

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА



P4 - 8710

Л.И.Пономарев, Л.Н.Сомов

ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.
VI. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

1975

P4 - 8710

Л.И.Пономарев, Л.Н.Сомов

ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.
VI. ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ НЕПРЕРЫВНОГО СПЕКТРА

Submitted to Journal Comp. Phys.

В В Е Д Е Н И Е

Волновые функции непрерывного спектра задачи двух центров необходимы при решении различных квантовомеханических задач: рассеяния электронов на двух кулоновских центрах^{/1/}, фотони-зации молекул^{/2/}, задачи трех тел с кулоновским взаимодействием^{/3/} и т.д.

Впервые волновые функции непрерывного спектра задачи двух центров с зарядами $Z_1 = Z_2 = 1$ были найдены в работах Бейтса и др.^{/2/}. Рассеяние на двух кулоновских центрах с различными зарядами $Z_1 \neq Z_2$ было рассмотрено Шимизу^{/4/}, который составил также таблицы собственных значений углового уравнения при некоторых значениях параметров задачи.

Данная работа содержит описание алгоритмов вычисления собственных значений $\lambda_{m_q}(k, R)$ углового уравнения и волновых функций $\Phi_{m_q}(\xi, \zeta, \varphi; k, R)$ непрерывного спектра задачи двух центров. Работа является непосредственным продолжением исследований^{/5/}, посвященных вычислению собственных значений и волновых функций дискретного спектра задачи двух центров.

Программа вычислений написана на языке ФОРТРАН-4 применительно к вычислительной машине СДС-6200, находящейся в распоряжении Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Волновые функции $\Phi_{\vec{k}}(\vec{z}; R)$ непрерывного спектра задачи двух центров определяются как решения уравнения Шредингера

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta_{\vec{z}} - \frac{Z_1}{z_1} - \frac{Z_2}{z_2}\right)\Phi_{\vec{k}}(\vec{z}; R) = E_k \Phi_{\vec{k}}(\vec{z}; R), \quad (I)$$

где z_1 и z_2 - расстояния отрицательно заряженной частицы (электрона) от положительных зарядов (ядер) Z_1 и Z_2 , удаленных друг от друга на расстояние R , а $E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2}$ - энергия электрона в состоянии с импульсом \vec{k} .

В сферических координатах

$$\xi = \frac{z_1 + z_2}{R}, \quad \eta = \frac{z_1 - z_2}{R}, \quad \varphi \quad (2)$$

решение $\Phi_{\vec{k}}(\vec{z}; R)$ представляется в виде произведения функций

$$\begin{aligned} \Phi_{\vec{k}}(\vec{z}; R) &= \Phi_{mq}(\xi, \eta, \varphi; k, R) = \\ &= N_{mq}(k, R) \Pi_{mq}(\xi; k, R) \Sigma_{mq}(\eta; k, R) \frac{e^{\pm i m \varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \end{aligned} \quad (3)$$

где $m = |m|$ - целое число, а q равно числу нулей функции $\Sigma_{mq}(\eta; k, R)$ на интервале $(-1, 1)$.

Функции $\Pi_{mq}(\xi; k, R)$ и $\Sigma_{mq}(\eta; k, R)$ будем называть радиальной и угловой кулоновскими сферическими функциями (по аналогии с кулоновскими функциями $F_\ell(\chi, kz)$ одноцентровой задачи^{/6/}). Они определяются как регулярные решения уравнений

$$\frac{d}{d\xi} \left[(\xi^2 - 1) \frac{d}{d\xi} \Pi_{mq}(\xi; k, R) \right] + \left[-\lambda_{mq} + c^2(\xi^2 - 1) + a\xi - \frac{m^2}{\xi^2 - 1} \right] \Pi_{mq}(\xi; k, R) = 0;$$

$$|\Pi_{mq}(1; k, R)| < \infty, \quad \Pi_{mq}(\xi; k, R) \rightarrow 0, \quad 1 \leq \xi < \infty; \quad \xi \rightarrow \infty \quad (4a)$$

$$\frac{d}{d\eta} \left[(1 - \eta^2) \frac{d}{d\eta} \Sigma_{mq}(\eta; k, R) \right] + \left[\lambda_{mq} + c^2(1 - \eta^2) + b\eta - \frac{m^2}{1 - \eta^2} \right] \Sigma_{mq}(\eta; k, R) = 0;$$

$$|\Sigma_{mq}(\pm 1; k, R)| < \infty, \quad -1 \leq \eta \leq 1. \quad (4b)$$

Здесь введены обозначения:

$$a = R(z_2 + Z_1), \quad b = R(z_2 - Z_1), \quad c = \frac{R}{2} \sqrt{2E_k} = \frac{kR}{2}. \quad (4в)$$

