

ПРЕЦИЗИОННЫЕ ИССЛЕДОВАНИЕ КВАНТОВОЙ ЗАДАЧИ НЕСКОЛЬКИХ ЧАСТИЦ С КУЛОНОВСКИМ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ

АЗНАБАЕВ
Дамир Талгатович

d.aznabayev@inp.kz

Глава 1.

- Вариационные разложения для основного состояния атома гелия
- Экспоненциальное разложение
- Результаты: сверхточные вычисления нерелятивистских уровней энергии ионизации атома гелия
- Заключение

Глава 2.

- Вариационная волновая функция для атома мюонного гелия
- Результаты: сверхточные вычисления нерелятивистских уровней энергии ионизации атома мюонного гелия для основного состояния
- Сверхтонкая структура основного состояния атома мюонного гелия
- Заключение

Стационарное уравнение Шредингера для кулоновской задачи трех тел:

$$\hbar = e = m_e = 1$$

$$H\psi = E\psi \tag{1}$$

$$H = \frac{\mathbf{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m_2} + \frac{\mathbf{p}_3^2}{2m_3} + \frac{Z_1 Z_2}{r_{12}} + \frac{Z_1 Z_3}{r_{13}} + \frac{Z_2 Z_3}{r_{23}}. \tag{2}$$

Вариационные разложения для основного состояния атома гелия

<p>Хиллераас¹ ¹E.A. Hylleraas, Z. Physik 48, 469 (1928); 54, 347 (1929).</p>	$\psi = e^{-ks} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{nlm} s^l u^m t^{2n},$	$\begin{aligned} s &= r_1 + r_2, \\ t &= r_2 - r_1, \\ u &= r_{12}. \end{aligned}$	$E = -2.90324.$
<p>Киношита² ²T. Kinoshita, Phys.Rev. 105 1490 (1957).</p>	$\psi = e^{-ks} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{u}\right)^{2n}$	$t \leq u \leq s$	$E = -2.903722_5.$
<p>Пекериса³ ³C.L. Pekeris, Phys. Rev. 112, 1649 (1958); 115, 1216 (1959).</p>	$\psi = e^{-k(u+v+2\omega)/2} \sum_{l,m,n} C_{lmn} L_l(ku/2) L_m(kv/2) L_n(k\omega)$	$\begin{cases} u = r_1 + r_{12} - r_2, \\ v = r_2 + r_{12} - r_1, \\ \omega = r_1 + r_2 - r_{12}, \end{cases}$	$E = -2.90372437_5.$
<p>Франковский и Пекерис⁴ ⁴K. Frankowski and C.L. Pekeris, Phys. Rev. 146, 46 (1966).</p>	$\psi = e^{-ks} \sum_{l,m,n,i,j \geq 0} C_{lmnij} s^l u^m t^{2n} (s^2 + t^2)^{i/2} (\ln s)^j$	$\ln s$	$E = -2.903724377033_3.$
<p><u>Ч. Шварц</u>⁵ ⁵C. Schwartz, Los Alamos E-print archive, physics/0208004 (2002); math-ph/0605017 (2006).</p>	$\psi = e^{-ks} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{lmn} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n} + s^{1/2} e^{-ks} \sum_{l,m,n \geq 0} D_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n}$ $\psi = e^{-ks} \sum_{l,m,n \geq 0} C_{lmn} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n} + e^{-ks} \ln s \sum_{l,m,n \geq 0} D_{nlm} s^{l+1} \left(\frac{u}{s}\right)^m \left(\frac{t}{s}\right)^{2n}$	<p>Включил как отрицательные степени переменной s, так и логарифм.</p>	$E =$ 

$E = -2.90372\ 43770\ 34119\ 59831\ 11592\ 45194\ 40444\ 66969\ 25310!$

Он был выполнен на обычном персональном компьютере!

⁵C. Schwartz, Los Alamos E-print archive, physics/0208004 (2002);
math-ph/0605017 (2006).

$$H\psi = E\psi$$

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{l_1+l_2=L} Y_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{r}}_1, \hat{\mathbf{r}}_2) G_{l_1 l_2}^{L\pi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_{12}), \quad (3)$$

$$Y_{LM}^{l_1 l_2}(\hat{\mathbf{R}}, \hat{\mathbf{r}}_1) = R^{l_1} r_1^{l_2} \{Y_{l_1} \otimes Y_{l_2}\}_{LM}$$

$$G_{l_1 l_2}^{L\pi}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}. \quad (4)$$

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}$$

(5)

$$\alpha_n = \left[\left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right],$$

$$\beta_n = \left[\left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1 \right],$$

$$\gamma_n = \left[\left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1 \right].$$

(6)

[6] Griffin J.J. and Wheeler J.A. Collective Motions in Nuclei by the Method of Generator Coordinates // **Phys. Rev.** – 1957. – Vol. 108. – P. 311.

Таб.1. Исследование сходимости нерелятивистской энергии основного состояние атома гелия

Базис (N)	E_{nr} (a.u)
10000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45193 9
14000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 398
18000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40432
22000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40443

[7] D.T.Aznabayev, A.K Bekbaev, V.I. Korobov. **Phys. Rev. A.** – 2018. –Vol. 98. – P. 012510

Таб.2. Сравнение нерелятивистских энергий ионизации основного состояния атома гелия с другими авторами.
N - число базисных функций

Авторы (год)	N	Нерелятивистские энергии в атомных единицах
[8] Drake et al. (2002)	2358	-2.90372 43770 34119 598311
[9] Korobov (2002)	5200	-2.90372 43770 34119 59831 1159
[10] Schwartz (2006)	24099	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40444 66969 25310
[11] Nakashima, Nakatsuji (2007)	22709	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40444 66969
[12] This work	22000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40443

[8] G. W. F. Drake, **Phys. Rev. A.** –2002. – Vol 65. –P.054501.

[9] Korobov V.I. **Phys. Rev. A.** –2002. –Vol. 66. –P. 024501.

[10] C. Schwartz. arXiv:mathph/0605018. // **Int. J. Mod. Phys.** – 2006. – Vol. 15 – P. 2–15.

[11] H. Nakashima and H. Nakatsuji. **J. Chem. Phys.** – 2007. –Vol. 127. – P. 224104.

[12] D.T.Aznabayev, A.K Bekbaev, V.I. Korobov. **Phys. Rev. A.** – 2018. –Vol. 98. – P. 012510.

Nonrelativistic energy levels of helium atoms

Table 3.

