ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р4-96-395

Н.Ф.Трускова

ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ ЗАДАЧИ ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ С ПОМОЩЬЮ АНАЛИТИЧЕСКОГО ИНТЕГРИРОВАНИЯ

Направлено в журнал «Ядерная физика»

1996

Трускова Н.Ф. Р4-96-395
Вычисление интегралов задачи двух центров квантовой механики с помощью аналитического интегрирования

Использование нового разложения для кулоновских сфероидальных функций вместе с записанными в более удобном виде уже известными разложениями для них, а также введение нового оператора, диагонального на системе таких функций, позволяют вычислять необходимые в ряде физических задач интегралы по собственным функциям задачи двух центров аналитически, более простым способом. Вследствие этого для получения различных матричных элементов дискретного спектра задачи двух центров, используемых при решении физических задач, требуется существенно меньшее время счета.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 1996

Перевод автора

Truskova N.F. P4-96-395
Calculation of Integrals of the Two-Centre Problem in Quantum Mechanics by Means of Analytical Integration

Use of a new expansion for Coulomb spheroidal functions together with already known expansions for them in a more convenient variant and also introduction of a new diagonal operator allow one to calculate eigenfunctions integrals of the two-centre problem analytically, in a simpler way. Due to that it requires considerably less time for calculation to obtain various matrix elements of discrete spectrum of the two-centre problem which are used for resolve of physics problems.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 1996

ВВЕДЕНИЕ

Нерелятивистская задача о движении электрона в поле двух кулоновских центров, расположенных на фиксированном расстоянии друг от друга, (задача двух центров квантовой механики) в последние годы вновь привлекает усиленное внимание в связи с успешными экспериментами в атомной и μ-мезоатомной физике, а также в связи с открытием антипротонного гелия [1].

В сфероидальной системе координат эта задача сводится к нахождению собственных значений и собственных функций системы уравнений [2,3]

$$\left[(\xi^2-1)\frac{d^2}{d\xi^2}+2\xi\frac{d}{d\xi}+\frac{R^2E}{2}(\xi^2-1)+RZ^+\xi-\frac{m^2}{\xi^2-1}-\lambda\right]\Pi(\xi)=0, \quad (1.\text{а})$$

$$\left[(1-\eta^2)\frac{d^2}{d\eta^2}-2\eta\frac{d}{d\eta}+\frac{R^2E}{2}(1-\eta^2)+RZ^-\eta-\frac{m^2}{1-\eta^2}+\lambda\right]\Xi(\eta)=0, \quad (1.\text{б})$$

$$\left[\frac{d^2}{d\varphi^2}+m^2\right]W(\varphi)=0, \quad (1.\text{в})$$

$$0\le R<\infty,\ \ +1\le\xi<\infty,\ \ -1\le\eta\le+1,\ \ 0\le\varphi\le 2\pi,$$

$$|\Pi(+1)|<\infty,\ \ |\Pi(\infty)|<\infty,\ \ |\Xi(\pm1)|<\infty,\ \ W(0)=W(2\pi)\ne\infty.$$

Здесь E — энергия электрона, λ — константа разделения, m — магнитное квантовое число, $Z^+=Z_1+Z_2$, $Z^-=Z_2-Z_1$; Z_1, Z_2 — заряды ядер, R — расстояние между ними. Система единиц $\hbar=m_e=e=1$.

В постановке Шредингера в случае дискретного спектра ($E=E_j<0$, $Z^+\ge0$, $Z^-\ge0$) решениями системы (1) являются собственные функции

$$\Psi_j=N_j(R)\,\Pi_j(\xi;R,Z^+,Z^-)\,\Xi_j(\eta;R,Z^+,Z^-)\,e^{im\varphi}, \quad (2)$$

соответствующие собственным значениям $E=E_j(R,Z^+,Z^-)$, $\lambda=\lambda_j(R,Z^+,Z^-)$; $j\equiv N,L,m$ (или n, n_1, n_2) — набор сферических (или параболических) квантовых чисел, классифицирующих систему (2), $N_j(R)$ — нормировочный множитель. Функции Ψ_j удовлетворяют соотношению ортогональности

$$\int_{\Omega} d\,\Omega\, \Psi_i^{*}\Psi_j = \delta_{ij}, \;\text{ где }\; d\,\Omega = \frac{R^3}{8}(\xi^2-\eta^2)d\,\xi d\,\eta d\,\varphi. \qquad (3)$$

Такие решения исследованы многими авторами [2—13] и получены на ЭВМ [8—13].

В постановке Штурма — Лиувилля при $E<0$, $Z^- \ge 0$ решениями системы (1) являются собственные функции

$$\Psi_j^{st} = N_j^{st}(R)\,\Pi_j^{st}(\xi; R, E, Z^-)\,\Xi_j^{st}(\eta; R, E, Z^-)\,e^{im\varphi}, \qquad (4)$$

соответствующие собственным значениям $Z^+ = Z_j^{st}(R,E,Z^-)$, $\lambda = \lambda_j^{st}(R,E,Z^-)$; $j \equiv N,L,m$ (или n, n_1, n_2) — набор сферических (или параболических) квантовых чисел для системы (4). Функции Ψ_j^{st} ортогональны с весом $\left(\dfrac{1}{\xi+\eta}+\dfrac{1}{\xi-\eta}\right)$:

$$\int_{\Omega} (\Psi_i^{st})^{*}\,\Psi_j^{st}\left(\frac{1}{\xi+\eta}+\frac{1}{\xi-\eta}\right)d\,\Omega = \delta_{ij}. \qquad (5)$$

Решения типа [4] получены в [14,15].

