ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ
И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ
ФИЗИКА
Том 64, № 1
июль, 1985

СФЕРОИДАЛЬНЫЕ ПОПРАВКИ К СФЕРИЧЕСКОМУ И ПАРАБОЛИЧЕСКОМУ БАЗИСАМ АТОМА ВОДОРОДА

Мардоян Л. Г. [1], Погосян Г. С. [1], Сисакян А. Н.,
Тер-Антонян В. М. [1]

Найдены рекуррентные соотношения, определяющие разложение сфероидального базиса атома водорода по его параболическому базису. Вычислены главные сфероидальные поправки к сферическому и параболическому базисам методом теории возмущений.

ВВЕДЕНИЕ

Как известно [1], при описании поведения атома водорода во внешнем однородном электрическом поле или поле дополнительного кулоновского центра удобно вместо сферического базиса пользоваться параболическим и сфероидальным. Разложения, связывающие между собой эти базисы, вычислялись разными авторами как прямым путем, использующим явный вид базисов [2—3], так и косвенным — с помощью дополнительных интегралов движения [4—5]. Насколько мы знаем, последний метод к разложению сфероидального базиса по параболическому еще не применялся.

В настоящей статье мы хотим восполнить этот пробел. В первом разделе введены базисы атома водорода, во втором — получены трехчленные рекуррентные соотношения, определяющие разложение сфероидального базиса по параболическому, в третьем — вычислены сфероидальные поправки к сферическому и параболическому базисам.

1. БАЗИСЫ

Напомним основные факты, относящиеся к базисам атома водорода. По определению сферический $\psi^{\text{сф}}$, параболический $\psi^{\text{пр}}$ и сфероидальный $\psi^{\text{сфр}}$ базисы в дискретном спектре удовлетворяют следующим уравнениям [1, 6].

А. Сферический базис:

$$\hat{H}\psi_{nlm}^{\text{сф}}=E_n\psi_{nlm}^{\text{сф}}, \qquad \hat{L}^2\psi_{nlm}^{\text{сф}}=l(l+1)\psi_{nlm}^{\text{сф}}.$$

Б. Параболический базис:

$$\hat{H}\psi_{n_1n_2m}^{\text{пр}}=E_n\psi_{n_1n_2m}^{\text{пр}}, \quad \hat{A}_z\psi_{n_1n_2m}^{\text{пр}}=(n_1-n_2)\psi_{n_1n_2m}^{\text{пр}}.$$

---

[1] Ереванский государственный университет.

В. Сфероидальный базис:

$$\hat{H}\psi_{nqm}^{\text{сфр}} = E_n \psi_{nqm}^{\text{сфр}}, \qquad \hat{\Lambda}\psi_{nqm}^{\text{сфр}} = \lambda_q \psi_{nqm}^{\text{сфр}}.$$

В атомных единицах ($e=m=\hbar=1$)

$$E_n = -{}^1/{}_2 n^2, \qquad \hat{H} = \frac{1}{2}\hat{p}^2 - \frac{1}{r}, \qquad \hat{\Lambda} = -\hat{L}^2 - \frac{R}{n}\hat{A}_z,$$

$$\hat{\mathbf{A}} = n\left\{\frac{1}{2}\hat{\mathbf{L}}\times\hat{\mathbf{p}} - \frac{1}{2}\hat{\mathbf{p}}\times\hat{\mathbf{L}} - \frac{\mathbf{r}}{r}\right\},$$

здесь R — параметр, входящий в определение сфероидальных координат [1].

2. РАЗЛОЖЕНИЕ СФЕРОИДАЛЬНОГО БАЗИСА ПО ПАРАБОЛИЧЕСКОМУ БАЗИСУ

Запишем интересующее нас разложение

$$\psi_{nqm}^{\text{сфр}} = \sum_{n_2=0}^{n-|m|-1} U_{nqm}^{n_2} \psi_{n_1 n_2 m}^{\text{пр}}.$$

Пользуясь явным видом оператора $\hat{\Lambda}$ и определением базисов $\psi^{\text{сфр}}$ и $\psi^{\text{пр}}$, имеем

$$\left[\frac{R}{n}(n-|m|-2n_2-1)+\lambda_q\right] U_{nqm}^{n_2} = \sum_{n_2'=0}^{n-|m|-1} U_{nqm}^{n_2'} (\hat{L}^2)_{n_2 n_2'},$$

где

$$(\hat{L}^2)_{n_2 n_2'} = \int \psi_{n_1 n_2 m}^{*\,\text{пр}} \hat{L}^2 \psi_{n_1' n_2' m}^{\text{пр}}\, dV.$$

Если согласно [7] разложить параболический базис по сферическому

$$\psi_{n_1 n_2 m}^{\text{пр}} = (-1)^{n_2 + \frac{m+|m|}{2}} \sum_{l=|m|}^{n-1} (-1)^l C_{\frac{n-1}{2},\, \frac{n-1}{2}-n_2;\, \frac{n-1}{2},\, |m|+n_2-\frac{n-1}{2}}^{l,\,|m|} \psi_{nlm}^{\text{сф}},$$

учесть трехчленные рекуррентные соотношения на коэффициенты Клебша — Гордона [8]

$$[(b-a+c)(a-b+c+1)]^{1/2} C_{a,\alpha;b,\beta}^{c,\gamma} =$$

$$= [(a-\alpha+1)(b-\beta)]^{1/2} C_{a+\frac{1}{2},\alpha-\frac{1}{2};b-\frac{1}{2},\beta+\frac{1}{2}}^{c,\gamma} +$$

$$+ [(a+\alpha+1)(b+\beta)]^{1/2} C_{a+\frac{1}{2},\alpha+\frac{1}{2};b-\frac{1}{2},\beta-\frac{1}{2}}^{c,\gamma}$$

