3/X-83

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р4-83-498

С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина

ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ.

IX. Алгоритм вычисления матричных элементов с $m \neq 0$

1983

1. ВВЕДЕНИЕ

В работах[1,2,3] изложен алгоритм вычисления собственных значений $p_{im}(R)$ и $\lambda_{im}(R)$ и собственных функций $\varphi_{im}(\xi,\eta;R)$ задачи двух центров квантовой механики. В работе[2] представлен также алгоритм вычисления матричных элементов $H^{(\pm)}_{im,jm'}(R)$, $H^{(*)}_{im,jm'}(R)$, $V_{im,jm'}(R)$, $Q^{(\pm)}_{im,jm'}(R)$, $D_{im,jm'}(R)$ между состояниями im и jm' задачи двух центров с азимутальным квантовым числом $m=m'=0$. Эти матричные элементы нужны для формирования эффективных потенциалов задачи трех тел в адиабатическом представлении[4]. Данная работа представляет собой непосредственное продолжение работы[2] и ее обобщение на случай $m=m'\neq 0$. В ней также приведены формулы для вычисления матричных элементов $B^{(\pm)}_{im,jm'}(R)$, $D_{im,jm'}(R)$ при $m'-m=\pm 1$.

Соответствующий комплекс программ реализован на ЭВМ CDC-6500 ЛВТА ОИЯИ на языке ФОРТРАН.

2. Вычисление матричных элементов с $m\neq 0$

В сфероидальных координатах матричные элементы с $m\neq 0$, необходимые для формирования эффективных потенциалов задачи трех тел, имеют вид[4,5]

$$H^{(+)}_{im,jm}(R) = -H^{(*)}_{im,jm}(R) + 3R^{-2}\delta_{ij} + \frac{1}{4}(E_i+E_j)\int d\tau(\xi^2+\eta^2)\varphi_i\varphi_j -$$

$$-\frac{1}{2}\int d\tau(\xi^2+\eta^2)V\varphi_i\varphi_j - \frac{1}{R}\int\frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2}\Big[\xi(\xi^2-1)\Big(\frac{\partial\varphi_i}{\partial\xi}\frac{\partial\varphi_j}{\partial R}+\frac{\partial\varphi_i}{\partial R}\frac{\partial\varphi_j}{\partial\xi}\Big)+$$

$$+\eta(1-\eta^2)\Big(\frac{\partial\varphi_i}{\partial\eta}\frac{\partial\varphi_j}{\partial R}+\frac{\partial\varphi_i}{\partial R}\frac{\partial\varphi_j}{\partial\eta}\Big)\Big] + \int d\tau\,\frac{\partial\varphi_i}{\partial R}\frac{\partial\varphi_j}{\partial R}, \qquad (1)$$

$$H^{(-)}_{im,jm}(R) = -\frac{1}{2}(E_i+E_j)\int d\tau\,\xi\eta\varphi_i\varphi_j + \int d\tau\,\xi\eta V\varphi_i\varphi_j +$$

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

$$H^{(*)}_{im,jm}(R) = \frac{1}{2}(E_i\delta_{ij}-V_{ij}), \quad V_{ij}\equiv V_{im,jm}(R) = \int d\tau\,\varphi_i V\varphi_j,$$

$$V = -\frac{2}{R(\xi^2-\eta^2)}\{(Z_a+Z_b)\xi+(Z_b-Z_a)\eta\},$$

$$Q^{(+)}_{im,jm}(R) = -\frac{1}{2}\int d\tau\Big(\varphi_i\frac{\partial\varphi_j}{\partial R}-\frac{\partial\varphi_i}{\partial R}\varphi_j\Big) - \frac{R}{8}(E_i-E_j)\int d\tau(\xi^2+\eta^2)\varphi_i\varphi_j,$$

$$Q^{(-)}_{im,jm}(R)=\frac{1}{2}(E_i-E_j)z_{ij}\,,\quad z_{ij}\equiv D_{im,jm}(R)=\int d\tau\frac{R}{2}\xi\eta\varphi_i\varphi_j\,,$$
$$E_i\equiv E_{im}\equiv E_{im}(R),\qquad \varphi_i\equiv\varphi_{im}\equiv\varphi_{im}(\xi,\eta;R).$$

От функций $\varphi_{im}(\xi,\eta;R)$, нормированных условием

$$S_{im,jm}=\int d\tau\,\varphi_{im}\varphi_{jm}=\delta_{ij}\,,\quad d\tau=\frac{R^3}{8}(\xi^2-\eta^2)\,d\xi\,d\eta\,, \tag{2}$$

перейдем к ненормированным функциям ψ_i /2/ x):

$$\varphi_i=\bar{N}_i\psi_i\,,\quad \psi_i=X_i(\xi;R)\,Y_i(\eta;R),\quad \bar{N}=N_i\left(\frac{R^3}{8}\right)^{-1/2},$$
$$N_i^{-2}=\int d\xi\,d\eta\,(\xi^2-\eta^2)\,\psi_i^2\,,\quad \psi_i\equiv\psi_i(\xi,\eta;R), \tag{3}$$
$$\lim_{\eta\to+1}(1-\eta^2)^{-m/2}\psi_i(\xi,\eta;R)=1,\quad \lim_{\xi\to1}(\xi^2-1)^{-m/2}\psi_i(\xi,\eta;R)=1.$$