Нормировка $N_{mq}(k, R)$ определяется условием

$$\begin{aligned} \int d\vec{z} \Phi_{\vec{k}'}^*(\vec{z}; R) \Phi_{\vec{k}}(\vec{z}; R) &= \\ = \int d\alpha \Phi_{m'q}^*(\xi, \eta, \varphi; k', R) \Phi_{mq}(\xi, \eta, \varphi; k, R) &= \delta_{mm'} \delta_{qq'} \delta(k - k'), \end{aligned} \quad (5)$$

где

$$\int d\alpha = \frac{R^3}{8} \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^1 d\eta \int_0^{2\pi} d\varphi (\xi^2 - \eta^2), \quad (6)$$

Решения уравнений (4) можно рассматривать как обобщение некоторых известных специальных функций. В частности, при $a = b = 0$ уравнения (4) переходят в уравнения для вытянутых сферических функций^{/7/}, при $c = b = 0$ уравнение (4б) переходит в уравнение для присоединенных полиномов Лежандра, а уравнение (4в) при $a \rightarrow 0, c \rightarrow 0, \frac{a}{2c} \rightarrow const$ - в уравнение, определяющее кулоновские функции^{/6/}.

В общем случае $c \neq 0, a \neq 0, b \neq 0$ решения уравнений (4) изучены плохо, а алгоритмы их численного нахождения разработаны недостаточно подробно.

На комплексной плоскости z уравнения (4) идентичны и различаются лишь областью определения решений. Решения $u(z)$ уравнений (4) - аналитические функции на плоскости z с разрезом, соединяющим особые точки уравнения: две регулярные (± 1) и одну иррегулярную (∞).

Показатели регулярных особых точек $z = \pm 1$ равны $\pm m/2$, и регулярные решения в их окрестности ведут себя следующим образом:

$$u(z) \sim (1-z^2)^{m/2}, \quad z \rightarrow \pm 1$$

асимптотика сингулярных решений при $z \rightarrow \pm 1$ имеет вид:

$$u(z) \sim \ln(1-z^2) \quad \text{при} \quad m=0,$$

$$u(z) \sim (1-z^2)^{-m/2} \quad \text{при} \quad m \neq 0.$$

Асимптотика решений в иррегулярной особой точке $z = \infty$ имеет вид

$$u(z) \sim \frac{1}{z} \exp\left\{\pm i\left(c z - \frac{\ell}{2c} \ln 2c z\right)\right\}, \quad z \rightarrow \infty$$

При $c=0, \ell \neq 0$ точка $z = \infty$ остается иррегулярной:

$$u(z) \sim z^{-3/4} \exp\{\pm 2\sqrt{-\ell z}\}.$$

Вычисление собственных значений $\lambda_{mq}(k, R)$

Собственные значения $\lambda = \lambda_{mq}(k, R)$ находятся из углового уравнения (4б). Они зависят от дискретного набора квантовых чисел $(m, q) = 0, 1, 2, \dots$ и двух непрерывных параметров $0 \leq k \leq \infty$ и $0 \leq R \leq \infty$. Для их вычисления решение задачи Штурма-Лиувилля (4б) ищем в виде ряда

$$\sum_{m,q} (z; k, R) = e^{-ic(1-z)} \sum_{s=0}^{\infty} d_s(k, R) P_{s+m}^m(z), \quad (7)$$

$$d_{-1} = 0, \quad d_0 = 1;$$

где $P_{s+m}^m(z)$ - присоединенные полиномы Лежандра, определенные формулой Родрига [7]. Подстановка разложения (7) в уравнение (4б) приводит к трехчленным рекуррентным соотношениям для коэффициентов d_s :

$$\rho_s d_{s+1} - \alpha_s d_s + \delta_s d_{s-1} = 0, \quad (8)$$

где

$$\rho_s = \frac{(s+2m+1)[\beta - 2ic(s+m+1)]}{2(s+m)+3},$$

$$\alpha_s = -\lambda + (s+m)(s+m+1), \quad (9)$$

$$\delta_s = \frac{s[\beta + 2ic(s+m)]}{2(s+m)-1}.$$

Собственные значения $\lambda = \lambda_{mq}(k, R)$ являются корнями трансцендентного уравнения $y(\lambda) = 0$, левую часть которого можно представить в виде бесконечной цепной дроби [5]

$$y(\lambda) = \alpha_0 - \frac{\rho_0 \delta_1}{\alpha_1} - \frac{\rho_1 \delta_2}{\alpha_2} - \dots \quad (10)$$

Функция $y(\lambda)$ действительна, поскольку она зависит только от α_s и произведений $\rho_s \delta_{s+1}$.