При решении многих физических задач, в частности задачи трех тел с кулоновским взаимодействием, функции (2) и (4) используются в качестве базисных. Для получения конкретных результатов в этих случаях необходимо знание ряда матричных элементов, выражающихся через интегралы по функциям (2) или (4). Чаще всего это интегралы вида

$$A^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l\,\Pi_j\,d\,\xi, \quad A_{\mu}^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l(\xi^2-1)^{\mu}\,\Pi_j\,d\,\xi,$$

$$\hat{A}^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l\,\frac{d}{d\,\xi}\,\Pi_j\,d\,\xi, \quad \hat{A}_{\mu}^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l(\xi^2-1)^{\mu}\,\frac{d}{d\,\xi}\,\Pi_j\,d\,\xi,$$

$${}^1A^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l\,\frac{d}{dR}\,\Pi_j\,d\,\xi, \quad {}^1A_{\mu}^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l(\xi^2-1)^{\mu}\,\frac{d}{dR}\,\Pi_j\,d\,\xi,$$

$${}^2A^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l\,\frac{d^2}{dR^2}\,\Pi_j\,d\,\xi, \quad {}^1\hat{A}_{\mu}^l = \int_1^{\infty} \Pi_i\,\xi^l(\xi^2-1)^{\mu}\,\frac{d}{d\,\xi}\,\frac{d}{dR}\,\Pi_j\,d\,\xi, \qquad (6)$$

где $l = 0,1,2\ldots$, $\mu = \begin{cases} -\dfrac{1}{2}, \dfrac{1}{2}, \dfrac{3}{2}, & \text{если } m_i = m_j \pm 1, \\ 0,\ 1,\ 2, & \text{если } m_i = m_j,\ m_j \pm 2 \end{cases}$,

и аналогичные интегралы по η с заменой

$$A \to B,\;\; \xi \to \eta,\;\; \int_1^{\infty} d\,\xi \to \int_{-1}^{+1} d\,\eta,\;\; (\xi^2-1)^{\mu} \to (\eta^2-1)^{\mu},$$

$$\Pi_i \to \Xi_i\,,\;\; \Pi_j \to \Xi_j\,.$$

Вычисление этих интегралов, особенно интегралов типа A, представляет собой весьма трудоемкую задачу и в случае, когда они вычисляются численно, требует огромного времени счета. Для решения физической задачи при этом обязательным становится предварительное вычисление громоздких таблиц соответствующих матричных элементов, поскольку вычисление их по ходу решения задачи просто нереально.

Для случая дискретного спектра задачи (1) в работе введено новое разложение для функции $\Pi(\xi)$, а некоторые уже известные разложения для $\Pi(\xi)$, $\Xi(\eta)$ записаны в более удобном виде. При этом введен новый оператор, диагональный на системах собственных функций (2), (4). Это позволяет использовать аналитическое интегрирование при вычислении интегралов вида (6) и получать выражения для них в простом алгебраическом виде или в виде сравнительно простых сумм, содержащих коэффициенты соответствующих разложений и некоторые алгебраические выражения. Вычисление этих сумм не требует сколько-нибудь значительного времени счета и вполне осуществимо на PC.

ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ ТИПА A

В работах [11,16—19] эти интегралы вычислялись численно. При этом для функций $\Pi(\xi)$ использовалось разложение [5]

$$\Pi(\xi) = (\xi^2-1)^{m/2}(\xi+1)^{\sigma}\,e^{-p(\xi-1)}\sum_{k=0}^{\infty} g_k\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^k, \qquad (7)$$

где $\sigma = \dfrac{b^+}{2p} - m - 1$, $b^+ = RZ^+$, $p = \left(\dfrac{-R^2E}{2}\right)^{1/2}$. Коэффициенты g_k удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$a_k\,g_{k-1} + b_k\,g_k + c_k\,g_{k+1} = 0,\;\; g_{-1} = 0;\;\; k = 0,1,2\ldots,$$

$$a_k = (k+1)(k+m+1),$$

$$b_k = -2k(k+2p-\sigma) + (m+\sigma)(m+1) + 2p\sigma - \lambda,$$

$$c_k = (k-1-\sigma)(k-m-1-\sigma). \tag{8}$$

Поскольку численное интегрирование требует больших затрат машинного времени, в [20] был развит другой алгоритм вычисления A-интегралов с использованием разложения (7). Все интегрирования выполнялись аналитически и сводились к нахождению неполной гамма-функции и ее первой и второй производных, которые вычислялись в программе рекуррентным образом с помощью цепных дробей. При этом применялась полученная в [21] линейная алгебра интегралов задачи двух центров, которая позволяет свести вычисление всех возможных интегралов вида (6) к вычислению только некоторых из них. Это позволило сократить время вычисления соответствующих матричных элементов на 2—3 порядка по сравнению с алгоритмами [11,16—19], но в случае, когда требовалось знание весьма большого числа таких величин, проблема машинного времени все еще оставалась.

