ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4 - 5040

Л.И. Пономарев, Т.П. Пузынина

ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

V. Алгоритм

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ
И АВТОМАТИЗАЦИИ

1970

Р4 - 5040

Л.И. Пономарев, Т.П. Пузынина

ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

V. Алгоритм

Направлено в ЖВМ и МФ

ОГЛАВЛЕНИЕ

Данная работа содержит описание алгоритмов для вычисления собственных значений $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$ задачи двух центров квантовой механики, ее волновых функций $\varphi_i(\xi,\eta;R)$, а также некоторых матричных элементов по этим функциям. В соответствии с задачами алгоритма в данной работе отсутствует обоснование выбора методики, зато подробно изложены практические рецепты ее реализации. Программа вычислений записана на языке ФОРТРАН - 63 применительно к вычислительной машине CDC-I604A, находящейся в распоряжении ЛВТА ОИЯИ.

Обозначения

Волновая функция $\varphi_i(\xi,\eta,\varphi;R)$ и собственные значения $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$ задачи двух центров, то есть задачи о движении частицы с отрицательным зарядом Z_3 и массой M_3 в кулоновском поле двух других частиц с зарядами Z_1 и Z_2 и массами M_I и M_2, удаленных на расстояние R друг от друга, определяются из уравнения Шредингера /I-3/

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_{\vec{r}} - \frac{Z_1 Z_3}{r_1} - \frac{Z_2 Z_3}{r_2}\right)\varphi_i(R;\vec{r}) = E_i(R)\,\varphi_i(R;\vec{r}), \qquad (I)$$

где r_1 и r_2 - расстояния от заряда Z_3 до зарядов Z_1 и Z_2 соответственно, а $E_i(R)$- полная энергия (терм) системы в квантовом состоянии i без учета отталкивания частиц Z_1 и Z_2.

В сфероидальных координатах

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}; \qquad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}$$

$$1 \le \xi < \infty \qquad -1 \le \eta \le 1$$

$0 \le \varphi \le 2\pi$ – угол поворота вокруг вектора $\vec{R}$,

функцию $\varphi_i(\vec{r}; R)$ можно представить в виде:

$$\varphi_i(\vec{r}; R) = \varphi_i(\xi, \eta, \varphi; R) = \bar{N}_i X_i(\xi; R) Y_i(\eta; R) e^{im\varphi}. \tag{2}$$

После подстановки разложения (2) в уравнение (I) в мезоатомных единицах $\hbar = Z_3 = \mu = 1$,

$$\frac{1}{\mu} = \frac{1}{M_3} + \frac{1}{M_1 + M_2}$$

получаем систему дифференциальных уравнений, которые связаны между собой через собственные значения $p_i(R)$ и константы разделения $\lambda_i(R)$:

$$\frac{d}{d\xi}\left[(\xi^2-1)\frac{dX_i}{d\xi}\right] + \left[-p_i^2(\xi^2-1) + b'\xi + \lambda_i - \frac{m^2}{\xi^2-1}\right] X_i = 0 \tag{3а}$$

$$\frac{d}{d\eta}\left[(1-\eta^2)\frac{dY_i}{d\eta}\right] + \left[-p_i^2(1-\eta^2) + b\eta - \lambda_i - \frac{m^2}{1-\eta^2}\right] Y_i = 0 \tag{3б}$$

$$1 \le \xi < \infty, \quad -1 \le \eta \le 1.$$

Здесь введены обозначения

$$b = R(Z_2 - Z_1) \qquad b' = R(Z_2 + Z_1) \qquad m \equiv |m|, \tag{4}$$

а нормировка $\bar{N}_i$ определяется из условия

$$\int \varphi_i^2(\xi, \eta; R)\, d\tau = 1 \tag{5}$$

$$\int d\tau = \frac{\pi R^3}{4} \int_1^\infty d\xi \int_{-1}^{1} d\eta (\xi^2 - \eta^2).$$

$$\varphi_i(\xi, \eta; R) = \bar{N}_i X_i(\xi; R) Y_i(\eta; R).$$

В дальнейшем предполагается, что частицы Z_1 и Z_2 помещены в точки $\eta = -1$ и $\eta = 1$ соответственно, причем всегда $Z_1 < Z_2$.

Собственные значения задачи $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$, а также термы $E_i(R)$ зависят от одного непрерывного параметра R, который изменяется в интервале $0 \le R \le \infty$, и заданного набора i квантовых чисел.

При изменении R от 0 до ∞, терм системы $Z_1 Z_2 Z_3$ $E_i(R)$ непрерывно переходит из уровня объединенного атома с зарядом $Z_1 + Z_2$ и набором сферических квантовых чисел $i = \{N\ell m\}$ в уровни изолированных атомов с зарядами Z_1 и Z_2, с наборами параболических квантовых чисел

$$i = [n\, n_1\, n_2\, m] \qquad i' = [n'\, n_1'\, n_2'\, m].$$

В соответствии с этим все термы системы $Z_1 Z_2 Z_3$ разделяются на Z_1-термы и Z_2-термы. В случае Z_1-термов правила соответствия между наборами квантовых чисел $i = \{N\ell m\}$ и $i = [n\, n_1\, n_2\, m]$ задаются формулами /5/:

$$\ell = \begin{cases} 2n_2 + m + n\dfrac{Z_2 - Z_1}{Z_1}, & \text{если } n \cdot \dfrac{Z_2}{Z_1} = \text{целому числу} \\ 2n_2 + m + 1 + Ent\left(n\dfrac{Z_2 - Z_1}{Z_1}\right), & \text{если } n \cdot \dfrac{Z_2}{Z_1} \ne \text{целому числу} \end{cases} \tag{6а}$$

$$n = n_1 + n_2 + m + 1$$

$$N = n_1 + \ell + 1.$$

В случае Z_2-термов формулы (6а) принимают вид:

$$\ell = \begin{cases} n_2' + m, & \text{если } n_2' < n'\dfrac{Z_2 - Z_1}{Z_2} \\ n_2' + m + 1 + Ent\left(n_2' - n'\dfrac{Z_2 - Z_1}{Z_2}\right), & \text{если } n_2' \ge n' \cdot \dfrac{Z_2 - Z_1}{Z_2} \end{cases} \tag{6б}$$

$$n' = n_1' + n_2' + m + 1$$

$$N = n_1' + \ell + 1$$

В особом случае $z_1 = z_2$ следует различать четные термы, для которых

$$\ell = 2n_2 + m, \qquad (7а)$$

и нечетные, для которых

$$\ell = 2n_2 + m + 1. \qquad (7б)$$

В практических приложениях наиболее важен случай термов с равным нулю магнитным квантовым числом ($m = 0$). В этом случае волновые функции задачи не зависят от азимутального квантового числа φ, и выражения для искомых матричных элементов принимают вид:

$$K_{ij}(R) = \int d\tau\, \varphi_i(\xi,\eta;R)(-\Delta_{\vec R})\,\varphi_j(\xi,\eta;R)$$

$$Q_{ij}(R) = \frac{\vec R}{R}\int d\tau\, \varphi_i(\xi,\eta;R)(-\nabla_{\vec R})\,\varphi_j(\xi,\eta;R) \qquad (8)$$

$$R_{ij}(R) = \frac{R}{2}\int d\tau\, \varphi_i(\xi,\eta;R)\,\xi\eta\,\varphi_j(\xi,\eta;R)$$

$$V_{ij}(R) = -\frac{2}{R}\int d\tau\, \varphi_i(\xi,\eta;R)\left[(z_2+z_1)\xi+(z_2-z_1)\eta\right]\varphi_j(\xi,\eta;R).$$

При этом волновые функции $\varphi_i(\xi,\eta;R)$ должны удовлетворять соотношению ортогональности

$$S_{ij}(R) = \int d\tau\, \varphi_i(\xi,\eta;R)\,\varphi_j(\xi,\eta;R) = \delta_{ij}. \qquad (9)$$

Вычисление $p_i(R)$, $\lambda_i(R)$ и $\varphi_i(\xi,\eta,\varphi;R)$

Решение системы уравнений (3) ищем в виде рядов /I-4/

$$X(\xi) = (\xi^2-1)^{m/2}(\xi+1)^{\sigma} e^{-p(\xi-1)}\sum_{s=0}^{N_1} g_s\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^s \qquad (10а)$$

$$Y(\eta) = e^{-p(1-\eta)}\sum_{s=0}^{N_2} c_s P^m_{s+m}(\eta) \qquad (10б)$$

$$\sigma = \frac{b'}{2p} - (m+1)$$

После подстановки разложений (10) в уравнения (3) при каждом фиксированном R задача о собственных значениях ρ и λ сводится к решению системы алгебраических уравнений

$$y_1(\rho,\lambda) = \sigma^{(1)}_{N_1+1}(\rho,\lambda) = 0 \qquad (11а)$$

$$y_2(\rho,\lambda) = \sigma^{(2)}_{N_2+1}(\rho,\lambda) = 0 \qquad (11б)$$

Функции $y_\alpha(\rho,\lambda)$ ($\alpha = 1,2$) вычисляются из рекуррентных соотношений:

$$\sigma^{(1)}_{k+1} = \sigma^{(1)}_k \bar\beta_{N_1-k} - \sigma^{(1)}_{k-1}\cdot\bar\alpha_{N_1-k}\,\bar\gamma_{N_1-k+1} \qquad (12а)$$

$$\sigma^{(2)}_{k+1} = \sigma^{(2)}_k \bar\lambda_{N_2-k} - \sigma^{(2)}_{k-1}\,\bar\rho_{N_2-k}\,\bar\delta_{N_2-k+1}, \qquad (12б)$$

где $\sigma^{(\alpha)}_{-1} = 0$; $\sigma^{(\alpha)}_0 = 1$; $k = 0,1,2,\dots N_\alpha$; $\alpha = 1,2$; (12в)

$$\bar\alpha_s = \alpha_s(1+\beta_s^2)^{-1/2};\quad \bar\beta_s = \beta_s(1+\beta_s^2)^{-1/2};\quad \bar\gamma_s = \gamma_s(1+\beta_s^2)^{-1/2}$$

$$\alpha_s = (s+1)(s+m+1)$$

$$\beta_s = 2s^2 - m(m+1) - \lambda - b' + (2s+m+1)(2p-\sigma) = \qquad (13а)$$

$$= 2s(s+2p-\sigma) - \lambda - 2p\sigma - (m+1)(m+\sigma)$$

$$\gamma_s = (s-1-\sigma)(s-m-1-\sigma).$$

Аналогично:

$$\bar\rho_s = \rho_s(1+\lambda_s^2)^{-1/2};\quad \bar\lambda_s = \lambda_s(1+\lambda_s^2)^{-1/2};\quad \bar\delta_s = \delta_s(1+\lambda_s^2)^{-1/2}$$

$$\rho_s = \frac{(s+2m+1)\left[b-2p(s+m+1)\right]}{2(s+m)+3} \qquad (13б)$$

$$\lambda_s = \lambda + (s+m)(s+m+1)$$

$$\delta_s = \frac{s\left[b+2p(s+m)\right]}{2(s+m)-1}$$

Решив систему (II), коэффициенты разложения g_s и c_s находим из рекуррентных соотношений

$$\alpha_s g_{s+1} - \beta_s g_s + \gamma_s g_{s-1} = 0 \tag{I4а}$$

$$\rho_s c_{s+1} - \lambda_s c_s + \delta_s c_{s-1} = 0 \tag{I4б}$$

при начальных условиях

$$\begin{aligned} g_{-1} &= c_{-1} = 0 \\ g_0 &= c_0 = 1, \end{aligned} \tag{I5}$$

после чего при каждом значении R волновые функции $X_i(\xi\,;R)$ и $Y_i(\eta\,;R)$ можно вычислить с точностью, которая ограничена лишь точностью вычисления собственных значений $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$.

Для совместного решения системы уравнений (II) строим функционал

$$S = \sum_{\alpha=1}^{2} \omega_\alpha y_\alpha^2$$

$$\omega_\alpha = \left[\left(\frac{\partial y_\alpha}{\partial p}\right)^2 + \left(\frac{\partial y_\alpha}{\partial \lambda}\right)^2\right]^{-1} \tag{I6}$$

и находим его минимум S_{min} методом наискорейшего спуска /6/. Значения $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$, которые реализуют минимум функционала S, дают решение краевой задачи (3) при каждом значении R, Z_1, Z_2 и заданном наборе квантовых чисел i. Для вычисления необходимо задать начальные приближения искомых параметров $p_i(R_H)$ и $\lambda_i(R_H)$ при некотором значении $R_H < 1$, шаг ΔR табулирования функций $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$, а также значения производных $\frac{\partial y_\alpha}{\partial p}$ и $\frac{\partial y_\alpha}{\partial \lambda}$, которые легко находятся из выражений (I2) и (I3).

Начальное приближение при $R = R_H < 1$ задается формулами:

$$p = \frac{R}{2}\sqrt{-2E}$$

$$E = -\frac{(Z_1+Z_2)^2}{2N^2} - 2R^2\frac{Z_1 Z_2 (Z_1+Z_2)^2}{N^3(2l-1)(2l+1)(2l+3)}\left[1 - \frac{3m^2}{l(l+1)}\right] \tag{I7}$$

$$\lambda = -l(l+1) - \frac{1}{2}p^2\left[1 + \frac{m^2}{l(l+1)}\right] - \frac{1}{8}\,\frac{R^2(Z_2-Z_1)^2}{N^2}\left[1 - \frac{3m^2}{l(l+1)}\right]$$

Для контроля вычислений термов можно сравнить полученный терм с его асимптотическим выражением при $R \gg 1$ /7/. Для Z_1-термов:

$$E = -\frac{Z_1^2}{2n^2} - \frac{Z_2}{R} + \frac{3Z_2}{2R^2 Z_1} - \frac{Z_2 n^2}{2R^3 Z_1^2}(6\Delta^2 - n^2 + 1) + \frac{Z_2 n^3}{16 Z_1^4 R^4}\Big\{Z_1\Delta(109\Delta^2 - 39n^2 - 9m^2 + 59) - Z_2 n(17n^2 - 3\Delta^2 - 9m^2 + 19)\Big\} + O(R^{-5})$$

$$\begin{aligned}\lambda = {} & 2\kappa + \frac{b}{2p} - \frac{1}{p}\left(\kappa^2 + \tau + \frac{b\kappa}{2p}\right) - \frac{1}{4p^2}\left\{2\kappa^3 + 2\kappa\tau + \frac{b}{2p}(3\kappa^2+\tau) + \frac{b^2\kappa}{4p^2}\right\} - \\ & -\frac{1}{8p^3}\left\{5\kappa^4 + \kappa^2 + 6\kappa^2\tau + \tau^2 + \frac{b}{2p}(10\kappa^3 + 6\kappa\tau + \kappa) + \frac{b^2}{4p^2}(6\kappa^2 + 2\tau) + \right. \\ & \left. + \frac{b^3\kappa}{8p^3}\right\} - \frac{1}{16p^4}\left\{\frac{33}{2}\kappa^5 + \frac{17}{2}\kappa^3 + 3\kappa\tau + 23\kappa^3\tau + \frac{13}{2}\kappa\tau^2 + \frac{b}{2p}\left(\frac{165}{4}\kappa^4 + \right.\right. \\ & \left. + \frac{51}{4}\kappa^2 + \frac{69}{2}\kappa^2\tau + \frac{13}{4}\tau^2 + \frac{3}{2}\tau\right) + \frac{b^2}{4p^2}\left(\frac{71}{2}\kappa^3 + \frac{17}{4}\kappa + \frac{39}{2}\kappa\tau\right) + \\ & \left. + \frac{b^3}{8p^3}(12\kappa^2 + 4\tau) + \frac{b^4}{16p^4}\cdot\frac{5\kappa}{4}\right\} + O(h^{-5}) \quad ,\end{aligned} \tag{I8}$$

где $\Delta = n_1 - n_2$, $\kappa = n_2 + \frac{m+1}{2}$, $\tau = \frac{1-m^2}{4}$.