Для нахождения корней уравнения $y(\lambda) = 0$ использован метод Ньютона-Рафсона, реализованный в программе с двойной точностью. В качестве начального приближения для собственных значений $\lambda_{mq}(k, R)$ использовано разложение

$$\lambda_{mq}(k, R) = l(l+1) - \frac{(l^2 - m^2)(b^2 + 4c^2 l^2)}{2l(2l-1)(2l+1)} + \frac{[(l+1)^2 - m^2][b^2 + 4c^2(l+1)^2]}{2(l+1)(2l+1)(2l+3)}, \quad (II)$$

которое следует из (10) в пределе $R \rightarrow 0$. Другие детали вычислений можно найти в предыдущих работах авторов^{/5/}.

В большинстве физических приложений значения λ_{mq} достаточно знать с относительной точностью $\varepsilon = 10^{-8} - 10^{-10}$. В этом случае число членов цепной дроби (10) не превышает ~ 100 , а время вычисления $\lambda_{mq}(k, R)$ на интервале $R = 0,025 (0,025) 20$ при фиксированных значениях m, q и k составляет ~ 15 мин. На рис. I приведены результаты вычислений $\lambda_{mq}(k, R)$ для различных наборов m, q и k в случае $Z_1 = 1, Z_2 = 2$.

Вычисление функций $\Sigma_{mq}(z; k, R)$

Алгоритм вычисления угловых кулоновских сферических функций дискретного спектра задачи двух центров, изложенный в работах^{/5/}, в случае непрерывного спектра неэффективен, поскольку при $kR > 5$ соответствующие ряды сходятся очень медленно. Например, в разложении (7) при значении $c \sim 10, d_s \sim 500$ уже для значений $s \sim 20$, причем коэффициенты d_s знакопеременны и быстро растут по абсолютной величине. В связи с этим функции $\Sigma_{mq}(z; k, R)$ предпочтительнее находить непосредственным интегрированием уравнения (4б), используя вблизи особых точек $z = \pm 1$ подходящие разложения. Например, вблизи $z \approx -1$

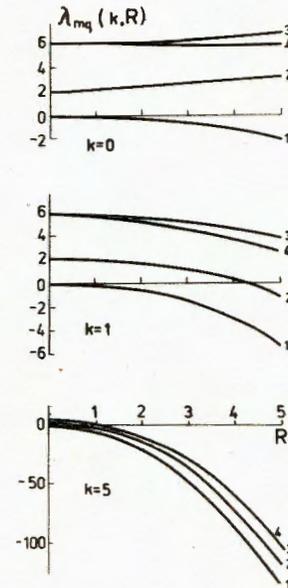


Рис. I. Зависимости $\lambda_{mq}(k, R)$ от R при фиксированных значениях k и различных наборах квантовых чисел: 1) $m=0, q=0$; 2) $m=0, q=1$; 3) $m=0, q=2$; 4) $m=1, q=1$. При $R \rightarrow 0 \lambda_{mq}(k, R) \rightarrow l(l+1)$.

$$\Sigma_{mq}(z; k, R) = (1-z^2)^{m/2} \sum_{s=0}^{S_1} \bar{d}_s (1+z)^s, \quad (I2)$$

где коэффициенты \bar{d}_s находятся из четырехчленных рекуррентных соотношений:

$$p_s \bar{d}_{s+1} + q_s \bar{d}_s + r_s \bar{d}_{s-1} + t_s \bar{d}_{s-2} = 0, \quad (I3)$$

причем $d_{-2} = d_{-1} = 0, d_0 = 1,$

Здесь введены обозначения:

$$\begin{aligned} p_s &= 2(s+1)(s+m+1), \\ q_s &= -[-\lambda + \beta + m(m+1) + s(s-1) + 2(m+1)s], \\ r_s &= 2c^2 + \beta, \\ t_s &= -c^2. \end{aligned} \quad (I4)$$

Чтобы обеспечить относительную точность вычисления функций $\varepsilon \sim 10^{-7}$, достаточно выбрать $S_1 = 4, 1+z = 10^{-6}$ и шаг интегрирования $\Delta z = 2^{-12}$. Нормировку решений естественно определить соотношением

$$\int_{-1}^1 \Sigma_{m'q'}(z; k, R) \Sigma_{mq}(z; k, R) dz = \delta_{mm'} \delta_{qq'}. \quad (I5)$$

При $R \rightarrow 0$ уравнение (4б) переходит в уравнение для присоединенных полиномов Лежандра $P_{m+q}^m(z)$. В соответствии с

этим имеет место соотношение ($l = m+q$):

$$\Sigma_{mq}(z; k, 0) = \left[\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} P_l^m(z), \quad (I6)$$

из которого определяется знак функций $\Sigma_{mq}(z; k, R)$.

