Ann. Phys., 1968, Bd. 21, N5/6, c. 225-234

31/VIII-67

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4 - 3354

И.А. Еганова , М.И. Широков

ДВУХТОЧЕЧНЫЕ ФУНКЦИИ

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

1967 г.

P4 - 3354

И.А. Еганова *, М.И. Широков

ДВУХТОЧЕЧНЫЕ ФУНКЦИИ

Направлено в "Annalen der Physik"

* Физический институт АН АзССР.

§1. Введение

Пусть частица с импульсом $\hbar\vec{k}$ рассеивается на потенциале малого радиуса a. Известно, что тогда рассеяние происходит преимущественно в состоянии с орбитальным моментом ℓ, если $ka \ll 1$. Аналогично рассеяние или излучение мягких фотонов хорошо описывается дипольным приближением, если размеры рассеивающей или излучающей системы малы (и нет специальных запретов). Математическая причина этих явлений заключается в том, что собственные функции оператора квадрата импульса $\hat{k}^2$ с определенным орбитальным моментом– так называемые сферические функции Бесселя $j_\ell(x)$, $x = kr$ – все обращаются в нуль в точке $x = 0$, кроме одной $- j_0(x)$. Более точно, $j_\ell(x) \approx x^\ell/(2\ell+1)!!$, при $x \to 0$

Полную систему собственных функций $\hat{k}^2$, обладающих аналогичным свойством по отношению к двум выделенным точкам $(+\vec{d})$ и $(-\vec{d})$, мы назовём двухточечными функциями. Как окажется, только две первые функции этой системы не равняются нулю в точках $(\pm\vec{d})$. Область их применения – задачи с потенциалами, сосредоточенными около двух точек. Например, рассмотрим задачу трех тел с таким гамильтонианом:

$$H = \sum_{i=1}^{3} \frac{p_i^2}{2m_i} + V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) + b_1\delta(\vec{r}_3 - \vec{r}_1) + b_2\delta(\vec{r}_3 - \vec{r}_2). \tag{1.1}$$

Под символом δ в двух последних членах (и далее в этом введении) следует понимать не δ–функции Дирака, но потенциалы с очень ма–

лым радиусом a, но с большой глубиной U (ещё точнее: имеется в виду предел при $a \to 0$, $U \to \infty$). После введения координат Якоби и отделения движения центра тяжести получим в случае $m_1 = m_2 = m$

$$H' = -\frac{\nabla_d^2}{4m} - \frac{\nabla_r^2}{2\mu_2} + V(2\vec{d}) + b_1\delta(\vec{r}+\vec{d}) + b_2\delta(\vec{r}-\vec{d}). \qquad (1.2)$$

Здесь $2\vec{d} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$; $\frac{1}{\mu_2} = \frac{1}{2m} + \frac{1}{m_3}$; $\vec{r} = \frac{\vec{r}_1 + \vec{r}_2}{2} - \vec{r}_3$

(относительная координата частицы 3 и комплекса частиц 1 и 2). Гамильтониан (1.2) может, например, описывать рассеяние нейтрона на двух протонах 1 и 2, связанных некоторым эффективным потенциалом $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ в молекулу водорода.

Пусть вместо молекулы имеем жесткую гантель ($\vec{d}$ фиксировано), тяжелую (m велико) и ориентированную вдоль оси Z, так что $d_x = d_y = 0$. Тогда получаем задачу о движении частицы в поле двух δ -потенциалов:

$$H'' = -\frac{\nabla_r^2}{2m_3} + b_1\delta(\vec{r}+\vec{d}) + b_2\delta(\vec{r}-\vec{d}). \qquad (1.3)$$

Знание двухточечных функций позволяет сразу указать "почти все" собственные функции H''. Ими являются все двухточечные функции, кроме первых двух: ведь они обращаются в нуль как раз там, где потенциал не равен нулю, так что для них H'' совпадает с $\hat{k}^2/2m_3$ и его собственные значения равны просто $k^2/2m_3$. Остальные собственные функции H'' могут быть найдены как суперпозиции двух оставшихся двухточечных функций (поскольку двухточечные функции образуют полную систему). Если радиусы δ -потенциалов конечны и равны a_1 и a_2, то можно ожидать, что рассеяние на них с хорошим приближением может быть описано с помощью всего двух волн. Условие успеха такого описания должно иметь вид $ka_1 \ll 1$ и $ka_2 \ll 1$. При этом kd может быть любым. Собственные функции $\Phi_n(\vec{r};\vec{d})$ задачи (1.3) могут быть использованы для нахождения собственных функций H', см. (1.2). Поскольку H'' входит в H' как составная часть, то их можно находить в виде разложения Борна-Оппенгеймера[1,2,3]

$$\Psi(\vec{r},\vec{d}) = \sum_n X_n(\vec{d})\,\Phi_n(\vec{r};\vec{d}). \qquad (1.4)$$