Для Z_2-термов в формулах (I8) необходимо произвести замены: $n_1 \to n_1'$, $n_2 \to n_2'$, $Z_1 \leftrightarrow Z_2$.

Точность вычисления собственных значений определяется величиной

$$\varepsilon = \max_\alpha \frac{|y_\alpha|}{\left|\lambda\frac{\partial y_\alpha}{\partial \lambda}\right| + \left|p\frac{\partial y_\alpha}{\partial p}\right|}, \qquad \alpha = 1,2. \tag{I9}$$

В большинстве практических расчетов достаточно знать λ и p с 6-7 верными знаками. Для достижения этой точности необходимо положить:

$$\varepsilon = 10^{-7} \qquad N_1 = 50 \qquad N_2 = 100 \ . \tag{20}$$

При такой реализации программы вычисления собственных значений продолжительность счета пары $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$ при каждом значении R на машине CDC-1604A равна ~ 3 сек, а продолжительность вычисления всего терма с шагом $\Delta R = 0{,}025$ на интервале $R = 0{,}025\ (0{,}025)\ 20$ составляет ~ 40 мин.

В таблице I приведены результаты вычислений термов $1s\sigma$, $2s\sigma$ и $2p\sigma$ для системы $z_1 = 1$, $z_2 = 2$, $z_3 = 1$. Некоторые термы систем $z_1 = 1$, $3 \le z_2 \le 8$ вычислены нами ранее /2/. Термы $1s\sigma$ и $2p\sigma$ системы $z_1 = z_2 = 1$ с точностью $\varepsilon = 10^{-11}$ вычислены Пиком /8/.

Вычисление матричных элементов $\hat{K}_{ij}(R)$, $Q_{ij}(R)$, $R_{ij}(R)$, $V_{ij}(R)$

Матричные элементы (8) удобно представить в виде:

$$Q_{ij} = Q_{ij}^{(+)} + \varkappa Q_{ij}^{(-)} \tag{21}$$

$$K_{ij} = K_{ij}^{(+)} + \varkappa K_{ij}^{(-)} + \varkappa^2 K_{ij}^{*} \ , \tag{22}$$

где

$$\varkappa = \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \ .$$

Удобно ввести другие величины

$$\hat{K}_{ij} = K_{ij} - \frac{2Q_{ij}}{R} \ . \tag{23}$$

Тогда:

$$\hat{K}_{ij} = \hat{K}_{ij}^{(+)} + \varkappa \hat{K}_{ij}^{(-)} + \varkappa^2 K_{ij}^{*} \ , \tag{24}$$

причем $\hat{K}_{ij}^{(+)}$ и $\hat{K}_{ij}^{(-)}$ можно разбить на симметричную и антисимметричную части:

$$\begin{aligned} \hat{K}_{ij}^{(+)} &= H_{ij}^{(+)} + \frac{\partial Q_{ij}^{(+)}}{\partial R} \\ \hat{K}_{ij}^{(-)} &= H_{ij}^{(-)} + \frac{\partial Q_{ij}^{(-)}}{\partial R} \end{aligned} \tag{25}$$

с условиями симметрии:

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(\pm)} &= H_{ji}^{(\pm)} \\ Q_{ij}^{(\pm)} &= -Q_{ji}^{(\pm)} \ . \end{aligned} \tag{26}$$

В эллиптических координатах эти интегралы примут вид:

$$Q_{ij}^{(+)} = -\int d\tau\, \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial R} + \frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\, \varphi_i \left[\xi(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \eta(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right]$$

$$Q_{ij}^{(-)} = -\frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\, \varphi_i \left[\eta(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \xi(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right]$$

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(+)} = \int d\tau\, \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}\frac{\partial \varphi_j}{\partial R} &- \frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}\left[\xi(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \eta(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] + \right. \\ &+ \left.\left[\xi(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} + \eta(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\right]\frac{\partial \varphi_j}{\partial R}\right\} + \frac{1}{R^2}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}(\xi^2+\eta^2-1)\left[(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \right. \\ &+ \left.(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(-)} = \frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}&\left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}\left[\eta(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \xi(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] + \left[\eta(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} + \xi(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\right]\cdot\frac{\partial \varphi_j}{\partial R}\right\} \\ &- \frac{2}{R^2}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\,\xi\eta\left[(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}\cdot\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + (1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] \end{aligned}$$

$$K^{*}_{ij} = \frac{1}{R^2}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\left[(\xi^2-1)\frac{\partial\varphi_i}{\partial\xi}\frac{\partial\varphi_j}{\partial\xi} + (1-\eta^2)\frac{\partial\varphi_i}{\partial\eta}\frac{\partial\varphi_j}{\partial\eta}\right].$$

Практически удобно перейти к ненормированным волновым функциям ψ_i, причем:

$$\varphi_i = \overline{N}_i\,\psi_i, \tag{28}$$

и определить вспомогательную нормировку

$$N_i = \overline{N}_i\left(\frac{\pi R^3}{4}\right)^{1/2} \tag{29}$$

После этого все интегралы можно представить в виде:

$$\begin{aligned}
Q^{(+)}_{ij} &= -K^{(1)}_{ij} + \frac{1}{R}Q^{(1)}_{ij}\\
Q^{(-)}_{ij} &= -\frac{1}{R}Q^{(2)}_{ij}\\
H^{(+)}_{ij} &= -K^{*}_{ij} + K^{(2)}_{ij} - \frac{1}{R}\left[K^{(3)}_{ij} + K^{(3)}_{ji}\right] + \frac{1}{R^2}K^{(4)}_{ij}\\
H^{(-)}_{ij} &= \frac{1}{R}\left[K^{(5)}_{ij} + K^{(5)}_{ji}\right] - \frac{2}{R^2}K^{(6)}_{ij}\\
K^{*}_{ij} &= \frac{1}{R^2}K^{(7)}_{ij}
\end{aligned} \tag{30}$$

где интегралы $Q^{(k)}_{ij}$ и $K^{(k)}_{ij}$ определены следующим образом через 25 интегралов $J^{(\alpha)}_{ij}$ по переменной ξ, 25 аналогичных интегралов $I^{(\alpha)}_{ij}$ по переменной η и нормировку N_i (для сокращения записи в дальнейшем опускаем нижние индексы у интегралов, предполагая, что их порядок соответствует порядку индексов в левой части равенств):

$$\begin{aligned}
Q^{(1)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(6)}I^{(1)} + J^{(1)}I^{(6)}\right]\\
Q^{(2)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(4)}I^{(2)} + J^{(2)}I^{(4)}\right]\\
K^{(1)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(14)}I^{(1)} - J^{(1)}I^{(14)} + J^{(3)}I^{(11)} - J^{(11)}I^{(3)}\right] + \frac{\overline{N}_j'}{\overline{N}_j}\delta_{ij}\\
K^{(2)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(19)}I^{(1)} - J^{(1)}I^{(19)} + J^{(15)}I^{(11)} - J^{(11)}I^{(15)} +\right.\\
&\quad \left. + J^{(14)}I^{(12)} - J^{(12)}I^{(14)} + J^{(3)}I^{(18)} - J^{(18)}I^{(3)}\right] +\\
&\quad + \left(\frac{\overline{N}_i'}{\overline{N}_i} - \frac{\overline{N}_j'}{\overline{N}_j}\right)K^{(1)}_{ij} - \left(\frac{3}{R} + \frac{\overline{N}_i'}{\overline{N}_i}\right)\frac{\overline{N}_j'}{\overline{N}_j}\delta_{ij}\\
K^{(3)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(17)}I^{(1)} + J^{(1)}I^{(17)} + J^{(7)}I^{(11)} + J^{(11)}I^{(7)}\right] -\\
&\quad - \frac{\overline{N}_j'}{\overline{N}_j}\left[Q^{(1)}_{ij} + 3\delta_{ij}\right]\\
K^{(3)}_{ji} &= N_i N_j\left[J^{(25)}I^{(1)} + J^{(1)}I^{(25)} + J^{(6)}I^{(12)} + J^{(12)}I^{(6)}\right] + \frac{\overline{N}_i'}{\overline{N}_i}Q^{(1)}_{ij}\\
K^{(4)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(10)}I^{(1)} + J^{(1)}I^{(10)} + J^{(8)}I^{(3)} + J^{(3)}I^{(8)}\right]\\
K^{(5)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(16)}I^{(2)} + J^{(2)}I^{(16)} + J^{(5)}I^{(13)} + J^{(13)}I^{(5)}\right] - \frac{\overline{N}_j'}{\overline{N}_j}\cdot Q^{(2)}_{ij}\\
K^{(5)}_{ji} &= N_i N_j\left[J^{(24)}I^{(2)} + J^{(2)}I^{(24)} + J^{(4)}I^{(23)} + J^{(23)}I^{(4)}\right] + \frac{\overline{N}_i'}{\overline{N}_i}Q^{(2)}_{ij}\\
K^{(6)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(9)}I^{(2)} + J^{(2)}I^{(9)}\right]\\
K^{(7)}_{ij} &= N_i N_j\left[J^{(8)}I^{(1)} + J^{(1)}I^{(8)}\right]
\end{aligned} \tag{3I}$$

В большинстве практических расчетов достаточно знать λ и p с 6-7 верными знаками. Для достижения этой точности необходимо положить:

$$\varepsilon = 10^{-7} \qquad N_1 = 50 \qquad N_2 = 100 \ . \tag{20}$$

При такой реализации программы вычисления собственных значений продолжительность счета пары $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$ при каждом значении R на машине CDC-1604A равна ~ 3 сек, а продолжительность вычисления всего терма с шагом $\Delta R = 0{,}025$ на интервале $R = 0{,}025\ (0{,}025)\ 20$ составляет ~ 40 мин.

В таблице I приведены результаты вычислений термов $1s\sigma$, $2s\sigma$ и $2p\sigma$ для системы $Z_1 = 1$, $Z_2 = 2$, $Z_3 = 1$. Некоторые термы систем $Z_1 = 1$, $3 \le Z_2 \le 8$ вычислены нами ранее /2/. Термы $1s\sigma$ и $2p\sigma$ системы $Z_1 = Z_2 = 1$ с точностью $\varepsilon = 10^{-11}$ вычислены Пиком /8/.

Вычисление матричных элементов $\hat{K}_{ij}(R),\ Q_{ij}(R),\ R_{ij}(R),\ V_{ij}(R)$

Матричные элементы (8) удобно представить в виде:

$$Q_{ij} = Q_{ij}^{(+)} + \varkappa Q_{ij}^{(-)} \tag{21}$$

$$K_{ij} = K_{ij}^{(+)} + \varkappa K_{ij}^{(-)} + \varkappa^2 K_{ij}^{*} \ , \tag{22}$$

где

$$\varkappa = \frac{M_2 - M_1}{M_2 + M_1} \ .$$

Удобно ввести другие величины

$$\hat{K}_{ij} = K_{ij} - \frac{2Q_{ij}}{R} \ . \tag{23}$$

Тогда:

$$\hat{K}_{ij} = \hat{K}_{ij}^{(+)} + \varkappa \hat{K}_{ij}^{(-)} + \varkappa^2 K_{ij}^{*} \ , \tag{24}$$

причем $\hat{K}_{ij}^{(+)}$ и $\hat{K}_{ij}^{(-)}$ можно разбить на симметричную и антисимметричную части:

$$\begin{aligned} \hat{K}_{ij}^{(+)} &= H_{ij}^{(+)} + \frac{\partial Q_{ij}^{(+)}}{\partial R} \\ \hat{K}_{ij}^{(-)} &= H_{ij}^{(-)} + \frac{\partial Q_{ij}^{(-)}}{\partial R} \end{aligned} \tag{25}$$

с условиями симметрии:

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(\pm)} &= H_{ji}^{(\pm)} \\ Q_{ij}^{(\pm)} &= -\,Q_{ji}^{(\pm)} \ . \end{aligned} \tag{26}$$

В эллиптических координатах эти интегралы примут вид:

$$Q_{ij}^{(+)} = -\int d\tau\, \varphi_i \frac{\partial \varphi_j}{\partial R} + \frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\, \varphi_i \left[\xi(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \eta(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right]$$

$$Q_{ij}^{(-)} = -\frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\, \varphi_i \left[\eta(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \xi(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right]$$

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(+)} = {} & \int d\tau\, \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}\frac{\partial \varphi_j}{\partial R} - \frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}\left[\xi(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \eta(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] + \right. \\ & \left. + \left[\xi(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} + \eta(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\right]\frac{\partial \varphi_j}{\partial R}\right\} + \frac{1}{R^2}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}(\xi^2+\eta^2-1)\left[(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \right. \\ & \left. + (1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] \end{aligned} \tag{27}$$

$$\begin{aligned} H_{ij}^{(-)} = {} & \frac{1}{R}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\left\{ \frac{\partial \varphi_i}{\partial R}\left[\eta(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + \xi(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] + \left[\eta(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi} + \xi(1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\right]\cdot\frac{\partial \varphi_j}{\partial R}\right\} - \\ & - \frac{2}{R^2}\int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\,\xi\eta\left[(\xi^2-1)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \xi}\cdot\frac{\partial \varphi_j}{\partial \xi} + (1-\eta^2)\frac{\partial \varphi_i}{\partial \eta}\frac{\partial \varphi_j}{\partial \eta}\right] \end{aligned}$$

$$R_{ij} = N_i N_j \frac{R}{2}\left[J^{(20)} I^{(2)} - J^{(2)} I^{(20)}\right]$$

$$V_{ij} = -N_i N_j \frac{2}{R}\left[(z_2 + z_1) J^{(2)} I^{(1)} + (z_2 - z_1) J^{(1)} I^{(2)}\right]$$

$$S_{ij} = N_i N_j \left[J^{(3)} I^{(1)} - J^{(1)} I^{(3)}\right]$$

$$N_i = \left[J_{ii}^{(3)} I_{ii}^{(1)} - J_{ii}^{(1)} I_{ii}^{(3)}\right]^{-1/2} .$$