Для нахождения функций $\Pi(\xi)$ были предложены также и другие разложения. Например, в [4] было введено разложение

$$\Pi(\xi) = (\xi^2-1)^{m/2}\, e^{-p(\xi-1)} \sum_{k=0}^{\infty} \rho_k L_k^m(2p(\xi-1)). \tag{9}$$

Здесь $L_k^m(x)$ — полиномы Лаггера. Коэффициенты ρ_k связаны рекуррентными соотношениями

$$a_k \rho_{k-1} + b_k \rho_k + c_k \rho_{k+1} = 0, \;\; \rho_{-1} = 0; \;\; k = 0,1,2\ldots, \tag{10}$$

$$a_k = k(\sigma + 1 - k),$$

$$b_k = 2k(k+2p-\sigma) - 2p\sigma + \lambda - (m+1)(m+\sigma),$$

$$c_k = (k+m+1)(\sigma+m-k).$$

Запишем разложение (9) в виде

$$\Pi_1 = \Pi(\xi) = (2p)^m (\xi^2-1)^{m/2}\, e^{-p(\xi-1)} \times$$

$$\times \sum_{k=0}^{\infty} A_k \left(\frac{(\sigma-k+1)_m}{(k+1)_m} \right)^{1/2} L_k^m(2p(\xi-1)), \tag{11}$$

а также введем новое разложение

$$\Pi_2 = \Pi(\xi) = \lambda^{(m)} \left(\frac{\xi-1}{\xi+1} \right)^{m/2} e^{-p(\xi-1)} \times$$

$$\times \sum_{k=0}^{\infty} A_k \left(\frac{1}{(k+1)_m (\sigma-k+1)_m} \right)^{1/2} L_k^m(2p(\xi-1)), \tag{12}$$

где $(a)_m$ — символ Похгаммера,

$$(a)_m = \frac{\Gamma(a+m)}{\Gamma(a)} = a(a+1)\ldots(a+m-1),$$

$\lambda^{(m)}$ — некоторая константа. Подставляем (12) в (1.a) и получаем, что коэффициенты A_k в (11) и в (12) удовлетворяют одинаковым рекуррентным соотношениям

$$\alpha_k A_{k-1} + \beta_k A_k + \alpha_{k+1} A_{k+1} = 0; \;\; A_{k-1} = 0; \;\; k = 0,1,2\ldots,$$

$$\alpha_k = (k(k+m)(\sigma-k+1)(\sigma-k+m+1))^{1/2},$$

$$\beta_k = 2k(k+2p-\sigma) - 2p\sigma + \lambda - (m+1)(m+\sigma). \tag{13}$$

Поскольку абсолютная сходимость разложения (9), а следовательно и (11), доказана в [4], сравниваем (11) и (12) и убеждаемся, что ряд (12) также сходится. Величина $((\sigma-k+1)_m)^{1/2}$ в (12) находится в знаменателе, что улучшает сходимость этого ряда по сравнению с рядом (11).

Введем нормировку $\Pi(\xi)$ такую, чтобы

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_k^2 = 1, \;\; A_{n_\xi} > 0, \tag{14}$$

где n_ξ — число нулей $\Pi(\xi)$ на луче $[1, \infty)$.

Вычислим интеграл

$$A^0 = \int_1^{\infty} \Pi^2(\xi) d\xi = \int_1^{\infty} \Pi_1 \Pi_2 d\xi = \frac{\lambda^{(m)}}{2p}. \tag{15}$$

Здесь мы воспользовались соотношением ортогональности для полиномов Лаггера [22]

$$\int_0^{\infty} e^{-x} x^m L_k^m(x) L_q^m(x) dx = \frac{(k+m)!}{k!} \delta_{kq} \tag{16}$$

и условием нормировки (14).

Найдем теперь константу $\lambda^{(m)}$. Используя (12) и (11), с учетом (16) получаем

$$\int_1^\infty \Pi_2 \, e^{-p(\xi-1)}(\xi^2-1)^{m/2}(2p)^{m+1}d\xi = \lambda^{(m)} A_0 \left(\frac{m!}{(\sigma+1)_m} \right)^{1/2}, \qquad (17)$$

$$\int_1^\infty \Pi_1 \, e^{-p(\xi-1)}(\xi^2-1)^{m/2}(2p)^{m+1}d\xi =$$

$$= \sum_{k=0}^\infty A_k \left(\frac{(\sigma-k+1)_m}{(k+1)_m} \right)^{1/2} \int_0^\infty e^{-x} x^m (x+4p)^m L_k^m(x) dx. \qquad (18)$$