Подставив (1.4) в $H'\Psi = E\Psi$, умножив полученное соотношение на Φ_m^* и проинтегрировав по $\vec{r}$, получим уравнение для $X_n(d)$.

Возможность точного решения задачи (1.3) с помощью двухточечных функций имеет и методическое значение для проверки эффективности приближенных методов решения задачи трех тел, см., например,[4]. Другое методическое применение эти функции могут найти в моделях теории поля. Пусть, например, имеем два электрона в разных осцилляторных ямах (ямы разделены расстоянием $2d$), взаимодействующие дипольно с квантованным электромагнитным полем. Векторные двухточечные функции (см. § 3) позволяют получить точное решение задач этой модели тем же способом, как это было сделано для модели с одним осциллирующим электроном[5].

§2. Скалярные двухточечные функции

1. Предварительное замечание. Существуют вытянутые сфероидальные координаты ξ, η, ϕ, в которых две точки являются выделенными. Соответствующая координатная сетка определяется 1) семейством софокусных эллипсоидов вращения с фокусами в точках $z = \pm d$; точке $\xi = 1$ соответствует эллипсоид, выродившийся в отрезок $(-d, +d)$; 2) пересекающими их гиперболоидами вращения с фокусами в тех же точках, η -угол раскрытия; 3) семейством азимутальных плоскостей, проходящих через ось Z (см. (10.3.46) в[6]). Выделенные точки соответствуют крайним значениям ξ и η : $\xi = 1$, $\cos\eta = \pm 1$. В этих координатах оператор $\hat{k}^2$ разделяется. Естественно проверить, не обладают ли искомым свойством соответствующие вытянутые сфероидальные функции $R_{nm}(\xi)\,S_{nm}(\eta)\,e^{im\phi}$, см.[6], гл. 11.3 и[7]. Оказывается, что функции, у которых азимутальное число m не равно нулю, обращаются в нуль в точках $\cos\eta = \pm 1$. Однако все же бесконечно много функций $R_{n0}\,S_{n0}$ при фиксированном k не обращаются в нуль в точке $\xi = 1$. Поэтому вытянутые сфероидальные функции не являются "двухточечными".

2. Чтобы обеспечить ортонормированность и полноту искомой системы функций F, мы их построим с помощью унитарного преобразования U из известной полной и ортонормированной системы. В качестве последней возьмем систему из функций

$$f_{k\ell m}(r,\theta,\phi) = j_\ell(kr) Y_{\ell m}(\theta,\phi); \quad j_\ell(kr) = J_{\ell+\frac{1}{2}}(kr)/\sqrt{kr}\ . \tag{2.1}$$

Соотношения ортонормировки и полноты для них имеют вид:

$$\int f^*_{k_1\ell_1 m_1}(r,\theta,\phi) f_{k_2\ell_2 m_2}(r,\theta,\phi)\, d^3x = \frac{\delta(k_1-k_2)}{k_1^2}\,\delta_{\ell_1\ell_2}\delta_{m_1 m_2}, \tag{2.2}$$

$$\int k^2\, dk \sum_{\ell,m} f_{k\ell m}(r_1,\theta_1,\phi_1) f^*_{k\ell m}(r_2,\theta_2,\phi_2) = \delta(\vec{x}_1 - \vec{x}_2) \tag{2.3}$$

Пусть k фиксировано и f означает строку из функций $f_{k\ell m}(r,\theta,\phi)$, $\ell = 0,1,2,\dots;\ -\ell \le m \le \ell$. Пусть F – строка из искомых функций, взятых в той же точке r,θ,ϕ:

$$F = fU\ . \tag{2.4}$$

Сначала рассмотрим случай, когда выделенные две точки лежат на оси Z: $\vec{d} = \{d,0,0\}$, т.е. $\theta_d = 0$, $\phi_d = 0$. Поскольку все функции $f_{\ell m}$ с $m \neq 0$ равны нулю при $\theta = 0$ или $\theta = \pi$ (т.е. на всей оси Z), то фактически надо ввести новые функции только вместо функций $f_{\ell 0}$.