Явные выражения для интегралов $J_{ij}^{(\alpha)}$ имеют вид:

$$J_{ij}^{(1)} = \int d\xi\, X_i X_j \qquad J_{ij}^{(2)} = \int d\xi \cdot \xi X_i X_j \qquad J_{ij}^{(3)} = \int d\xi\, \xi^2 X_i X_j$$

$$J_{ij}^{(4)} = \int d\xi (\xi^2-1) X_i \frac{\partial X_j}{\partial \xi}\ ; \quad J_{ij}^{(5)} = \int d\xi (\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial \xi} X_j\ ; \quad J_{ij}^{(6)} = \int d\xi\, \xi(\xi^2-1) X_i \frac{\partial X_j}{\partial \xi} ;$$

$$J_{ij}^{(7)} = \int d\xi \cdot \xi(\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial \xi} X_j\ ; \quad J_{ij}^{(8)} = \int d\xi (\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial \xi} \frac{\partial X_j}{\partial \xi} ; \quad J_{ij}^{(9)} = \int d\xi \cdot \xi(\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial \xi} \frac{\partial X_j}{\partial \xi} ; \qquad (32)$$

$$J_{ij}^{(10)} = \int d\xi\, \xi^2(\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial \xi} \frac{\partial X_j}{\partial \xi} ; \quad J_{ij}^{(11)} = \int d\xi\, X_i \frac{\partial X_j}{\partial R}\ ; \quad J_{ij}^{(12)} = \int d\xi \frac{\partial X_i}{\partial R} X_j ;$$

$$J_{ij}^{(13)} = \int d\xi \cdot \xi X_i \frac{\partial X_j}{\partial R}\ ; \quad J_{ij}^{(14)} = \int d\xi\, \xi^2 X_i \frac{\partial X_j}{\partial R}\ ; \quad J_{ij}^{(15)} = \int d\xi \cdot \xi^2 \frac{\partial X_i}{\partial R} X_j ;$$

$$J_{ij}^{(16)} = \int d\xi (\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial \xi} \frac{\partial X_j}{\partial R}\ ; \quad J_{ij}^{(17)} = \int d\xi \cdot \xi(\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial X_j}{\partial R} ; \quad J_{ij}^{(18)} = \int d\xi \frac{\partial X_i}{\partial R} \frac{\partial X_j}{\partial R} ;$$

$$J_{ij}^{(19)} = \int d\xi \cdot \xi^2 \frac{\partial X_i}{\partial R} \frac{\partial X_j}{\partial R} ; \quad J_{ij}^{(20)} = \int d\xi \cdot \xi^3 X_i X_j ; \quad J_{ij}^{(21)} = \int d\xi\, \xi^4 X_i X_j ;$$

$$J_{ij}^{(22)} = \int d\xi \cdot \xi^5 X_i X_j ; \quad J_{ij}^{(23)} = \int d\xi \cdot \xi \cdot X_j \frac{\partial X_i}{\partial R}\ ; \quad J_{ij}^{(24)} = \int d\xi (\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial R} \frac{\partial X_j}{\partial \xi}\ ;$$

$$J_{ij}^{(25)} = \int d\xi \cdot \xi(\xi^2-1) \frac{\partial X_i}{\partial R} \frac{\partial X_j}{\partial \xi} .$$

Интегралы $I_{ij}^{(\alpha)}$ отличаются от интегралов $J_{ij}^{(\alpha)}$ заменами:

$$\xi \to \eta\ ; \quad \xi^2 - 1 \to 1 - \eta^2\ ; \quad X_i \to Y_i \qquad (33)$$

$$\int_1^\infty d\xi \longrightarrow \int_{-1}^1 d\eta .$$

Вычисление интегралов $J_{ij}^{(\alpha)}$

При вычислении интегралов $J^{(\alpha)}$ удобно перейти к независимой переменной x:

$$x = \frac{\xi + 1}{2} \qquad 1 \le x < \infty , \qquad (34)$$

после чего разложения для функции X (ξ ; R) и ее производных приобретают вид:

$$X_i(\xi ; R) = e^{-2p_i(x-1)} \sum_{s=0}^{\tau_1} g_s^{(i)} x^{\sigma_i - s} (x-1)^s$$

$$\frac{\partial X_i}{\partial \xi} = \frac{1}{2}\Big[-2p_i X_i + \sigma_i e^{-2p_i(x-1)} \sum_{s=0} g_s^{(i)} x^{\sigma_i - s - 1} (x-1)^s + \qquad (35)$$

$$+ e^{-2p_i(x-1)} \sum_{s=0} s g_s^{(i)} x^{\sigma_i - s - 1} (x-1)^{s-1}\Big]$$

$$\frac{\partial X_i}{\partial R} = -2 \frac{\partial p_i}{\partial R}(x-1) X_i + e^{-2p_i(x-1)} \sum_{s=0} \frac{\partial g_s^{(i)}}{\partial R} x^{\sigma_i - s} (x-1)^s +$$

$$+ \frac{\partial \sigma_i}{\partial R} \ln x \cdot X_i .$$

Коэффициенты разложения g_s определяются из рекуррентных соотношений:

$$g_s = \frac{1}{\alpha_{s-1}}\left[\beta_{s-1}\, g_{s-1} - \gamma_{s-1}\, g_{s-2}\right] \qquad (36)$$

$$g_{-1} = 0 \qquad g_0 = 1\ ,$$

причем для величин α_s, β_s и γ_s по-прежнему справедливы формулы (13а).

Используя разложения (35), вычисление интегралов $J_{ij}^{(\alpha)}$ можно свести к чисто алгебраическим операциям, если предварительно определить величины:

$$A_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} g_{\nu-s}^{(i)}\, g_s^{(j)} \qquad B_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} s\, g_{\nu-s}^{(i)}\, g_s^{(j)}$$

$$B_\nu^* = \sum_{s=0}^{\nu} (\nu-s)\, g_{\nu-s}^{(i)}\, g_s^{(j)} \qquad D_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} g_{\nu-s}^{(i)}\, \frac{\partial g_s^{(j)}}{\partial R}$$

$$D_\nu^* = \sum_{s=0}^{\nu} \frac{\partial g_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}\, g_s^{(j)} \qquad F_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} s(\nu-s)\, g_{\nu-s}^{(i)}\, g_s^{(j)} \qquad (37)$$

$$H_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} \frac{\partial g_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R} \cdot \frac{\partial g_s^{(j)}}{\partial R} \qquad R_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} (\nu-s)\, g_{\nu-s}^{(i)}\, \frac{\partial g_s^{(j)}}{\partial R}$$

$$R_\nu^* = \sum_{s=0}^{\nu} s\cdot \frac{\partial g_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}\, g_s^{(j)}$$

и вычислить интегралы:

$$S_\nu^{(\gamma)} = \int_1^\infty dx\cdot e^{-2p(x-1)}\, x^{\sigma+\gamma-\nu}\,(x-1)^\nu$$

$$\Delta_\nu^{(\gamma)} = \int_1^\infty dx\, \ln x\cdot e^{-2p(x-1)}\, x^{\sigma+\gamma-\nu}\,(x-1)^\nu \qquad (38)$$

$$\tilde\Delta_\nu^{(\gamma)} = \int_1^\infty dx\, \ln^2 x\, e^{-2p(x-1)}\, x^{\sigma+\gamma-\nu}\,(x-1)^\nu.$$

Здесь:

$$p = p_i + p_j \qquad \sigma = \sigma_i + \sigma_j\ . \qquad (39)$$

Например, для интеграла $J^{(1)}$ получим:

$$J_{ij}^{(1)} = \int_1^\infty d\xi\, X_i X_j = 2\int_1^\infty dx\, X_i X_j =$$

$$= 2\sum_{k=0}^{\tau_k}\sum_{s=0}^{\tau_s} g_k^{(i)} g_s^{(j)} \int_1^\infty dx\, e^{-2p(x-1)}\, x^{\sigma-k-s}\,(x-1)^{k+s} =$$

$$= 2\sum_{\nu=0}^{\tau_1}\sum_{s=0}^{\nu} g_{\nu-s}^{(i)}\, g_s^{(j)} \int_1^\infty dx\, e^{-2p(x-1)}\, x^{\sigma-\nu}\,(x-1)^\nu = \qquad (40)$$

$$= 2\sum_{\nu=0}^{\tau_1} A_\nu S_\nu^{(0)} = 2 A_\nu S_\nu^{(0)}.$$

(В дальнейшем знак суммы будем опускать).

Значение τ_1 определяется равенством

$$\tau_1 = \min\{\tau_k, \tau_s\}\ , \qquad (41)$$

а значения τ_k и τ_s определяются из условий

$$|g_{\tau_i}^{(i)}| < |g_{\tau_i+1}^{(i)}| \qquad (42)$$

$$|g_{\tau_j}^{(j)}| < |g_{\tau_j+1}^{(j)}|\ ,$$

причем процедура сравнения (42) начинается лишь со значений

$$\tau_i = n_1^{(i)} + 3 \qquad (43)$$

$$\tau_j = n_1^{(j)} + 3.$$

Интегралы $J_{ij}^{(\alpha)}$ выражаются через величины (37) и (38), имеют довольно громоздкий вид и выписаны в Приложении I. Используя формулы (36) и (13а), производные $\frac{\partial g_s^{(i)}}{\partial R}$ можно выразить через производные от параметров $\frac{\partial p_i}{\partial R}$ и $\frac{\partial \lambda_i}{\partial R}$. Последние вычисляются по приближенной формуле Лагранжа для численного дифференцирования с $n = 4$ (пять узлов) /9/. Если термы $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$ вычислены с шагом $\Delta R = 0{,}025$, то погрешность вычисления производных $\frac{\partial p_i}{\partial R}$ и $\frac{\partial \lambda_i}{\partial R}$ меньше, чем $10^{-7} \max\left\{\frac{\partial^5 p_i}{\partial R^5}, \frac{\partial^5 \lambda_i}{\partial R^5}\right\}$, т.е. ограничена лишь точностью вычисления термов.

Интегралы (38) поддаются дальнейшему упрощению:

$$S_\nu^{(\gamma)} = \sum_{n=0}^{\nu} (-)^n C_\nu^n V_s$$

$$\Delta_\nu^{(\gamma)} = \sum_{n=0}^{\nu} (-)^n C_\nu^n W_s \qquad (44)$$

$$\tilde{\Delta}_\nu^{(\gamma)} = \sum_{n=0}^{\nu} (-)^n C_\nu^n \tilde{W}_s \ .$$

Здесь $C_\nu^n = \frac{\nu(\nu-1)\ldots(\nu-n+1)}{n!}$ – биномиальные коэффициенты,

$$s = \sigma + \gamma + 1 - n \qquad (45)$$

$$V_s = \int_1^\infty dx\, e^{-2p(x-1)} x^{s-1} = V_s(1)$$

$$W_s = \int_1^\infty dx \ln x\, e^{-2p(x-1)} x^{s-1} = \int_1^\infty \frac{dx}{x} V_s(x) \qquad (46)$$

$$\tilde{W}_s = \int_1^\infty dx \ln^2 x\, e^{-2p(x-1)} x^{s-1} = 2\int_1^\infty \frac{dx}{x} \ln x\, V_s(x) .$$

Функция $V_s(x)$ выражается через неполную Г-функцию /10/:

$$V_s(x) = \int_x^\infty dx\, e^{-2p(x-1)} x^{s-1} = e^{2px}(2p)^{-s}\Gamma(s, 2px) \qquad (47)$$

и подчиняется рекуррентному соотношению:

$$V_s(x) = \frac{1}{2p}\left[e^{-2p(x-1)} x^{s-1} + (s-1) V_{s-1}(x)\right] , \qquad (48)$$

которое позволяет вычисление интегралов (46) свести к вычислению трех интегралов: $V_{\varepsilon-1}$, $W_{\varepsilon-1}$, $\tilde{W}_{\varepsilon-1}$, где величина ε удовлетворяет условию $0 \le \varepsilon \le 1$ и определяется соотношением:

$$s = \varepsilon + [s]$$

$$[s] = \mathrm{Ent}(s) \ . \qquad (49)$$

После этого рекуррентные соотношения для интегралов (46) примут вид:

при $[s] \ge 0$ $\qquad k = 0, 1, 2, \ldots [s]$

$$V_{\varepsilon+k} = \frac{1}{2p}\left[1 + (\varepsilon+k-1) V_{\varepsilon+k-1}\right]$$

$$W_{\varepsilon+k} = \frac{1}{2p}\left[V_{\varepsilon+k-1} + (\varepsilon+k-1) W_{\varepsilon+k-1}\right] \qquad (50а)$$

$$\tilde{W}_{\varepsilon+k} = \frac{1}{2p}\left[2W_{\varepsilon+k-1} + (\varepsilon+k-1)\tilde{W}_{\varepsilon+k-1}\right]$$

при $[s] \le -2$ $\qquad k = -2, -3, \ldots [s]$

$$V_{\varepsilon+k} = \frac{1}{\varepsilon+k}\left[2p V_{\varepsilon+k+1} - 1\right]$$

$$W_{\varepsilon+k} = \frac{1}{\varepsilon+k}\left[2p W_{\varepsilon+k+1} - V_{\varepsilon+k}\right] \qquad (50б)$$

$$\tilde{W}_{\varepsilon+k} = \frac{1}{\varepsilon+k}\left[2p \tilde{W}_{\varepsilon+k+1} - 2 W_{\varepsilon+k}\right] .$$

После введения функции

$$F(t) = \frac{1}{t} V_{\varepsilon-1}\left(\frac{1}{t}\right) \tag{51}$$

искомые интегралы приобретают простой вид:

$$V_{\varepsilon-1} = F(1)$$
$$W_{\varepsilon-1} = \int_0^1 F(t)\,dt \tag{52}$$
$$\widetilde{W}_{\varepsilon-1} = -2\int_0^1 F(t)\ln t \cdot dt .$$

Таким образом, вся задача вычисления интегралов $J_{ij}^{(\alpha)}$ (α =I,2,..25) сводится к вычислению двух интегралов $W_{\varepsilon-1}$ и $\widetilde{W}_{\varepsilon-1}$ от плавной функции $F(t)$ в конечных пределах $0 \le t \le 1$ и к использованию простых рекуррентных соотношений.

Функция $F(t)$ определяется цепной дробью /II/

$$F(t) = \frac{t^{1-\varepsilon} e^{2p(1-\frac{1}{t})}}{2p + t\sum_{N-1}} , \tag{53}$$

где

$$\sum_k = \frac{N+1-k-\varepsilon}{1 + \dfrac{t(N-k)}{2p + t\sum_{k-1}}} \tag{54}$$

$$k = 0, 1, 2, \ldots, N-1$$

$$\sum_0 = \frac{N+1-\varepsilon}{1 + \dfrac{t \cdot N}{2p}} ; \quad \sum_{-1} = 0 .$$

Чтобы обеспечить точность $\varepsilon = 10^{-9}$ при вычислении функции $F(t)$, достаточно положить $N = 200$. Интегралы $W_{\varepsilon-1}$ и $\widetilde{W}_{\varepsilon-1}$ вычисляются по I6-точечной схеме Гаусса, оценка точности проверяется по разности результатов вычисления по I6-точечной и 8-точечной схемам Гаусса

$$W(16) - W(8) \le 10^{-12} . \tag{55}$$

Во избежание накопления погрешностей при вычислении величин g_s, $\frac{\partial g_s}{\partial R}$, V_s, W_s и $\widetilde{W}_s$ из рекуррентных соотношений, эти вычисления производились с двойной точностью.

Вычисление интегралов $I_{ij}^{(\alpha)}$

Задачу вычисления интегралов $I_{ij}^{(\alpha)}$ (α = I,2,...,25) удается свести к чисто алгебраическим операциям, если вместо разложения (I0б) для волновой функции $Y_i(\eta; R)$ использовать разложение:

$$Y_i(\eta;R) = \begin{cases} \bar{Y}_i = e^{-p_i(1+\eta)} \sum\limits_s \bar{C}_s^{(i)} (1+\eta)^s & \text{при } -1 \le \eta \le 0 \\ \widetilde{Y}_i = e^{-p_i(1-\eta)} \sum\limits_s \widetilde{C}_s^{(i)} (1-\eta)^s & \text{при } 0 \le \eta \le 1 . \end{cases} \tag{56}$$

Оба разложения можно использовать во всей области изменения переменной $-1 \le \eta \le 1$, однако при этом труднее обеспечить их сходимость. При $\eta = 0$ оба разложения (56) совпадают и выполняется очевидное равенство:

$$\bar{Y}(0) = \widetilde{Y}(0) , \tag{57}$$

из которого следует соотношение:

$$\sum_s \bar{C}_s = \sum_s \widetilde{C}_s \tag{58}$$

Равенства (57) и (58) автоматически приводят к условиям на производные

$$\overline{Y}'(0) = \widetilde{Y}'(0) \tag{57a}$$

$$\rho_i\Big(\sum_s \overline{C}_s^{(i)} + \sum_s \widetilde{C}_s^{(i)}\Big) = \sum_s s\,\overline{C}_s^{(i)} + \sum_s s\,\widetilde{C}_s^{(i)}. \tag{58a}$$

При $R \to 0$ разложения (56) должны непрерывно переходить в соответствующие полиномы Лежандра, для которых справедливы равенства

$$P_\ell(1) = 1 \qquad P_\ell(-1) = (-)^\ell . \tag{59}$$

С учетом формул (58) и (59) удобно ввести новые коэффициенты C_s, которые определяются формулой

$$\begin{gathered} \overline{C}_s^{(i)} = \varepsilon_i\, C_s^{(i)} \\ \varepsilon_i = (-)^{\ell_i} \left| \frac{\sum_s \widetilde{C}_s^{(i)}}{\sum_s C_s^{(i)}} \right| \end{gathered} \tag{60}$$

и вычисляются из рекуррентных соотношений:

$$C_s^{(i)} = \frac{1}{\rho_{s-1}}\left[\lambda_{s-1}\, C_{s-1}^{(i)} - \delta_{s-1}\, C_{s-2}^{(i)}\right] , \tag{6I}$$

где

$$\begin{aligned} \rho_s &= 2(s+1)(s+m+1) \\ \lambda_s &= \lambda_i + s(s+1) + b + (2s+m+1)(2p_i+m) \\ \delta_s &= b + 2p_i(s+m) . \end{aligned} \tag{62}$$

Коэффициенты $\widetilde{C}_s^{(i)}$ определяются из аналогичных рекуррентных соотношений после замены $b \to -b$ в формулах (62).

