

А.Д. Быков, Т.В. Круглова

О некоторых свойствах обобщенного преобразования Эйлера рядов в применении к колебательно-вращательным уровням энергии молекул

Институт оптики атмосферы СО РАН, г. Томск

Поступила в редакцию 23.05.2006 г.

Рассматриваются свойства обобщенного преобразования Эйлера (GET), такие как возможность получения точного значения суммы ряда, сходимость преобразованного ряда, его новые представления. Приводятся некоторые критерии сходимости преобразованного ряда, и устанавливаются условия, при которых метод Эйлера дает конечное выражение для суммы ряда. Анализируются свойства преобразованного ряда для случая, когда в качестве нулевого приближения в GET используются известные аппроксиманты Паде, Паде–Бореля или Паде–Эрмита, а также различные способы параметризации коэффициентов преобразованного ряда. В заключение статьи приводятся результаты тестирования метода на примере точно решаемой квантово-механической задачи осциллятора Кратцера.

Введение

Расчеты уровней энергии высоковозбужденных состояний молекул методом эффективного вращательного гамильтониана требуют применения методов суммирования рядов. Как известно, ряды, представляющие собой матричные элементы эффективного вращательного гамильтониана, расходятся для больших значений квантовых чисел углового момента [1–10]. Ранее (см., например, [1–22]) были предложены различные способы суммирования, позволившие улучшить расчеты для высоковозбужденных состояний. Однако появление новых экспериментальных данных об уровнях высокоэнергетических состояний ряда молекул, например H_2O , H_2S , H_3^+ и т.д., требует создания и применения новых расчетных методов, учитывающих плохую сходимость рядов.

В данной статье рассматриваются некоторые свойства обобщенного преобразования Эйлера (GET) [23, 24], такие как возможность получения точного значения суммы ряда, сходимость преобразованного ряда, его новые представления. Преобразование Эйлера ранее успешно применялось для суммирования рядов в некоторых квантово-механических задачах, например для вычисления уровней энергии ангармонического осциллятора, расчетов эффекта Штарка и Зеемана для атома водорода, суммирования $1/Z$ -разложения в теории атомов (см., например, [24, 25]). Метод также применялся и для вычисления КВ-уровней энергии молекулы H_2O [15] и радикала CH_2 [16], двухатомных молекул [26, 27]. Краткое описание метода GET дано в данной статье.

Одно из важнейших свойств метода Эйлера — это то, что он является регуляризирующим [23], т.е. метод

дает правильные значения сумм для сходящихся рядов. Такое свойство у других методов, например Паде, не наблюдалось. Необходимо отметить, что GET не дает каких-либо сведений о сходимости преобразованного ряда. Сходимость в любом методе суммирования является критически важным моментом, в случае его расходимости невозможно получить определенный результат. Тем не менее в большинстве работ, посвященных применению методов суммирования расходящихся рядов при вычислении колебательно-вращательных уровней энергии, не приводятся какие-либо аргументы в пользу сходимости. Поэтому указаны некоторые критерии сходимости преобразованного ряда и установлены условия, при которых метод Эйлера дает конечное выражение для суммы.

Рассмотрены свойства преобразованного ряда для случая, когда в качестве нулевого приближения в GET используются известные аппроксиманты Паде, Паде–Бореля или Паде–Эрмита, а также различные способы параметризации коэффициентов преобразованного ряда, и приведены результаты тестирования метода на примере точно решаемой квантово-механической задачи об осцилляторе Кратцера.

1. Обобщенное преобразование Эйлера

В данном разделе для удобства кратко приводятся основные соотношения метода GET [24]. 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

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

Аппроксимирующая функция может быть использована для преобразования ряда следующим образом. Добавим к правой части (1) аппроксимант и вычтем его, но в виде ряда. Затем добавим величину $z \frac{dg(z)}{dz}$ и вычтем ее также в виде ряда. Повторяя эту процедуру, можно исключить все степенные выражения из правой части (1) и превратить, таким образом, ряд (1) в функциональный. Преобразованный ряд имеет вид

$$f(z) = \sum_{n=0}^{\infty} D_n \Phi_n(z); \quad \Phi_n(z) = (-1)^n \frac{z^n}{n!} \frac{d^n g(z)}{dz^n}; \quad (3)$$

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

Указанные здесь преобразования являются формально тождественными, и преобразованное выражение при разложении в ряд Тейлора возвращает исходный ряд (1). Это выражение и называется «суммой ряда».