$$F_{kLm}(r,\theta,\phi) = \sum_{\ell=m}^{\infty} f_{k\ell m}(r,\theta,\phi)\, U^m_{\ell L}(k,d); \quad L = 1,2,3,\dots \tag{2.5}$$

При $m \neq 0$ можно положить $U^m_{\ell L} = \delta_{\ell L}$

3. Покажем, что по крайней мере две функции F не должны обращаться в нуль в точках $(\pm\vec{d})$. Прежде всего заметим, что функции полной системы не могут все одновременно исчезать вблизи одной или нескольких точек: тогда по ним нельзя было бы разложить функцию, не исчезающую вблизи этих точек.

Рассмотрим функцию

$$\phi_k(r,\theta,\phi) = \sum_{L,m} F_{kLm}(r,\theta,\phi)\, C(L,m)\ . \tag{2.6}$$

Она может принимать произвольные значения на сфере радиуса d (однако значения её при других r определяются её значениями на этой сфере). В частности, в качестве значений ϕ_k в точках $(\pm\vec{d})$ могут быть взяты произвольные числа. Если в точке $(\pm\vec{d})$ только одна функция $F_{10} \neq 0$, то $\phi(+\vec{d}) = F_{10}(\vec{d})C(1,0)$; $\phi(-\vec{d}) = F_{10}(-\vec{d})C(1,0)$.
Отсюда следует, что отношение $\phi(\vec{d})/\phi(-\vec{d})$ тогда не произвольно, но строго фиксировано, поскольку $F_{10}(\vec{d})$ и $F_{10}(-\vec{d})$ являются двумя конкретными значениями вполне определенной функции. Только если две функции F_{10} и F_{20} не равны нулю в точках $(\pm\vec{d})$, система

$$\begin{aligned} \phi(\vec{d}) &= F_{10}(\vec{d})C_1 + F_{20}(\vec{d})C_2\ , \\ \phi(-\vec{d}) &= F_{10}(-\vec{d})C_1 + F_{20}(-\vec{d})C_2 \end{aligned} \tag{2.7}$$

имеет решения для C_1 и C_2 при произвольных $\phi(\vec{d})$ и $\phi(-\vec{d})$. Конечно, детерминат (2.7) должен быть неравным нулю.

4. Два набора действительных чисел

$$\begin{aligned} & f_{00}(\vec{d}),\ f_{10}(\vec{d}),\ f_{20}(\vec{d}),\dots \\ & f_{00}(-\vec{d}),\ f_{10}(-\vec{d}),\ f_{20}(-\vec{d}),\dots \end{aligned} \tag{2.8}$$

можно рассматривать как проекции двух векторов (в гильбертовом пространстве). В сферических координатах $\vec{d} = \{d,0,0\}$, $-\vec{d} = \{d,\pi,0\}$.
Из-за $Y_{\ell 0}(\pi,0) = (-1)^\ell\, Y_{\ell 0}(0,0)$ векторы (2.8) отличаются только знаками

нечётных компонент. В геометрической интерпретации задача U заключается в таком повороте векторов (2.8), чтобы только две проекции у каждого из повернутых векторов оказались неравными нулю. Все столбцы бесконечной матрицы U должны быть ортогональными и нормированными и строки тоже[8]. Тогда U унитарна и функции F ортонормированны и составляют полную систему.

Первые два столбца U обязательно должны быть линейными суперпозициями векторов (2.8). Только тогда $F_{30}(\pm\vec{d})$, $F_{40}(\pm\vec{d})$ и т.д. будут равняться нулю. Действительно, $\sum_{\ell} f_{\ell_0}(\pm\vec{d})\,U_{\ell 3} = 0$, если третий столбец $U_{\ell 3}$ ортогонален к обоим векторам (2.8). Это так и будет, если первые два столбца унитарной матрицы U являются суперпозициями (2.8), причём ортогональными и нормированными. В качестве таких возьмем векторы

$$g_+ = \{ N_+ [f_{\ell_0}(\vec{d}) + f_{\ell_0}(-\vec{d})] \} = \{ 2N_+ f_{00}(\vec{d}), 0, 2N_+ f_{20}(\vec{d}), 0, \ldots \}, \qquad (2.9)$$

$$g_- = \{ N_- [f_{\ell_0}(\vec{d}) - f_{\ell_0}(-\vec{d})] \} = \{ 0, 2N_- f_{10}(\vec{d}), 0, \ldots \}.$$