Состояние	Базис (N)	E_{nr}
1 ¹ S	18000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40432
1 ¹ S	22000	-2.90372 43770 34119 59831 11592 45194 40443
2 ¹ S	18000	-2.14597 40460 54417 41580 50289 75461 918
2 ¹ S	22000	-2.14597 40460 54417 41580 50289 75461 921
	[13]	-2.14597 40460 5443(5)
2 ³ S	14000	-2.17522 93782 36791 30573 89782 78206 81124
2 ³ S	16000	-2.17522 93782 36791 30573 89782 78206 81125
	[13]	-2.17522 93782 367912(1)
2 ¹ P	18000	-2.12384 30864 98101 35924 73331 42354
2 ¹ P	22000	-2.12384 30864 98101 35924 73331 42374
	[13]	-2.12384 30864 98092(8)
2 ³ P	16000	-2.13316 41907 79283 20514 69927 63793
2 ³ P	18000	-2.13316 41907 79283 20514 69927 63806
	[13]	-2.13316 41907 7927(1)
3 ¹ S	18000	-2.06127 19897 40908 65074 03499 37089 2816
3 ¹ S	22000	-2.06127 19897 40908 65074 03499 37089 2824
3 ³ S	14000	-2.06868 90674 72457 19199 65329 11291 75048
3 ³ S	16000	-2.06868 90674 72457 19199 65329 11291 75049
3 ¹ P	18000	-2.05514 63620 91943 53692 83410 913
3 ¹ P	22000	-2.05514 63620 91943 53692 83410 921
	[13]	-2.05514 63620 9195(3)

[13] G.W.F. Drake and Zong-Chao Yan. Phys. Rev. A. – 1992. –Vol. 46. –P. 2378.

Nonrelativistic energy levels of helium atoms(*continuation...*)

Table 3.

Состояние	Базис (N)	E_{nr}
3^3P	18000	-2.05808 10842 74275 33134 26965 47197
3^3P	22000	-2.05808 10842 74275 33134 26965 47203
	[13]	-2.05808 10842 7428(4)
3^1D	18000	-2.05562 07328 52246 48939 00994 819
3^1D	22000	-2.05562 07328 52246 48939 00994 825
	[13]	-2.05562 07328 52245(6)
3^3D	18000	-2.05563 63094 53261 32711 49601 65840
3^3D	22000	-2.05563 63094 53261 32711 49601 65851
	[13]	-2.05563 63094 53261(4)
4^1S	14000	-2.03358 67170 30725 44743 92926 44363 64
4^1S	18000	-2.03358 67170 30725 44743 92926 44363 87
4^3S	14000	-2.03651 20830 98236 29958 03780 71617 853
4^3S	16000	-2.03651 20830 98236 29958 03780 71617 874
4^1P	18000	-2.03106 96504 50240 71475 89314 36090 3
4^1P	22000	-2.03106 96504 50240 71475 89314 36094 1
	[13]	-2.03106 96504 5024(3)
4^3P	18000	-2.03232 43542 96630 33195 38824 67087
4^3P	22000	-2.03232 43542 96630 33195 38824 67103
	[13]	-2.03232 43542 9662(2)
4^1D	22000	-2.03127 98461 78684 99621 39438 073
4^1D	26000	-2.03127 98461 78684 99621 39438 143

[13] G.W.F. Drake and Zong-Chao Yan. Phys. **Rev. A.** – 1992. –Vol. 46. –P. 2378.

- Предложен универсальный вариационный метод, основанный на "экспоненциальном" вариационном разложении. Показано, что этот метод дает наилучшие значения нерелятивистских уровней энергии для всех практически интересных физических систем.
- «Экспоненциальное» разложение позволяет получить для основного состояния атома гелия **35** значащих цифр, что более чем достаточно для прецизионной спектроскопии этого атома.
- Исследовалась сходимость вычисляемых уровней энергии для основного состояния, также для состояний с ненулевым угловым моментом в зависимости от числа базисных функций N . Это позволяет утверждать, что полученные значения энергии имеют точность **28-35** значащих цифр, в том числе для состояний с ненулевым угловым моментом. Сравнение с расчетами, полученными другими вариационными методами, показывает значительное превосходство предлагаемого подхода.

PHYSICAL REVIEW A **98**, 012510 (2018)

Nonrelativistic energy levels of helium atoms

D. T. Aznabaev,^{1,2,3} A. K. Bekbaev,^{1,4} and Vladimir I. Korobov^{1,5}

¹*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 141980, Russia*

²*The Institute of Nuclear Physics, Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, 050032 Almaty, Kazakhstan*

³*L.N. Gumilyov Eurasian National University, 010000 Astana, Kazakhstan*

⁴*Al-Farabi Kazakh National University, 050038 Almaty, Kazakhstan*

⁵*Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), 6 Miklukho-Maklaya St., Moscow 117198, Russia*



(Received 28 May 2018; published 24 July 2018)

$$\mathbf{H} = -\frac{1}{2} \left[\nabla_e^2 + \frac{1}{m_\mu} \nabla_\mu^2 + \frac{1}{m_N} \nabla_N^2 \right] + \frac{1}{r_{e\mu}} - \frac{2}{r_{eN}} - \frac{2}{r_{\mu N}} \quad (1)$$

$$r_{\mu N} = |\vec{r}_\mu - \vec{r}_N|,$$

$$r_{eN} = |\vec{r}_e - \vec{r}_N|,$$

$$r_{e\mu} = |\vec{r}_e - \vec{r}_\mu|,$$

$$m_\mu = 206.768262,$$

$$M_{3He^{2+}} = 5495.8852,$$

$$M_{4He^{2+}} = 7294.2996 m_e.$$

$$m_e \ll m_\mu \ll M_{He}$$

$$\psi(r_1, r_2, r_{12}) = \sum_n C_n e^{-\alpha_n r_1 - \beta_n r_2 - \gamma_n r_{12}}$$

$$\alpha_n = \left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1, \quad (2)$$

$$\beta_n = \left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\beta} \right] (B_2 - B_1) + B_1, \quad (3)$$

$$\gamma_n = \left[\frac{1}{2} n(n+1) \sqrt{p_\gamma} \right] (C_2 - C_1) + C_1.$$

CREMA (Charge Radius Experiment with Muonic Atoms).

Pohl R., Antognini A., Nez F., et al. The size of the proton // Nature (London, U.K.). –

2010. –Vol. 466. –P. 213–217.