2. Условия сходимости преобразованного ряда

Интуитивно понятно, что если аппроксимант выбран «правильно», так что коэффициенты тейлоровских разложений $f(z)$ и $g(z)$ в каком-то смысле подобны, то «новый» ряд (3) должен иметь лучшие свойства, чем исходный, т.е. он должен сходиться

быстрее в силу соотношения $\sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} = 0$. Однако желательно иметь более определенные условия сходимости. Мы укажем на два таких необходимых условия.

1) Если при $z \leq z_0$

$$\left| D_n \frac{d^n g(z)}{dz^n} \right| \leq AB^n, \quad (4)$$

то ряд (3) сходится в указанной области.

Действительно,

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n D_n \frac{z^n}{n!} \frac{d^n g(z)}{dz^n} \leq \sum_{n=0}^{\infty} \left| D_n \frac{d^n g(z)}{dz^n} \right| \frac{z^n}{n!} \leq A \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(Bz)^n}{n!} = A \exp(Bz). \quad (5)$$

Поскольку последний ряд сходится при любом z , то, очевидно, сходится и преобразованный ряд при $z \leq z_0$.

Таким образом, если производные аппроксиманта и коэффициенты $a_n = f_n / g_n$, рассматриваемые

как функции индекса n , возрастают с ростом n не быстрее, чем по экспоненциальному закону, то преобразованный по Эйлеру ряд сходится.

2) Если при $z \leq z_0$

$$\left| D_n \frac{d^n g(z)}{dz^n} \right| \leq AB^n n!, \quad (6)$$

то радиус сходимости (3) $z \leq \min\{z_0, 1/B\}$.

Докажем это:

$$\sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n D_n \frac{z^n}{n!} \frac{d^n g(z)}{dz^n} \leq \sum_{n=0}^{\infty} \left| D_n \frac{d^n g(z)}{dz^n} \right| \frac{z^n}{n!} \leq A \sum_{n=0}^{\infty} (Bz)^n = \frac{A}{1-Bz}. \quad (7)$$

Поскольку последний ряд сходится при $|z| \leq 1/B$, то отсюда и следует приведенная выше оценка.

Аппроксимирующая функция $g(z)$ может быть выбрана различными способами. Как следствие, величины $a_r = f_r / g_r$ могут иметь различную зависимость от r . Полезно ввести оценки коэффициентов преобразованного ряда, предполагая определенную зависимость отношений $a_r = f_r / g_r$ от индекса r . Это поможет установить некоторые критерии, определяющие «качество» аппроксиманта, и дать удобную параметризацию преобразованного ряда. Здесь необходимо отметить, что оценки коэффициентов f_r исходного ряда теории возмущения (ТВ) могут быть получены стандартным образом, на основе квазиклассического подхода, описанного, например, в [28]. С другой стороны, получить коэффициенты разложения аппроксиманта g_r в ряд Тейлора не представляет труда. Однако сначала установим следующий факт.