Все матричные элементы с $m=m'$ можно определить через интегралы $J^{(\alpha)}$ по переменной ξ и $I^{(\alpha)}$ по переменной η (индексы m и аргументы R опускаем):

$$Q^{(+)}_{ij}=-\frac{1}{2}\left(K^{(1)}_{ij}-K^{(1)}_{ji}\right)-Q^{(*)}_{ij}\,,$$
$$Q^{(*)}_{ij}=\frac{R}{8}(E_i-E_j)N_iN_j\left(J^{(21)}I^{(1)}-J^{(1)}I^{(21)}\right),$$
$$K^{(1)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(14)}I^{(1)}-J^{(1)}I^{(14)}+J^{(3)}I^{(11)}-J^{(11)}I^{(3)}\right)+\frac{\bar{N}_j'}{\bar{N}_j}\delta_{ij}\,,$$
$$K^{(1)}_{ji}=N_iN_j\left(J^{(15)}I^{(1)}-J^{(1)}I^{(15)}+J^{(3)}I^{(12)}-J^{(12)}I^{(3)}\right)+\frac{\bar{N}_i'}{\bar{N}_i}\delta_{ij}\,,$$
$$Q^{(-)}_{ij}=\frac{1}{2}(E_i-E_j)z_{ij}\,,\quad z_{ij}=\frac{R}{2}N_iN_j\left(J^{(20)}I^{(2)}-J^{(2)}I^{(20)}\right), \tag{4}$$
$$V_{ij}=-\frac{2}{R}N_iN_j\left[(Z_a+Z_b)J^{(2)}I^{(1)}+(Z_b-Z_a)J^{(1)}I^{(2)}\right],$$
$$S_{ij}=N_iN_j\left(J^{(3)}I^{(1)}-J^{(1)}I^{(3)}\right),\quad N_i=\left(J^{(3)}I^{(1)}-J^{(1)}I^{(3)}\right).$$

---

x) В работе /2/ $\bar{N}_i=N_i\left(\frac{\pi R^3}{4}\right)^{-1/2}$, так как там элемент объема $d\tau=\frac{\pi R^3}{4}(\xi^2-\eta^2)\,d\xi\,d\eta$.

$$H^{(+)}_{ij}=-H^{(*)}_{ij}+K^{(2)}_{ij}-\frac{1}{R}\left(K^{(3)}_{ij}+K^{(3)}_{ji}\right)+\frac{1}{R^2}K^{(4)}_{ij}\,,$$
$$H^{(*)}_{ij}=\frac{1}{2}\left(E_i\delta_{ij}-V_{ij}\right),$$
$$K^{(2)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(19)}I^{(1)}-J^{(1)}I^{(19)}+J^{(15)}I^{(11)}-J^{(11)}I^{(15)}+\right.$$
$$\left.+J^{(14)}I^{(12)}-J^{(12)}I^{(14)}+J^{(3)}I^{(18)}-J^{(18)}I^{(3)}\right)+$$
$$+\left(\frac{\bar{N}_i'}{\bar{N}_i}-\frac{\bar{N}_j'}{\bar{N}_j}\right)K^{(1)}_{ij}-\left(\frac{3}{R}+\frac{\bar{N}_i'}{\bar{N}_i}\right)\frac{\bar{N}_j'}{\bar{N}_j}\delta_{ij}\,,$$
$$K^{(3)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(17)}I^{(1)}+J^{(1)}I^{(17)}+J^{(7)}I^{(11)}+J^{(11)}I^{(7)}\right)+\frac{\bar{N}_j'}{\bar{N}_j}Q^{(3)}_{ij}\,,$$
$$K^{(3)}_{ji}=N_iN_j\left(J^{(25)}I^{(1)}+J^{(1)}I^{(25)}+J^{(6)}I^{(12)}+J^{(12)}I^{(6)}\right)+\frac{\bar{N}_i'}{\bar{N}_i}Q^{(1)}_{ij}\,,$$
$$Q^{(3)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(7)}I^{(1)}+J^{(1)}I^{(7)}\right),\quad Q^{(1)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(6)}I^{(1)}+J^{(1)}I^{(6)}\right),$$
$$K^{(4)}_{ij}=3\delta_{ij}+\frac{1}{4}R^2(E_i+E_j)N_iN_j\left(J^{(21)}I^{(1)}-J^{(1)}I^{(21)}\right)+$$
$$+RN_iN_j\left[(Z_a+Z_b)\left(J^{(20)}I^{(1)}+J^{(2)}I^{(3)}\right)+(Z_b-Z_a)\left(J^{(3)}I^{(2)}+J^{(1)}I^{(20)}\right)\right],$$
$$H^{(-)}_{ij}=\frac{1}{R}\left(K^{(5)}_{ij}+K^{(5)}_{ji}\right)-\frac{2}{R^2}K^{(6)}_{ij}\,,$$
$$K^{(5)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(16)}I^{(2)}+J^{(2)}I^{(16)}+J^{(5)}I^{(13)}+J^{(13)}I^{(5)}\right)+\frac{\bar{N}_j'}{\bar{N}_j}Q^{(4)}_{ij}\,,$$
$$K^{(5)}_{ji}=N_iN_j\left(J^{(24)}I^{(2)}+J^{(2)}I^{(24)}+J^{(4)}I^{(23)}+J^{(23)}I^{(4)}\right)+\frac{\bar{N}_i'}{\bar{N}_i}Q^{(2)}_{ij}\,, \tag{4}$$
$$Q^{(4)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(5)}I^{(2)}+J^{(2)}I^{(5)}\right),$$
$$Q^{(2)}_{ij}=N_iN_j\left(J^{(4)}I^{(2)}+J^{(2)}I^{(4)}\right),$$
$$K^{(6)}_{ij}=\frac{R}{2}(E_i+E_j)z_{ij}+RN_iN_j\left[(Z_a+Z_b)J^{(3)}I^{(2)}+\right.$$
$$\left.+(Z_b-Z_a)J^{(2)}I^{(3)}\right].$$