На рис. 2а-2в представлены функции $\Sigma_{mq}(z; k, R)$, нормированные условием (I5), при различных значениях k и R , для разных наборов квантовых чисел m и q .

Задачу Штурме-Лиувилля (4б) можно рассматривать независимо от исходной трехмерной задачи. В этом случае собственные значения $\lambda_{mq}(k, R) = \lambda_{mq}(c, \beta)$ являются функциями параметров c и β . При $\beta = 0$ уравнение (4б) переходит в уравнение для вытянутых сфероидальных функций [7], а его решения совпадают со сфероидальными функциями $S_{m\ell}(c, z)$.

В обратном предельном случае $c \rightarrow 0, \beta \neq 0$ через решения уравнения (4б) представляются волновые функции электронов в поле конечного диполя [8]. На рис. 3 приведены значения $\lambda_{mq}(c, \beta)$ при $c=0$ как функции параметра β . На рис. 4 представлены также величины $\lambda_{mq}(c, \beta)$ как функции параметра c при различных значениях β и наборах квантовых чисел m и q .

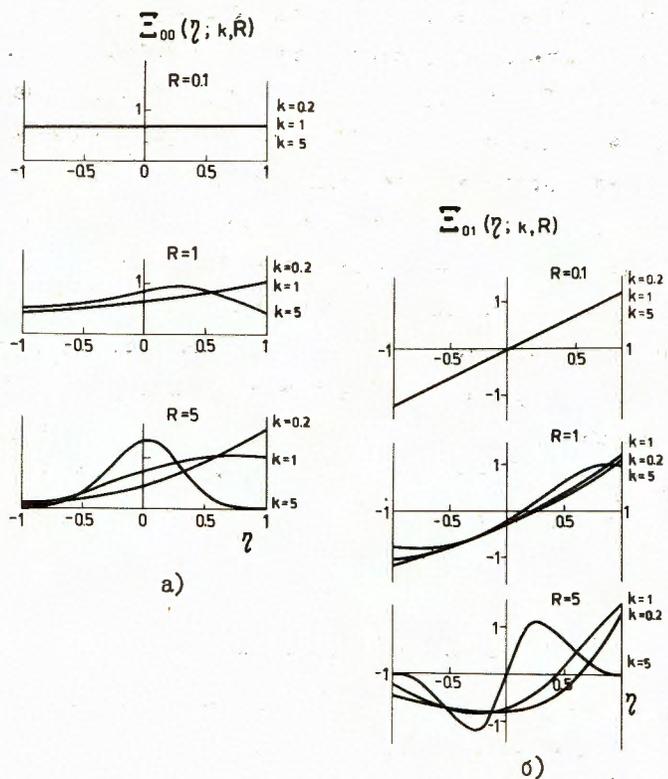
Вычисление функций $\Pi_{mq}(\xi; k, R)$

Два линейно-независимых решения уравнения (4а) можно представить следующим образом ($t = \xi - 1$):

$$\Pi_{mq}^{reg}(\xi; k, R) = (\xi^2 - 1)^{m/2} F(t), \quad (I7a)$$

Рис. 2.

Угловые кулоновские сфероидальные функции $\Xi_{mq}(z; k, R)$, нормированные условием (15), при фиксированных значениях k, R, m, q .



$\Xi_{02}(z; k, R)$

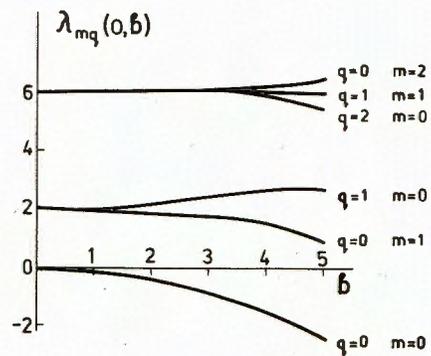
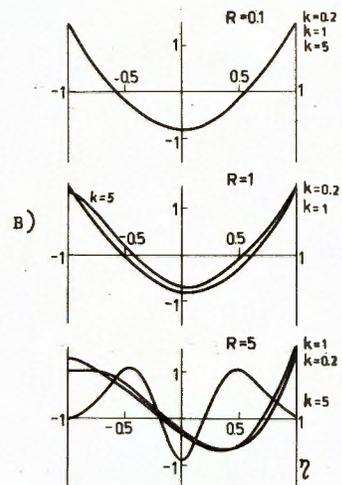


Рис. 3.