3) Если аппроксимирующая функция $g(z)$ выбрана так, что

$$f_r / g_r = a_r = \alpha_0 + \alpha_1 r + \alpha_2 r^2 + \dots + \alpha_K r^K, \quad (8)$$

то GET дает конечное выражение для суммы ряда. Действительно, в этом случае

$$D_n = \sum_{i=0}^K \alpha_i \sum_{r=0}^n (-1)^r r^i \binom{n}{r}. \quad (9)$$

Поскольку

$$\sum_{r=0}^n (-1)^r r^m \binom{n}{r} = 0 \quad \text{при } m < n,$$

то все коэффициенты D_n , $n > K$ обращаются в нуль. При выполнении (8) обобщенное преобразование Эйлера дает для суммы ряда конечное выражение

$$f(z) = g(z) a_0 + \sum_{n=1}^K (-1)^n D_n \frac{z^n}{n!} \frac{d^n g(z)}{dz^n}, \quad (10)$$

где

$$D_n = \sum_{i=0}^{K-n} \alpha_{n+i} \sum_{r=0}^n (-1)^r r^{n+i} \binom{n}{r}, \quad (11)$$

и ряд суммируется точно. Таким образом, аппроксимант может быть выбран так, чтобы только качественно воспроизводить производные исходной функции f_r , они должны быть примерно пропорциональны, тогда GET дает конечное выражение для суммы ряда. При этом различие в величине исходной функции и аппроксиманта может быть произвольным и достаточно большим. Это свойство GET весьма полезно, так как позволяет использовать «грубые» приближения, если только отношение f_r/g_r не меняется с ростом индекса r слишком быстро.

3. Преобразованный ряд

В методе эффективных гамильтонианов обычно известно только несколько первых членов исходного разложения (1) (т.е. коэффициенты f_r , $r = 0, \dots, N$), которые определяются подгонкой к экспериментальным уровням энергии или частотам переходов. Поэтому весьма полезно рассмотреть различные способы аппроксимации отношений $a_r = f_r/g_r$, чтобы получить новые представления для матричных эффективных гамильтонианов, содержащие новые подгоночные параметры.

В конкретных расчетах, особенно для легких жестких молекул, имеющих малые моменты инерции, используются аппроксимации Паде [2], Паде–Бореля [6] или производящие функции [10]. Эти аппроксиманты определяются таким образом, чтобы точно воспроизводить N первых коэффициентов $f_0, f_1, f_2, \dots, f_N$ исходного разложения (1). При использовании этих аппроксимантов в качестве нулевого приближения в методе Эйлера преобразованный ряд упрощается. Действительно, поскольку

$$g_0 = f_0, g_1 = f_1, \dots, g_N = f_N,$$

то

$$D_n = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} \frac{f_r}{g_r} = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} = \delta_{n,0}, \quad n \leq N \quad (12)$$

и преобразованный ряд (3) имеет вид

$$f(z) = g(z) + (-1)^{N+1} D_{N+1} \Phi_{N+1}(z) \times \left\{ 1 + \sum_{n=N+2}^{\infty} (-1)^{n-N-1} \tilde{D}_n \tilde{\Phi}_n(z) \right\}, \quad (13)$$

где

$$\begin{aligned} \tilde{D}_n &= D_n / D_{N+1}; \\ \tilde{\Phi}_n(z) &= \Phi_n(z) / \Phi_{N+1}(z) = \\ &= z^{n-N-1} \frac{(N+1)!}{n!} \frac{d^n g(z)}{dz^n} \Big/ \frac{d^{N+1} g(z)}{dz^{N+1}}. \end{aligned} \quad (14)$$

Выражения для коэффициентов D_n преобразованного ряда также упрощаются.

В (13) первое слагаемое $g(z)$ есть аппроксимант, т.е. приближенное выражение для колеба-

тельно-вращательной энергии. Второе слагаемое представляет собой поправки к этому приближению, следующие из преобразования Эйлера. Коэффициенты ряда в фигурных скобках зависят от неизвестных параметров $f_{N+1}/g_{N+1}, f_{N+2}/g_{N+2}, \dots$, и желательно, используя определенные оценки этих отношений, провести новую параметризацию преобразованного ряда, имея в виду подгонку параметров нового представления ряда к экспериментальным данным. Очевидно, это может улучшить расчеты колебательно-вращательных уровней энергии.