Нормировочные коэффициенты вычисляются с помощью формулы (1) в[9]:

$$N_+^{-2} = 4\sum_{n=0}^{\infty} f^2_{2n,0}(\vec{d}) = \frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}(4n+1)\,j^2_{2n}(kd) = \frac{1}{\pi^2}\left(1 + \frac{\sin 2kd}{2kd}\right),$$

$$N_-^{-2} = 4\sum_{n=0}^{\infty} f^2_{2n+1,0}(\vec{d}) = \frac{1}{\pi^2}\left(1 - \frac{\sin 2kd}{2kd}\right). \qquad (2.10)$$

Заметим, что можно положить равными нулю все чётные элементы нечётных столбцов, как это сделано у g_+, а также все нечётные элементы чётных столбцов, как у g_-. Тогда все нечётные столбцы будут ортогональны к чётным и достаточно решить "половину задачи": найти унитарную матрицу U_+ с действительным вектором $g_+ = \{2N_+ f_{00}(\vec{d}), 2N_+ f_{20}(\vec{d}), \ldots\}$ в качестве первого столбца. Для матрицы конечного порядка это можно сделать, например, следующим образом.

Возможно выписать самый общий вид ортогональной матрицы n-ого порядка, т.е. выразить все её элементы через $n(n-1)/2$ независимых параметров. Такая матрица может быть получена как произведение матриц вращения $g_{k+1,k}(\theta)$ в плоскости $(k+1,k)$ на угол Эйлера θ, см.[10], гл. IX, §1. Возьмем матрицу частного вида:

$$g = g_{n,n-1}(\theta_{n-1}) \ldots g_{43}(\theta_3)\, g_{32}(\theta_2)\, g_{21}(\theta_1).$$

$$g = \begin{array}{c|lllll}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & \ldots \\
\hline
1 & \cos\theta_1 & -\sin\theta_1 & 0 & 0 & \ldots \\
2 & \sin\theta_1\cos\theta_2 & \cos\theta_1\cos\theta_2 & -\sin\theta_2 & 0 & \ldots \\
3 & \sin\theta_1\sin\theta_2\cos\theta_3 & \cos\theta_1\sin\theta_2\cos\theta_3 & \cos\theta_2\cos\theta_3 & -\sin\theta_3 & \ldots \\
4 & \sin\theta_1\sin\theta_2\sin\theta_3\cos\theta_4 & \cos\theta_1\sin\theta_2\sin\theta_3\cos\theta_4 & \cos\theta_2\sin\theta_3\cos\theta_4 & \cos\theta_3\cos\theta_4 & \ldots \\
\ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots & \ldots
\end{array} \qquad (2.11)$$

Элементы g_{ik} всех столбцов, кроме первого, имеют такой общий вид:

$$g_{ik} = \begin{cases} 0 & \text{при } i < k-1, \\ -\sin\theta_{k-1} & \text{при } i = k-1, \\ \cos\theta_1 \sin\theta_2 \ldots \sin\theta_{i-1}\cos\theta_i & \text{при } n > i > k-1, \\ \cos\theta_1 \sin\theta_2 \ldots \sin\theta_{i-1}\sin\theta_i & \text{при } i = n. \end{cases} \qquad (2.12)$$

Первый же столбец состоит из проекций $x_1, x_2, \ldots$ произвольного единичного вектора в сферических координатах в n-мерном пространстве. Если теперь приравнять эти проекции элементам первого столбца g^+ матрицы U_+ и заменить в (2.12) углы $\theta_1, \theta_2, \ldots$ их выражениями через $N_+ f_{00}(\vec{d})$, $N_+ f_{20}(\vec{d})$ и т.д., то получим пример ортогональной (т. е. унитарной и действительной) матрицы с заданным первым столбцом.