Как и при вычислении интегралов $J^{(\alpha)}$, удобно ввести набор коэффициентов

$$\begin{aligned}
&\widetilde{a}_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}\, \widetilde{C}_s^{(j)} && \widetilde{b}_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} s\, \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}\, \widetilde{C}_s^{(j)} \\
&\widetilde{b}_\nu^* = \sum_{s=0}^{\nu} (\nu-s)\, \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}\, \widetilde{C}_s^{(j)} && \widetilde{d}_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}\, \frac{\partial \widetilde{C}_s^{(j)}}{\partial R} \\
&\widetilde{d}_\nu^* = \sum_{s=0}^{\nu} \frac{\partial \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}\, \widetilde{C}_s^{(j)} && \widetilde{f}_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} s(\nu-s)\, \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}\, \widetilde{C}_s^{(j)} \\
&\widetilde{h}_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} \frac{\partial \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}\, \frac{\partial \widetilde{C}_s^{(j)}}{\partial R} && \widetilde{\tau}_\nu = \sum_{s=0}^{\nu} (\nu-s)\, \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}\, \frac{\partial \widetilde{C}_s^{(j)}}{\partial R} \\
&\widetilde{\tau}_\nu^* = \sum_{s=0}^{\nu} s \cdot \frac{\partial \widetilde{C}_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R} \cdot \widetilde{C}_s^{(j)}
\end{aligned} \tag{63}$$

и аналогичный набор $\overline{a}_\nu$, $\overline{b}_\nu$, ..., $\overline{\tau}_\nu^*$, который отличается от набора (63) заменой $\widetilde{C}_s^{(i)} \to \overline{C}_s^{(i)}$. Определим также интегралы

$$T_\nu = \int_0^1 e^{-p(1-\eta)}(1-\eta)^\nu d\eta = \int_{-1}^0 e^{-p(1+\eta)}(1+\eta)^\nu d\eta , \tag{64}$$

где, как обычно, $p = p_i + p_j$. Эти интегралы вычисляются последовательно из рекуррентных соотношений

$$\begin{aligned} T_\nu &= \frac{1}{p}\left(\nu T_{\nu-1} - e^{-p}\right) \\ T_0 &= \frac{1}{p}\left(1 - e^{-p}\right) ; \quad T_{-1} = T_{-2} = 0 . \end{aligned} \tag{65}$$

После этого все интегралы $I^{(\alpha)}$ выражаются через величины (63) и (65) алгебраически. Например:

$$
\begin{aligned}
I_{ij}^{(1)} &= \int_{-1}^{1} d\eta\, Y_i Y_j = \int_{-1}^{0} d\eta\, \overline{Y}_i \overline{Y}_j + \int_{0}^{1} d\eta\, \widetilde{Y}_i \widetilde{Y}_j = \\
&= \sum_{k=0}^{\tau_k} \sum_{s=0}^{\tau_s} \overline{C}_k^{(i)} \overline{C}_s^{(j)} \int_{-1}^{0} d\eta\, e^{-p(1+\eta)} (1+\eta)^{k+s} + \sum_{k=0}^{\tau_k} \sum_{s=0}^{\tau_s} \widetilde{C}_k^{(i)} \widetilde{C}_s^{(j)} \int_{0}^{1} d\eta\, e^{-p(1-\eta)} (1-\eta)^{k+s} = \\
&= \sum_{\nu=0}^{\tau_2} \overline{a}_\nu T_\nu + \sum_{\nu=0}^{\tau_2} \widetilde{a}_\nu T_\nu = \overline{a}_\nu T_\nu + \widetilde{a}_\nu T_\nu = \\
&= \overline{I}_{ij}^{(1)} + \widetilde{I}_{ij}^{(1)} .
\end{aligned}
\tag{66}
$$

В общем случае любой интеграл $I_{ij}^{(\alpha)}$ представляется в виде суммы

$$I_{ij}^{(\alpha)} = \varepsilon_\alpha \overline{I}_{ij}^{(\alpha)} + \widetilde{I}_{ij}^{(\alpha)} , \tag{67}$$

где $\varepsilon_\alpha = \pm 1$ в зависимости от четности интегралов $I^{(\alpha)}$:

$$\varepsilon_\alpha = \begin{cases} +1 & \text{при } \alpha = 1,3,6,7,8,10,11,12,14,15,17,18,19,21,25 \\ -1 & \text{при } \alpha = 2,4,5,9,13,16,20,22,23,24 \end{cases} , \tag{68}$$

причем интегралы $\overline{I}^{(\alpha)}$ отличаются от интегралов $\widetilde{I}^{(\alpha)}$ лишь заменой $\widetilde{a}_\nu \to \overline{a}_\nu$, $\widetilde{b}_\nu \to \overline{b}_\nu$ и т.д. Все они выписаны в Приложении П. Так же, как и в случае вычисления интегралов $J^{(\alpha)}$, величины $\overline{C}_s$, $\frac{\partial \overline{C}_s}{\partial R}$, $\widetilde{C}_s$, $\frac{\partial \widetilde{C}_s}{\partial R}$ и T_ν вычисляются из рекуррентных соотношений с двойной точностью.

Число членов τ_2 в сумме (66) определяется равенством

$$\tau_2 = \min\{\tau_k, \tau_s\} , \tag{69}$$

а значения τ_k и τ_s определяются из условий

$$\left|\overline{C}_{\tau_k}^{(i)}\right|, \left|\overline{C}_{\tau_s}^{(j)}\right| \leq 10^{-11} \tag{70}$$

и аналогично для коэффициентов $\widetilde{C}_k^{(i)}$ и $\widetilde{C}_s^{(j)}$.

Контроль точности вычислений

Для контроля точности вычислений использованы строгие аналитические соотношения, которые должны выполняться независимо от способа реализации программы вычислений.

1. Соотношение ортогональности

$$S_{ij} = \int d\tau\, \varphi_i(\xi,\eta;R)\, \varphi_j(\xi,\eta;R) = \delta_{ij}$$

выполняется для используемых волновых функций с точностью 10^{-6} - 10^{-8}.

2. При каждом значении R теорема Вириала /12/

$$2 K_{ii}^{*}(R) + V_{ii}(R) = E_i(R) \tag{71}$$

выполняется с точностью 10^{-7}-10^{-9}.

3. Соотношение

$$\hat{K}_{ij}(R) - \hat{K}_{ji}(R) = 2\, \frac{d Q_{ij}(R)}{dR} , \tag{72}$$

которое следует из определений (27), во всей области изменения R выполняется с точностью 10^{-6}-10^{-8}.

Из этих проверок следует, что абсолютная точность численных значений матричных элементов $\varepsilon \sim 10^{-6}$.

Заключение

Изложенный алгоритм вычисления собственных значений $p_i(R)$ и $\lambda_i(R)$, волновых функций $\varphi_i(\xi, \eta, \varphi; R)$ задачи двух центров, а также матричных элементов $\hat{K}_{ij}(R)$ и $Q_{ij}(R)$, позволяет реализовать его на ЭВМ и затем использовать полученные данные в различных прикладных задачах физики атомных столкновений.

Данная работа завершает цикл исследований авторов /2/, начатый в 1964 году. За истекшее время появился ряд работ Хантера, Грея и Причарда /4/, в которых дана другая реализация программы вычислений. В этой программе используется численное дифференцирование волновых функций $X_i(\xi; R)$ и $Y_i(\eta; R)$, что на наш взгляд является ее недостатком. Для справок приводим соотношение между обозначениями нашей работы и работы Хантера и др.

$$
\begin{aligned}
H_{ij}^{(+)} &= -H(R) & \qquad Q_{ij}^{(+)} &= -\tfrac{1}{2}\, I(R) \\
H_{ij}^{(-)} &= -\tfrac{1}{2}\, Z(R) & \qquad Q_{ij}^{(-)} &= -\tfrac{1}{4}\, J(R) \\
K_{ij}^{*} &= -\tfrac{1}{4}\, Q(R) & \qquad V_{ij} &= \tfrac{1}{2}\, V(R) \\
R_{ij} &= DM(R) & \qquad \varkappa &= 2\alpha .
\end{aligned}
\tag{73}
$$

Следует отметить, что знак численных значений матричных элементов $I(R)$ и $J(R)$ в работе /4/ определен неверно. Поэтому при сравнении численных значений $Q_{ij}^{(+)}$ и $Q_{ij}^{(-)}$, полученных разными методами, знак $I(R)$ и $J(R)$ в таблицах работы /4/ должен быть изменен на обратный.

Литература:

1. W.G.Baber, H.R.Hasse, Proc.Camb.Phyl.Soc. 31, 564 (1938); G.Jaffe, Zs.Phys. 87, 535 (1934); Quantum mechanics, v.1, Edited by D.R.Bates, New York, and London, 1961.
2. Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина, ЖЭТФ 52, 1273 (1967), ЖВМ и МФ 8, 1256 (1968). Препринты ОИЯИ Р2-3009, Р2-3012, Дубна, 1966, Р4-3175, Р4-3405, Дубна, 1967.
3. D.R.Bates, K.Ledsham, A.L.Stewart, Phil.Trans.Roy.Soc. A246, 215 (1953). D.R.Bates, T.R.Carson, Proc.Roy.Soc. A234, 207 (1954).
4. G.Hunter, B.F.Gray, H.O.Pritchard, J.Chem.Phys. 45, 3806 (1966), 46, 2146 (1967), 46, 2153 (1967).
5. С.С.Герштейн, В.Д.Кривченков, ЖЭТФ 40, 1491 (1961).
6. С.Н.Соколов, И.Н.Силин, Препринт ОИЯИ Д-810, Дубна, 1961.
7. I.V.Komarov, S.Yu.Slavjanov, Proc.Phys.Soc. ser.2, 1 N.6 1066 (1968).
8. J.M.Peek, J.Chem.Phys. 43, 3004 (1965); Sandia corporation report No. Sc- RR-65-67, 1965.
9. И.С. Березин, Н.П.Жидков, Методы вычислений, Физматгиз, т.1, 1966, т.2, 1959.
10. Н.С.Градштейн, И.М.Рыжик, Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений, М., Физматгиз, 1962.
11. H.S.Wall, Continued Fractions, New York, Pergamon Press, 1948.
12. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Квантовая механика, М., Физматгиз, 1963.

Приложение I

Ниже выписаны выражения для 25 интегралов J_{ij} по переменной ξ через коэффициенты A_ν, B_ν, $\tilde{B}_\nu$, D_ν, $\tilde{D}_\nu$, F_ν, H_ν, R_ν, $\tilde{R}_\nu$, а также интегралы $S_\nu^{(\gamma)}$, $\Delta_\nu^{(\gamma)}$ и $\tilde{\Delta}_\nu^{(\gamma)}$. По двум повторяющимся индексам подразумевается суммирование, знак суммы $\sum\limits_{\nu=0}^{r}$ опущен.

$$J_{ij}^{(1)} = 2A_\nu S_\nu^{(0)}$$

$$J_{ij}^{(2)} = -J_{ij}^{(1)} + 4A_\nu S_\nu^{(1)}$$

$$J_{ij}^{(3)} = J_{ij}^{(1)} + 8A_\nu S_{\nu+1}^{(2)}$$

$$J_{ij}^{(4)} = 4\left\{-2\rho_j A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \sigma_j A_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + B_\nu S_\nu^{(0)}\right\}$$

$$J_{ij}^{(5)} = 4\left[-2\rho_i A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \sigma_i A_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + \tilde{B}_\nu S_\nu^{(0)}\right]$$

$$J_{ij}^{(6)} = -J_{ij}^{(4)} + 8\left[-2\rho_j A_\nu S_{\nu+1}^{(3)} + \sigma_j A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + B_\nu S_\nu^{(1)}\right]$$

$$J_{ij}^{(7)} = -J_{ij}^{(5)} + 8\left[-2\rho_i A_\nu S_{\nu+1}^{(3)} + \sigma_i A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \tilde{B}_\nu S_\nu^{(1)}\right]$$

$$J_{ij}^{(8)} = 2\Big[4\rho_i\rho_j A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} - (2\rho_i\sigma_j + 2\rho_j\sigma_i)A_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + \sigma_i\sigma_j A_\nu S_{\nu+1}^{(0)} -$$
$$-2\rho_i B_\nu S_\nu^{(0)} - 2\rho_j \tilde{B}_\nu S_\nu^{(0)} + \sigma_i B_\nu S_\nu^{(-1)} + \sigma_j \tilde{B}_\nu S_\nu^{(-1)} + F_\nu S_{\nu-1}^{(-2)}\Big]$$

$$J_{ij}^{(9)} = -J_{ij}^{(8)} + 4\Big[4\rho_i\rho_j A_\nu S_{\nu+1}^{(3)} - (2\rho_i\sigma_j + 2\rho_j\sigma_i)A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \sigma_i\sigma_j A_\nu S_{\nu+1}^{(1)} -$$
$$-2\rho_i B_\nu S_\nu^{(1)} - 2\rho_j \tilde{B}_\nu S_\nu^{(1)} + \sigma_i B_\nu S_\nu^{(0)} + \sigma_j \tilde{B}_\nu S_\nu^{(0)} + F_\nu S_{\nu-1}^{(-1)}\Big]$$

$$J_{ij}^{(10)} = J_{ij}^{(8)} + 8\Big[4\rho_i\rho_j A_\nu S_{\nu+2}^{(4)} - (2\rho_i\sigma_j + 2\rho_j\sigma_i)A_\nu S_{\nu+2}^{(3)} + \sigma_i\sigma_j A_\nu S_{\nu+2}^{(2)} -$$
$$-2\rho_i B_\nu S_{\nu+1}^{(2)} - 2\rho_j \tilde{B}_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \sigma_i B_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + \sigma_j \tilde{B}_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + F_\nu S_\nu^{(0)}\Big]$$

$$J_{ij}^{(11)} = 2\left[-2\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + D_\nu S_\nu^{(0)} + \frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \Delta_\nu^{(0)}\right]$$

$$J_{ij}^{(12)} = 2\left[-2\frac{\partial\rho_i}{\partial R} A_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + \tilde{D}_\nu S_\nu^{(0)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R} A_\nu \Delta_\nu^{(0)}\right]$$