Рассмотрим следующую параметризацию величин $a_r = f_r/g_r$:

$$a_r = f_r/g_r = \omega(r) \sum_{i=0}^K \frac{\gamma_i}{(r+1)^i}. \quad (15)$$

Здесь $\omega(r)$ – «главная» часть отношений коэффициентов суммируемого ряда и аппроксиманта (которая предполагается известной); γ_i – некоторые коэффициенты. В этом случае коэффициенты D_n преобразованного ряда представляются в виде

$$D_n = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} \omega(r) \sum_{i=0}^K \frac{\gamma_i}{(r+1)^i} = \sum_{i=0}^K \gamma_i T_i^n, \quad (16)$$

где

$$T_i^n = \sum_{r=0}^n (-1)^r \binom{n}{r} \frac{\omega(r)}{(r+1)^i}. \quad (17)$$

Теперь преобразованный ряд представляется в виде

$$f(z) = \sum_{i=0}^K \gamma_i \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n T_i^n \Phi_n(z). \quad (18)$$

Таким образом, мы получили новое представление преобразованного ряда, в котором введены новые параметры γ_i . Такой подход является некоторым аналогом метода суммирования, известного как «нелинейные преобразования последовательностей» [29]. В этом методе остаток при оценках суммы ряда представляется также в виде (12).

В методе эффективных гамильтонианов суммируемые ряды (т.е. в нашем случае $f(z)$) представляют собой матричные элементы. Например, для молекул типа воды наиболее важная часть суммируемых рядов – это так называемая J_z -последовательность [9], включающая вращательную постоянную A и постоянные центробежного искажения $\Delta_k, \Delta_{jk}, \Delta_j, H_k$ и т.д. Для определения $\omega(r)$ в этом случае можно взять r -й член разложения производящей функции $G = (2/\alpha) \left\{ \sqrt{1 + \alpha J_z^2} - 1 \right\}$ в ряд Тейлора. При этом параметры γ_i можно рассматривать как величины, определяемые подгонкой к экспериментальным значениям уровней энергии. Таким образом, использование приближений вида (15) позволяет ввести новую параметризацию в эффективном гамильтониане.

Рассмотрим далее некоторые наиболее простые случаи.

Экспоненциальная аппроксимация. Если аппроксимирующая функция выбрана так, что

$$\begin{aligned} f_r/g_r = a_r = \beta^r \left\{ \gamma_0 + \frac{\gamma_1}{r+1} + \dots + \frac{\gamma_K}{(r+1)^K} \right\} = \\ = \beta^r \sum_{i=0}^K \frac{\gamma_i}{(r+1)^i}, \quad \omega(r) = \beta^r, \end{aligned} \quad (19)$$

то коэффициенты преобразованного ряда упрощаются. Здесь предполагается, что при больших r различие между коэффициентами разложения аппроксиманта и исходного ряда становится близким к $\gamma_0\beta^r$ при возрастании r . Воспользуемся соотношениями [31]:

$$\sum_{r=0}^n \binom{n}{r} (\pm x)^r = (1 \pm x)^n, \quad (20)$$

$$\sum_{r=0}^n \frac{(\pm 1)^r}{r+a} \binom{n}{r} x^r = x^{-a} \int_0^x t^{a-1} (1 \pm t)^n dt = Q(x, a, n), \quad (21)$$

$$a \neq 0, -1, -2, \dots$$

Тогда получим

$$\begin{aligned} T_0^n &= (1 - \beta)^n, \\ T_1^n &= Q(\beta, 1, n), \\ T_i^n &= \frac{(-1)^{i-1}}{(i-1)!} \frac{d^{i-1}}{da^{i-1}} Q(\beta, a, n) \Big|_{a=1}. \end{aligned} \quad (22)$$

Факториальная аппроксимация. Предположим теперь, что различие между коэффициентами аппроксиманта и исходного ряда определяется факториальной функцией

$$\begin{aligned} f_r/g_r = a_r = \beta^r r! \left\{ \gamma_0 + \frac{\gamma_1}{r+1} + \dots + \frac{\gamma_K}{(r+1)^K} \right\} = \\ = \beta^r r! \sum_{i=0}^K \frac{\gamma_i}{(r+1)^i}. \end{aligned} \quad (23)$$

Такого рода оценки получаются для членов ряда ТВ ангармонического осциллятора. В этом случае вычислить точно суммы (17) не удастся и T_i^n необходимо определять прямым вычислением. В методе эффективных гамильтонианов при вычислении колебательно-вращательных уровней энергии формула (23) дает удобную параметризацию преобразованного ряда. Величины β , γ_i можно определять подгонкой к экспериментальным значениям уровней.