Так как

$$x^l = (l+m)! \, l! \sum_{k=0}^{l} \frac{(-1)^k L_k^m(x)}{(k+m)!(l-k)!},$$

$$(x+4p)^m = \sum_{l=0}^{m} \frac{m!(4p)^{m-l}(m+l)!}{(m-l)!} \sum_{n=0}^{l} \frac{(-1)^n L_n^m(x)}{(l-n)!(n+m)!},$$

находим, что

$$\int_0^\infty L_k^m(x)(x+4p)^m x^m e^{-x} dx =$$

$$= \begin{cases} \displaystyle\sum_{l=0}^{m} \frac{m!}{(m-l)!} \frac{(4p)^{m-l}(l+m)!(-1)^k}{k!(l-k)!}, & \text{если } k \le m, \\ 0, & \text{если } k > m. \end{cases} \qquad (19)$$

Приравнивая (17) и (18), с учетом (19) получаем

$$\lambda^{(m)} = (m!(\sigma+1)_m)^{1/2} \frac{1}{A_0} \sum_{k=0}^{m} \frac{(4p)^{m-l}(l+m)!}{(m-l)!} \times$$

$$\times \sum_{k=0}^{l} \frac{A_k(-1)^k}{(l-k)!} \left(\frac{(\sigma-k+1)_m}{k!(k+m)!} \right)^{1/2}. \qquad (20)$$

Как видим, $\lambda^{(m)}$ — полином по λ степени m, зависящий также от b^+, p. В частных случаях, когда

$$m=0, \quad \lambda^{(0)}=1,$$

$$m=1, \quad \lambda^{(1)} = \lambda + b^+,$$

$$m=2, \quad \lambda^{(2)} = (\lambda - 1 + b^+)(\lambda + b^+) - 3b^+ - \lambda - 4p^2.$$

Введем оператор

$$\hat{\lambda}^{(m)} = \left(\prod_{l=1}^{m} (\hat{\mathcal{L}} + l) \right) (2p(\xi+1))^m, \qquad (21)$$

где

$$\hat{\mathcal{L}} = \left(x\frac{d}{dx} + 1 - \frac{x}{2} + \frac{m}{2} - \frac{m}{2} \frac{x}{(x+4p)} \right) \left(\frac{d}{dx} + \frac{1}{2} - \frac{m}{2x} - \frac{m}{2(x+4p)} \right) + \sigma,$$

$$x = 2p(\xi-1),$$

или

$$\hat{\mathcal{L}}\, 2p = \left((\xi-1)\frac{d}{d\xi} - p(\xi-1) + 1 + \frac{m}{2} - \frac{m}{2}\left(\frac{\xi-1}{\xi+1} \right) \right) \times$$

$$\times \left(\frac{d}{d\xi} + p - \frac{m}{2(\xi-1)} - \frac{m}{2(\xi+1)} \right) + b^+ - 2p(m+1).$$

Подействуем оператором (21) на ряд (12). Получаем

$$\hat{\lambda}^{(m)}\Pi_2 = \lambda^{(m)} e^{-p(\xi-1)}(2p)^m(\xi^2-1)^{m/2} \times$$

$$\times \sum_{k=0}^{\infty} A_k \frac{(\sigma-k+1)(\sigma-k+2)\dots(\sigma-k+m)}{((k+1)_m(\sigma-k+1)_m)^{1/2}} L_k^m(2p(\xi-1)).$$

Сравнивая с (11), имеем

$$\hat{\lambda}^{(m)}\Pi_2 = \lambda^{(m)}\Pi_1.$$

Таким образом,

$$\hat{\lambda}^{(m)}\Pi(\xi) = \lambda^{(m)}\Pi(\xi),$$

то есть оператор $\hat{\lambda}^{(m)}$ диагонален на системе функций $\Pi(\xi)$, и его собственным значением является величина $\lambda^{(m)}$.

Не вдаваясь здесь в детали теоретико-групповой интерпретации $\hat{\lambda}^{(m)}$, заметим лишь, что $\hat{\lambda}^{(m)}$ не является независимым оператором от оператора $\hat{\lambda}$, собственными значениями которого является константа разделения λ. $\hat{\lambda}^{(m)}$ — полином по операторам $\hat{\lambda}$ степени m, зависящий также от оператора энергии

$\hat{E}$ (в случае решения системы (1) в постановке Шредингера) или от оператора $R\hat{Z}^{+}$ (в постановке Штурма — Лиувилля).

Приведем некоторые примеры вычисления интегралов с помощью разложений (11)—(12) и величины $\lambda^{(m)}$.

Подействуем оператором $(\xi-1)\dfrac{d}{d\xi}+p(\xi-1)$ на правую и левую части (11)—(12), умножим на $\Pi(\xi)$ и проинтегрируем по ξ от 1 до ∞. С учетом (14)—(16) и рекуррентных соотношений для полиномов Лаггера [22] получаем

$$\int_1^\infty\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)\Pi^2 d\xi=-\left(\frac{\lambda^{(m)}}{2p}\right)\sum_{k=0}^{\infty}A_kA_{k+1}\left(\frac{(k+1)(k+m+1)}{(\sigma-k)(\sigma+m-k)}\right)^{1/2}, \tag{22}$$

$$A^1=\frac{\lambda^{(m)}}{4p^2}\Bigg(2p+m+1+\sum_{k=0}^{\infty}2kA_k^2-$$

$$-\sum_{k=0}^{\infty}A_kA_{k+1}(2(\sigma-k)+m)\left(\frac{(k+1)(k+m+1)}{(\sigma-k)(\sigma+m-k)}\right)^{1/2}\Bigg). \tag{23}$$

Согласно алгебре интегралов, полученной в [21], все остальные A^l при $l\geq 2$, $i=j$ линейным образом выражаются через A^0, A^1.