Явные выражения для интегралов $J^{(\alpha)}_{ij}$ и $I^{(\alpha)}_{ij}$ (α =I,...,25) приведены в работе /2/.

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

При вычислении интегралов $J_{ij}^{(\alpha)} \equiv J_{im,jm'}^{(\alpha)}(R)$ при $m=m'=1$ перейдем к независимой переменной $x=\frac{1}{2}(\xi+1)$, после чего разложение для функций $X_i(\xi;R)$ (3) и ее производных приобретает вид

$$X_i(x)=e^{-2p_i(x-1)}\sum_{k=0}^{r_k} g_k^{(i)} x^{(\sigma_i+1)-(k+1/2)}(x-1)^{k+1/2},$$

$$\frac{\partial X_i}{\partial \xi}=\frac{1}{2}\Big\{-2p_i X_i + e^{-2p_i(x-1)}(\sigma_i+1)\sum_{k=0}^{r_k} g_k^{(i)} x^{(\sigma_i+1)-(k+1/2)-1}(x-1)^{k+1/2}+$$
$$+e^{-2p_i(x-1)}\sum_{k=0}^{r_k}(k+1/2)g_k^{(i)}x^{(\sigma_i+1)-(k+1/2)-1}(x-1)^{(k+1/2)-1}\Big\},$$

$$\frac{\partial X_i}{\partial R}=-2\frac{\partial p_i}{\partial R}(x-1)X_i+e^{-2p_i(x-1)}\sum_{k=0}^{r_k}\frac{\partial g_k}{\partial R}x^{(\sigma_i+1)-(k+1/2)}(x-1)^{k+1/2}+$$
$$+\frac{\partial \sigma_i}{\partial R}\ln x\, X_i . \tag{5}$$

Коэффициенты $g_k^{(i)}$ определяются из рекуррентных соотношений (36), приведенных в [2], $g_{-1}^{(i)}=0$, $g_0^{(i)}=1$.

Вычисление интегралов $J_{ij}^{(\alpha)}$, как показано в [2], сводится к чисто алгебраическим операциям, если предварительно определить величины

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

$$B_\nu=\sum_{s=0}^{\nu}(s+1/2)g_{\nu-s}^{(i)}g_s^{(j)}, \quad B_\nu^*=\sum_{s=0}^{\nu}(\nu-s+1/2)g_{\nu-s}^{(i)}g_s^{(j)},$$

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

$$F_\nu=\sum_{s=0}^{\nu}(s+1/2)(\nu-s+1/2)g_{\nu-s}^{(i)}g_s^{(j)}, \tag{6}$$

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

$$R_\nu=\sum_{s=0}^{\nu}(\nu-s+1/2)g_{\nu-s}^{(i)}\frac{\partial g_s^{(j)}}{\partial R}, \quad R_\nu^*=\sum_{s=0}^{\nu}(s+1/2)\frac{\partial g_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}g_s^{(j)}$$

и вычислить интегралы

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

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

$$\tilde{\Delta}_\nu^{(\gamma)}=\int_1^\infty dx\,\ln^2 x\, e^{-2p(x-1)}x^{\sigma+\gamma-\nu}(x-1)^\nu . \tag{7}$$

Здесь $p=p_i+p_j$, $\sigma=(\sigma_i+1)+(\sigma_j+1)$, $\nu=k+s$.
Например, для интеграла $J^{(1)}$ получим:

$$\int d\xi\, X_i X_j = 2\sum_{k=0}^{r_k}\sum_{s=0}^{r_s} g_k^{(i)}g_s^{(j)}\int dx\, e^{-2p(x-1)}x^{\sigma-(\nu+1)}(x-1)^{\nu+1}=$$
$$=\sum_{\nu=0}^{r}2A_\nu S_{\nu+1}^{(0)}=2A_\nu S_{\nu+1}^{(0)} \tag{8}$$

вместо прежнего выражения $2A_\nu S_\nu^{(0)}$ для случая $m=m'=0$ (по повторяющимся индексам проводится суммирование от 0 до $r=max\{r_k,r_s\}$), для интеграла $J^{(4)}$ имеем

$$\int d\xi\, X_i(\xi^2-1)\frac{\partial X_j}{\partial \xi}=4\{-2p_i A_\nu S_{\nu+2}^{(2)}+(\sigma_j+1)A_\nu S_{\nu+2}^{(1)}+B_\nu S_{\nu+1}^{(0)}\} \tag{9}$$