Приведенные результаты показывают, что независимо от скорости расходимости исходного ряда метод Эйлера может дать правильный результат, если аппроксимирующая функция выбрана удачно, т.е. выполняется либо (4) либо (6). Это обстоятельство оказывается весьма важным, и задача, таким

образом, может быть сведена к подбору аппроксимирующей функции независимо от скорости расходимости исходного ряда теории возмущений.

4. Применение к точно решаемым моделям

Рассмотрим применение ГЕТ для суммирования рядов в точно решаемой задаче осциллятора Кратцера.

Потенциал Кратцера имеет вид

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

Решение уравнения Шредингера с этим потенциалом может быть найдено в замкнутом виде, выражение для уровней энергии имеет вид [30]:

$$\begin{aligned} K(J, \nu) = -a \left[\nu + 1/2 + \sqrt{J(J+1) + b} \right]^{-2} + \\ + a \left[1/2 + \sqrt{b} \right]^{-2} = -a \left[y + \sqrt{x+b} \right]^{-2} + a \left[1/2 + \sqrt{b} \right]^{-2}, \quad (24) \\ a = \frac{B^2 \mu}{2\hbar^2}, \quad b = 1/4 + 2A\mu/\hbar^2. \end{aligned}$$

Здесь μ – приведенная масса, энергия отсчитывается от нулевого уровня $\nu = 0$, $J = 0$.

Мы используем задачу осциллятора Кратцера для тестирования метода ГЕТ. В качестве аппроксимантов используем простейший аппроксимант Паде [1/1]. При $x = -b$ функция Кратцера (24) имеет точку ветвления второго порядка и ряд, начиная с $J = 23$, расходится (рис. 1).

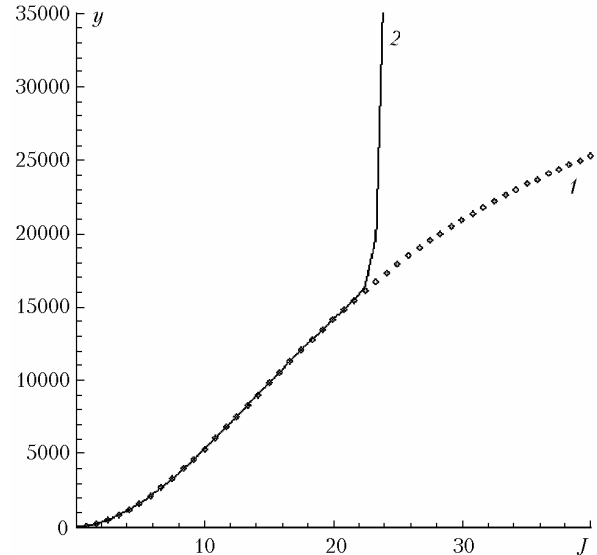


Рис. 1. Уровни энергии осциллятора Кратцера (1) и сумма ряда (1) (2)

Рис. 2 демонстрирует относительную ошибку $E^{Kr}[J(J+1)]/E^{Pade}[J(J+1)]$ при расчете вращательных уровней энергии $V = 0$ и 10 осциллятора Кратцера методом ГЕТ (кривые 1–4) и расчет с аппроксимантом Паде [1/1] (5).