В постановке Шредингера при $p_i\neq p_j$, $m_i=m_j$ интеграл A^0 вычисляем, используя (11)—(12) и [22]:

$$\int_0^\infty e^{-bx}x^mL_n^m(x\nu)L_k^m(x\mu)dx=\frac{\Gamma(m+n+k+1)}{k!n!}\,\frac{(b-\nu)^n(b-\mu)^k}{b^{n+k+m+1}}\times$$

$$\times\,{}_2F_1\left(-n,-k,-n-k-m;\ \frac{b(b-\nu-\mu)}{(b-\nu)(b-\mu)}\right).$$

Получаем:

$$\int_1^\infty\Pi_i\Pi_j\,d\xi=\frac{(2p_i)^m\lambda_j^{(m)}}{(p_i+p_j)^{m+1}}\sum_{l=0}^{\infty}\sum_{k=0}^{l}A_k^{(j)}A_{l-k}^{(i)}\left(\frac{(\sigma_i-l+k+1)_m}{(k+1)_m(l-k+1)_m(\sigma_j-k+1)_m}\right)^{1/2}\times$$

$$\times\sum_{n=0}^{\min(k,\,l-k)}\frac{(-1)^{n-k}(l+m-n)!}{(k-n)!(l-k-n)!n!}\left(\frac{p_j-p_i}{p_j+p_i}\right)^{l-2n}. \tag{24}$$

Здесь $\sigma_i=\dfrac{RZ^{+}}{2p_i}-m-1$, $\sigma_j=\dfrac{RZ^{+}}{2p_j}-m-1$; $A_k^{(i)}$, $A_k^{(j)}$ — коэффициенты A_k в разложениях (11)—(12) для состояний i, j соответственно.

Так как интеграл (24) симметричен относительно i, j, то формула справа равна такой же с заменой $i\to j$, $j\to i$.

В постановке Штурма — Лиувилля выражение для интеграла (24) упрощается, поскольку в этом случае $p_i=p_j$. Имеем:

$$\int_1^\infty\Pi_i^{st}\Pi_j^{st}d\xi=\frac{\lambda_j^{(m)}}{2p}\sum_{k=0}^{\infty}A_k^{(i)}A_k^{(j)}\left(\frac{(\sigma_i-k+1)_m}{(\sigma_j-k+1)_m}\right)^{1/2},$$

$$\sigma_i=\frac{RZ_i^{st}}{2p}-m-1,\ \sigma_j=\frac{RZ_j^{st}}{2p}-m-1.$$

При $i=j$, учитывая (14), получаем (15).

Отметим, что ряд (7) также можно записать с помощью коэффициентов A_k. А именно:

$$\Pi(\xi)=\kappa(\xi^2-1)^{m/2}\left(\frac{\xi+1}{2}\right)^{\sigma}e^{-p(\xi-1)}\sum_{k=0}^{\infty}A_k(-1)^k\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^k\Gamma_k,$$

$$\text{где }\Gamma_k=\left(\frac{(-\sigma)_k(-\sigma-m)_k}{k!(k+m)!}\right)^{1/2}. \tag{25}$$

Константу κ определяем, приравнивая $\Pi(\xi)/(\xi-1)^{m/2}$ в точке $\xi=1$ в разложениях (11) и (25). Находим:

$$\kappa=\frac{(2p)^m}{A_0}\sum_{k=0}^{\infty}A_k\left(\frac{(k+1)_m(\sigma-k+1)_m}{m!}\right)^{1/2}.$$

Рассмотрим интеграл

$$J_k=\int_1^\infty\Pi(\xi)f_k(\xi)d\xi, \tag{26}$$

где

$$f_k(\xi)=\kappa(\xi^2-1)^{m/2}\left(\frac{\xi+1}{2}\right)^{\sigma}e^{-p(\xi-1)}(-1)^k\Gamma_k\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^k.$$

Используя уравнение (1.a) и тот факт, что

$$\left((\xi^2-1)\left(f_k\frac{d}{d\xi}\Pi-\Pi\frac{d}{d\xi}f_k\right)\right)\Big|_1^\infty=0,$$

получаем, что J_k удовлетворяет рекуррентным соотношениям (13) для A_k, и так как J_k уменьшаются с увеличением k, то

$$J_k = \tilde{\kappa} A_k, \tag{27}$$

где $\tilde{\kappa}$ — некоторая константа.

Учитывая (14)—(15) и (25), находим

$$\sum_{k=0}^{\infty} A_k J_k = \tilde{\kappa} = A^0 = \frac{\lambda^{(m)}}{2p}. \tag{28}$$

Здесь мы применили фактически почленное интегрирование ряда (25), которое возможно в силу его абсолютной сходимости [5].