Бесконечную унитарную матрицу можно строить таким способом. Присоединим к g_+ и g_- другие столбцы, про которые известно, что они вместе с g_+ и g_- образуют полный базис нашего гильбертова пространства. В качестве таковых возьмем векторы $e_3=\{0,0,1,0,0,...\}$, $e_4=\{0,0,0,1,0,..\}$ и т.д. . Первые два вектора этого базиса – $e_1=\{\delta_{k1}\}$, $e_2=\{\delta_{k2}\}$ не берем потому, что они совпадают с g_+ и g_- в частном случае $kd=0$ (а нам нужны векторы, линейно независимые от g_+ и g_-). Затем вместо третьего столбца матрицы

$$\begin{pmatrix} g_{+0} & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & g_{-1} & 0 & 0 & \dots \\ g_{+2} & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & g_{-3} & 0 & 1 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \tag{2.13}$$

берём линейную суперпозицию g_+ , g_- и e_3 , ортогональную к g_+ и g_- и нормированную. То же делаем с четвёртым столбцом и т.д. , см. /11/, Такая последовательная ортогонализация (способ Шмидта) дает нам матрицу U такую, что $U^+U=1$. Однако бесконечная матрица будет унитарной, если ещё и $UU^+=1$ /8/. Мы знаем, что столбцы полученной матрицы $g_+\equiv\vec U_1$; $g_-\equiv\vec U_2$; $\{U_{k3}\}\equiv\vec U_3$,.... составляют полную систему. Тогда проекция любого вектора $\vec h$ на эту систему $\sum_{n=1}^{\infty}\vec U_n(\vec U_n\vec h)$ должна совпадать с $\vec h$. Если $\vec h=\{1,0,0,..\}$, то получаем

$$h_k=\sum_n U_{kn}\sum_\ell U^*_{\ell n}h_\ell=\sum_n U_{kn}U^*_{1n} ,$$

что должно равняться δ_{k1} . Беря в качестве $\vec h$ векторы $\vec e_2=\{\delta_{k2}\}$, $\vec e_3$ и т.д., убеждаемся, что для построенной матрицы должна быть справедлива система соотношений $UU^+=1$.

Может быть, полезно будет указать простую унитарную матрицу U_+ восьмого порядка, см. (2.14). Элементы g^+ обозначены цифрами от 1 до 8, цифра с минусом обозначает соответствующий элемент, взятый с обратным знаком. Заметим, что матрицу бо́льшего порядка по способу (2.14) построить нельзя.

Конкретный выбор U должен определяться деталями задачи. Для многих задач вообще нужны только функции F_{10} и F_{20} . Для их нахождения достаточно знать только два первые столбца U , т.е. g_+ и g_- .

$$\begin{pmatrix} 1 & -2 & -3 & -4 & -5 & -6 & -7 & -8 \\ 2 & 1 & -4 & 3 & -6 & 5 & -8 & 7 \\ 3 & 4 & 1 & -2 & 7 & -8 & -5 & 6 \\ 4 & -3 & 2 & 1 & -8 & -7 & 6 & 5 \\ 5 & 6 & -7 & 8 & 1 & -2 & 3 & -4 \\ 6 & -5 & 8 & 7 & 2 & 1 & -4 & -3 \\ 7 & 8 & 5 & -6 & -3 & 4 & 1 & -2 \\ 8 & -7 & -6 & -5 & 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \tag{2.14}$$

Приведем значения $F_{10}(\pm\vec d)$ и $F_{20}(\pm\vec d)$:

$$F_{10}(\vec d)=2N_+(f_{00}^2+f_{20}^2+\dots)=\frac{1}{2N_+}=F_{10}(-\vec d),$$
$$F_{20}(\vec d)=2N_-(f_{10}^2+f_{30}^2+\dots)=\frac{1}{2N_-}=-F_{20}(-\vec d) . \tag{2.15}$$

Детерминант (2.7) оказывается равным $-\frac{1}{2N_+N_-}\neq 0$.

Отметим еще, что функции $F_{kLm}(r,\theta,\phi)$, построенные по формуле (2.5), являются суперпозицией функций $f_{k\ell m}(r,\theta,\phi)$ с одним и тем же k и поэтому являются собственными функциями оператора $\hat k^2$.

5. В качестве исходной системы функций для построения двухточечных функций можно брать и другую полную ортонормированную систему, например, вытянутые сфероидальные функции. Однако $f_{k\ell m}(r,\theta,\phi)$ изучены лучше других, в частности, для них известны суммы вида (2.10). Функции с $m\neq 0$ уже обращаются в нуль на оси Z , и задача сводится к построению матрицы U с двумя входами (двумерной). Хотя в случае вытянутых сфероидальных функций точки $(\pm\vec d)$ могут быть сделаны начальными точками координат ($\xi=1$, $\cos\eta=\pm 1$), но их значения и в этих точках надо находить по таблицам (как и значения $j_\ell(kd)$).