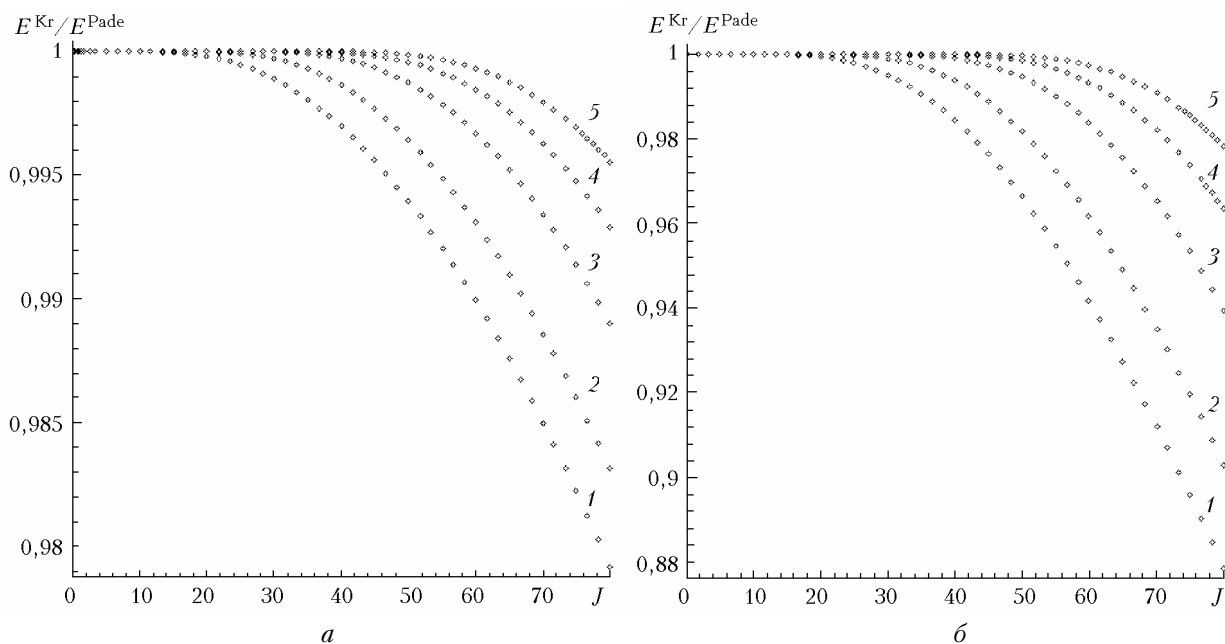


Рис. 2. Относительная ошибка $E^{\text{Kr}}[J(J+1)]/E^{\text{Pade}}[J(J+1)]$ при расчете вращательных уровней энергии $V=0$ (а) и $V=10$ (б)

Зависимость вращательных уровней энергии колебательного состояния $V=10$ от квантового числа J показана на рис. 3.

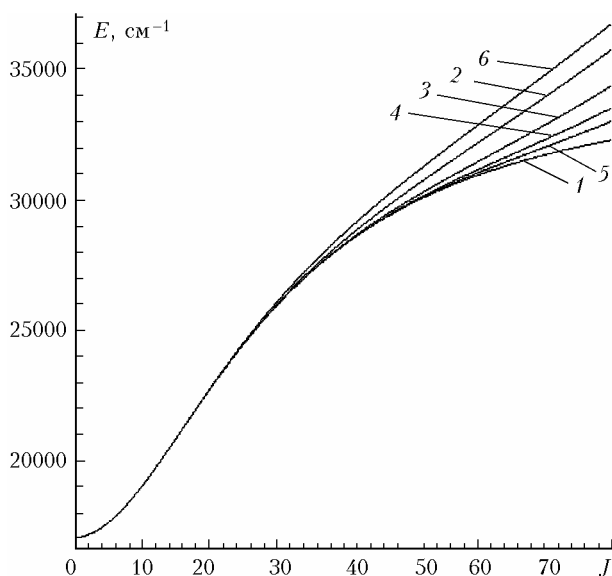


Рис. 3. Зависимость вращательных уровней энергии колебательного состояния $V=10$ от квантового числа J : 1 – точная формула; 2–5 – расчет методом GET, $N=5, 10, 15, 20$; 6 – расчет с аппроксимантом Паде $[1/1]$

Авторы выражают благодарность чл.-кор. РАН С.Д. Творогову за внимание к данной работе и полезные замечания.