$$J_{ij}^{(13)} = -J_{ij}^{(11)} + 4\left[-2\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + D_\nu S_\nu^{(1)} + \frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \Delta_\nu^{(1)}\right]$$

$$J_{ij}^{(14)} = J_{ij}^{(11)} + 8\left[-2\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+2}^{(3)} + D_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \Delta_{\nu+1}^{(2)}\right]$$

$$J_{ij}^{(15)} = J_{ij}^{(12)} + 8\left[-2\frac{\partial\rho_i}{\partial R} A_\nu S_{\nu+2}^{(3)} + \tilde{D}_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R} A_\nu \Delta_{\nu+1}^{(2)}\right]$$

$$J_{ij}^{(16)} = 4\Big[4\rho_i\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+2}^{(3)} - 2\sigma_i\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+2}^{(2)} - 2\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{B}_\nu S_{\nu+1}^{(1)} - 2\rho_i D_\nu S_{\nu+1}^{(2)} +$$
$$+\sigma_i D_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + R_\nu S_\nu^{(0)} - 2\rho_i\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \Delta_{\nu+1}^{(2)} + \sigma_i\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \Delta_{\nu+1}^{(1)} + \frac{\partial\sigma_j}{\partial R}\tilde{B}_\nu \Delta_\nu^{(0)}\Big]$$

$$J_{ij}^{(17)} = -J_{ij}^{(16)} + 8\Big[4\rho_i\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+2}^{(4)} - 2\sigma_i\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+2}^{(3)} - 2\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{B}_\nu S_{\nu+1}^{(2)} -$$
$$-2\rho_i D_\nu S_{\nu+1}^{(3)} + \sigma_i D_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + R_\nu S_\nu^{(1)} - 2\rho_i\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \Delta_{\nu+1}^{(3)} + \sigma_i\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \Delta_{\nu+1}^{(2)} + \frac{\partial\sigma_j}{\partial R}\tilde{B}_\nu \Delta_\nu^{(1)}\Big]$$

$$J_{ij}^{(18)} = 2\Big[4\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+2}^{(2)} - 2\left(\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} + \frac{\partial\rho_j}{\partial R}\frac{\partial\sigma_i}{\partial R}\right)A_\nu \Delta_{\nu+1}^{(1)} + H_\nu S_\nu^{(0)} -$$
$$-2\frac{\partial\rho_i}{\partial R}D_\nu S_{\nu+1}^{(1)} - 2\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{D}_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R}D_\nu \Delta_\nu^{(0)} + \frac{\partial\sigma_j}{\partial R}\tilde{D}_\nu \Delta_\nu^{(0)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R}\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \tilde{\Delta}_\nu^{(0)}\Big]$$

$$J_{ij}^{(19)} = J_{ij}^{(18)} + 8\Big[4\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\frac{\partial\rho_j}{\partial R} A_\nu S_{\nu+3}^{(4)} - 2\left(\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} + \frac{\partial\rho_j}{\partial R}\frac{\partial\sigma_i}{\partial R}\right)A_\nu \Delta_{\nu+2}^{(3)} + H_\nu S_{\nu+1}^{(2)} -$$
$$-2\frac{\partial\rho_i}{\partial R}D_\nu S_{\nu+2}^{(3)} - 2\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{D}_\nu S_{\nu+2}^{(3)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R}D_\nu \Delta_{\nu+1}^{(2)} + \frac{\partial\sigma_j}{\partial R}\tilde{D}_\nu \Delta_{\nu+1}^{(2)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R}\frac{\partial\sigma_j}{\partial R} A_\nu \tilde{\Delta}_{\nu+1}^{(2)}\Big]$$

$$J_{ij}^{(20)} = 2A_\nu\left[8S_\nu^{(3)} - 12S_\nu^{(2)} + 6S_\nu^{(1)} - S_\nu^{(0)}\right]$$

$$J_{ij}^{(21)} = 2A_\nu\left[16S_\nu^{(4)} - 32S_\nu^{(3)} + 24S_\nu^{(2)} - 8S_\nu^{(1)} + S_\nu^{(0)}\right]$$

$$J_{ij}^{(22)} = 2A_\nu\left[32S_\nu^{(5)} - 80S_\nu^{(4)} + 80_\nu^{(3)} - 40S_\nu^{(2)} + 10S_\nu^{(1)} - S_\nu^{(0)}\right]$$

$$J_{ij}^{(23)} = -J_{ij}^{(12)} + 4\left[-2\frac{\partial\rho_i}{\partial R}A_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \tilde{D}_\nu S_\nu^{(1)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R}A_\nu \Delta_\nu^{(1)}\right]$$

$$J_{ij}^{(24)} = 4\left[4\rho_j\frac{\partial\rho_i}{\partial R}A_\nu S_{\nu+2}^{(3)} - 2\sigma_j\frac{\partial\rho_i}{\partial R}A_\nu S_{\nu+2}^{(2)} - 2\frac{\partial\rho_i}{\partial R}B_\nu S_{\nu+1}^{(1)} - 2\rho_j\tilde{D}_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \right.$$

$$\left. + \sigma_j\tilde{D}_\nu S_{\nu+1}^{(1)} + \tilde{R}_\nu S_\nu^{(0)} - 2\rho_j\frac{\partial\sigma_i}{\partial R}A_\nu\Delta_{\nu+1}^{(2)} + \sigma_j\frac{\partial\sigma_i}{\partial R}A_\nu\Delta_{\nu+1}^{(1)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R}B_\nu\Delta_\nu^{(0)}\right]$$

$$J_{ij}^{(25)} = -J_{ij}^{(24)} + 8\left[4\rho_j\frac{\partial\rho_i}{\partial R}A_\nu S_{\nu+2}^{(4)} - 2\sigma_j\frac{\partial\rho_i}{\partial R}A_\nu S_{\nu+2}^{(3)} - 2\frac{\partial\rho_i}{\partial R}B_\nu S_{\nu+1}^{(2)} - 2\rho_j\tilde{D}_\nu S_{\nu+1}^{(3)} + \right.$$

$$\left. + \sigma_j\tilde{D}_\nu S_{\nu+1}^{(2)} + \tilde{R}_\nu S_\nu^{(1)} - 2\rho_j\frac{\partial\sigma_i}{\partial R}A_\nu\Delta_{\nu+1}^{(3)} + \sigma_j\frac{\partial\sigma_i}{\partial R}A_\nu\Delta_{\nu+1}^{(2)} + \frac{\partial\sigma_i}{\partial R}B_\nu\Delta_\nu^{(1)}\right]$$

Приложение II

Ниже выписаны выражения для 25 интегралов $\tilde{I}_{ij}$ по переменной ? через коэффициенты $\tilde{a}_\nu$, $\tilde{b}_\nu$, $\tilde{b}_\nu^*$, $\tilde{d}_\nu$, $\tilde{d}_\nu^*$, $\tilde{f}_\nu$, $\tilde{h}_\nu$, $\tilde{\tau}_\nu$, $\tilde{\tau}_\nu^*$, а также интегралы T_ν. Выражения для интегралов $\bar{I}_{ij}$ отличаются от приведенных ниже заменами $\tilde{a}_\nu \to \bar{a}_\nu$, $\tilde{b}_\nu \to \bar{b}_\nu$ и т.д.

$$\tilde{I}_{ij}^{(1)} = \tilde{a}_\nu T_\nu$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(2)} = \tilde{a}_\nu(T_\nu - T_{\nu+1})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(3)} = \tilde{a}_\nu(T_\nu - 2T_{\nu+1} + T_{\nu+2})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(4)} = \rho_j\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+1} - T_{\nu+2}) - \tilde{b}_\nu(2T_\nu - T_{\nu+1})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(5)} = \rho_i\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+1} - T_{\nu+2}) + \tilde{b}_\nu^*(2T_\nu - T_{\nu+1})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(6)} = \rho_j\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+1} - 3T_{\nu+2} + T_{\nu+3}) - \tilde{b}_\nu(2T_\nu - 3T_{\nu+1} + T_{\nu+2})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(7)} = \rho_i\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+1} - 3T_{\nu+2} + T_{\nu+3}) - \tilde{b}_\nu^*(2T_\nu - 3T_{\nu+1} + T_{\nu+2})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(8)} = \rho_i\rho_j\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+1} - T_{\nu+2}) - \rho_i\tilde{b}_\nu(2T_\nu - T_{\nu+1}) - \rho_j\tilde{b}_\nu^*(2T_\nu - T_{\nu+1}) + \tilde{f}_\nu(2T_{\nu-1} - T_\nu)$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(9)} = \rho_i\rho_j\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+1} - 3T_{\nu+2} + T_{\nu+3}) - \rho_i\tilde{b}_\nu(2T_\nu - 3T_{\nu+1} + T_{\nu+2}) - \rho_j\tilde{b}_\nu^*(2T_\nu -$$

$$- 3T_{\nu+1} + T_{\nu+2}) + \tilde{f}_\nu(2T_{\nu-1} - 3T_\nu + T_{\nu+1})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(10)} = \rho_i\rho_j\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+1} - 5T_{\nu+2} + 4T_{\nu+3} - T_{\nu+4}) - \rho_i\tilde{b}_\nu(2T_\nu - 5T_{\nu+1} + 4T_{\nu+2} - T_{\nu+3}) -$$

$$- \rho_j\tilde{b}_\nu^*(2T_\nu - 5T_{\nu+1} + 4T_{\nu+2} - T_{\nu+3}) + \tilde{f}_\nu(2T_{\nu-1} - 5T_\nu + 4T_{\nu+1} - T_{\nu+2})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(11)} = -\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde{a}_\nu T_{\nu+1} + \tilde{d}_\nu T_\nu$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(12)} = -\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde{a}_\nu T_{\nu+1} + \tilde{d}_\nu^* T_\nu$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(13)} = -\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu(T_{\nu+1} - T_{\nu+2}) + \tilde{d}_\nu(T_\nu - T_{\nu+1})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(14)} = -\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu(T_{\nu+1} - 2T_{\nu+2} + T_{\nu+3}) + \tilde{d}_\nu(T_\nu - 2T_{\nu+1} + T_{\nu+2})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(15)} = -\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde{a}_\nu(T_{\nu+1} - 2T_{\nu+2} + T_{\nu+3}) + \tilde{d}_\nu^*(T_\nu - 2T_{\nu+1} + T_{\nu+2})$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(16)} = -\rho_i\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu(2T_{\nu+2} - T_{\nu+3}) + \rho_i\tilde{d}_\nu(2T_{\nu+1} - T_{\nu+2}) +$$

$$+ \frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde{b}_\nu^*(2T_{\nu+1} - T_{\nu+2}) - \tilde{\tau}_\nu(2T_\nu - T_{\nu+1})$$

$$\tilde I_{ij}^{(17)} = -\rho_i \frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde a_\nu(2T_{\nu+2}-3T_{\nu+3}+T_{\nu+4}) + \rho_i \tilde d_\nu(2T_{\nu+1}-3T_{\nu+2}+T_{\nu+3}) +$$

$$+\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde b_\nu^*(2T_{\nu+1}-3T_{\nu+2}+T_{\nu+3}) - \tilde r_\nu(2T_\nu - 3T_{\nu+1}+T_{\nu+2})$$

$$\tilde I^{(18)}_{ij} = \frac{\partial\rho_i}{\partial R}\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde a_\nu T_{\nu+2} - \frac{\partial\rho_i}{\partial R} d_\nu T_{\nu+1} - \frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde d_\nu T_{\nu+1} + \tilde h_\nu T_\nu$$

$$\tilde I^{(19)}_{ij} = \frac{\partial\rho_i}{\partial R}\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde a_\nu(T_{\nu+2}-2T_{\nu+3}+T_{\nu+4}) - \frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde d_\nu(T_{\nu+1}-2T_{\nu+2}+T_{\nu+3}) -$$

$$-\frac{\partial\rho_j}{\partial R}\tilde d_\nu^*(T_{\nu+1}-2T_{\nu+2}+T_{\nu+3}) + \tilde h_\nu(T_\nu-2T_{\nu+1}+T_{\nu+2})$$

$$\tilde I^{(20)}_{ij} = \tilde a_\nu(T_\nu - 3T_{\nu+1}+3T_{\nu+2}-T_{\nu+3})$$

$$\tilde I^{(21)}_{ij} = \tilde a_\nu(T_\nu-4T_{\nu+1}+6T_{\nu+2}-4T_{\nu+3}+T_{\nu+4})$$

$$\tilde I^{(22)}_{ij} = \tilde a_\nu(T_\nu -5T_{\nu+1}+10T_{\nu+2}-10T_{\nu+3}+5T_{\nu+4}-T_{\nu+5})$$

$$\tilde I^{(23)}_{ij} = -\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde a_\nu(T_{\nu+1}-T_{\nu+2}) + \tilde d^*_\nu(T_\nu - T_{\nu+1})$$

$$\tilde I^{(24)}_{ij} = -\rho_j\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde a_\nu(2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}) + \rho_j\tilde d_\nu^*(2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}) +$$

$$+\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde b_\nu(2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}) - \tilde r^*_\nu(2T_\nu - T_{\nu+1})$$

$$\tilde I^{(25)}_{ij} = -\rho_j\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde a_\nu(2T_{\nu+2}-3T_{\nu+3}+T_{\nu+4}) + \rho_j\tilde d^*_\nu(2T_{\nu+1}-3T_{\nu+2}+T_{\nu+3}) +$$

$$+\frac{\partial\rho_i}{\partial R}\tilde b_\nu(2T_{\nu+1}-3T_{\nu+2}+T_{\nu+3}) - \tilde r^*_\nu(2T_\nu-3T_{\nu+1}+T_{\nu+2})$$

Приложение III

Ниже представлены таблицы матричных элементов по волновым функциям задачи двух центров, вычисленные по формулам данной работы. Все величины даны в единицах задачи ($\hbar = Z_3 = M = 1$) как функции межъядерного расстояния R в интервале значений R = 0,1 (0,1) 5 (0,2) 11 (0,5) 20. Вид таблиц определяется значениями зарядов Z_1 и Z_2, а также наборами квантовых чисел $i=\{N_i, l_i, m\}$ и $j=\{N_j, l_j, m\}$ соответственно термов $E_i(R)$ и $E_j(R)$. Следует различать четыре различных случая.

I. $Z_1 = Z_2 = 1$; $N_i = N_j$, $l_i = l_j$.

Отличны от нуля величины:
$R, E, H^{(+)}, K^*, V, W, \lambda, \bar N$.

2. $Z_1 = Z_2$; $N_i \neq N_j$ или $l_i \neq l_j$.

а) Четность орбитальных моментов l_i и l_j одинакова:
$R, Q^{(+)}, H^{(+)}, \hat K^{(+)}, K^*$.

б) Четность орбитальных моментов l_i и l_j различна:
$R, Q^{(-)}, H^{(-)}, \hat K^{(-)}, R_{ij}$.

3. $Z_1 \neq Z_2$; $N_i = N_j$, $l_i = l_j$
$R, H^{(+)}, H^{(-)}, K^*, V, \bar N, E, \lambda$.

4. $Z_1 \neq Z_2$; $N_i \neq N_j$ или $l_i \neq l_j$
$R, \hat K^{(+)}, \hat K^{(-)}, K^*, Q^{(+)}, Q^{(-)}, S, H^{(+)}, H^{(-)}, V, R_{ij}$.

Каждый лист таблиц имеет заголовок, в котором указаны заряды ядер и символы соответствующей пары термов. Например, для пары термов $1s\sigma - 2p\sigma$, $Z_2 = 2$ заголовок имеет вид:

N	L	M	RMA	Z1	Z2	N1	N2	NM
1	0	0	1	2	1	0	0	1
2	1	0	0	1	2	0	0	1 ,

где $N \equiv N$, $L \equiv l$, $M \equiv m$, RMA – признак терма (RMA = 0 для lZ_1-терма, RMA = 1 для lZ_2-терма), $Z1 \equiv Z_1$, $Z2 \equiv Z_2$, $N1 \equiv n_1$, $N2 \equiv n_2$, $NM \equiv n$.