Таб. 1. Нерелятивистская энергия ионизации атома мюонного гелия

N	${}^3\text{He}^{2+} \mu^- e^-$	${}^4\text{He}^{2+} \mu^- e^-$
2000	-399.042 336 832 862 534 827 027 433	- 402.637 263 035 135 454 018 960 573
2500	-399.042 336 832 862 534 827 039 305	- 402.637 263 035 135 454 018 972 984
3000	-399.042 336 832 862 534 827041 147	- 402.637 263 035 135 454 018 973 292
3500	-399.042 336 832 862 534 827 041 500	- 402.637 263 035 135 454 018 974 187
4000	-399.042 336 832 862 534 827 041 545	- 402.637 263 035 135 454 018 974 468
4500	-399.042 336 832 862 534 827 041 560	- 402.637 263 035 135 454 018 974 488

Таб. 2. Нерелятивистская энергия ионизации атома мюонного гелия [1]

N	${}^3\text{He}^{2+} \mu^- e^-$	${}^4\text{He}^{2+} \mu^- e^-$
10000	-399.042 336 832 862 534 827 041 568 448 6603	- 402.637 263 035 135 454 018 974 498 601 4674
12000	-399.042 336 832 862 534 827 041 568 448 7145	- 402.637 263 035 135 454 018 974 498 601 4894
14000	-399.042 336 832 862 534 827 041 568 448 7191	- 402.637 263 035 135 454 018 974 498 601 4911
16000	-399.042 336 832 862 534 827 041 568 448 7198	- 402.637 263 035 135 454 018 974 498 601 4914
18000	-399.042 336 832 862 534 827 041 568 448 7192	- 402.637 263 035 135 454 018 974 498 601 4914
20000	-399.042 336 832 862 534 827 041 568 449 8494	- 402.637 263 035 135 454 018 974 498 601 4914

[1] D.T. Aznabayev, A.K. Bekbaev, V.I. Korobov. **Physics of Particles and Nuclei Letters**. 2018, T.15, №3 (236-239).

$$H_{HFS} = -\frac{8\pi}{3} \mu_N \mu_\mu \delta(r_{N\mu}) - \frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_\mu \delta(r_{e\mu}) - \frac{8\pi}{3} \mu_N \mu_e \delta(r_{Ne}) \quad (4)$$

$$H_{HFS}(^4\text{He}) = -\frac{8\pi}{3} \mu_e \mu_\mu \langle \delta(r_{e\mu}) \rangle = E_1(s_e, s_\mu),$$

$$\text{где } E_1 = -4464.55(60) \text{ MHz}$$

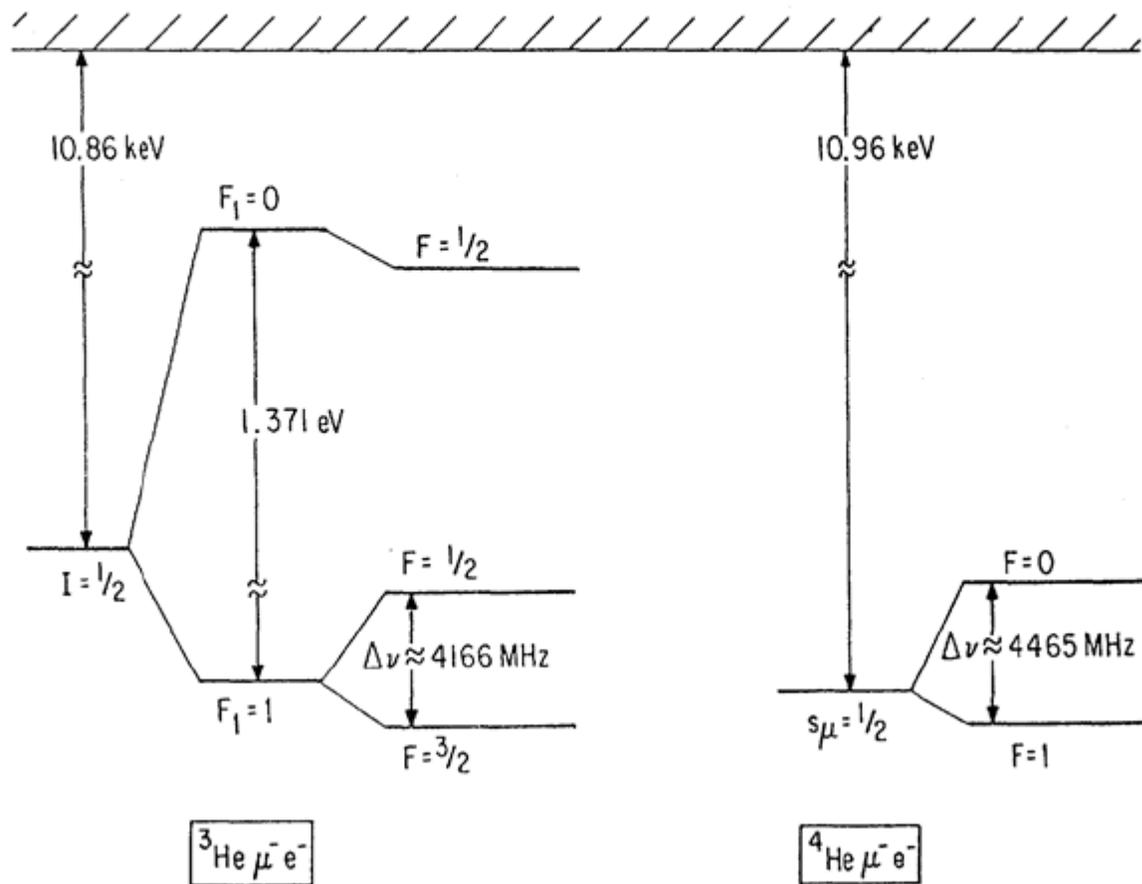
$$H_{HFS}(^3\text{He}) = E_1(s_e, s_\mu) + E_2(s_h, s_\mu) + E_3(s_h, s_e) \quad (5)$$

$$E_1 = -4463.44(24) \text{ MHz}, \quad E_2 = -331846. (16.) \text{ GHz}, \quad E_3 = -1091.750(58) \text{ MHz}$$

$$H_{HFS}(^3\text{He}) \delta\nu \left(\chi_{|1, \frac{3}{2}, -\frac{1}{2}} \right) = 4166.39(58) \text{ MHz}.$$

Keh-Ning Huang and Vernon W. Hughes "Theoretical hyperfine structure of the muonic ^3He and ^4He atoms".

Physical review A, volume 26, november 1982.