Функции $\lambda_{mq}(0, b)$ при различных наборах квантовых чисел m и q .

$$\prod_{mq}^{irreg}(\xi; k, R) = (\xi^2 - 1)^{m/2} G(t). \quad (17b)$$

Здесь $F(t) \equiv F(t, m)$ удовлетворяет уравнению

$$t(t+2)F'' + 2(m+1)(t+1)F' + [c^2t^2 + (2c^2+a)t - \lambda + a + m(m+1)]F = 0 \quad (18)$$

и при $t < 1$ определяется рядом

$$F(t, \nu) = \sum_{s=0}^{S_2} g_s(\nu) t^{s+\nu}, \quad (19)$$

коэффициенты которого удовлетворяют четырехчленному рекуррентному соотношению

$$\bar{p}_s g_{s+1} + \bar{q}_s g_s + \bar{r}_s g_{s-1} + \bar{t}_s g_{s-2} = 0, \quad (20)$$

$$g_{-2} = g_{-1} = 0, \quad g_0 = 1, \quad (20a)$$

$$\bar{p}_s = 2(\nu + s + 1)(\nu + s + m + 1),$$

$$\bar{q}_s = (\nu + s)(\nu + s + 2m + 1) - \lambda + a + m(m+1), \quad (21)$$

$$\bar{r}_s = 2c^2 + a,$$

$$\bar{t}_s = c^2.$$

Нерегулярное решение определяется по функции $F(t, \nu)$ формулами /9/:

при $m \neq 0$

$$G(t) = \frac{\partial}{\partial \nu} [(\nu + m) F(t, \nu)] \Big|_{\nu = -m}; \quad (22a)$$

при $m = 0$

$$G(t) = F(t) \ln t + \frac{\partial}{\partial \nu} F(t, \nu) \Big|_{\nu=0}. \quad (22b)$$

Производные $\partial F(t, \nu) / \partial \nu$ вычисляются с учетом формул (19), (20) и (21), а также условий $\partial g_{-2} / \partial \nu = \partial g_{-1} / \partial \nu = \partial g_0 / \partial \nu = 0$.

Используя представление (22) и разложение (19) в особой точке $t = 0$, оба решения (17) уравнения (4a) находим непосредственным интегрированием. Чтобы обеспечить относительную точность вычисления функций $\varepsilon \sim 10^{-7}$, достаточно выбрать $S_2 = 4$, $t \approx 10^{-6}$ и шаг интегрирования $\Delta \xi = 0,02/c$ и $\Delta \xi = 0,002/c$. При интегрировании уравнения (4a) использован метод Нумерова /10/, который значительно быстрее метода Рунге-Кутты.

Знак функций $\prod_{mq}(\xi; k, R)$ определяется из требования их положительности при $\xi \rightarrow 1$.

Нормировка фиксируется асимптотическим поведением решения при $c\xi \gg 1$:

$$(\xi^2 - 1)^{1/2} \prod_{mq}(\xi; k, R) = A \cdot \text{Re} \left\{ \left[1 + \sum_{s=1}^{S_2} g_s(c\xi)^{-s} \right] \cdot \exp \left[-i \left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{\ell+1}{2} \pi + \Delta_{mq} \right) \right] \right\}. \quad (23)$$

Здесь $\Delta_{mq} = \Delta_{mq}(k, R)$ - фаза радиальной кулоновской сферической функции, аналогичная кулоновской фазе

$\sigma_2 = \arg \Gamma(\ell+1 - i\gamma)$, $\gamma = Z/\kappa$ при рассеянии на кулоновском потенциале притяжения $-Z/z$. Имеют место предельные соотношения

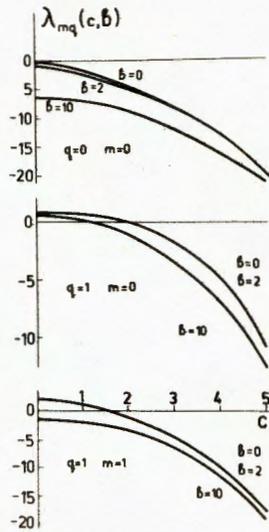


Рис. 4. Собственные значения $\lambda_{mq}(c, b)$ как функции параметра c при фиксированных значениях b, m и q .