6. Пусть $\vec d=\{d,\theta_d,\phi_d\}$ и $-\vec d=\{d,\pi-\theta_d,\pi+\phi_d\}$. Функции, обращающиеся в нуль в этих двух точках (кроме первых двух), можно построить точно так же, как и в случае $\vec d=\{d,0,0\}$, если взять в качестве исходных

1. Сначала рассмотрим двухточечные суперпозиции магнитных мультиполей. В точках $(\pm\vec{d})$ отличны от нуля только

$$\vec{A}^{(m)}_{k,L,\pm 1}(\vec{d}) = \mp\sqrt{\frac{2L+1}{8\pi}}\, j_L(kd)\,\vec{\xi}_{\pm 1} \equiv a^{(m)}_{k,L,\pm 1}(\vec{d})\,\vec{\xi}_{\pm 1}, \tag{3.5}$$

$$\vec{A}^{(m)}_{k,L,\pm 1}(-\vec{d}) = (-1)^L\,\vec{A}^{(m)}_{k,L,\pm 1}(\vec{d}).$$

Поэтому при $M=0$ и $|M|>1$ матрицу $U(m)$ можно брать как единичную. При $M=\pm 1$

$$\vec{F}^{(m)}_{k,z,\pm 1}(r,\theta,\phi) = \sum_L \vec{A}^{(m)}_{k,L,\pm 1}(r,\theta,\phi)\,U_{Lz}(\pm 1, m); \quad z = 1,2,\ldots$$

$\vec{A}^{(m)}_{k,L,+1}(\pm\vec{d})$ и $\vec{A}^{(m)}_{k,L,-1}(\pm\vec{d})$ параллельны $\vec{\xi}_{+1}$ и $\vec{\xi}_{-1}$, задача матрицы U – так "повернуть" векторы $\{a^{(m)}_{L,+1}(\vec{d})\}$ и $\{a^{(m)}_{L,-1}(\vec{d})\}$, составленные из скалярных величин a, фигурирующих в (3.5), чтобы только по две проекции у повернутых "векторов" оказались не равными нулю. Заметим, что $a^{(m)}_{L,-1}$ от $a^{(m)}_{L,+1}$ отличается только знаком, см. (3.5), поэтому $U(-1,m) = U(1,m) \equiv U(m)$. Матрицу $U(m)$ строим так же, как в § 2. В качестве элементов первых двух столбцов берем:

$$U_{L1}(m) = N^{(m)}_1\,[\,a^{(m)}_{L,1}(\vec{d}) + a^{(m)}_{L,1}(-\vec{d})\,],$$
$$\tag{3.7}$$
$$U_{L2}(m) = N^{(m)}_2\,[\,a^{(m)}_{L,1}(\vec{d}) - a^{(m)}_{L,1}(-\vec{d})\,].$$

Здесь $N^{(m)}_2 = \sqrt{2}\,N_-$, а $N^{(m)\,-2}_1 = N_+^{-2}/2 - j_0^2(\nu d)/\pi$, см. (2.10)

В точках $(\pm\vec{d})$ отличны от нуля только

$$\vec{F}^{(m)}_{1,\pm 1}(\vec{d}) = \frac{1}{2N^{(m)}_1}\,\vec{\xi}_{\pm 1} = \vec{F}^{(m)}_{1,\pm 1}(-\vec{d}),$$
$$\tag{3.8}$$
$$\vec{F}^{(m)}_{2,\pm 1}(\vec{d}) = \frac{1}{2N^{(m)}_2}\,\vec{\xi}_{\pm 1} = -\vec{F}^{(m)}_{2,\pm 1}(-\vec{d}).$$