Таб. 4. Сходимость средних значений дельта-функций для различных пар частиц. N – базис используемых в расчетах [1]

N	${}^3\text{He}^{2+} \mu^- e^-$		${}^4\text{He}^{2+} \mu^- e^-$	
	$\langle \delta(r_{N\mu}) \rangle$	$\langle \delta(r_{Ne}) \rangle$	$\langle \delta(r_{\mu e}) \rangle$	$\langle \delta(r_{\mu e}) \rangle$
2000	20149938 845	0.32061155099	0.31368232001	0.31376053634
2500	20149938 845	0.32061155124	0.31368232001	0.31376053639
3000	20149938 845	0.32061155142	0.31368232000	0.31376053638
3500	20149938 845	0.32061155151	0.31368232000	0.31376053638
4000	20149938 845	0.32061155156	0.31368231999	0.31376053637
4500	20149938 845	0.32061155157	0.31368231999	0.31376053637

[1] D.T. Aznabayev, A.K. Bekbaev, V.I. Korobov. **Physics of Particles and Nuclei Letters**. 2018, T.15, №3 (236-239).

- Вычислены нерелятивистские уровни энергии ионизации для основного состояния атома мюонного гелия; Полученные значения энергии ионизации имеют точность **33** значащих цифр.
- Вычислены сверхтонкая структура атома мюонного гелия;

ISSN 1547-4771, Physics of Particles and Nuclei Letters, 2018, Vol. 15, No. 3, pp. 236–239. © Pleiades Publishing, Ltd., 2018.

PHYSICS OF ELEMENTARY PARTICLES
AND ATOMIC NUCLEI. THEORY

**The Hyperfine Structure of the Ground State
in the Muonic Helium Atoms¹**

D. T. Aznabayev^{a, b, c, *}, A. K. Bekbaev^{a, d, **}, and V. I. Korobov^{a, *}**

^a*Joint Institute for Nuclear Research, Dubna, Moscow oblast, 141980 Russia Federation*

^b*The Institute of Nuclear Physics, Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, Almaty, 050032 Kazakhstan*

^c*L. N. Gumilyov Eurasian National University, Astana, 010000 Republic of Kazakhstan*

^d*Al-Farabi Kazakh National University, Almaty, 050038 Republic of Kazakhstan*

Атомные часы важны в навигации. Определение положения космических кораблей, спутников, самолётов, подводных лодок, а также передвижение автомобилей в автоматическом режиме по спутниковой связи (GPS, ГЛОНАСС, Galileo) невозможны без атомных часов. Атомные часы используются также в системах спутниковой и наземной телекоммуникации, в том числе в базовых станциях мобильной связи, международными и национальными бюро стандартов и службами точного времени, которые периодически транслируют временные сигналы по радио.



FOCS 1, атомные часы в Швейцарии с погрешностью 10^{-15} , то есть не более секунды за 30 миллионов лет



«Высокоточные измерения всегда привлекали меня как одна из самых красивых сторон физики. Появление все более совершенных инструментов для измерения позволяет заглянуть в неизведанные области».

«Precision measurements have always appealed to me as one of the most beautiful aspects of physics. With better measuring tools, one can look where no one has looked before».

Pasion for Precision

Nobel Lecture by T.W. *Theodor Wolfgang Hänsch*

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!

- 1 Результаты работы имеют большое значение в метрологии, а именно для уточнения фундаментальных физических констант, в первую очередь для улучшения значения отношения массы электрона к протону, m_e/m_p .
- 2 Сверхточные расчеты имеют огромное значение для экспериментов по проверке изменений фундаментальных констант. Было предложено использовать молекулярные ионы водорода H_2^+ и HD^+ для реализации сверхточных часов. Это позволит создать реализацию молекулярных часов.
- 3 В ЦЕРНе проводятся эксперименты (эксперимент ASACUSA). Это группа ставит перед собой цели, недоступные прочим экспериментам. В нём физики собираются проводить, среди прочего, очень точные спектроскопические измерения антиводорода и сравнивать результаты с водородом. В случае обнаружения различия между уровнями энергии водорода и антиводорода эта находка станет революционным результатом для теоретической физики.

[1] S. Alighanbari, G. S. Giri, F. L. Constantin, **V. I. Korobov**, S. Schiller. Precise test of quantum electrodynamics and determination of fundamental constants with HD^+ ions. **Nature** V. 581, p.152–158. (2020).

[2] Z.-X. Zhong, P.-P. Zhang, Z.-C. Yan, and T.-Y. Shi, Precision spectroscopy of the hydrogen molecular ion HD^+ . **Phys. Rev. A** 86, 064502 (2012).

[3] T. Azuma, J.S. Bakos, H. Bluhme, et al. ASACUSA Collaboration, Atomic spectroscopy and collisions using slow antiprotons // CERN/SPSC. – Vol . 2. –2000 – P. 1–140;

$$E_{tr-ph}^{(2)} = \frac{\alpha^2 Z_1}{2m_e M_1} \left\langle \frac{p_e P_1}{r_1} + \frac{r_1 (r_1 p_e) P_1}{r_1^3} \right\rangle + \frac{\alpha^2 Z_2}{2m_e M_2} \left\langle \frac{p_e P_2}{r_2} + \frac{r_2 (r_2 p_e) P_2}{r_2^3} \right\rangle - \frac{\alpha^2 Z_1 Z_2}{2M_1 M_2} \left\langle \frac{P_1 P_2}{R} + \frac{R (R P_1) P_2}{R^3} \right\rangle \quad (21)$$

$$E_{kin} = \sqrt{m^2 + p^2} \approx m + \frac{p^2}{2m} + \dots \quad (22)$$

$$E_{kin}^{(2)} = -\alpha^2 \left\langle \frac{\mathbf{P}_1^4}{8M_1^3} + \frac{\mathbf{P}_2^4}{8M_2^3} \right\rangle$$

$$E_{Darwin}^{(2)} = \frac{\alpha^2 4\pi Z_p}{8M_p^2} \langle \delta(\mathbf{r}_p) \rangle, \quad (23)$$

$$E_{nuc}^{(2)} = \sum_{i=1,2} \frac{2\pi Z_i (R_i/a_0)^2}{3} \langle \delta(\mathbf{r}_i) \rangle$$

$$E_{\alpha^2} = E_{rc}^{(2)} + E_{kin}^{(2)} + E_{tr-ph}^{(2)} + E_{Darwin}^{(2)} + E_{nuc}^{(2)} \quad (24)$$