В данной работе для иллюстрации развитого метода приведены таблицы матричных элементов системы Z_1=I, Z_2=2 для следующих пар термов: $2s\sigma-2s\sigma$, $2p\sigma-2p\sigma$, $2s\sigma-2p\sigma$, $2p\sigma-2s\sigma$.

Более полные таблицы изданы в Издательском отделе ОИЯИ и находятся в библиотеке ОИЯИ.

Рукопись поступила в издательский отдел
I4 апреля I970 года

$2s\sigma-2s\sigma$

N	L	M	RA	Z1	Z2	N1	N2	NM
2	0	0	1	2	1	1	n	2
2	0	0	1	2	1	1	n	2

R	E	K(+)	K(-)	K(*)	V	LAMBDA	NORM
.10	-1.1138311	.355956	-.384703	.547527	-2.208484	-,0020446	.923601
.20	-1.0927980	.456725	-.401682	.519795	-2.130387	-,0078543	.829921
.30	-1.0642691	.504039	-.418787	.491716	-2.047700	-,0168175	.759346
.40	-1.0375558	.520025	-.434478	.466213	-1.969982	-,0283395	.706095
.50	-1.0119520	.520570	-.448576	.443840	-1.899632	-,0419024	.665243
.60	-.9879253	.513965	-.461202	.424414	-1.836753	-,0570648	.633335
.70	-.9655913	.504290	-.472511	.407572	-1.780736	-,0734512	.607997
.80	-.9449145	.493515	-.482637	.392945	-1.730804	-,0907414	.587578
.90	-.9257969	.482568	-.491687	.380200	-1.686197	-,1086623	.570906
1.00	-.9081183	.471868	-.499746	.369057	-1.646231	-,1269818	.557129
1.10	-.8917552	.461581	-.506885	.359277	-1.610310	-,1455033	.545616
1.20	-.8765891	.451753	-.513168	.350664	-1.577917	-,1640619	.535891
1.30	-.8625099	.442382	-.518655	.343051	-1.548611	-,1825209	.527591
1.40	-.8494174	.433445	-.523404	.336297	-1.522011	-,2007684	.520436
1.50	-.8372208	.424917	-.527472	.330285	-1.497791	-,2187146	.514204
1.60	-.8258382	.416775	-.530916	.324914	-1.475667	-,2362892	.508725
1.70	-.8151964	.409002	-.533795	.320099	-1.455395	-,2534387	.503862
1.80	-.8052295	.401585	-.536161	.315768	-1.436765	-,2701238	.499505
1.90	-.7958784	.394516	-.538071	.311857	-1.419593	-,2863180	.495570
2.00	-.7870902	.387786	-.539574	.308314	-1.403719	-,3020046	.491987
2.10	-.7788172	.381389	-.540718	.305093	-1.389004	-,3171757	.488701
2.20	-.7710166	.375317	-.541549	.302155	-1.375327	-,3318302	.485668
2.30	-.7636499	.369563	-.542107	.299466	-1.362582	-,3459723	.482851
2.40	-.7566824	.364117	-.542431	.296998	-1.350678	-,3596108	.480222
2.50	-.7500828	.358968	-.542553	.294724	-1.339531	-,3727573	.477758
2.60	-.7438227	.354105	-.542505	.292625	-1.329072	-,3854262	.475439
2.70	-.7378767	.349516	-.542312	.290680	-1.319237	-,3976332	.473249
2.80	-.7322216	.345188	-.541999	.288875	-1.309971	-,4093954	.471175
2.90	-.7268363	.341106	-.541585	.287194	-1.301224	-,4207302	.469206
3.00	-.7217016	.337259	-.541090	.285626	-1.292954	-,4316555	.467333
3.10	-.7168008	.333631	-.540528	.284160	-1.285121	-,4421889	.465548
3.20	-.7121174	.330211	-.539913	.282787	-1.277691	-,4523481	.463845
3.30	-.7076372	.326985	-.539256	.281498	-1.270633	-,4621500	.462217
3.40	-.7033471	.323941	-.538568	.280286	-1.263919	-,4716112	.460659
3.50	-.6992348	.321068	-.537857	.279145	-1.257524	-,4807477	.459167
3.60	-.6952895	.318353	-.537129	.278068	-1.251426	-,4895747	.457737
3.70	-.6915009	.315787	-.536391	.277051	-1.245604	-,4981067	.456364
3.80	-.6878596	.313361	-.535648	.276090	-1.240039	-,5063576	.455046
3.90	-.6843571	.311064	-.534904	.275179	-1.234716	-,5143407	.453780
4.00	-.6809853	.308888	-.534163	.274316	-1.229617	-,5220684	.452563
4.10	-.6777370	.306825	-.533426	.273497	-1.224730	-,5295526	.451392
4.20	-.6746054	.304868	-.532698	.272718	-1.220042	-,5368043	.450265
4.30	-.6715841	.303010	-.531979	.271978	-1.215540	-,5438342	.449179
4.40	-.6686673	.301245	-.531271	.271273	-1.211214	-,5506523	.448134
4.50	-.6658496	.299565	-.530576	.270602	-1.207053	-,5572680	.447126
4.60	-.6631259	.297968	-.529894	.269962	-1.203049	-,5636902	.446153
4.70	-.6604914	.296446	-.529226	.269351	-1.199193	-,5699273	.445215
4.80	-.6579419	.294995	-.528572	.268767	-1.195476	-,5759873	.444310
4.90	-.6554731	.293611	-.527934	.268210	-1.191892	-,5816776	.443435

N	L	M	R A	Z1	Z2	N1	N2	NM
2	0	0	1	2	1	1	0	2
2	0	0	1	2	1	1	0	2

R	E	K(+)	K(-)	K(*)	V	LAMBDA	NORM
5,00	-.6530813	.292290	-.527310	.267676	-1.188434	-,5876053	.442590
5,20	-.6485143	.289822	-.526109	.266677	-1.181869	-,5985996	.441774
5,40	-.6442147	.287565	-.524968	.265760	-1.175734	-,6090195	.440984
5,60	-.6401592	.285493	-.523887	.264915	-1.169989	-,6189095	.440221
5,80	-.6363276	.283589	-.522864	.264136	-1.164600	-,6283093	.439481
6,00	-.6327014	.281834	-.521895	.263416	-1.159533	-,6372550	.438766
6,20	-.6292645	.280212	-.520979	.262749	-1.154762	-,6457789	.438073
6,40	-.6260022	.278711	-.520113	.262130	-1.150261	-,6539105	.437402
6,60	-.6229014	.277319	-.519295	.261554	-1.146010	-,6616765	.436751
6,80	-.6199503	.276026	-.518520	.261018	-1.141987	-,6691012	.436121
7,00	-.6171384	.274822	-.517788	.260518	-1.138175	-,6762067	.435509
7,20	-.6144557	.273700	-.517095	.260051	-1.134558	-,6830134	.434915
7,40	-.6118937	.272651	-.516438	.259614	-1.131123	-,6895398	.434339
7,60	-.6094443	.271671	-.515817	.259205	-1.127854	-,6958030	.433780
7,80	-.6071001	.270752	-.515228	.258821	-1.124742	-,7018186	.433237
8,00	-.6048546	.269890	-.514669	.258460	-1.121775	-,7076011	.432709
8,20	-.6027015	.269081	-.514139	.258121	-1.118944	-,7131638	.432196
8,40	-.6006352	.268320	-.513636	.257802	-1.116238	-,7185191	.431698
8,60	-.5986507	.267603	-.513158	.257501	-1.113652	-,7236783	.431213
8,80	-.5967430	.266928	-.512703	.257216	-1.111176	-,7286521	.430741
9,00	-.5949079	.266290	-.512271	.256948	-1.108804	-,7334503	.430282
9,20	-.5931412	.265688	-.511860	.256694	-1.106529	-,7380821	.429835
9,40	-.5914392	.265118	-.511468	.256453	-1.104347	-,7425559	.429400
9,60	-.5897983	.264578	-.511094	.256226	-1.102250	-,7468798	.428976
9,80	-.5882153	.264067	-.510738	.256010	-1.100235	-,7510611	.428564
10,00	-.5866873	.263582	-.510399	.255805	-1.098297	-,7551068	.428161
10,20	-.5852113	.263122	-.510074	.255610	-1.096431	-,7590233	.427769
10,40	-.5837848	.262684	-.509765	.255424	-1.094634	-,7628169	.427387
10,60	-.5824053	.262268	-.509468	.255248	-1.092902	-,7664931	.427014
10,80	-.5810705	.261872	-.509185	.255080	-1.091231	-,7700574	.426650
11,00	-.5797783	.261495	-.508914	.254920	-1.089618	-,7735147	.426295
11,50	-.5767212	.260626	-.508285	.254551	-1.085823	-,7817206	.425949
12,00	-.5738897	.259852	-.507720	.254222	-1.082334	-,7893539	.425611
12,50	-.5712599	.259159	-.507209	.253927	-1.079114	-,7964725	.425280
13,00	-.5688108	.258537	-.506746	.253662	-1.076133	-,8031268	.424957
13,50	-.5665245	.257975	-.506326	.253422	-1.073368	-,8093606	.424642
14,00	-.5643852	.257467	-.505943	.253205	-1.070795	-,8152126	.424334
14.50	-.5623792	.257006	-.505594	.253008	-1.068396	-,8207167	.424033
15,00	-.5604943	.256586	-.505274	.252829	-1.066152	-,8259031	.423739
15,50	-.5587200	.256203	-.504981	.252665	-1.064050	-,8307984	.423451
16,00	-.5570468	.255852	-.504710	.252514	-1.062076	-,8354266	.423169
16,50	-.5554663	.255530	-.504461	.252377	-1.060220	-,8398087	.422894
17,00	-.5539709	.255233	-.504231	.252250	-1.058470	-,8439639	.422624
17,50	-.5525541	.254960	-.504019	.252132	-1.056820	-,8479095	.422360
18,00	-.5512097	.254708	-.503821	.252024	-1.055258	-,8516607	.422102
18,50	-.5499323	.254474	-.503638	.251924	-1.053780	-,8552317	.421849
19,00	-.5487171	.254258	-.503468	.251831	-1.052380	-,8586351	.421602
19,50	-.5475596	.254056	-.503309	.251745	-1.051048	-,8618824	.421359
20,00	-.5464558	.253869	-.503161	.251665	-1.049785	-,8649840	.421122

2 pσ-2pσ

N	L	M	R A	Z1	Z2	N1	N2	NM
2	1	0	0	1	2	0		1
2	1	0	0	1	2	0		1

R	E	K(+)	K(-)	K(*)	V	LAMBDA	NORM
.10	-1.128[illegible]30	200.006392	-.377989	.567[illegible]07	-2.262[illegible]17	-2,0032571	.078335
.20	-1.1370225	50.024529	-.386757	.580[illegible]31	-2.298[illegible]85	-2,0131144	.158898
.30	-1.1519798	22.272734	-.400439	.602743	-2.357465	-2,0298295	.241648
.40	-1.1725[illegible]14	12.577353	-.417120	.632[illegible]91	-2.437[illegible]83	-2,0538241	.324849
.50	-1.1977527	8.097402	-.433743	.666[illegible]86	-2.531[illegible]24	-2,0856523	.405377
.60	-1.2263725	5.661902	-.446540	.702[illegible]91	-2.631[illegible]54	-2,1259353	.479351
.70	-1.2565821	4.187118	-.451901	.734[illegible]37	-2.725656	-2,1752716	.543061
.80	-1.2864436	3.225024	-.447246	.759[illegible]80	-2.805404	-2,2341472	.593852
.90	-1.3141665	2.564358	-.431489	.774734	-2.863[illegible]36	-2,3028725	.630559
1.00	-1.3383421	2.093795	-.404990	.779[illegible]37	-2.897[illegible]17	-2,3815604	.653438
1.10	-1.3580486	1.748625	-.369182	.774[illegible]00	-2.906[illegible]48	-2,4701368	.663772
1.20	-1.3728375	1.488383	-.326126	.760121	-2.893[illegible]80	-2,5683706	.663414
1.30	-1.3826514	1.286695	-.278131	.739[illegible]17	-2.861[illegible]87	-2,6759084	.654415
1.40	-1.3877162	1.126095	-.227471	.713[illegible]68	-2.814[illegible]53	-2,7923067	.638776
1.50	-1.3884403	.994997	-.176192	.684[illegible]04	-2.757[illegible]48	-2,9170600	.618313
1.60	-1.3853304	.885733	-.125998	.653[illegible]95	-2.693121	-3,0496243	.594591
1.70	-1.3789302	.793218	-.078188	.622[illegible]21	-2.624173	-3,1894372	.568901
1.80	-1.3697776	.714031	-.033660	.591[illegible]76	-2.553129	-3,3359342	.542273
1.90	-1.3583771	.645798	.007058	.561[illegible]96	-2.481770	-3,4885625	.515496
2.00	-1.3451857	.586792	.043747	.533[illegible]10	-2.411[illegible]05	-3,6467916	.489151
2.10	-1.33[illegible]6051	.535681	.076425	.506[illegible]73	-2.342[illegible]51	-3,8101202	.463647
2.20	-1.3149816	.491389	.105277	.481[illegible]17	-2.277[illegible]16	-3,9780816	.439251
2.30	-1.2986[illegible]82	.453006	.130596	.457[illegible]79	-2.213[illegible]66	-4,1502450	.416123
2.40	-1.2817295	.419751	.152730	.436[illegible]34	-2.153[illegible]97	-4,3262166	.394342
2.50	-1.2645470	.39 944[illegible]	.172051	.416[illegible]13	-2.097174	-4,5056384	.373927
2.60	-1.2472250	.365994	.188925	.398[illegible]27	-2.043[illegible]79	-4,6881859	.354856
2.70	-1.2298964	.344383	.203697	.381[illegible]70	-1.992[illegible]36	-4,8735662	.337080
2.80	-1.2126670	.325667	.216686	.366[illegible]32	-1.945[illegible]30	-5,0615148	.320532
2.90	-1.1956208	.309460	.228174	.352[illegible]04	-1.900[illegible]29	-5,2517930	.305135
3.00	-1.1788232	.295431	.238414	.339[illegible]83	-1.857[illegible]90	-5,4441852	.290809
3.10	-1.1623250	.283298	.247622	.327[illegible]70	-1.818[illegible]6[illegible]	-5,6384962	.277470
3.20	-1.1461642	.272819	.255987	.317[illegible]73	-1.780[illegible]10	-5,8345490	.265040
3.30	-1.13[illegible]3693	.263785	.263670	.307709	-1.745787	-6,0321825	.253441
3.40	-1.1149606	.256021	.270808	.298[illegible]01	-1.712763	-6,2312500	.242601
3.50	-1. 999519	.249376	.277518	.290[illegible]80	-1.681712	-6,4316170	.232452
3.60	-1. 853518	.243719	.283896	.283[illegible]83	-1.652[illegible]19	-6,6331600	.222931
3.70	-1. 711647	.238939	.290025	.276[illegible]55	-1.625[illegible]74	-6,8357654	.213979
3.80	-1. 573919	.234941	.295973	.270[illegible]43	-1.599[illegible]78	-7,0393280	.205544
3.90	-1. 440329	.231639	.301796	.265[illegible]01	-1.575[illegible]35	-7,2437503	.197576
4.00	-1. 310813	.228962	.307539	.260[illegible]89	-1.552[illegible]60	-7,4489418	.190030
4.10	-1. 185345	.226846	.313240	.256[illegible]68	-1.530[illegible]71	-7,6548178	.182867
4.20	-1. 63864	.225233	.318928	.252[illegible]04	-1.510794	-7,8612994	.176049
4.30	-.9946286	.224072	.324624	.248[illegible]64	-1.491[illegible]58	-8,0683124	.169542
4.40	-.9832534	.223319	.330343	.245[illegible]22	-1.474[illegible]97	-8,2757874	.163316
4.50	-.9722525	.222929	.336097	.242749	-1.457750	-8,4836593	.157344
4.60	-.9616169	.222865	.341891	.240[illegible]21	-1.442[illegible]59	-8,6918666	.151601
4.70	-.9513375	.223090	.347725	.238[illegible]15	-1.427768	-8,9003518	.146065
4.80	-.9414[illegible]50	.223569	.353595	.236[illegible]09	-1.414[illegible]24	-9,1090608	.140715
4.90	-.9318[illegible]99	.224270	.359497	.234[illegible]83	-1.401[illegible]76	-9,3179429	.135536