Вычислим несколько интегралов с помощью разложения (25). Поскольку

$$\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^l \Pi = (-1)^l \sum_{k=0}^{\infty} A_k f_{k+l} \left(\frac{(k+1)_l (k+m+1)_l}{(k-\sigma)_l (k-\sigma-m)_l}\right)^{1/2},$$

то умножая это равенство на Π и интегрируя по ξ от 1 до ∞, с учетом (26)—(28) получаем

$$\int_1^{\infty} \left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^l \Pi^2 d\xi = (-1)^l \frac{\lambda^{(m)}}{2p} \sum_{k=0}^{\infty} A_k A_{k+1} \left(\frac{(k+1)_l (k+m+1)_l}{(k-\sigma)_l (k-\sigma-m)_l}\right)^{1/2}.$$

В случае $l = 1$ это равенство совпадает с найденным другим способом равенством (22).

Действуя оператором $\left((\xi^2-1)\frac{d}{d\xi} - m\xi - \sigma(\xi-1) + p(\xi^2-1)\right)$ на правую и левую части (25), затем умножая полученное выражение на Π и производя соответствующее интегрирование, находим

$$(\sigma - p)A^0 - (\sigma + m + 1)A^1 + pA^2 = A^0 \sum_{k=0}^{\infty} 2kA_k^2.$$

Заметим, что согласно [21]

$$A^0 \frac{d}{dR}\left(\lambda + \frac{R^2E}{2}\right) - A^2 \frac{d}{dR}\left(\frac{R^2E}{2}\right) = A^1 Z^+.$$

ВЫЧИСЛЕНИЕ ИНТЕГРАЛОВ ТИПА *B*

В случае, когда $Z_1 = Z_2$, для вычисления интегралов по η применяем используемое в [7] и во многих других работах разложение $\Xi(\eta)$ по функциям Лежандра, которое запишем здесь в виде

$$\Xi(\eta) = \sum_{l=0}^{\infty} C_l P^m_{2l+m+\delta}(\eta) \left(\frac{(4l+2m+2\delta+1)(2l+\delta)!}{2(2l+2m+\delta)!}\right)^{1/2},$$

$$\delta = \begin{cases} 0, & \text{если } L - m = 2n, \\ 1, & \text{если } L - m = 2n+1;\ n = 0,1,2\ldots \end{cases} \tag{29}$$

Коэффициенты C_l удовлетворяют рекуррентным соотношениям

$$C_{l-1}\alpha_l + C_l \beta_l + C_{l+1}\alpha_{l+1} = 0,\quad C_{-1} = 0,\ l = 0,1,2\ldots,$$

$$\alpha_l = p^2 \left(\frac{(j^2 - m^2)((j-1)^2 - m^2)}{(4j^2-1)(4(j-1)^2-1)}\right)^{1/2},$$

$$\beta_l = \lambda - p^2 - j(j+1) + p^2 \left(\frac{j^2 - m^2}{4j^2 - 1} + \frac{(j+1)^2 - m^2}{4(j+1)^2 - 1}\right),\quad j = 2l + m + \delta.$$

Введем нормировку $\Xi(\eta)$, так чтобы

$$\sum_{l=0}^{\infty} C_l^2 = 1,\quad C_n > 0. \tag{30}$$

Используя (29) и соотношения ортогональности для функций Лежандра, получаем при $m_i = m_j$, $\delta_i = \delta_j$:

$$B^0 = \int_{-1}^{+1} \Xi_i \Xi_j \, d\eta = \sum_{l=0}^{\infty} C_l^{(i)} C_l^{(j)}. \tag{31}$$

Если $i = j$, то с учетом (30) находим, что $B^0 = 1$. Согласно алгебре интегралов [21], все остальные B^{2k} при $k \geq 1$, $i = j$, $Z_1 = Z_2$ выражаются через B^0. Все B^{2k-1} в этом случае равны нулю.

Для решений штурмовского типа интеграл (31) равен нулю при $L_i \neq L_j$ и равен 1 при $L_i = L_j$ [24].

В случае $Z_1 \neq Z_2$ функции $\Xi(\eta)$ также можно разлагать в ряд по функциям Лежандра [16]. Представим это разложение в виде

$$\Xi(\eta) = \sum_{l=0}^{\infty} D_l P^m_{l+m}(\eta) \left(\frac{(2l+2m+1)l\,!}{2(l+2m)!}\right)^{1/2}, \tag{32}$$

где коэффициенты D_l связаны рекуррентными соотношениями

$$p^2\beta_l\,\beta_{l-1}D_{l-2}+b^-\beta_l\,D_{l-1}+\gamma_l\,D_l+b^-\beta_{l+1}D_{l+1}+p^2\beta_{l+2}\beta_{l+1}D_{l+2}=0,$$

$$D_{-2}=D_{-1}=0;\ \ l=0,1,2...;\ \ \beta_l=\left(\frac{l(l+2m)}{4(l+m)^2-1}\right)^{1/2},\ \ b^-=RZ^-,$$

$$\gamma_l=\lambda-p^2-(l+m)(l+m+1)+p^2\left(\frac{l(l+2m)}{4(l+m)^2-1}+\frac{(l+1)(l+2m+1)}{4(l+m+1)^2-1}\right).$$

Введем нормировку

$$\sum_{l=0}^{\infty}D_l^2=1,\ \ D_{n_\eta}>0, \tag{33}$$

где $n_\eta=L-m$— число нулей функции $\Xi(\eta)$ на интервале $[-1,+1]$.