Ведущие релятивистские поправки. Основной вклад вносит релятивистская поправка в энергию связанного электрона,

$$E_{rc}^{(2)} = \alpha^2 \left\langle -\frac{\mathbf{p}_e^4}{8m_e^3} + \frac{4\pi}{8m_e^2} [Z_1\delta(\mathbf{r}_1) + Z_2\delta(\mathbf{r}_2)] \right\rangle. \quad (25)$$

Ведущие радиационные поправки

Радиационные поправки порядка $R_\infty\alpha^3$ для одноэлектронной молекулярной системы могут быть выражены следующей системой уравнений

Учитывается только спин-независимая часть. Однопетлевая поправка на собственную энергию ($R_\infty\alpha^3$),

$$E_{se}^{(3)} = \frac{4\alpha^3}{3m_e^2} \left(\ln \frac{1}{\alpha^2} - \beta(L, \nu) + \frac{5}{6} - \frac{3}{8} \right) \times \langle [Z_1\delta(\mathbf{r}_1) + Z_2\delta(\mathbf{r}_2)] \rangle$$

$$\beta(L, \nu) = \frac{\langle \mathbf{J}(H_0 - E_0) \ln // \mathbf{J} \rangle}{\langle [\mathbf{J}, [H_0, \mathbf{J}]] / 2 \rangle} \quad - \text{логарифм Бете} \quad (26)$$

$$\mathbf{J} = -\frac{\mathbf{p}_e}{m_e} + \frac{Z_1 \mathbf{P}_1}{M_1} + \frac{Z_2 \mathbf{P}_2}{M_2} \tag{27}$$

Аномальный магнитный момент ($R_\infty \alpha^3$) равен: $E_{\text{anom}}^{(3)} = \frac{\pi \alpha^2}{m_e^2} \left[\frac{1}{2} \left(\frac{\alpha}{\pi} \right) \right] \langle Z_1 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2 \delta(\mathbf{r}_2) \rangle .$ (28)

Однопетлевая поляризация вакуума ($R_\infty \alpha^3$) равна: $E_{\text{vp}}^{(3)} = \frac{4 \alpha^3}{3 m^2} \left[-\frac{1}{5} \right] \langle Z_1 \delta(\mathbf{r}_1) + Z_2 \delta(\mathbf{r}_2) \rangle .$ (29)

Обмен поперечным фотоном в порядке $\left[R_\infty \alpha^3 \left(\frac{m}{M} \right) \right]$ равен:

$$E_{\text{tr-ph}}^{(3)} = \alpha^3 \sum_{i=1,2} \left[\frac{2Z_i^2}{3m_e M_i} \left(-\ln \alpha - 4\beta(L, \nu) + \frac{31}{3} \right) \langle \delta(\mathbf{r}_i) \rangle - \frac{14Z_i^2}{3m_e M_i} Q(r_i) \right], \tag{30}$$

$$E_{\alpha^3} = E_{se}^{(3)} + E_{\text{anom}}^{(3)} + E_{\text{vp}}^{(3)} + E_{\text{tr-ph}}^{(3)} . \tag{31}$$

Таб.7 Сходимость среднего значения $\langle p_e^4 \rangle$ для колебательных состояний $v = 4$ и 10 в HD^+ для различных L [23]

	N	L=0	L=3
v= 4	8000	5.792 077 3804	5.765 200 6482
	10000	5.792 077 3799	5.765 200 6473
	12000	5.792 077 3798	5.765 200 6468
	14000	5.792 077 3798	5.765 200 6466
	∞	5.792 077 3798(1)	5.765 200 6465(1)
	Ref.[22]	5.792 077 379 5339(5)	5.765 200 6889(6)
v = 10	18000	5.276 903 8407	5.259 382 5408
	20000	5.276 903 8401	5.259 382 5364
	22000	5.276 903 8397	5.259 382 5339
	24000	5.276 903 8395	5.259 382 5328
	∞	5.276 903 8394(2)	5.259 382 5322(9)

Таб.8 Различные переходы в HD^+ (в кГц) вычислено с использованием улучшенных значений для элементов матрицы [23]

$(L, v) \rightarrow (L', v')$	HD^+	$u_r(v)$
$(0, 0) \rightarrow (1, 0)$	1 314 925 752.627(18)	1.35×10^{-11}
$(0, 0) \rightarrow (0, 1)$	57 350 154 373.6(5)	7.9×10^{-12}
$(0, 0) \rightarrow (1, 1)$	58 605 052 157.4(5)	8.1×10^{-12}
$(2, 0) \rightarrow (3, 4)$	214 978 560 967.2(1.5)	7.8×10^{-12}
$(2, 0) \rightarrow (3, 8)$	383 407 177 207.0(2.9)	7.6×10^{-12}
$(3, 0) \rightarrow (3, 9)$	415 264 925 467.0(3.1)	7.5×10^{-12}

[22] Z.-X. Zhong, P.-P. Zhang, Z.-C. Yan, and T.-Y. Shi. **Phys. Rev. A** 86, 064502 (2012).

[23] D.T. Aznabayev, A.K. Bekbaev, V.I. Korobov. **Phys. Rev. A** 99, 012501 (2019)

Таб.9 Средние значения различных операторов для колебательных состояний (L, ν) в молекулярном ионе H_2^+