N	L	M	RHA	Z1	Z2	N1	N2	NM
2	1	0	0	1	2	0	[illegible]	1
2	1	0	0	1	2	0	[illegible]	1

R	E	K(+)	K(•)	K(*)	V	LAMBDA	NORM
5.00	-.9225429	.225161	.365418	.233616	-1.389776	-9.5269505	.130511
5.20	-.9049549	.227390	.377272	.231787	-1.368530	-9.9451682	.125626
5.40	-.8885655	.23 027	.389030	.230778	-1.350122	-10.3633968	.120872
5.60	-.8732999	.232862	.400546	.230453	-1.334207	-10.7813675	.116238
5.80	-.8590846	.235706	.411663	.230684	-1.320452	-11.1988596	.111716
6.00	-.8458473	.238406	.422230	.231347	-1.308542	-11.6156992	.107300
6.20	-.8335179	.24 846	.432117	.232332	-1.298182	-12.0317573	.102984
6.40	-.8220280	.242950	.441220	.233536	-1.289100	-12.4469466	.098766
6.60	-.8113117	.244684	.449471	.234871	-1.281053	-12.8612177	.094643
6.80	-.8013063	.246052	.456839	.236261	-1.273829	-13.2745541	.090613
7.00	-.7919522	.247081	.463326	.237648	-1.267249	-13.6869657	.086676
7.20	-.7831937	.247819	.468965	.238986	-1.261167	-14.0984837	.082832
7.40	-.7749789	.248321	.473812	.240245	-1.255469	-14.5091541	.079082
7.60	-.7672602	.248641	.477936	.241404	-1.250068	-14.9190326	.075427
7.80	-.7599939	.248830	.481416	.242453	-1.244900	-15.3281803	.071870
8.00	-.7531406	.248929	.484332	.243390	-1.239920	-15.7366599	.068412
8.20	-.7466646	.248971	.486762	.244217	-1.235100	-16.1445329	.065054
8.40	-.74 5339	.248982	.488779	.244942	-1.230418	-16.5518580	.061799
8.60	-.7347199	.248977	.490450	.245572	-1.225864	-16.9586899	.058649
8.80	-.7291968	.248951	.491700	.245994	-1.221231	-17.3650785	.055605
9.00	-.7239416	.248950	.492848	.246477	-1.216932	-17.7710687	.052668
9.20	-.7189340	.248955	.493802	.246894	-1.212750	-18.1767007	.049840
9.40	-.7141554	.248966	.494595	.247254	-1.208683	-18.5820100	.047120
9.60	-.7095894	.248985	.495259	.247563	-1.204730	-18.9870280	.044509
9.80	-.7052210	.249009	.495815	.247830	-1.200891	-19.3917820	.042006
10.00	-.7010369	.249039	.496285	.248061	-1.197164	-19.7962961	.039610
10.20	-.6970251	.249074	.496683	.248260	-1.193548	-20.2005915	.037322
10.40	-.6931744	.249110	.497022	.248433	-1.190042	-20.6046866	.035138
10.60	-.6894748	.249149	.497314	.248584	-1.186642	-21.0085978	.033057
10.80	-.6859173	.249189	.497566	.248715	-1.183347	-21.4123393	.031078
11.00	-.6824934	.249228	.497785	.248831	-1.180153	-21.8159239	.029196
11.50	-.6744698	.249325	.498221	.249063	-1.172594	-22.8242695	.027411
12.00	-.6671308	.249414	.498544	.249236	-1.165601	-23.8318468	.025719
12.50	-.6603907	.249496	.498795	.249370	-1.159136	-24.8387679	.024116
13.00	-.6541778	.249562	.498986	.249472	-1.153125	-25.8451213	.022601
13.50	-.6484317	.249619	.499138	.249553	-1.147539	-26.8509784	.021169
14.00	-.6431011	.249668	.499261	.249618	-1.142338	-27.8563981	.019817
14.50	-.6381422	.249710	.499362	.249671	-1.137485	-28.8614295	.018542
15.00	-.6335171	.249746	.499446	.249715	-1.132948	-29.8661141	.017341
15.50	-.6291930	.249776	.499516	.249752	-1.128697	-30.8704875	.016210
16.00	-.6251412	.249802	.499575	.249783	-1.124706	-31.8745806	.015146
16.50	-.6213367	.249825	.499626	.249809	-1.120955	-32.8784199	.014146
17.00	-.6177574	.249844	.499669	.249831	-1.117420	-33.8820285	.013206
17.50	-.6143838	.249861	.499706	.249850	-1.114084	-34.8854272	.012324
18.00	-.6111986	.249875	.499738	.249866	-1.110932	-35.8886339	.011497
18.50	-.6081864	.249888	.499766	.249881	-1.107948	-36.8916646	.010721
19.00	-.6053334	.249899	.499789	.249893	-1.105119	-37.8945335	.009994
19.50	-.6026274	.249910	.499811	.249904	-1.102435	-38.8972535	.009313
20.00	-.6000571	.249921	.499831	.249913	-1.099884	-39.8998359	.008676

2sσ-2pσ

N	L	M	RHA	Z1	Z2	N1	N	NM
2	0	0	1	2	1	1		2
2	1	0	0	1	2	0		1

R	K(+)	K(-)	K(*)	Q(•)	Q(-)	H(•)	H(-)	V	RIJ
.10	-4.924250	-.202998	.000175	•.247442	-.007 64	-4.972009	-.075734	-.000351	-.996947
.20	-2.359858	-.342981	.001114	•.241062	-.022785	-2.439209	-.161658	-.002229	-.985813
.30	-1.464003	-.445233	.003048	•.231686	-.042302	-1.571533	-.240679	-.006095	-.964569
.40	-.989876	-.510883	.005925	•.219698	-.062940	-1.121441	-.305450	-.011850	-.932821
.50	-.692164	-.542601	.009528	•.205565	-.082842	-.842046	-.352354	-.019056	-.891731
.60	-.492576	-.543669	.013518	•.189976	-.100591	-.652955	-.380612	-.027036	-.843715
.70	-.357742	-.520709	.017502	•.173767	-.115211	-.520041	-.392132	-.035004	-.791853
.80	-.268559	-.482311	.021109	•.157762	-.126223	-.425190	-.390581	-.042219	-.739162
.90	-.211271	-.436577	.024058	•.142614	-.133605	-.356815	-.380012	-.048116	-.688031
1.00	-.175261	-.389483	.026186	•.128754	-.137669	-.306754	-.363863	-.052371	-.639986
1.10	-.152633	-.344585	.027447	•.116354	-.138900	-.269180	-.344609	-.054893	-.595764
1.20	-.1379 8	-.303577	.027888	•.105431	-.137840	-.240031	-.323875	-.055776	-.555527
1.30	-.127544	-.267 14	.027616	•.095888	-.135303	-.216566	-.302687	-.055231	-.519100
1.40	-.119398	-.234863	.026768	•.087573	-.130845	-.196981	-.281703	-.053536	-.486143
1.50	-.112266	-.206836	.025492	•.080315	-.125752	-.180117	-.261346	-.050984	-.456267
1.60	-.105537	-.182544	.023927	•.073950	-.120 38	-.165239	-.241894	-.047854	-.429096
1.70	-.098949	-.161567	.022194	•.068329	-.113557	-.151886	-.223516	-.044388	-.404293
1.80	-.092436	-.143493	.020393	•.063324	-.107707	-.139766	-.206303	-.040786	-.381567
1.90	-.086026	-.127928	.018601	•.058831	-.101439	-.128693	-.190285	-.037202	-.360673
2.00	-.079783	-.114507	.016872	•.054765	-.095268	-.118542	-.175450	-.033743	-.341402
2.10	-.073776	-.102903	.015242	•.051059	-.089273	-.109222	-.161758	-.030484	-.323578
2.20	-.068062	-.092831	.013733	•.047668	-.083512	-.100661	-.149148	-.027466	-.307048
2.30	-.062681	-.084 46	.012355	•.044527	-.078 19	-.092800	-.137551	-.024710	-.291683
2.40	-.057655	-.076340	.011109	•.041627	-.072816	-.085583	-.126893	-.022217	-.277368
2.50	-.052992	-.069541	.009990	•.038934	-.067910	-.078960	-.117103	-.019981	-.264003
2.60	-.048687	-.063509	.008993	•.036427	-.063302	-.072884	-.108109	-.017986	-.251498
2.70	-.044728	-.058 28	.008107	•.034089	-.058987	-.067309	-.099846	-.016214	-.239777
2.80	-.041097	-.053302	.007321	•.031906	-.054955	-.062193	-.092251	-.014643	-.228767
2.90	-.037773	-.046953	.006626	•.029866	-.051193	-.057498	-.085267	-.013253	-.218408
3.00	-.034734	-.045 18	.006012	•.027958	-.047688	-.053187	-.078842	-.012024	-.208643
3.10	-.031955	-.041444	.005468	•.026173	-.044424	-.049225	-.072927	-.010936	-.199421
3.20	-.029415	-.038 86	.004987	•.024501	-.041386	-.045583	-.067479	-.009973	-.190698
3.30	-.027093	-.035209	.004559	•.022937	-.038560	-.042232	-.062457	-.009119	-.182433
3.40	-.024968	-.032480	.004180	•.021471	-.035932	-.039146	-.057826	-.008360	-.174589
3.50	-.023022	-.029973	.003842	•.020099	-.033487	-.036302	-.053551	-.007684	-.167133
3.60	-.021237	-.027665	.003540	•.018813	-.031212	-.033678	-.049603	-.007080	-.160035
3.70	-.019599	-.025538	.003269	•.017609	-.029 95	-.031255	-.045955	-.006538	-.153267
3.80	-.018094	-.023572	.003026	•.016480	-.027125	-.029016	-.042581	-.006051	-.146805
3.90	-.0167 9	-.021755	.002806	•.015423	-.025290	-.026945	-.039458	-.005612	-.140626
4.00	-.015432	-.020 71	.002607	•.014432	-.023581	-.025027	-.036566	-.005215	-.134710
4.10	-.014254	-.018511	.002427	•.013504	-.021988	-.023249	-.033887	-.004854	-.129037
4.20	-.013166	-.017 63	.002262	•.012631	-.020503	-.021600	-.031402	-.004524	-.123592
4.30	-.012159	-.015719	.002111	•.011814	-.019118	-.020069	-.029097	-.004223	-.118359
4.40	-.011227	-.014470	.001973	•.011048	-.017625	-.018646	-.026957	-.003946	-.113323
4.50	-.01 362	-.013310	.001845	•.010329	-.016618	-.017324	-.024970	-.003691	-.108472
4.60	-.00 9560	-.012231	.001727	•.009655	-.015491	-.016092	-.023124	-.003455	-.103794
4.70	-.008816	-.011228	.001618	•.009022	-.014438	-.014946	-.021408	-.003236	-.099280
4.80	-.008124	-.010295	.001516	•.008428	-.013453	-.013878	-.019812	-.003032	-.094920
4.90	-.007481	-.009428	.001421	•.007879	-.012533	-.012883	-.018328	-.002842	-.090706