$$\Delta_{mq}(k, 0) = \sigma_l = \arg \Gamma(l+1-i\gamma), \quad (24)$$

$$\gamma = \frac{a}{2c}, \quad l = m+q.$$

Коэффициенты g_s разложения (23) удовлетворяют шести-членному рекуррентному соотношению

$$\begin{aligned} & i2(s+1)g_{s+1} + \left[s(s+1) - \lambda - \left(\frac{a}{2c}\right)^2 + i(2s+1)\frac{a}{2c} \right] g_s + \\ & + 2c^2 \left[\frac{a}{2c} - i2(s-1) \right] g_{s-1} + \\ & + c^2 \left[-2(s-1)(s-2) + \lambda + 1 - m^2 + 2\left(\frac{a}{2c}\right)^2 - i2(2s-3)\frac{a}{2c} \right] g_{s-2} + \\ & + 2c^4 \left[-\frac{a}{2c} + i(s-3) \right] g_{s-3} + \\ & + c^4 \left[(s-3)(s-4) - \left(\frac{a}{2c}\right)^2 + i(2s-7)\frac{a}{2c} \right] g_{s-4} = 0. \end{aligned} \quad (25)$$

Нормировка A и фаза Δ_{mq} находятся из условия сшивания асимптотики решения (23) и его производной в точке $\xi^* \gg 1$ с решением $\Pi_{mq}(\xi; k, R)$ и производной $\frac{\partial}{\partial \xi} \Pi_{mq}(\xi; k, R)$, найденных при численном интегрировании уравнения (4а).

Чтобы обеспечить относительную точность $\varepsilon \sim 10^{-7}$ при вычислении A и Δ_{mq} достаточно положить $S_3 = 4$ при $c \xi^* = 500 \cdot \left| \lambda + \left(\frac{a}{2c}\right)^2 \right|$.

В пределе $R \rightarrow 0$ задаче двух центров переходит в одно-центровую задачу с зарядом $Z = Z_1 + Z_2$, в уравнение (4а) (после масштабного преобразования $z = R\xi/2$) - в уравнение, определяющее кулоновские функции $F_l(\gamma, kz)$ и $G_l(\gamma, kz)$ [6]. При этом волновая функция $\Phi_{mq}(\xi, \eta, \varphi; k, R)$, нормированная условием (5), переходит в нормированное решение $\Psi_{k\ell m}(\vec{z})$

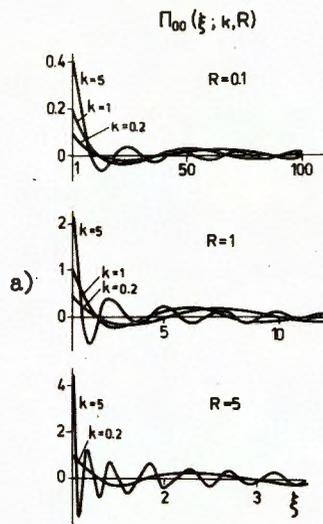


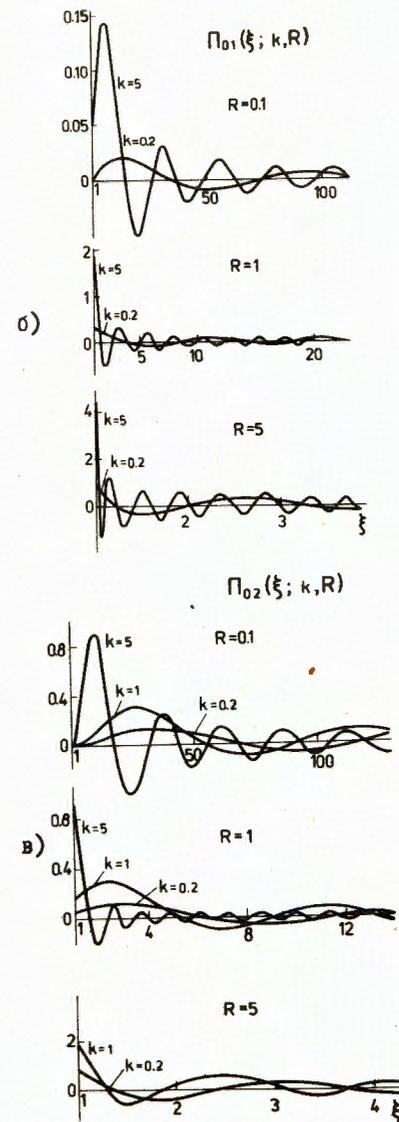
Рис. 5.