L	ν	$\langle P_x^4 \rangle$	$\langle \delta(r_1) \rangle$	$\langle P_y^4 \rangle$	R_{px}	R_{py}	Q_{px}
$L = 0$	0	6.2856600594	0.20673647629	79.797649364	1.170117625	4.601934314	-0.1344262279
	1	6.1245198079	0.20131066471	334.89830216	1.140805227	12.89614650	-0.1312863754
	2	5.9762285601	0.19629458830	762.80369623	1.114077226	19.87898102	-0.1283925753
	3	5.8400118491	0.19166249726	1304.2092864	1.089801609	25.66162135	-0.1257315001
	4	5.7151984964	0.18739184669	1908.3716822	1.067868274	30.33829429	-0.1232916813
	5	5.6012112574	0.18346299199	2531.6173039	1.048187719	33.98804802	-0.1210633708
	6	5.4975592498	0.17985893910	3136.1167480	1.030690164	36.67618495	-0.1190384366
	7	5.4038319567	0.17656514348	3688.8844922	1.015325087	38.45539351	-0.1172102897
	8	5.3196946603	0.17356935365	4160.9753024	1.002061184	39.36661303	-0.1155738424
	9	5.2448852254	0.17086149709	4526.8597586	0.9908868010	39.43965837	-0.1141255007
10	5.1792121777	0.16843360820	4763.9728538	0.9818108626	38.69362778	-0.1128631936	
$L = 1$	0	6.2780390374	0.20649132016	85.050455667	1.168818664	4.834336475	-0.1342668169
	1	6.1173973078	0.20108117308	347.54872567	1.139597149	13.09529203	-0.1311369254
	2	5.9695793176	0.19607994205	780.92161614	1.112955682	20.04770789	-0.1282526561
	3	5.8338140029	0.19146198172	1326.1219910	1.088762926	25.80234570	-0.1256007425
	4	5.7094333595	0.18720484414	1932.6198442	1.066909426	30.45305169	-0.1231697745
	5	5.5958631574	0.18328897611	2556.9179839	1.047306308	34.07852553	-0.1209500612
	6	5.4926153921	0.17969747034	3161.3322085	1.029884418	36.74374470	-0.1189335254
	7	5.3992823972	0.17641586729	3712.9958575	1.014593872	38.50108793	-0.1171136355
	8	5.3155323072	0.17343199956	4183.0603098	1.001404040	39.39119123	-0.1154853623
	9	5.2411059278	0.17073588027	4546.0740115	0.9903039968	39.44356252	-0.1140451747
10	5.1758148732	0.16831963269	4779.5341125	0.9813034913	38.67697691	-0.1127910691	
$L = 2$	0	6.2629099578	0.20600454283	96.910905201	1.166239007	5.293427390	-0.1339504598
	1	6.1032596294	0.20062554856	373.99761897	1.137198302	13.48828656	-0.1308403800
	2	5.9563828602	0.19565384281	818.12463975	1.110729011	20.38024874	-0.1279750672
	3	5.8215153662	0.19106398834	1370.7553673	1.086701150	26.07923567	-0.1253413771
	4	5.6979954729	0.18683373048	1981.7828915	1.065006550	30.67833547	-0.1229280161
	5	5.5852549395	0.18294369775	2608.0596187	1.045557594	34.25555325	-0.1207254060
	6	5.4828115576	0.17937715716	3212.1889678	1.028286377	36.87521850	-0.1187255828
	7	5.3902633187	0.17611981800	3761.5395264	1.013144294	38.58909168	-0.1169221266
	8	5.3072840707	0.17315968126	4227.4536463	1.000102065	39.43720246	-0.1153101265
	9	5.2336204946	0.17048693110	4584.6333862	0.9891502316	39.44844397	-0.1138861763
10	5.1690904704	0.16809387031	4810.6981087	0.9803002006	38.64094245	-0.1126484120	

Таб.9. (Продолжение...)

$L = 3$	0	6.2404943312	0.20528307706	117.97635160	1.162414502	5.968061524	-0.1334819874
	1	6.0823171617	0.19995037649	416.43490453	1.133642648	14.06480756	-0.1304013519
	2	5.9368391490	0.19502254993	876.24662762	1.107429423	20.86703769	-0.1275642145
	3	5.8033061164	0.19047447029	1439.6301087	1.083646859	26.48342299	-0.1249576135
	4	5.6810658304	0.18628417107	2057.1039760	1.062188713	31.00592204	-0.1225704294
	5	5.5695590038	0.18243255228	2686.0371498	1.042969244	34.51150425	-0.1203932534
	6	5.4683120665	0.17890314079	3289.4575739	1.025922422	37.06353165	-0.1184182891
	7	5.3769315140	0.17568189914	3835.0805572	1.011001564	38.71284003	-0.1166392866
	8	5.2950997615	0.17275708064	4294.5293028	0.9981794217	39.49855014	-0.1150515119
	9	5.2225723483	0.17011912691	4642.7309921	0.9874487559	39.44863056	-0.1136517483
10	5.1591765901	0.16776061086	4857.4830325	0.9788234896	38.58022733	-0.1124383412	
$L = 4$	0	6.2111137341	0.20433699022	151.87439790	1.157397265	6.842198150	-0.1328684048
	1	6.0548751988	0.19906521543	477.89237049	1.128979542	14.81002209	-0.1298265267
	2	5.9112382325	0.19419514510	957.79934933	1.103103711	21.49435017	-0.1270264811
	3	5.7794620170	0.18970206193	1534.8012769	1.079644470	27.00220305	-0.1244555480
	4	5.6589068100	0.18556438053	2160.2340467	1.058498128	31.42404737	-0.1221028394
	5	5.5490251876	0.18176336040	2792.1407251	1.039581440	34.83548285	-0.1199591710
	6	5.4493550513	0.17828287309	3394.1025379	1.022830872	37.29858981	-0.1180169703
	7	5.3595142132	0.17510921788	3934.2857135	0.1008202311	38.86297608	-0.1162702141
	8	5.2791965306	0.17223098447	4384.6775195	0.9956712337	39.56655122	-0.1147144056
	9	5.2081694237	0.16963895903	4720.4954258	0.9852333961	39.43604596	-0.1133465831
10	5.1462729334	0.16732607784	4919.7643085	0.9769061357	38.48728563	-0.1121653755	