Работа поддержана программой РАН «Оптическая спектроскопия и стандарты частоты» и грантом INTAS № 03-51-3394.

1. Belov S.P., Burenin A.V., Polaynsky O.L., Shapin S.M. A new approach to the treatment of rotational spectra of molecules with small moments of inertia applied to the PH_3 molecule in its ground state // J. Mol. Spectrosc. 1981. V. 90. P. 579–589.
2. Буренин А.В., Полянский О.Л., Щатин С.М. Применение Паде-операторов Гамильтона для описания вращательного спектра молекулы H_2X : приложение к молекуле H_2S в основном состоянии // Оптика и спектроскопия. 1982. Т. 53. С. 666–672.
3. Burenin A.V. On the Convergence of Rational Series when Treating Spectra of Quantum Systems // J. Mol. Spectrosc. 1989. V. 136. P. 169–172.
4. Брюханов В.Н., Макушкин Ю.С., Тютерева В.Г., Черепанов В.Н. О Паде-форме эффективных вращательных гамильтонианов молекулы // Изв. вузов. Физ. 1981. № 8. С. 14–18.
5. Majewski W.A., Marshall M.D., McKellar A.R.W., Johns J.W.C., Watson J.K.G. Higher rotational lines in the ν_2 fundamental band of the H_3^+ molecular ion // J. Mol. Spectrosc. 1987. V. 122. P. 341–355.
6. Polyansky O.L. One-Dimensional Approximation of the effective rotational Hamiltonian of the Ground State of the Water Molecule // J. Mol. Spectrosc. 1985. V. 112. N 1. P. 79–87.
7. Polyansky O.L., Tennyson J. On the Convergence of Effective Hamiltonian Expansions // J. Mol. Spectrosc. 1992. V. 154. P. 246–251.
8. Головки В.Ф., Тютерева В.Г., Буренин А.В. Определение параметров центробежного искажения с помощью непolynomialных представлений редуцированного вращательного гамильтониана в Паде-форме // Оптика и спектроскопия. 1988. Т. 64. С. 764–769.
9. Тютерева В.Г., Стариков В.И., Толмачев В.И. Асимптотика вращательных уровней энергии нежестких молекул типа H_2O . Производящие функции и радиусы сходимости для эффективного вращательного гамильтониана // Докл. АН СССР. 1987. Т. 297. С. 38–58.
10. Tuyterev V.I.G., Starikov V.I., Tashkun S.A., Mikhailenko S.N. Calculation of High Rotational Energies