вместо прежнего выражения

$$4\{-2p_i A_\nu S_{\nu+1}^{(2)}+\sigma_j A_\nu S_{\nu+1}^{(1)}+B_\nu S_\nu^{(0)}\}.$$

Таким образом, в случае $m=m'=1$ интегралы $J^{(\alpha)}$ можно вычислять по формулам, данным в приложении I работы [2] для случая $m=m'=0$, проведя предварительно замены

$$s\to(s+1/2), \quad (\nu-s)\to(\nu-s+1/2)$$

в коэффициентах (6), а также замены $\sigma_i\to\sigma_i+1$, $\sigma_j\to\sigma_j+1$, $\nu\to\nu+1$ в интегралах (7) и замены $\sigma_i\to\sigma_i+1$, $\sigma_j\to\sigma_j+1$ в выражениях для $J_{ij}^{(\alpha)}$, приведенных в приложении I работы [2].

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

Вычисление интегралов $I^{(\alpha)}$ в случае $m=m'=1$ также сводится к чисто алгебраической задаче. Воспользуемся следующим разложением для

$$Y_i(\eta;R)=\begin{cases}\bar{Y}_i=(1-\eta)^{1/2}e^{-p_i(1+\eta)}\sum_{k=0}^{r_k}\bar{C}_k^{(i)}(1+\eta)^{k+1/2}, & -1\le\eta\le 0,\\ \tilde{Y}_i=(1+\eta)^{1/2}e^{-p_i(1-\eta)}\sum_{k=0}^{r_k}\tilde{C}_k^{(i)}(1-\eta)^{k+1/2}, & 0\le\eta\le 1.\end{cases} \tag{10}$$

Коэффициенты $\bar{C}_k^{(i)}$ и $\tilde{C}_k^{(i)}$ определяются из выражений (58)-(60) и рекуррентных соотношений (61)-(62), приведенных в [2], причем в формуле (60) $(-)^{l_i}$ следует заменить на $(-)^{l_i-m_i}$.

Разложения для производных $\tilde{Y}_i$ имеют вид:

$$\frac{\partial\tilde{Y}_i}{\partial\eta}=p_i\tilde{Y}_i-(1+\eta)^{1/2}e^{-p_i(1-\eta)}\sum_{k=0}^{r_k}(k+1/2)\tilde{C}_k^{(i)}(1-\eta)^{k-1/2}+ \tag{11}$$

$$+\frac{1}{2}(1+\eta)^{-1/2}e^{-p_i(1-\eta)}\sum_{k=0}^{r_k}\tilde C_k^{(i)}(1-\eta)^{k+1/2},$$

$$\frac{\partial \tilde Y_i}{\partial R} = -\frac{\partial p_i}{\partial R}(1-\eta)\tilde Y_i + (1+\eta)^{1/2}e^{-p_i(1-\eta)}\sum_{k=0}^{r_k}\frac{\partial \tilde C_k^{(i)}}{\partial R}(1-\eta)^{k+1/2}.$$

Введем набор коэффициентов

$$\begin{aligned}
\tilde a_\nu &= \sum_{s=0}^{\nu}\tilde C_{\nu-s}^{(i)}\tilde C_s^{(j)},\\
\tilde b_\nu &= \sum_{s=0}^{\nu}(s+1/2)\tilde C_{\nu-s}^{(i)}\tilde C_s^{(j)}, \quad \tilde b_\nu^{*} = \sum_{s=0}^{\nu}(\nu-s+1/2)\tilde C_{\nu-s}^{(i)}\tilde C_s^{(j)},\\
\tilde d_\nu &= \sum_{s=0}^{\nu}\tilde C_{\nu-s}^{(i)}\frac{\partial \tilde C_s^{(j)}}{\partial R}, \quad \tilde d_\nu^{*} = \sum_{s=0}^{\nu}\frac{\partial \tilde C_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}\tilde C_s^{(j)},\\
\tilde f_\nu &= \sum_{s=0}^{\nu}(s+1/2)(\nu-s+1/2)\tilde C_{\nu-s}^{(i)}\tilde C_s^{(j)}, \quad \tilde h_\nu = \sum_{s=0}^{\nu}\frac{\partial \tilde C_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}\frac{\partial \tilde C_s^{(j)}}{\partial R},\\
\tilde r_\nu &= \sum_{s=0}^{\nu}(\nu-s+1/2)\tilde C_{\nu-s}^{(i)}\frac{\partial \tilde C_s^{(j)}}{\partial R}, \quad \tilde r_\nu^{*} = \sum_{s=0}^{\nu}(s+1/2)\frac{\partial \tilde C_{\nu-s}^{(i)}}{\partial R}\tilde C_s^{(j)}
\end{aligned} \tag{I2}$$

и аналогичный набор $\bar a_\nu, \ldots, \bar r_\nu^{*}$, который отличается от (I2) заменой $\tilde C_s^{(i)} \to \bar C_s^{(i)}$ /2/. Определим интегралы ($t=1-\eta$ или $t=1+\eta$):

$$T_\nu = \int_0^1 e^{-p(1-\eta)}(1-\eta)^\nu d\eta = \int_{-1}^0 e^{-p(1+\eta)}(1+\eta)^\nu d\eta = \int_0^1 e^{-pt}t^\nu dt. \tag{I3}$$

Здесь $p=p_i+p_j$, $\nu=k+s$.