Таб.10. Средние значения операторов для HD⁺

ν	$\langle \delta(\mathbf{r}_d) \rangle$	$\langle \delta(\mathbf{r}_p) \rangle$	$\langle p_d^4 \rangle$	$\langle p_p^4 \rangle$	$\langle P_d^4 \rangle$	
$L = 0$	0	0.20734814178	0.20704259948	6.3001999477	104.37171376	104.44384898
	1	0.20260117861	0.20228886474	6.1590223524	449.45675982	449.73914662
	2	0.19816679513	0.19784583748	6.0276143229	1042.8168322	1043.4433174
	3	0.19402784139	0.19369601393	5.9054534327	1812.9975669	1814.0632379
	4	0.19016909090	0.18982370286	5.7920773798	2697.6692759	2699.2354173
	5	0.18657710159	0.18621484444	5.6870790520	3642.2321785	3644.3304724
	6	0.18324011137	0.18285684358	5.5901023863	4598.6380478	4601.2741340
	7	0.18014797184	0.17973840936	5.5008389477	5524.3976372	5527.5541366
	8	0.17729212821	0.17684938788	5.4190251466	6381.7503195	6385.3894083
	9	0.17466566245	0.17418056963	5.3444400643	7136.9787737	7141.0443898
	10	0.17226343214	0.17172343636	5.2769038394	7759.8577177	7764.2774745
$L = 1$	0	0.20716324168	0.20685769957	6.2944507461	110.38493989	110.46133144
	1	0.20242655717	0.20211421221	6.1535997460	464.36193851	464.65338756
	2	0.19800198124	0.19768095602	6.0225036793	1064.6241336	1065.2634075
	3	0.19387241680	0.19354047839	5.9006418101	1839.9516894	1841.0329235
	4	0.19002268724	0.18967713562	5.7875534291	2728.2144184	2729.7980540
	5	0.18643939814	0.18607691220	5.6828329367	3674.9819497	3677.0989179
	6	0.18311083326	0.18272725426	5.5861257049	4632.3495498	4635.0048177
	7	0.18002688970	0.17961690940	5.4971246933	5557.9490993	5561.1246812
	8	0.17717905975	0.17673576024	5.4155677242	6414.1217749	6417.7792967
	9	0.17456047384	0.17407462955	5.3412352361	7167.2353693	7171.3182658
	10	0.17216604459	0.17162502783	5.2739488088	7787.1353273	7791.5707486
$L = 2$	0	0.20679544434	0.20648990098	6.2830163299	123.79001421	123.87565882
	1	0.20207923036	0.20176682151	6.1428157396	495.36790199	495.67811676
	2	0.19767418733	0.19735302514	6.0123409636	1109.2715320	1109.9369362
	3	0.19356332376	0.19323116142	5.8910746483	1894.7472178	1895.8600523
	4	0.18973156234	0.18938568123	5.7785592512	2790.0612338	2791.6802614
	5	0.18616560334	0.18580265714	5.6743921721	3741.1197981	3743.2744544
	6	0.18285382284	0.18246961801	5.5782216799	4700.3031879	4702.9971004
	7	0.17978620914	0.17937538868	5.4897435379	5625.4837721	5628.6977473
	8	0.17695434714	0.17650992330	5.4086983151	6479.2047371	6482.8993039
	9	0.17435146623	0.17386411066	5.3348692560	7228.0026311	7232.1202214
	10	0.17197258810	0.17142951724	5.2680807597	7841.8629641	7846.3298040

Таб.10. (Продолжение...)

$L = 3$	0	0.20624869702	0.20594314769	6.2660227900	147.25876390	147.36009301
	1	0.20156297374	0.20125046479	6.1267909226	544.78450154	545.12442395
	2	0.19718702656	0.19686565434	5.9972415658	1178.7470290	1179.4529692
	3	0.19310402154	0.19277151828	5.8768624098	1979.0846625	1980.2460433
	4	0.18929902981	0.18895264869	5.7652006466	2884.6520623	2886.3251483
	5	0.18575889338	0.18539524983	5.6618581670	3841.8547847	3844.0667859
	6	0.18247212603	0.18208697377	5.5664875531	4803.4957133	4806.2482620
	7	0.17942885267	0.17901676065	5.4787887613	5727.8035584	5731.0756611
	8	0.17662079781	0.17617467198	5.3985065094	6577.6205427	6581.3710932
	9	0.17404133892	0.17355169431	5.3254282095	7319.7326808	7323.9026143
	10	0.17168566289	0.17113947797	5.2593825328	7924.3321151	7928.8462782
$L = 4$	0	0.20552877799	0.20522321313	6.2436546662	184.59247486	184.71796048
	1	0.20088331252	0.20057066224	6.1057017312	615.88018454	616.26250830
	2	0.19654578490	0.19622412424	5.9773742631	1275.8456943	1276.6080718
	3	0.19249956988	0.19216660270	5.8581666316	2095.3366407	2096.5647803
	4	0.18872993534	0.18838287675	5.7476323025	3013.9805344	3015.7274073
	5	0.18522391134	0.18485932503	5.6453791232	3978.8384624	3981.1283423
	6	0.18197019460	0.18158376287	5.5510654021	4943.2676976	4946.0995834
	7	0.17895909192	0.17854528318	5.4643966701	5865.9639410	5869.3144615
	8	0.17618251410	0.17573408983	5.3851231705	6710.1607564	6713.9866433
	9	0.17363403687	0.17314129869	5.3130378763	7442.9699688	7447.2101770
	10	0.17130906936	0.17075867070	5.2479751736	8034.8527748	8039.4303232

Leading-order relativistic corrections to the rovibrational spectrum of H_2^+ and HD^+ molecular ions

D. T. Aznabayev,^{1,2,3} A. K. Bekbaev,^{1,4} and Vladimir I. Korobov^{1,5}

¹*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 141980, Russia*

²*The Institute of Nuclear Physics, Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, 050032 Almaty, Kazakhstan*

³*L. N. Gumilyov Eurasian National University, 010000 Astana, Kazakhstan*

⁴*Al-Farabi Kazakh National University, 050038 Almaty, Kazakhstan*

⁵*Peoples' Friendship University of Russia (RUDN University), 6 Miklukho-Maklaya St., Moscow 117198, Russia*

Magnetic dipole transitions in the H_2^+ ion

D. T. Aznabayev^{1,2,3}, A. K. Bekbaev^{2,3} and Vladimir I. Korobov¹

¹*Bogoliubov Laboratory of Theoretical Physics, Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 141980, Russia*

²*The Institute of Nuclear Physics, Ministry of Energy of the Republic of Kazakhstan, 050032 Almaty, Kazakhstan*

³*Al-Farabi Kazakh National University, 050038 Almaty, Kazakhstan*

$$H = -\frac{1}{2\mu_1}\nabla_{r_1}^2 - \frac{1}{2\mu_2}\nabla_{r_2}^2 - \frac{1}{M}\nabla_{r_1} \cdot \nabla_{r_2} - \frac{Z}{r_1} - \frac{Z}{r_2} + \frac{1}{r_{12}}, \quad (1)$$

M is a mass of helium nucleus, and $Z = 2$ is the nuclear charge.