2. Электрические двухточечные функции. В точках $(\pm\vec{d})$ не равны нулю только

$$\vec{A}^{(e)}_{kLo}(\vec{d}) = \sqrt{\frac{L(L+1)(2L+1)}{\pi k^2 d^2}}\, j_L(kd)\,\vec{\xi}_0 \equiv a^{(e)}_{kLo}(\vec{d})\,\vec{\xi}_0\,; \tag{3.9}$$

$$\vec{A}^{(e)}_{k\,L,\pm 1}(\vec{d}) = \sqrt{\frac{1}{8\pi(2L+1)}}\,[\,(L+1)\,j_{L-1}(kd) - L\,j_L(kd)\,]\,\vec{\xi}_{\pm 1} \equiv$$

$$\equiv a^{(e)}_{kL,\pm 1}(\vec{d})\,\vec{\xi}_{\pm 1}\,; \tag{3.10}$$

$$\vec{A}^{(e)}_{kLM}(-\vec{d}) = (-1)^{L+1}\,\vec{A}^{(e)}_{kLM}(\vec{d}), \quad M = 0, \pm 1.$$

Опять при $|M|>1$ матрицы $U(M,e)$ можно считать единичными. Первые столбцы матриц $U(0,e)$ и $U(1,e)=U(-1,e)$ стоятся точно так же, как и у $U(m)$, но из величин $a^{(e)}_{kLo}(\pm\vec{d})$ и $a^{(e)}_{kL,\pm 1}(\pm\vec{d})$, соответственно. Выпишем значения $\vec{F}^{(e)}$ с $Z=1,2$ в точках $(\pm\vec{d})$:

$$\vec{F}^{(e)}_{10}(\vec{d}) = \frac{1}{2N^{0(e)}_1}\,\vec{\xi}_0 = \vec{F}^{(e)}_{10}(-\vec{d}), \tag{3.11}$$

$$\vec{F}^{(e)}_{1,\pm 1}(\vec{d}) = \frac{1}{2N^{1(e)}_1}\,\vec{\xi}_{\pm 1} = \vec{F}^{(e)}_{1,\pm 1}(-\vec{d}), \tag{3.12}$$

$$\vec{F}^{(e)}_{20}(\vec{d}) = \frac{1}{2N^{0(e)}_2}\,\vec{\xi}_0 = -\vec{F}^{(e)}_{20}(-\vec{d}), \tag{3.13}$$

$$\vec{F}^{(e)}_{2,\pm 1}(\vec{d}) = \frac{1}{2N^{1(e)}_2}\,\vec{\xi}_{\pm 1} = -\vec{F}^{(e)}_{2,\pm 1}(-\vec{d}). \tag{3.14}$$

3. Обозревая (3.8) и (3.11)–(3.14), замечаем, что у нас получилось больше функций, неравных нулю в точках $(\pm\vec{d})$, чем нужно. Для разложения произвольного векторного поля достаточно, чтобы в этих точках не обращались в нуль шесть функций (в скалярном случае достаточно было двух). У нас получилось, что в точках $(\pm\vec{d})$ по $\vec{\xi}_0$ направлено как раз два вектора: $\vec{F}^{(e)}_{10}$ и $\vec{F}^{(e)}_{20}$. А по $\vec{\xi}_{+1}$ направлено четыре: $\vec{F}^{(m)}_{1,1}$, $\vec{F}^{(e)}_{1,1}$, $\vec{F}^{(m)}_{2,1}$ и $\vec{F}^{(e)}_{2,1}$. Оказывается, что из $\vec{F}^{(m)}_{Z1}$ и $\vec{F}^{(e)}_{Z1}$ можно образовать две суперпозиции:

$$\begin{aligned} \vec{a}^{(-)}_{Z1}(r,\theta,\phi) &= \alpha_Z \vec{F}^{(m)}_{Z1}(r,\theta,\phi) + \beta_Z \vec{F}^{(e)}_{Z1}(r,\theta,\phi), \\ \vec{a}^{(+)}_{Z1}(r,\theta,\phi) &= \gamma_Z \vec{F}^{(m)}_{Z1}(r,\theta,\phi) + \delta_Z \vec{F}^{(e)}_{Z1}(r,\theta,\phi), \end{aligned} \tag{3.15}$$

такие, что 1) $\vec{a}^{(-)}_{Z1}$ будет равно нулю в точках $(\pm\vec{d})$; 2) вместе с тем функции $\vec{a}^{(-)}$ и $\vec{a}^{(+)}$ будут нормированы, как и $\vec{F}^{(m)}$ и $\vec{F}^{(e)}$. Для этого коэффициенты суперпозиции в (3.15) достаточно выбрать такими:

$$\alpha_Z = \delta_Z = N^{1(m)}_Z / \sqrt{(N^{1(m)}_Z)^2 + (N^{1(e)}_Z)^2} ;$$

$$-\beta_{Z'} = \gamma_Z = N^{1(e)}_Z / \sqrt{(N^{1(m)}_Z)^2 + (N^{1(e)}_Z)^2} .$$

Аналогичную суперпозицию надо образовать и для $M = -1$. Заметим; что в (3.15) можно считать, что либо Z принимает только два значения, $Z = 1$ и $Z = 2$, либо все значения.