Радиальные кулоновские сфероидальные функции

$\Pi_{mq}(\xi; k, R)$, нормированные асимптотическим условием

$$\Pi_{mq}(\xi; k, R) \rightarrow \frac{1}{\xi} \sin\left(c\xi + \frac{a}{2c} \ln 2c\xi - \frac{l+1}{2}\pi + \Delta_{mq}\right)$$

при фиксированных значениях k, R и различных наборах m и q .



одноцентральной задачи /II/

$$\Psi_{k\ell m}(\vec{z}) = \sqrt{\frac{2}{\pi}} \frac{1}{z} F_{\ell}(\gamma, kz) Y_{\ell m}(\theta, \varphi), \quad (26)$$

где $\frac{Rz}{2} \rightarrow z$, $z \rightarrow \cos \theta$, а $Y_{\ell m}(\theta, \varphi)$ — сферическая функция Лежандра.

Сравнивая асимптотику функций

$$F_{\ell}(\gamma, kz) = \sin(kz + \gamma \ln 2kz - \frac{\ell\pi}{2} + \sigma_{\ell}) \quad (27)$$

с разложением (23), находим, что $A = I$. При таком выборе A нормировочный коэффициент $N_{mq}(k, R)$ решения (3) равен:

$$N_{mq} = \frac{2}{R} \sqrt{\frac{2}{\pi}}. \quad (28)$$

Этот результат сразу следует из сравнения выражений (3) и (26) с учетом предельных соотношений (16), (23) и (27).

Другой вывод выражения для N_{mq} приведен в работе Бейтса и др. /2/.

На рис. 5а-5в представлены регулярные решения $\Pi_{mq}(\xi; k, R)$, нормированные условием $A = I$ при различных k и R и разных наборах m и q . На рис. 6 приведены также фазы $\Delta_{mq}(k, R)$, как функции межцентрового расстояния R при различных значениях k , q и m .

Через эти фазы выражаются сечения рассеяния электронов на двух кулоновских центрах /I/.

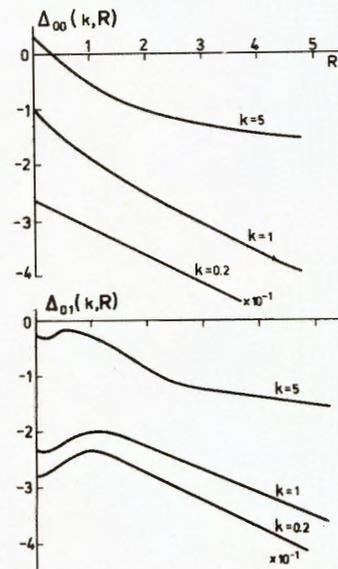


Рис. 6. Фазы решений радиального уравнения $\Delta_{mq} = \Delta_{mq}(k, R)$ как функции R при различных значениях k .

При $R \rightarrow 0$ Δ_{mq} совпадают с кулоновской

фазой одноцентральной задачи с зарядом $Z_1 + Z_2$:

$$\Delta_{mq}(k, 0) = \sigma_{\ell} = \arg(\ell + 1 - i \frac{Z_1 + Z_2}{k}).$$

Контроль точности вычислений

Для дополнительного контроля точности вычислений собственные значения $\lambda_{mq}(\epsilon, \nu)$ сравнивались с аналитическими выражениями $\lambda_{mq}(0, \nu)$, которые известны при определенных значениях (например, $\lambda_{00}(0, \nu=1,27863) = 1/4$).

Критерием точности вычисления радиальных функций было выбрано условие постоянства вронскиана

$$W = \bar{P}_{mq} \frac{\partial \bar{C}_{mq}}{\partial \xi} - \bar{C}_{mq} \frac{\partial \bar{P}_{mq}}{\partial \xi} = \text{const}, \quad (29)$$

где \bar{P}_{mq} и \bar{C}_{mq} определены соотношениями

$$\bar{P}_{mq} = (\xi^2 - 1)^{1/2} \Pi_{mq}^{\text{reg}}(\xi; k, R), \quad (30)$$

$$\bar{C}_{mq} = (\xi^2 - 1)^{1/2} \Pi_{mq}^{\text{irreg}}(\xi; k, R).$$

Условие (29) выполнялось в расчетах с относительной точностью $\epsilon \leq 10^{-7}$. Для контроля точности вычислений варьировались также число членов сумм S_n в разложениях (12), (19) и (23), а также величина $c\xi^*$. Приведенные в тексте значения этих величин обеспечивают относительную точность вычисления волновых функций $\epsilon \sim 10^{-7}$.