- of the Water Molecule Using the Generating Function Model // *J. Mol. Spectrosc.* 1995. V. 170. P. 130–147.
11. *Camy-Peyret C., Flaud J.-M., Mandin J.-Y., Bykov A., Naumenko O.V., Sinitza L., Voronin B.* Fourier-transform absorption spectrum of the H_2^{17}O molecule in the 9711–11335 cm^{-1} spectral region: the first decade of resonating states // *J. Quant. Spectrosc. and Radiat. Transfer.* 1999. V. 61. N 6. P. 795–812.
 12. *Cizek J., Spirko V., Bludsky O.* On the use of divergent series in vibrational spectroscopy. Two- and three-dimensional oscillators // *J. Chem. Phys.* 1993. V. 99. N. 10. P. 7331–7336.
 13. *Spirko V., Kraemer W.* Rovibrational Energies of Triatomic Molecules by Means of the Rayleigh – Schrodinger Perturbation Theory // *J. Mol. Spectrosc.* 2000. V. 199. P. 236–244.
 14. *Goodson D.Z., Sergeev A.V.* On the use of algebraic approximants to sum divergent series for Fermi resonances in vibrational spectroscopy // *J. Chem. Phys.* 1999. V. 110. N 16. P. 8205 – 8206.
 15. *Pickett H.M., Pearson J.C., Miller C.E.* Use of Euler series to fit spectra with application to water // *J. Mol. Spectrosc.* 2005. V. 233. P. 174–179.
 16. *Brunken S., Muller H.S.P., Lewen F., Giesen T.F.* Analysis of the rotation spectrum of methylene (CH_2) in its vibronic ground state with an Euler expansion of the Hamiltonian // *J. Chem. Phys.* 2005. V. 123. P. 164315-1–164315-10.
 17. *Starikov V.I., Tashkun S.A., Tyuterev V.I.G.* Description of Vibration-Rotation Energies of Nonrigid Triatomic Molecules Using the Generating Function Method // *J. Mol. Spectrosc.* 1992. V. 151. P. 130–147.
 18. *Tyuterev V.I.G.* The Generating Function Approach to the Formulation of the Effective Rotational Hamiltonian // *J. Mol. Spectrosc.* 1992. V. 151. P. 97–129.
 19. *Starikov V.I., Mikhailenko S.N.* Expansion of the generating function approach for non-rigid X_2Y -type molecules by means of Borel-type summation // *J. Phys. B.* 2000. V. 33. P. 2141–2152.
 20. *Буренин А.В., Рябикин М.Ю.* Аналитическое описание высоковозбужденных колебательно-вращательных состояний двухатомных молекул. I. Построение описания // *Оптика и спектроскопия.* 1995. Т. 78. № 5. С. 742–748.
 21. *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. № 2. С. 223–225.
 22. *Suvernev A.A., Goodson D.Z.* Dimensional perturbation theory for vibration-rotation spectra of linear triatomic molecules // *J. Chem. Phys.* 1997. V. 107. N 11. P. 4099–4111.
 23. *Morse P.M., Feshbach H.* Methods of Theoretical Physics, Part 1 // *Phys. Rev.* 1929. V. 34. P. 57.
 24. *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.
 25. *Silverman J.N.* Generalized Euler transformation for summing strongly divergent Rayleigh–Schrodinger perturbation series: The Zeeman effect // *Phys. Rev. A.* 1983. V. 28. N 1. P. 498–501.
 26. *Быков А.Д., Круглова Т.В.* Метод Эйлера для рядов двух переменных // *Оптика атмосфер. и океана.* 2003. Т. 16. № 11. С. 1011–1014.
 27. *Круглова Т.В.* Суммирование рядов теории возмущений методом Эйлера. Колебательно-вращательные состояния двухатомных молекул // *Оптика атмосфер. океана.* 2002. Т. 15. № 9. С. 806–809.
 28. *Zamastil J., Cizek J., Skala L.* WKB Approach to Calculating the Lifetime of Quasistationary States // *Phys. Rev. Lett.* 2000. V. 84. N 25. P. 1–11.
 29. *Weniger E.J.* Nonlinear Sequence Transformations: Computational Tools for the Acceleration of convergence and the Summation of Divergent Series // arXiv.math.CA.0107080
 30. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматгиз, 1963. 702 с.
 31. *Прудников А.П., Брычков Ю.А., Маричев О.И.* Интегралы и ряды. М.: Наука, 1981. 800 с.

A.D. Bykov, T.V. Kruglova. On some properties of the generalized Euler series transformation as applied to rovibrational energy levels of molecules.

Properties of the generalized Euler transformation (GET) are considered, such as possibility to obtain an exact sum of series, convergence of a transformed series, and its new representations. Certain convergence criteria for a transformed series are given and conditions are established under which the Euler method gives a finite expression for the sum of series. Properties of a transformed series are analyzed for the case when the well known Pade, Pade–Borel or Pade–Hermite approximants are used as a null GET approximation as well as different ways of parametrization of the transformed series coefficients. In conclusion of the work, the results of the method testing are given for the exactly solvable quantum-mechanics problem of the Kratzer oscillator.