Все интегралы $I^{(\alpha)}$ выражаются через величины (I2) и (I3) алгебраически, например:

$$\begin{aligned}
I_{ij}^{(1)} &= \int_{-1}^{1}d\eta\, Y_i Y_j = \int_{-1}^{0}d\eta\, \bar Y_i \bar Y_j + \int_0^1 d\eta\, \tilde Y_i \tilde Y_j =\\
&= \sum_{k=0}^{r_k}\sum_{s=0}^{r_s}\bar C_k^{(i)}\bar C_s^{(j)}\int_{-1}^{0}d\eta\, e^{-p(1+\eta)}(1+\eta)^\nu + \sum_{k=0}^{r_k}\sum_{s=0}^{r_s}\tilde C_k^{(i)}\tilde C_s^{(j)}\int_0^1 d\eta\, e^{-p(1-\eta)}(1-\eta)^\nu =\\
&= \sum_{\nu=0}^{q}\bar a_\nu[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}] + \sum_{\nu=0}^{q}\tilde a_\nu[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}] =\\
&= \bar a_\nu[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}] + \tilde a_\nu[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}] = \bar I_{ij}^{(1)} + \tilde I_{ij}^{(2)}, \quad q=\max\{r_k, r_s\}.
\end{aligned} \tag{I4}$$

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

$$I_{ij}^{(\alpha)} = \varepsilon_\alpha \bar I_{ij}^{(\alpha)} + \tilde I_{ij}^{(\alpha)} = \{\varepsilon_\alpha(-)^{q_i-q_j}+1\}\tilde I_{ij}^{(\alpha)}, \quad q_i=l_i-m_i,$$

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

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

Выражения для 25 интегралов $\tilde I_{ij}^{(\alpha)}$ имеют вид (соответствующие выражения для интегралов $\bar I_{ij}^{(\alpha)}$ отличаются от приведенных ниже заменами $\tilde a_\nu \to \bar a_\nu$ и т.д.):

$$\begin{aligned}
\tilde I_{ij}^{(1)} &= \tilde a_\nu[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}],\\
\tilde I_{ij}^{(2)} &= \tilde a_\nu[2T_{\nu+1}-3T_{\nu+2}+T_{\nu+3}],\\
\tilde I_{ij}^{(3)} &= \tilde a_\nu[2T_{\nu+1}-5T_{\nu+2}+4T_{\nu+3}-T_{\nu+4}],\\
\tilde I_{ij}^{(4)} &= p_j\tilde a_\nu[4T_{\nu+2}-4T_{\nu+3}+T_{\nu+4}] - \tilde b_\nu[4T_{\nu+1}-4T_{\nu+2}+T_{\nu+3}]+\\
&\quad +\tfrac{1}{2}\tilde a_\nu[2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}],\\
\tilde I_{ij}^{(5)} &= p_i\tilde a_\nu[4T_{\nu+2}-4T_{\nu+3}+T_{\nu+4}] - \tilde b_\nu^{*}[4T_{\nu+1}-4T_{\nu+2}+T_{\nu+3}]+\\
&\quad +\tfrac{1}{2}\tilde a_\nu[2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}],\\
\tilde I_{ij}^{(6)} &= p_j\tilde a_\nu[4T_{\nu+2}-8T_{\nu+3}+5T_{\nu+4}-T_{\nu+5}]-\\
&\quad -\tilde b_\nu[4T_{\nu+1}-8T_{\nu+2}+5T_{\nu+3}-T_{\nu+4}]+\\
&\quad +\tfrac{1}{2}\tilde a_\nu[2T_{\nu+2}-3T_{\nu+3}+T_{\nu+4}],\\
\tilde I_{ij}^{(7)} &= p_i\tilde a_\nu[4T_{\nu+2}-8T_{\nu+3}+5T_{\nu+4}-T_{\nu+5}]-\\
&\quad -\tilde b_\nu^{*}[4T_{\nu+1}-8T_{\nu+2}+5T_{\nu+3}-T_{\nu+4}]+\\
&\quad +\tfrac{1}{2}\tilde a_\nu[2T_{\nu+2}-3T_{\nu+3}+T_{\nu+4}],\\
\tilde I_{ij}^{(8)} &= p_i p_j\tilde a_\nu[4T_{\nu+2}-4T_{\nu+3}+T_{\nu+4}]-\\
&\quad -(p_i\tilde b_\nu+p_j\tilde b_\nu^{*})[4T_{\nu+1}-4T_{\nu+2}+T_{\nu+3}]+
\end{aligned} \tag{I5}$$