N	L	M	RMA	Z1	Z2	N1	N	NM
2	[illegible]	0	1	2	1	1		2
2	1	0	0	1	2	0		1

R	K(+)	K(-)	K(*)	Q(+)	Q(-)	H(+)	H(-)	V	RIJ
5.00	-..6883	-.008623	.001332	-.007347	-.011[illegible]72	-.011954	-.016949	-.002664	[illegible]
5.20	-..5810	-.007[illegible]83	.001171	-.006394	-.010[illegible]13	-.010280	-.014471	-.002342	[illegible]
5.40	-..4883	-.005947	.001028	-.005554	-.008748	-.008823	-.012329	-.002058	[illegible]
5.60	-..4086	-.004892	.00[illegible]901	-.004814	-.007[illegible]52	-.007555	-.010479	-.001803	[illegible]
5.80	-..3[illegible]42	-.003997	.00[illegible]789	-.004163	-.006[illegible]06	-.006453	-.0[illegible]8665	-.001577	[illegible]
6.00	-..2819	-.003245	.00[illegible]688	-.003593	-.005[illegible]92	-.005497	-.0[illegible]7513	-.001376	[illegible]
6.20	-..2325	-.002[illegible]18	.00[illegible]598	-.003089	-.004794	-.004671	-.0[illegible]6338	-.001196	[illegible]
6.40	-..19[illegible]9	[illegible]	.00[illegible]518	-.002658	-.004[illegible]	-.003958	-.0[illegible]5334	-.001037	[illegible]
6.60	-..1563	-.001676	.00[illegible]448	-.002267	-.003[illegible]97	-.003346	-.0[illegible]4479	-.000896	[illegible]
6.80	-..1275	-.001333	.00[illegible]385	-.001934	-.002[illegible]76	-.002823	-.0[illegible]3754	-.000774	[illegible]
7.00	-..1039	-.00[illegible]156	.00[illegible]331	-.001644	-.002[illegible]26	-.002376	-.0[illegible]3141	-.000661	[illegible]
7.20	-..845	-.00[illegible]636	.00[illegible]283	-.001397	-.002[illegible]39	-.001997	-.0[illegible]2625	-.000566	[illegible]
7.40	-..686	-.00066[illegible]	.00[illegible]241	-.001184	-.001[illegible]08	-.001675	-.0[illegible]2190	-.000462	[illegible]
7.60	-..558	-.00[illegible]522	.00[illegible]205	-.001001	-.001[illegible]25	-.001404	-.0[illegible]1826	-.000410	[illegible]
7.80	-..454	-.00[illegible]413	.00[illegible]174	-.000844	-.001[illegible]84	-.001175	-.0[illegible]1522	-.000344	[illegible]
8.00	-..369	-.00[illegible]326	.00[illegible]147	-.000711	-.001[illegible]79	-.000982	-.0[illegible]1267	-.000294	[illegible]
8.20	-..3[illegible]1	-.00[illegible]259	.00[illegible]124	-.000598	-.000[illegible]06	-.000821	-.0[illegible]1054	-.000240	[illegible]
8.40	-..245	-.00[illegible]6	.00[illegible]105	-.000502	[illegible]	-.000685	-.0[illegible]	-.000214	[illegible]
8.60	-..2[illegible]0	-.00[illegible]64	.00[illegible]088	-.000427	-.000[illegible]36	-.000571	-.0[illegible]0729	-.000177	[illegible]
8.80	-..164	[illegible]3	.00[illegible]074	-.000353	-.000[illegible]32	-.000477	-.0[illegible]0606	-.000144	[illegible]
9.00	-..134	[illegible]4	.00[illegible]062	-.000294	-.000[illegible]45	-.000397	-.0[illegible]0504	-.000125	[illegible]
9.20	-..110	[illegible]83	.00[illegible]052	-.000247	-.000[illegible]72	-.000331	-.0[illegible]0419	-.000105	[illegible]
9.40	-..09[illegible]	[illegible]67	.00[illegible]044	-.000208	-.000[illegible]10	-.000275	-.0[illegible]0348	-.000088	[illegible]
9.60	-..074	[illegible]54	.00[illegible]037	-.000172	[illegible]59	-.000229	-.0[illegible]0289	-.000073	[illegible]
9.80	-..06[illegible]	[illegible]43	.00[illegible]031	-.000144	[illegible]16	-.000191	-.0[illegible]0240	-.000061	[illegible]
10.00	-..05[illegible]	[illegible]35	.00[illegible]026	-.000125	[illegible]	-.000159	-.0[illegible]0199	-.000051	[illegible]
10.20	-..041	[illegible]28	.00[illegible]021	-.00010[illegible]	[illegible]	-.000132	-.0[illegible]0165	-.000043	[illegible]
10.40	-..034	[illegible]23	.00[illegible]018	-.000083	[illegible]25	-.000110	-.0[illegible]0137	-.000036	[illegible]
10.60	-..028	[illegible]18	.00[illegible]015	-.000069	[illegible]04	-.000091	-.0[illegible]0114	-.000030	[illegible]
10.80	-..023	[illegible]15	.00[illegible]012	[illegible]	[illegible]	-.000076	-.0[illegible]0094	-.000025	[illegible]
11.00	-..019	[illegible]12	.00[illegible]010	[illegible]	[illegible]	-.000063	-.0[illegible]0078	-.000021	[illegible]
11.50	-..012	[illegible]7	.00[illegible]007	[illegible]	[illegible]45	-.000040	-.0[illegible]0049	-.000013	[illegible]
12.00	-..0[illegible]7	[illegible]4	.00[illegible]004	[illegible]	[illegible]	-.000025	-.0[illegible]0031	-.000008	[illegible]
12.50	-..0[illegible]4	[illegible]3	.00[illegible]003	-.000012	[illegible]	-.000016	-.0[illegible]0019	-.000005	[illegible]
13.00	-..0[illegible]3	[illegible]2	.00[illegible]002	[illegible]	[illegible]	-.000010	-.0[illegible]0012	-.000003	[illegible]
13.50	-..0[illegible]2	[illegible]1	.00[illegible]001	[illegible]	[illegible]07	-.000006	-.0[illegible]0007	-.000002	[illegible]
14.00	-..0[illegible]1	[illegible]1	.00[illegible]001	[illegible]	[illegible]04	-.000004	-.0[illegible]0005	-.000001	[illegible]
14.50	-..0[illegible]1	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	-.000002	-.0[illegible]0003	-.00000[illegible]	[illegible]
15.00	[illegible]	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]02	-.000001	-.0[illegible]0002	-.00000[illegible]	[illegible]
15.50	[illegible]2	[illegible]1	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	-.000001	-.0[illegible]0001	.000000	[illegible]
16.00	[illegible]1	[illegible]1	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	-.000001	-.0[illegible]0001	.000000	[illegible]
16.50	[illegible]	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]	-.0[illegible]0001	.000000	[illegible]
17.00	[illegible]	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]	.0[illegible]0000	.000000	[illegible]
17.50	[illegible]	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]	.0[illegible]0000	.000000	[illegible]
18.00	[illegible]	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]	.0[illegible]0000	.000000	[illegible]
18.50	[illegible]	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]	.0[illegible]0000	.000000	[illegible]
19.00	[illegible]1	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]	.0[illegible]0000	.000000	[illegible]
19.50	[illegible]1	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]	.0[illegible]0000	.000000	[illegible]
20.00	[illegible]4	[illegible]	.00[illegible]000	[illegible]	[illegible]	[illegible]03	.0[illegible]0000	.000000	[illegible]

2 pG-25G

N	L	M	R·A	Z1	Z2	N1	N2	NM
2	1	0	0	1	2	0	0	1
2	0	0	1	2	1	1	0	2

R	K(+)	K(-)	K(*)	Q(+)	Q(-)	H(+)	H(-)	V	RIJ
.10	-5..19799	.051530	.000175	.247443	.007064	-4.972022	-.075734	-.000351	-.996947
.20	-2.518563	.019665	.001114	.241062	.022785	-2.439209	-.161658	-.002229	-.985813
.30	-1.679064	-.036125	.003048	.231686	.042302	-1.571533	-.240679	-.006095	-.964569
.40	-1.253007	-.100 18	.005925	.219697	.062940	-1.121440	-.305450	-.011850	-.932821
.50	-.991927	-.162107	.009528	.205565	.082842	-.842045	-.352354	-.019056	-.891731
.60	-.813331	-.217555	.013518	.189975	.100591	-.652955	-.380612	-.027036	-.843715
.70	-.682340	-.263555	.017502	.173767	.115211	-.520041	-.392132	-.035004	-.791853
.80	-.581821	-.298850	.021109	.157762	.126223	-.425190	-.390581	-.042219	-.739162
.90	-.502358	-.323447	.024058	.142619	.133605	-.356815	-.380012	-.048116	-.688031
1.00	-.438246	-.338243	.026186	.128754	.137669	-.306754	-.363863	-.052371	-.639986
1.10	-.385726	-.344633	.027447	.116354	.138900	-.269180	-.344609	-.054893	-.595764
1.20	-.342154	-.344172	.027888	.105431	.137840	-.240031	-.323875	-.055776	-.555527
1.30	-.305588	-.338361	.027616	.095888	.135003	-.216566	-.302687	-.055231	-.519100
1.40	-.274564	-.328542	.026768	.087573	.130845	-.196981	-.281703	-.053536	-.486143
1.50	-.247968	-.315856	.025492	.080315	.125752	-.180117	-.261346	-.050984	-.456267
1.60	-.224942	-.301244	.023927	.073950	.120038	-.165239	-.241894	-.047854	-.429096
1.70	-.204823	-.285465	.022194	.068329	.113957	-.151886	-.223516	-.044388	-.404293
1.80	-.187096	-.269112	.020393	.063324	.107707	-.139766	-.206303	-.040786	-.381567
1.90	-.171361	-.252642	.018601	.058831	.101439	-.128693	-.190285	-.037202	-.360673
2.00	-.157301	-.236394	.016872	.054765	.095268	-.118542	-.175450	-.033743	-.341402
2.10	-.144667	-.220613	.015242	.051059	.089273	-.109222	-.161758	-.030484	-.323578
2.20	-.133260	-.205464	.013733	.047660	.083512	-.100661	-.149148	-.027466	-.307048
2.30	-.122918	-.191[illegible]56	.012355	.044527	.078019	-.092800	-.137551	-.024710	-.291683
2.40	-.113511	-.177447	.011109	.041627	.072816	-.085583	-.126893	-.022217	-.277368
2.50	-.1[illegible]4928	-.164665	.009990	.038934	.067910	-.078960	-.117103	-.019981	-.264003
2.60	-..97080	-.152709	.008993	.036427	.063302	-.072884	-.108109	-.017986	-.251498
2.70	-..89890	-.141564	.008107	.034089	.058987	-.067309	-.099846	-.016214	-.239777
2.80	-..83290	-.131200	.007321	.031906	.054955	-.062193	-.092251	-.014643	-.228767
2.90	-..77223	-.121581	.006626	.029866	.051193	-.057498	-.085267	-.013253	-.218408
3.00	-..71640	-.112665	.006012	.027958	.047688	-.053187	-.078842	-.012024	-.208643
3.10	-..66496	-.104410	.005468	.026173	.044424	-.049225	-.072927	-.010936	-.199421
3.20	-..61751	-.096771	.004987	.024501	.041386	-.045583	-.067479	-.009973	-.190698
3.30	-. 57371	-.089705	.004559	.022937	.038560	-.042232	-.062457	-.009119	-.182433
3.40	-..53324	-.083171	.004180	.021471	.035932	-.039146	-.057826	-.008360	-.174589
3.50	-..49582	-.077129	.003842	.020099	.033487	-.036302	-.053551	-.007684	-.167133
3.60	-..46119	-.071541	.003540	.018813	.031212	-.033678	-.049603	-.007080	-.160035
3.70	-..42911	-.066372	.003269	.017609	.029095	-.031255	-.045955	-.006538	-.153267
3.80	-..39938	-.061589	.003026	.016480	.027125	-.029016	-.042581	-.006051	-.146805
3.90	-..37181	-.057162	.002806	.015423	.025290	-.026945	-.039458	-.005612	-.140626
4.00	-..34621	-.053[illegible]61	.002607	.014432	.023581	-.025027	-.036566	-.005215	-.134710
4.10	-..32244	-.049262	.002427	.013503	.021988	-.023249	-.033887	-.004854	-.129037
4.20	-..3[illegible]034	-.045741	.002262	.012631	.020503	-.021600	-.031402	-.004524	-.123592
4.30	-..27979	-.042475	.002111	.011814	.019118	-.020069	-.029097	-.004223	-.118359
4.40	-..26066	-.039444	.001973	.011046	.017825	-.018646	-.026957	-.003946	-.113323
4.50	-..24285	-.036630	.001845	.010329	.016618	-.017324	-.024970	-.003691	-.108472
4.60	-..22625	-.034[illegible]17	.001727	.009655	.015491	-.016093	-.023124	-.003455	-.103794
4.70	-..21077	-.031588	.001618	.009022	.014438	-.014946	-.021408	-.003236	-.099280
4.80	-..19632	-.029329	.001516	.008428	.013453	-.013878	-.019812	-.003032	-.094920
4.90	-..18284	-.027228	.001421	.007870	.012533	-.012883	-.018328	-.002842	-.090706

N	L	M	R A	Z1	Z2	N1	N2	NM
2	1	0	0	1	2	0	[illegible]	1
2	0	0	1	2	1	1	1	2

R	K(+)	K(-)	K(*)	Q(+)	Q(-)	H(+)	H(-)	V	RIJ
5.00	-. 17026	-.025274	.001332	. 07347	.011672	-.011954	-.016949	-.002664	-.086630
5.20	-. 14751	-.021760	.001171	. 06394	.010113	-.010280	-.014471	-.002342	-.078870
5.40	-. 12763	-.018712	.001028	. 05554	.008748	-.008823	-.012329	-.002056	-.071599
5.60	-. 11025	-.016 67	.000901	. 04814	.007552	-.007555	-.010479	-.001803	-.064788
5.80	-. 9505	-.013772	.000789	. 04165	.006506	-.006453	-.008885	-.001577	-.058417
6.00	-. 8176	-.011781	.000688	. 0359	.005592	-.005497	-.007513	-.001376	-.052472
6.20	-. 7017	-.010 58	.000598	. 0306	.004794	-.004671	-.006338	-.001196	-.046946
6.40	-. 60 8	-.008567	.000518	. 0265	.004100	-.003958	-.005334	-.001037	-.041832
6.60	-. 5130	-.007281	.000448	. 02267	.003497	-.003346	-.004479	-.000896	-.037125
6.80	-. 4370	-.006 75	.000385	. 01934	.002976	-.002823	-.003754	-.000771	-.032817
7.00	-. 3714	-.005226	.000331	. 0164	.002526	-.002376	-.003141	-.000661	-.028898
7.20	-. 3149	-.004413	.000283	. 01397	.002139	-.001997	-.002625	-.000566	-.025355
7.40	-. 2664	-.003721	.000241	. 01164	.001808	-.001675	-.002190	-.000482	-.022171
7.60	-. 2249	-.003 31	.000205	. 0100	.001525	-.001404	-.001826	-.000410	-.019325
7.80	-. 1896	-.002631	.000174	. 00844	.001284	-.001175	-.001522	-.000348	-.016796
8.00	-. 1595	-.002207	.000147	. 0071	.001 79	-.000982	-.001267	-.000294	-.014559
8.20	-. 1340	-.001850	.000124	. 0059	.000906	-.000821	-.001054	-.000249	-.012590
8.40	-. 1125	-.001549	.000105	. 0050	.000760	-.000685	-.000877	-.000210	-.010863
8.60	-. 943	-.001295	.000088	. 0042	.000636	-.000571	-.000729	-.000177	-.009354
8.80	-. 789	-.001 82	.000074	. 0035	.000532	-.000477	-.000606	-.000148	-.008040
9.00	-. 660	-.000903	.000062	. 0029	.000445	-.000397	-.000504	-.000125	-.006900
9.20	-. 552	-.000754	.000052	. 00247	.000372	-.000331	-.000419	-.000105	-.005912
9.40	-. 461	-.000629	.000044	. 0020	.000310	-.000275	-.000348	-.000088	-.005059
9.60	-. 385	-.000524	.000037	. 00172	.000259	-.000229	-.000289	-.000073	-.004323
9.80	-. 321	-.000436	.000031	. 00144	.000216	-.000191	-.000240	-.000061	-.003690
10.00	-. 268	-.000363	.000026	. 0012	.000180	-.000159	-.000199	-.000051	-.003147
10.20	-. 223	-.000302	.000021	. 0010	.000150	-.000132	-.000165	-.000043	-.002681
10.40	-. 186	-.000252	.000018	. 0008	.000125	-.000110	-.000137	-.000036	-.002281
10.60	-. 155	-.000209	.000015	. 0006	.000104	-.000091	-.000114	-.000030	-.001940
10.80	-. 129	-.000 74	.000012	. 0005	.000 86	-.000076	-.000094	-.000025	-.001648
11.00	-. 1 7	-.000 45	.000010	. 0004	.000 72	-.000063	-.000078	-.000021	-.001399
11.50	-. 068	-.000 91	.000007	. 0003	.000 45	-.000040	-.000049	-.000013	-.000926
12.00	-. 043	-.000 57	.000004	. 0001	.000 28	-.000025	-.000031	-.000008	-.000611
12.50	-. 027	-.000 36	.000003	. 0001	.000 18	-.000016	-.000019	-.000005	-.000401
13.00	-. 017	-.000 22	.000002	. 0000	.000 11	-.000010	-.000012	-.000003	-.000263
13.50	-. 011	-.000 14	.000001	. 0000	.000 07	-.000006	-.000007	-.000002	-.000172
14.00	-. 0 7	-.000 09	.000001	. 0000	.000 04	-.000004	-.000005	-.000001	-.000112
14.50	-. 0 4	-.000 05	.000000	. 0000	.000 03	-.000002	-.000003	-.000001	-.000073
15.00	-. 0 3	-.000 03	.000000	. 0000	.000 02	-.000002	-.000002	-.000001	-.000047
15.50	-. 0 2	-.000 02	.000000	. 0000	.000 01	-.000001	-.000001	.000000	-.000031
16.00	-. 0 1	-.000 01	.000000	. 0000	.000 01	-.000001	-.000001	.000000	-.000020
16.50	-. 0 1	-.000 01	.000000	. 0000	.000 00	.000000	-.000001	.000000	-.000013
17.00	. 0 0	-.000 01	.000000	. 0000	.000 00	.000000	.000000	.000000	-.000009
17.50	. 0 0	.000 00	.000000	. 0000	.000 00	.000000	.000000	.000000	-.000006
18.00	. 0 0	.000 00	.000000	. 0000	.000 00	.000000	.000000	.000000	-.000004
18.50	. 0 0	.000 00	.000000	. 0000	.000 00	.000000	.000000	.000000	-.000003
19.00	. 0 0	.000 00	.000000	. 0000	.000 00	.000000	.0 0000	.000000	-.000002
19.50	. 0 0	.000 00	.000000	. 0000	.000 00	.000000	.000000	.000000	-.000001
20.00	-. 0 2	.000 00	.000000	. 0000	.000 00	.000000	.000000	.000000	-.000001