Точность вычисления угловых функций $\Sigma_{mq}(b; k, R)$ при значениях $kR \leq 5$ контролировалась сравнением значений, полученных интегрированием уравнения (4б), со значениями, девятыми разложениями

$$\Sigma_{mq}(b; k, R) = (1-b^2)^{m/2} e^{ic(1\pm b)} \sum_{s=0}^m c_s (1\pm b)^s. \quad (31)$$

При $kR > 5$ вблизи $b \approx 1$ сравнивались логарифмические произ-

водные угловых функций, найденных интегрированием уравнения (4б) при использовании разложения (12), и логарифмические производные, которые следуют из разложения (12) после замены $b \rightarrow -b$.

Для глобальной проверки построенных решений использовано условие ортогональности

$$\int d\alpha \Phi_{mq}(\xi, b, \varphi; k, R) \Psi_{n\ell m}(\xi, b, \varphi; R) = 0, \quad (32)$$

где $\Psi_{n\ell m}(\xi, b, \varphi; R)$ - волновая функция дискретного спектра задачи двух центров, вычисленная ранее [5]. Условие (32) выполнялось в наших расчетах с точностью $\sim 10^{-7}$.

В заключение нам приятно поблагодарить Т.П.Пузынину и И.В.Пузынина за большую помощь в работе и конструктивные обсуждения.

Литература

- I. Д.И.Абрамов, И.В.Комаров. ТМФ, 22, 253 (1975);
Ling Chiang Li. J.Math. Phys., 15, No. 5, 570 (1974).
2. D.R.Bates, G.Poots. Proc. Phys. Soc. 66, 784 (1953);
D.R.Bates, U.Örik, G.Poots. Proc. Phys. Soc., 66, 1113 (1953).
3. Н.Мотт, Г.Мэсси. Теория атомных столкновений. Изд. "Мир",
М. (1969);
А.В.Матвеев, Л.И.Пономарев. ТМФ, 12, 64 (1972).
4. Mikio Shimizu, Natural Science Report, Ochanomizu University
12, No. 1, 1 (1961);
Mikio Shimizu. J.Phys. Soc. of Japan, 18, No. 6, 811 (1963).
5. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. АВМ и МФ, 8, 1256 (1968);
Препринты ОИЯИ Р2-3009, Р2-3012, Дубна (1966);
Препринт ОИЯИ Р4-5040, Дубна (1970).
6. N.A.Abramowitz, I.A.Stegun. Handbook of mathematical
functions, Nat. Bur. Stand. Washington D.C.;
А.Р.Кертис. Волновые функции Кулона. ВЦ АН СССР, М., 1969.
7. К.Фламмер. Таблицы волновых сфероидальных функций ВЦ АН
СССР М. 1962.
8. Д.И.Абрамов, И.В.Комаров. ТМФ, 13, 209 (1972).
9. Г.Джеффрис, Б.Свирлс. Методы математической физики, том 3,
стр. 20. Изд. "Мир", М. (1970).
10. D.R.Hartree. Numerical analysis, 2nd ed, section 7.23,
Oxford, 1958.
11. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, стр. 151.
Физматгиз, М (1963).

Рукопись поступила в издательский отдел
20 марта 1975 г.

Условия обмена

Препринты и сообщения ОИЯИ рассылаются бесплатно, на основе взаимного обмена, университетам, институтам, лабораториям, библиотекам, научным группам и отдельным ученым более 50 стран.

Мы ожидаем, что получатели изданий ОИЯИ будут сами проявлять инициативу в бесплатной посылке публикаций в Дубну. В порядке обмена принимаются научные книги, журналы, препринты и иного вида публикации по тематике ОИЯИ.

Единственный вид публикаций, который нам присылать не следует, - это репринты /оттиски статей, уже опубликованных в научных журналах/.

В ряде случаев мы сами обращаемся к получателям наших изданий с просьбой бесплатно прислать нам какие-либо книги или выписать для нашей библиотеки научные журналы, издающиеся в их странах.

Отдельные запросы

Издательский отдел ежегодно выполняет около 3 000 отдельных запросов на высылку препринтов и сообщений ОИЯИ. В таких запросах следует обязательно указывать индекс запрашиваемого издания.

Адреса

Письма по всем вопросам обмена публикациями, а также запросы на отдельные издания следует направлять по адресу:

101000 Москва,
Главный почтамт, п/я 79.
Издательский отдел
Объединенного института
ядерных исследований.

Адрес для посылки всех публикаций в порядке обмена, а также для бесплатной подписки на научные журналы:

101000 Москва,
Главный почтамт, п/я 79.
Научно-техническая библиотека
Объединенного института
ядерных исследований.