$$
\begin{aligned}
&+\frac{1}{2}(p_i+p_j)\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}\right]+\\
&+\tilde{f}_\nu\left[4T_\nu-4T_{\nu+1}+T_{\nu+2}\right]-\\
&-\frac{1}{2}(\tilde{b}_\nu+\tilde{b}_\nu^*)\left[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}\right]+\frac{1}{4}\tilde{a}_\nu T_{\nu+2},
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(9)}_{ij}= {}& p_i p_j\tilde{a}_\nu\left[4T_{\nu+2}-8T_{\nu+3}+5T_{\nu+4}-T_{\nu+5}\right]-\\
&-(p_i\tilde{b}_\nu+p_j\tilde{b}_\nu^*)\left[4T_{\nu+1}-8T_{\nu+2}+5T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right]+\\
&+\frac{1}{2}(p_i+p_j)\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-3T_{\nu+3}+T_{\nu+4}\right]+\\
&+\tilde{f}_\nu\left[4T_\nu-8T_{\nu+1}+5T_{\nu+2}-T_{\nu+3}\right]-\\
&-\frac{1}{2}(\tilde{b}_\nu+\tilde{b}_\nu^*)\left[2T_{\nu+1}-3T_{\nu+2}+T_{\nu+3}\right]+\frac{1}{4}\tilde{a}_\nu\left[T_{\nu+2}-T_{\nu+3}\right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(10)}_{ij}= {}& p_i p_j\tilde{a}_\nu\left[4T_{\nu+2}-12T_{\nu+3}+13T_{\nu+4}-6T_{\nu+5}+T_{\nu+6}\right]-\\
&-(p_i\tilde{b}_\nu+p_j\tilde{b}_\nu^*)\left[4T_{\nu+1}-12T_{\nu+2}+13T_{\nu+3}-6T_{\nu+4}+T_{\nu+5}\right]+\\
&+\frac{1}{2}(p_i+p_j)\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-5T_{\nu+3}+4T_{\nu+4}-T_{\nu+5}\right]-\\
&-\tilde{f}_\nu\left[4T_\nu-12T_{\nu+1}+13T_{\nu+2}-6T_{\nu+3}+T_{\nu+4}\right]-\\
&-\frac{1}{2}(\tilde{b}_\nu+\tilde{b}_\nu^*)\left[2T_{\nu+1}-5T_{\nu+2}+4T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right]+\\
&+\frac{1}{4}\tilde{a}_\nu\left[T_{\nu+2}-2T_{\nu+3}+T_{\nu+4}\right],
\end{aligned}
$$

$$\tilde{I}^{(11)}_{ij}=-\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}\right]+\tilde{d}_\nu\left[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}\right],$$

$$\tilde{I}^{(12)}_{ij}=-\frac{\partial p_i}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}\right]+\tilde{d}_\nu^*\left[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}\right],$$

$$\tilde{I}^{(13)}_{ij}=-\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-3T_{\nu+3}+T_{\nu+4}\right]+\tilde{d}_\nu\left[2T_{\nu+1}-3T_{\nu+2}+T_{\nu+3}\right].$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(14)}_{ij}= {}& -\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-5T_{\nu+3}+4T_{\nu+4}-T_{\nu+5}\right]+\\
&+\tilde{d}_\nu\left[2T_{\nu+1}-5T_{\nu+2}+4T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(15)}_{ij}= {}& -\frac{\partial p_i}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+2}-5T_{\nu+3}+4T_{\nu+4}-T_{\nu+5}\right]+\\
&+\tilde{d}_\nu^*\left[2T_{\nu+1}-5T_{\nu+2}+4T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(16)}_{ij}= {}& -p_i\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[4T_{\nu+3}-4T_{\nu+4}+T_{\nu+5}\right]+p_i\tilde{d}_\nu\left[4T_{\nu+2}-4T_{\nu+3}+T_{\nu+4}\right]+\\
&+\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{b}_\nu^*\left[4T_{\nu+2}-4T_{\nu+3}+T_{\nu+4}\right]-r_\nu\left[4T_{\nu+1}-4T_{\nu+2}+T_{\nu+3}\right]-\\
&-\frac{1}{2}\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right]+\frac{1}{2}d_\nu\left[2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}\right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(17)}_{ij}= {}& -p_i\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[4T_{\nu+3}-8T_{\nu+4}+5T_{\nu+5}-T_{\nu+6}\right]+\\
&+p_i\tilde{d}_\nu\left[4T_{\nu+2}-8T_{\nu+3}+5T_{\nu+4}-T_{\nu+5}\right]+\\
&+\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{b}_\nu^*\left[4T_{\nu+2}-8T_{\nu+3}+5T_{\nu+4}-T_{\nu+5}\right]-r_\nu\left[4T_{\nu+1}-8T_{\nu+2}+5T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right]-\\
&-\frac{\partial p_j}{\partial R}\frac{1}{2}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+3}-3T_{\nu+4}+T_{\nu+5}\right]+\frac{1}{2}\tilde{d}_\nu\left[2T_{\nu+2}-3T_{\nu+3}+T_{\nu+4}\right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(18)}_{ij}= {}& \frac{\partial p_i}{\partial R}\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right]-\\
&-\left(\frac{\partial p_i}{\partial R}\tilde{d}_\nu+\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{d}_\nu^*\right)\left[2T_{\nu+2}-T_{\nu+3}\right]+\tilde{h}_\nu\left[2T_{\nu+1}-T_{\nu+2}\right],
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\tilde{I}^{(19)}_{ij}= {}& \frac{\partial p_i}{\partial R}\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{a}_\nu\left[2T_{\nu+3}-5T_{\nu+4}+4T_{\nu+5}-T_{\nu+6}\right]-\\
&-\left(\frac{\partial p_i}{\partial R}\tilde{d}_\nu+\frac{\partial p_j}{\partial R}\tilde{d}_\nu^*\right)\left[2T_{\nu+2}-5T_{\nu+3}+4T_{\nu+4}-T_{\nu+5}\right]+\\
&+\tilde{h}_\nu\left[2T_{\nu+1}-5T_{\nu+2}+4T_{\nu+3}-T_{\nu+4}\right].
\end{aligned}
$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(20)} = \tilde{a}_\nu \left[2T_{\nu+1} - 7T_{\nu+2} + 9T_{\nu+3} - 5T_{\nu+4} + T_{\nu+5} \right],$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(21)} = \tilde{a}_\nu \left[2T_{\nu+1} - 9T_{\nu+2} + 16T_{\nu+3} - 14T_{\nu+4} + 6T_{\nu+5} - T_{\nu+6} \right],$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(22)} = \tilde{a}_\nu \left[2T_{\nu+1} - 11T_{\nu+2} + 25T_{\nu+3} - 30T_{\nu+4} + 20T_{\nu+5} - 7T_{\nu+6} + T_{\nu+7} \right],$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(23)} = -\frac{\partial p_i}{\partial R} \tilde{a}_\nu \left[2T_{\nu+2} - 3T_{\nu+3} + T_{\nu+4} \right] + \tilde{d}_\nu^* \left[2T_{\nu+1} - 3T_{\nu+2} + T_{\nu+3} \right],$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(24)} = -p_i \frac{\partial p_j}{\partial R} \tilde{a}_\nu \left[4T_{\nu+3} - 4T_{\nu+4} + T_{\nu+5} \right] + p_j \tilde{d}_\nu^* \left[4T_{\nu+2} - 4T_{\nu+3} + T_{\nu+4} \right] +$$
$$+ \frac{\partial p_i}{\partial R} \tilde{b}_\nu \left[4T_{\nu+2} - 4T_{\nu+3} + T_{\nu+4} \right] - \tilde{r}_\nu^* \left[4T_{\nu+1} - 4T_{\nu+2} + T_{\nu+3} \right] -$$
$$- \frac{1}{2} \frac{\partial p_i}{\partial R} \tilde{a}_\nu \left[2T_{\nu+3} - T_{\nu+4} \right] + \frac{1}{2} \tilde{d}_\nu^* \left[2T_{\nu+2} - T_{\nu+3} \right],$$