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1, \quad \mu_1 = Mm_1/(M + m_1), \quad \mu_2 = Mm_2/(M + m_2) \quad (2)$$

$$M = m_{\text{He}} = 5495.8852754m_e \text{ and } m_{\text{K}^-} = 966.11m_e.$$

$$m_2 = m_e = 1.$$

$$m_1 = m_{\text{K}^-}$$

$$L = l, \quad v = n - l - 1. \quad (3)$$

$$\Psi_L(l_1, l_2) = \sum_{k=1}^{\infty} \left\{ U_k \operatorname{Re}[e^{-\alpha_k r_1 - \beta_k r_2 - \gamma_k r_{12}}] + W_k \operatorname{Im}[e^{-\alpha_k R - \beta_k r_1 - \gamma_k r_2}] \right\} \mathcal{Y}_{LM}^{l_1, l_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2), \quad (4)$$

$$\mathcal{Y}_{LM}^{l_1, l_2}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = r_1^{l_1} r_2^{l_2} \{Y_{l_1} \otimes Y_{l_2}\}_{LM},$$

$$\alpha_k = \left[\left[\frac{1}{2} k(k+1) \sqrt{p_\alpha} \right] (A_2 - A_1) + A_1 \right] + i \left[\left[\frac{1}{2} k(k+1) \sqrt{q_\alpha} \right] (A'_2 - A'_1) + A'_1 \right], \quad (5)$$

$$V_p = -\boldsymbol{\mathcal{E}} \cdot \mathbf{d}, \quad \mathbf{d} = e(Z \mathbf{R}_{\text{He}} - \mathbf{R}_{\text{K}^-} - \mathbf{R}_e), \quad (6)$$

$$\begin{aligned} E_p^{(2)} &= \langle \Psi_0 | V_p (E_0 - H_0)^{-1} V_p | \Psi_0 \rangle \\ &= E^i E^j \langle \Psi_0 | d^i (E_0 - H_0)^{-1} d^j | \Psi_0 \rangle = -\frac{1}{2} \alpha_d^{ij} \mathcal{E}^i \mathcal{E}^j, \end{aligned} \quad (7)$$

$$\alpha_d^{ij} = -2 \langle \Psi_0 | d^i (E_0 - H_0)^{-1} d^j | \Psi_0 \rangle. \quad (8)$$

$$\begin{aligned} a_+ &= \frac{2}{2L+1} \sum_n \frac{\langle 0L \| \mathbf{d} \| n(L+1) \rangle \langle n(L+1) \| \mathbf{d} \| 0L \rangle}{E_0 - E_n}, \\ a_0 &= -\frac{2}{2L+1} \sum_n \frac{\langle 0L \| \mathbf{d} \| nL \rangle \langle nL \| \mathbf{d} \| 0L \rangle}{E_0 - E_n}, \\ a_- &= \frac{2}{2L+1} \sum_n \frac{\langle 0L \| \mathbf{d} \| n(L-1) \rangle \langle n(L-1) \| \mathbf{d} \| 0L \rangle}{E_0 - E_n}. \end{aligned} \quad (9)$$

$$\alpha_d^{ij} = \alpha_s + \alpha_t \left[L^i L^j + L^j L^i - \frac{2}{3} \mathbf{L}^2 \right], \quad (10)$$

TABLE I: Nonrelativistic energies E_{nr} (in a.u.), Auger widths Γ (in a.u.), scalar α_s and tensor α_t polarizabilities for the ${}^4\text{He}^+K^-$ atom.

state	E_{nr}	$\Gamma/2$	α_s	$\alpha_t \times 10^3$
(25, 23)	-3.4024865(2)	$2.56 \cdot 10^{-5}$	$3.58576 + i 0.33877$	$-1.39927 - i 0.51535$
(26, 24)	-3.38789866633(1)	$3.11 \cdot 10^{-9}$	$-1.59291 + i 1.69676$	$0.41197 - i 2.37835$
(26, 25)	-3.20622306613(1)	$4.3 \cdot 10^{-10}$	$1.34155 + i 0.00028$	$0.43132 - i 0.00035$
(27, 25)	-3.06540046242(1)	$7.97 \cdot 10^{-9}$	$1.02953 + i 0.00023$	$0.64852 - i 0.00026$
(28, 25)	-2.946595302(3)	$4.950 \cdot 10^{-6}$	$1.25817 - i 0.65030$	$0.48307 + i 0.62204$
(28, 26)	-2.931443594442(1)	$6.54 \cdot 10^{-10}$	$0.75587 + i 0.00060$	$0.72171 - i 0.00068$
(29, 25)	-2.8455617(1)	$6.98 \cdot 10^{-5}$	$-1.77316 + i 2.66409$	$25.7724 - i 8.44617$
(29, 26)	-2.83199839979(1)	$5.54 \cdot 10^{-9}$	$0.43025 + i 0.00028$	$1.07217 - i 0.00030$
(30, 26)	-2.7482558446(1)	$3.4 \cdot 10^{-9}$	$-641.028 + i 93.375$	$584.298 - i 77.294$
(30, 27)	-2.734026229098(2)	$2.34 \cdot 10^{-10}$	$0.14811 + i 0.00028$	$1.22025 - i 0.00028$
(31, 27)	-2.66443660325(1)	$1.21 \cdot 10^{-9}$	$-0.09273 + i 0.00771$	$1.66610 - i 0.00808$

where

$$\alpha_s = \frac{1}{3}[a_+ + a_0 + a_-],$$

$$\alpha_t = -\frac{a_+}{2(L+1)(2L+3)} + \frac{a_0}{2L(L+1)} - \frac{a_-}{2L(2L-1)}.$$

Обобщенная симметричная задача на собственные значения

Задача

$$Ax = \lambda Bx$$

где A — симметричная, а B — симметричная положительно определенная матрицы, называется *обобщенной симметричной задачей на собственные значения*.

Используя разложение матрицы $B = L \cdot L^T$ задача сводится к стандартной симметричной задаче на собственные значения:

$$A'y = \lambda y,$$

$$A' = L^{-1}AL^{-T}, \quad x = L^T y.$$

Метод обратной итерации

Если требуется одно собственное значение (собственный вектор), то эффективным методом решения может стать *метод обратной итерации*

$$(A - \mu)x_k^{(n+1)} = s^{(n)}x_k^{(n)}$$

где скалярный множитель $s^{(n)}$ выбирается так, чтобы $\|x_k^{(n+1)}\| = 1$.

Если μ близко к точному собственному значению λ_k , то последовательность $x_k^{(n)}$ быстро сходится к точному значению вектора x_k , а $\lambda_k^{(n)} = (x_k^{(n)}, Ax_k^{(n)})$ — к точному значению λ_k .

Чтобы показать это, можно без ограничения общности считать, что матрица A — диагональная, тогда решение можно выписать в явном виде:

$$x_k^{(n)} = c_n \left(\left(\frac{\lambda_k - \mu}{\lambda_1 - \mu} \right)^n u_1, \dots, u_k, \dots, \left(\frac{\lambda_k - \mu}{\lambda_n - \mu} \right)^n u_n \right)^T$$