Используя (32) и соотношения ортогональности для функций Лежандра, аналогично предыдущему случаю находим

$$B^0=\int_{-1}^{+1}\Xi_i\,\Xi_j\,d\eta=\sum_{l=0}^{\infty}D_l^{(i)}D_l^{(j)}. \tag{34}$$

Если $i=j$, то согласно (33) этот интеграл равен 1.

Для случая штурмовских решений интеграл (34) равен нулю при $i\neq j$ и равен 1 при $i=j$ [24].

Применяя рекуррентные соотношения для функций Лежандра [22], подобным образом находим

$$B^1=\int_{-1}^{+1}\eta\,\Xi^2d\eta=2\sum_{l=1}^{\infty}D_l\,D_{l-1}\left(\frac{l(l+2m)}{4(l+m)^2-1}\right)^{1/2}.$$

Согласно [21,24] все остальные B^k при $k\geq 2$, $i=j$ выражаются через B^0, B^1.

Разложение (32) применимо для вычисления интегралов как по шредингеровским функциям (2), так и по штурмовским функциям (4). Когда же вычисляются интегралы только по штурмовским функциям или по функциям (2) при $i=j$, удобно использовать разложения $\Xi(\eta)$ по $e^{\pm p\eta}P^m_{l+m}(\eta)$ [4,6], записанные в виде

$$\Xi_1=\Xi(\eta)=e^{-p\eta}\sum_{l=0}^{\infty}B_l\,P^m_{l+m}(\eta)\times$$

$$\times\left(\frac{(2l+2m+1)l\,!\,\Gamma(\nu-m)}{2(l+2m)!\,\Gamma(\nu-l-m)}\,\frac{1}{(\nu+m+1)_l}\right)^{1/2}, \tag{35}$$

$$\Xi_2=\Xi(\eta)=\varepsilon\,e^{p\eta}\sum_{l=0}^{\infty}B_l\,P^m_{l+m}(\eta)\times$$

$$\times\left(\frac{(2l+2m+1)l\,!}{2(l+2m)!}\,\frac{\Gamma(\nu-l-m)(\nu+m+1)_l}{\Gamma(\nu-m)}\right)^{1/2}, \tag{36}$$

где

$$\nu=\frac{R(Z_1-Z_2)}{2p},$$

$$\alpha_l\,B_{l-1}+\beta_l\,B_l+\alpha_{l+1}B_{l+1}=0;\ \ B_{-1}=0;\ \ l=0,1,2...,$$

$$\alpha_l=2p\left(\frac{l(l+2m)(\nu^2-(l+m)^2)}{4(l+m)^2-1}\right)^{1/2},\ \ \beta_l=-\lambda+(l+m)(l+m+1).$$

Выберем нормировку $\Xi(\eta)$ так, чтобы

$$\sum_{l=0}^{\infty}B_l^2=1,\ \ B_{n_\eta}>0. \tag{37}$$

Используя (35)—(37) и соотношения ортогональности для функций Лежандра, получаем

$$B^0=\int_{-1}^{+1}\Xi_1\Xi_2\,d\eta=\int_{-1}^{+1}\Xi^2d\eta=\varepsilon. \tag{38}$$

Приравнивая $\Xi(\eta)/(1-\eta)^{m/2}$ в точке $\eta=1$ в разложениях (35) и (36), имеем

$$\varepsilon=e^{-2p}\sum_{l=0}^{\infty}B_l\left(\frac{(2l+2m+1)l\,!}{(l+2m)!}\,\frac{\Gamma(\nu+m+1)\,\Gamma(\nu-m)}{\Gamma(\nu+l+m+1)\,\Gamma(\nu-l-m)}\right)^{1/2}\Big/$$

$$\Big/\sum_{l=0}^{\infty}B_l\left(\frac{2l+2m+1)l\,!}{(l+2m)!}\,\frac{(\nu+m+1)_l\,\Gamma(\nu-l-m)}{\Gamma(\nu-m)}\right)^{1/2}.$$

Продифференцируем по R правую и левую стороны (35) и (36) (это возможно в силу абсолютной сходимости этих рядов [4,6]), затем умножим полученные выражения соответственно на Ξ_2 и Ξ_1 и проинтегрируем по η от -1 до $+1$. С учетом (37) и соотношений ортогональности для функций Лежандра находим

$$\frac{d}{dR}B^0 = -2\left(\frac{dp}{dR}\right)B^1 - \left(\frac{d\nu}{dR}\right)\times$$

$$\times \sum_{l=0}^{\infty} B_l^2(\Psi(\nu+m+l+1) - \Psi(\nu+m+1) + \Psi(-\nu+l+m+1) - \Psi(-\nu+m+1)),$$