$$\tilde{I}_{ij}^{(25)} = -p_j \frac{\partial p_i}{\partial R} \tilde{a}_\nu \left[4T_{\nu+3} - 8T_{\nu+4} + 5T_{\nu+5} - T_{\nu+6} \right] +$$
$$+ p_j \tilde{d}_\nu^* \left[4T_{\nu+2} - 8T_{\nu+3} + 5T_{\nu+4} - T_{\nu+5} \right] +$$
$$+ \frac{\partial p_i}{\partial R} \tilde{b}_\nu \left[4T_{\nu+2} - 8T_{\nu+3} + 5T_{\nu+4} - T_{\nu+5} \right] -$$
$$- \tilde{r}_\nu^* \left[4T_{\nu+1} - 8T_{\nu+2} + 5T_{\nu+3} - T_{\nu+4} \right] -$$
$$- \frac{1}{2} \frac{\partial p_i}{\partial R} \tilde{a}_\nu \left[2T_{\nu+3} - 3T_{\nu+4} + T_{\nu+5} \right] - \frac{1}{2} \tilde{d}_\nu^* \left[2T_{\nu+2} - 3T_{\nu+3} + T_{\nu+4} \right].$$

Таблица I

Число членов r в разложениях (5) при различных значениях R

Терм \ R	0,I-0,5	5	I0	20	50	I00
$1s\sigma_g$	I8	8	6	6	6	7
$2p\sigma_u$	I8-20	9	7	6	7	7
$2p\pi_u$	49-38	I0	6	6	6	6
$3d\pi_g$	I6-I8	8	7	7	6	6

5. Вычисление матричных элементов с $m'-m=1$

Матричные элементы с $m'-m=\pm 1$ имеют вид[5]

$$b^{(+)}_{im,jm\mp1}(R) = \mp \frac{1}{R^2} \int \frac{d\tau}{\xi^2-\eta^2} \left\{(\xi^2-1)(1-\eta^2)\right\}^{1/2} \varphi_{im} \left(\eta \frac{\partial \varphi_{jm\mp1}}{\partial \xi} - \xi \frac{\partial \varphi_{jm\mp1}}{\partial \eta} \right) +$$
$$+ \frac{(m\mp1)}{R^2} \int d\tau\, \xi\eta \frac{\varphi_{im}\varphi_{jm\mp1}}{\left\{(\xi^2-1)(1-\eta^2)\right\}^{1/2}},$$

$$b^{(-)}_{im,jm\mp1}(R) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}R} (E_{im} - E_{jm\mp1}) \left(\frac{x \pm iy}{\sqrt{2}} \right)_{im,jm\mp1}, \qquad (I6)$$

$$\left(\frac{x \pm iy}{\sqrt{2}} \right)_{im,jm\mp1} = D_{im,jm\mp1}(R) = -\frac{1}{\sqrt{2}} \int d\tau \frac{R}{2} \left\{(\xi^2-1)(1-\eta^2)\right\}^{1/2} \varphi_{im}\varphi_{jm\mp1}.$$

