depending on new variables, which are less than 1 for all values of quantum numbers. New representation of the Danham series may be useful for calculation of highly excited vibration-rotation states of diatomic molecules for which only several coefficients of perturbation expansion are known.