Таким образом, получена такая полная ортонормированная система векторных двухточечных поперечных функций $\vec{a}_{kZM}(r,\theta,\phi)$ для случая, когда $\vec{d}$ направлено по оси Z. При $|M| > 1$ они совпадают с электрическими и магнитными мультиполями (3.1) и (3.2). При $M = 0$ они равны $\vec{A}^{(m)}_{kLo}$ и $\vec{F}^{(e)}_{kZo} = \sum_L \vec{A}^{(e)}_{kLo} U_{LZ}(0,e)$. При $M = \pm 1$ они равны $\vec{a}^{(-)}_{Z,\pm 1}(r,\theta,\phi)$ и $\vec{a}^{(+)}_{Z,+1}(r,\theta,\phi)$. Из них в точках $(\pm\vec{d})$ не равны нулю только $\vec{F}^{(e)}_{10}$, $\vec{F}^{(e)}_{20}$ (см.(3.11) и (3.13)) и

$$\begin{aligned} \vec{a}^{(+)}_{1,\pm 1}(\vec{d}) &= \frac{[(N^{1(m)}_1)^2 + (N^{1(e)}_1)^2]^{1/2}}{2N^{1(m)}_1 N^{1(e)}_1} \vec{\xi}_{\pm 1} = \vec{a}^{(+)}_{1,\pm 1}(-\vec{d}), \\ \vec{a}^{(+)}_{2,\pm 1}(\vec{d}) &= \frac{[(N^{1(m)}_2)^2 + (N^{1(e)}_2)^2]^{1/2}}{2N^{1(m)}_2 N^{1(e)}_2} \vec{\xi}_{\pm 1} = -\vec{a}^{(+)}_{2,\pm 1}(-\vec{d}). \end{aligned} \tag{3.16}$$

В заключение авторы пользуются случаем выразить благодарность Н.Я.Виленкину за обсуждение работы. Один из авторов (М.Ш.) благодарит В.Б.Беляева и Б.Н.Захарьева за обсуждение вопросов приложения двухточечных функций.

Литература

1. M.Born, J.Oppenheimer. Ann.d.Phys.,84, 457 (1927);
R. de L.Kronig. Z.f. Phys., 50, 347 (1928).
2. А.С.Давыдов. Квантовая механика. §116, ГИФМЛ, Москва, 1963.
3. Л.И.Пономарев. Квантовомеханическая задача 3-х тел, взаимодействующих по закону Кулона. Препринт ОИЯИ, Р-4-3011, Дубна,1966.
4. L.Eyges. Journ. Math. Phys., 6, 1320 (1965).
5. N.G. van Kampen. Dan.Mat.Fys.Medd., 26, No 15 (1951).
6. Ф.М.Морс и Г.Ф.Фешбах. Методы теоретической физики, II, ИЛ, Москва, 1960.
7. C.Flammer. Spheroidal wave functions. Stanford, California, 1957.
(Имеется перевод: К.Фламмер. Таблицы волновых сфероидальных функций, ВЦ АН СССР, Москва, 1962).
8. В.И.Смирнов. Курс высшей метематики, т.V, гл. V, §2, п.164. ГИФМЛ, Москва, 1959.
9. Г.Н.Ватсон. Теория Бесселевых функций, ч. 1, гл. V. п. 5.51. ИЛ, Москва, 1949.
10. Н.Я.Виленкин. Специальные функции и теория представлений групп. "Наука", Москва, 1965.
11. Е.Вигнер. Теория групп, гл. 3, ИЛ, Москва, 1961.
12. A.R.Edmonds. CERN 55–26, Geneva, 1955.
(Имеется перевод: А.Эдмондс. Угловые моменты в квантовой механике; в сб. "Деформация атомных ядер", ИЛ, Москва, 1958).

13. В. Гайтлер. Квантовая теория излучения, гл. 1, § 6, ИЛ, Москва, 1956.

14. М. Роуз. Поля мультиполей. § 12, ИЛ, Москва, 1957.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 мая 1967 г.