Матричные элементы с $m'=1$, $m=0$ можно определить через интегралы $J_{ij}^{(\alpha)}$ и $I_{ij}^{(\alpha)}$, введенные в работе[2], если из разложений для $X_i(\xi;R)$ и $Y_i(\eta;R)$ с $m=1$ выделить полиномы $(\xi^2-1)^{1/2}$ и $(1-\eta^2)^{1/2}$:

$$b^{(+)}_{i0,j1} = -R^{-2} N_i N_j \left[J^{(4)}(I^{(2)} - I^{(20)}) + (J^{(2)} - J^{(20)}) I^{(4)} + \right.$$
$$\left. + 2 (J^{(20)} I^{(2)} - J^{(2)} I^{(20)}) \right], \qquad (I7)$$

$$b^{(-)}_{i0,j1} = -\frac{1}{\sqrt{2}R} (E_{i0} - E_{j1}) \left(\frac{x - iy}{\sqrt{2}} \right)_{i0,j1},$$

$$\left(\frac{x - iy}{\sqrt{2}} \right)_{i0,j1} = D_{i0,j1} = -\frac{R}{2\sqrt{2}} N_i N_j \left[J^{(21)}(I^{(1)} - I^{(3)}) + (J^{(3)} - J^{(1)}) I^{(21)} - \right.$$
$$\left. - J^{(3)} I^{(1)} + J^{(1)} I^{(3)} \right],$$

$$N_i = \left[m \left(J^{(21)}(I^{(1)} - I^{(3)}) + (J^{(3)} - J^{(1)}) I^{(21)} \right) + (-1)^m \left(J^{(3)} I^{(1)} - J^{(1)} I^{(3)} \right) \right]^{-1/2}.$$

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложенный алгоритм был использован для вычисления матричных элементов (I,I6) между σ- и π-состояниями задачи двух центров. Эти матричные элементы были использованы для проведения расчетов энергии связанных состояний μ-мезомолекул, сечений мезомолекулярных, мезоатомных и атомных процессов в смеси изотопов водорода[4].

В таблицах I и 2 приведено число членов r и q в разложениях (5) и (I0) соответственно при различных значениях R для состояний $1s\sigma_g$, $2p\sigma_u$, $2p\pi_u$, $3d\pi_g$, которые необходимо использовать для вычисления матричных элементов (I), (I6) с точностью $\varepsilon \sim$ I0^{-8} ÷ I0^{-7}.

Таблица 2

Число членов q в разложении (10) при различных значениях R

Терм \ R	0,1-0,5	5	10	20	50	100
$1s\sigma_g$	18-27	39	51	73	13	10
$2p\sigma_u$	16	49	61	73	14	10
$2p\pi_u$	16-20	43	41	70	19	13
$3d\pi_g$	15-20	32	52	52	47	13

ЛИТЕРАТУРА

1. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ЖВМиМФ, 1968, 8, с. 1256.
2. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. ОИЯИ, Р4-5040, Дубна, 1970.
3. Puzynina T.P. TERM-Program for finding the eigenvalues of quantum-mechanical two centre problem. In Collection of Scientific Papers of Algorithms and Programs for Solution of Some Problems in Physics.
   KFKI-1977-12, Budapest, Central Research Inst. for Phys., 1977.
4. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., ЭЧАЯ, 1982, т. 13, в. 6, с. 1336.
5. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., ЯФ, 1974, 20, 576.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 июля 1983 года.

Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. Р4-83-498

Задача двух центров квантовой механики.
IX. Алгоритм вычисления матричных элементов с $m \neq 0$

Дан алгоритм вычисления матричных элементов оператора кинетической энергии и импульса относительного движения ядер в системе трех частиц с кулоновским взаимодействием между состояниями jm и jm' с $m=m'\neq 0$ и $m'-m=\pm 1$ дискретного спектра задачи двух центров квантовой механики / m - азимутальное квантовое число/.

В таблицах приведено число членов разложения волновых функций задачи двух центров при различных значениях R / R - расстояние между ядрами/ для состояний $1s\sigma g$, $2p\sigma u$, $2p\pi u$, $3d\pi g$, которые необходимо использовать для вычисления матричных элементов с точностью $\sim 10^{-8} \div 10^{-7}$.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Vinitsky S.I., Ponomarev L.I., Puzynina T.P. Р4-83-498

Two-Center Problem of Quantum Mechanics.
IX. Calculation Algorithm of Matrix Elements with $m \neq 0$

An algorithm is given for the calculation of matrix elements of the kinetic energy operator and the momentum of relative motion of nuclei in the three-body system with a Coulomb interaction between states jm and jm' with $m=m'\neq 0$ and $m'-m=\pm 1$ of the discrete spectrum of the two-center problem of quantum mechanics (m is the azimuthal quantum number).

Tables contain the expansion terms of the wave functions of the two-center problem at different R (R is the distance between nuclei) for states $1s\sigma g$, $2p\sigma u$, $2p\pi u$, $3d\pi g$, which are to be used to calculate the matrix elements within accuracy $\sim 10^{-8} \div 10^{-7}$.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод авторов