где

$$\frac{d\nu}{dR} = \frac{\nu}{p}\left(\frac{p}{R} - \frac{dp}{dR}\right), \quad \Psi(z+l) - \Psi(z) = \frac{1}{z} + \frac{1}{z+1} + \ldots + \frac{1}{z+l-1}.$$

Умножая (35) на $\eta\, \Xi_2$, используя рекуррентные соотношения для функций Лежандра и интегрируя соответствующим образом, аналогично предыдущему получаем

$$B^1 = 2\nu B^0 \sum_{l=0}^{\infty} B_l B_{l-1}\left(\frac{l(l+2m)}{(4(l+m)^2-1)} \cdot \frac{1}{(\nu^2-(l+m)^2)}\right)^{1/2}.$$

Выбор различной нормировки для $\Xi(\eta)$ в разложениях (29), (32) и (35), (36) не является принципиальным и может быть легко устранен заменой коэффициентов B_l в разложениях (35), (36) на $B_l/\sqrt{B^0}$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе приведены примеры вычисления некоторых основных интегралов по собственным функциям задачи двух центров квантовой механики.

Аналогичным образом вычисляются другие интегралы вида (6). Использование при этом линейной алгебры интегралов по шредингеровским функциям данной задачи [21], линейной алгебры интегралов по ее штурмовским функциям [24], разложений (11), (12), (25), (29), (32), (35), (36), условий нормировки для коэффициентов этих разложений, соотношений ортогональности для полиномов Лаггера и функций Лежандра позволяет получать необходимые интегралы сравнительно простым способом. В силу абсолютной сходимости упомянутых разложений и быстрого убывания их коэффициентов вычисление с необходимой точностью получаемых сумм не требует существенных затрат машинного времени.

Автор выражает глубокую благодарность А.Т.Филиппову за внимание к работе и поддержку, а также Я.Реваи за полезные обсуждения и проверку разложений (11)—(12), (35)—(36).

ЛИТЕРАТУРА

1. Iwasaku M. et al. — Phys. Rev. Lett., 1991, v.67, p.1246;
Yamazaki T. et al. — Nature, 1993, v.361, p.238;
Nakamura S.N. et al. — Phys. Rev., 1994, v.A49, p.4457.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. — Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
3. Герштейн С.С., Кривченков В.Д. — ЖЭТФ, 1961, т.40, с.1491.
4. Baber W.G., Hasse H.R. — Proc. Camb. Phys. Soc., 1938, v.31, p.564.
5. Jaffe G. — Zs. Phys., 1934, b.87, s.535.
6. Bates D.R., Ledsham K., Stewart A.L. — Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., 1953, v.A246, p.215;
Bates D.R., Carson T.R. — Proc. Roy. Soc., 1956, v.A234, p.207.
7. Chakravatry S.K. — Phil. Mag., 1939, v.28, p.423.
8. Helfrich K., Hartmann H. — Theoret. Chim. Acta (Berl.), 1965, v.3, p.21; 1970, v.16, p.263; 1971, v.21, pp.44,381.
9. Power J.D. — Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., 1973, v.A274, p.663.
10. Peek J.M. — J. Chem. Phys., 1965, v.43, p.3004; Sandia Corporation Report SC-RR-65-77, TID-4500 (39th Ed.), UC-34, 1965;
Madsen M.M., Peek J.M. — Atomic Data, 1971, v.2, p.171.
11. Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. — Препринт ОИЯИ Р4-5040, Дубна, 1970.
12. Трускова Н.Ф. — ОИЯИ, Р11-10207, Дубна, 1976.
13. Hadinger G., Aubert-Frecon M., Hadinger G. — J. Phys. B, 1989, v.22, p.697.
14. Трускова Н.Ф. — ЖВМ и МФ, 1984, т.24, с.1042.
15. Helfrich K. — Z.Phys.D, 1989, b.13, s.295.
16. Hunter G., Gray D.F., Pritchard H.O. — J. Chem. Phys., 1966, v.45, p.3806;
Hunter G., Pritchard H.O. — J. Chem. Phys., 1967, v.46, p.2146.
17. Ramaker D.E., Peek J.M. — Atomic Data, 1973, v.5, p.167.
18. Bishop D.M., Shing-Kuo Shin, Beckel C.L. — J. Chem. Phys., 1975, v.63, p.4836.
19. Виницкий С.И., Пономарев Л.И., Пузынина Т.П. — ОИЯИ, Р4-83-498, Дубна, 1983.
20. Трускова Н.Ф. — ОИЯИ, 11-11218, Дубна, 1978.
21. Трускова Н.Ф. — ЯФ, 1978, т.28, с.850.
22. Градштейн И.С., Рыжик И.М. — Таблицы интегралов, сумм, рядов и произведений. М.: Физматгиз, 1962.
23. Лебедев Н.Н. — Специальные функции и их приложения. М.—Л.: ГИФМЛ, 1963.
24. Трускова Н.Ф. — ЯФ, 1983, т.38, с.652.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 октября 1996 года.