и соотношение ортогональности

$$\sum_{c=|\gamma|}^{|a+b|} C_{a,\alpha;b,\beta}^{c,\gamma} C_{a,\alpha';b,\beta'}^{c,\gamma} = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'};$$

то для матричных элементов оператора $\hat{L}^2$ по параболическому базису можно получить формулу

$$(\hat{L}^2)_{n_2n_2'}=[(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)+(n-n_2)(n+|m|)]\delta_{n_2',n_2}-$$
$$-[(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)(n-n_2-1)(n_2+|m|+1)]^{1/2}\delta_{n_2',n_2+1}-$$
$$-[n_2(n-|m|-n_2)(n-n_2)(n_2+|m|)]^{1/2}\delta_{n_2',n_2-1}$$

и значительно упростить выписанную выше систему уравнений на коэффициенты $U_{nqm}^{n_2}$:

$$\Big[\lambda_2+(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)+(n-n_2)(n_2+|m|)+$$
$$+\frac{R}{n}(n-|m|-2n_2-1)\Big]U_{nqm}^{n_2}=[(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)\times$$
$$\times(n-n_2-1)(n_2+|m|+1)]^{1/2}U_{nqm}^{n_2+1}+$$
$$+[n_2(n-|m|-n_2)(n-n_2)(n_2+|m|)]^{1/2}U_{nqm}^{n_2-1}.$$

Эти трехчленные рекуррентные соотношения при малых n позволяют вычислить собственные значения λ_q и коэффициенты $U_{nqm}^{n_2}$ аналитически. Для однозначного выбора коэффициентов необходимо еще учесть условие нормировки

$$\sum_{n_2=0}^{n-|m|-1}|U_{nqm}^{n_2}|^2=1.$$

В общем случае вычисление коэффициентов $U_{nqm}^{n_2}$ с помощью полученных рекуррентных соотношений возможно лишь на ЭВМ.

3. ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

При малых R второе слагаемое в операторе $\hat{\Lambda}$ является возмущением, а сферический базис — нулевым приближением. Уравнение на собственные значения оператора $\hat{\Lambda}$ при больших R после деления его на R/n есть

$$\left(-\hat{A}_z-\frac{n}{R}\hat{L}^2\right)\psi_{nqm}^{\text{сфр}}=\frac{n}{R}\lambda_q\psi_{nqm}^{\text{сфр}}.$$

Как видно, теперь возмущением является член $n\hat{L}^2/R$. После сказанного вычисление поправок к λ_q и $\psi_{nqm}^{\text{сфр}}$ при малых и больших R приобретает стандартный характер. Необходимо лишь наряду с $(\hat{L}^2)_{n_2n_2'}$ знать явный вид матричного элемента оператора $\hat{A}_z$ по сферическому базису [9]:

$$(\hat{A}_z)_{l'l}\equiv\int\psi_{nl'm}^{*\,\text{сф}}\hat{A}_z\psi_{nlm}^{\text{сф}}\,dV=$$
$$=-\left\{\frac{(l+|m|+1)(l-|m|+1)(n-l-1)(n+l+1)}{(2l+1)(2l+3)}\right\}^{1/2}\delta_{l',l+1}-$$
$$-\left\{\frac{(l+|m|)(l-|m|)(n-l)(n+l)}{(2l+1)(2l-1)}\right\}^{1/2}\delta_{l',l-1}.$$

Приведем окончательный результат.

А. Область малых R:

$$\lambda_q(R)=-l(l+1)-\frac{R^2}{2n^2(2l+1)}\times$$
$$\times\left\{\frac{(l+|m|+1)(l-|m|+1)(n-l-1)(n+l+1)}{(l+1)(2l+3)}-\right.$$
$$\left.-\frac{(l+|m|)(l-|m|)(n-l)(n+l)}{l(2l-1)}\right\},$$

$$\psi_{nqm}^{\text{сфр}}=\psi_{nlm}^{\text{сф}}+\frac{R}{2n(l+1)}\times$$
$$\times\left\{\frac{(l+|m|+1)(l-|m|+1)(n-l-1)(n+l+1)}{(2l+1)(2l+3)}\right\}^{1/2}\psi_{n,l+1,m}^{\text{сф}}+$$
$$+\frac{R}{2nl}\left\{\frac{(l+|m|)(l-|m|)(n-l)(n+l)}{(2l-1)(2l+1)}\right\}^{1/2}\psi_{n,l-1,m}^{\text{сф}}.$$

Б. Область больших R:

$$\lambda_q(R)=-\frac{R}{n}(n-|m|-2n_2-1)-(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)-$$
$$-(n-n_2)(n_2+|m|),$$
$$\psi_{nqm}^{\text{сфр}}=\psi_{n_1n_2m}^{\text{пр}}-\frac{2n}{R}\{(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)(n-n_2-1)\times$$
$$\times(n_2+|m|+1)\}^{1/2}\psi_{n_1-1,n_2+1,m}^{\text{пр}}+\frac{2n}{R}\{n_2(n-|m|-n_2)\times$$
$$\times(n-n_2)(n_2+|m|)\}^{1/2}\psi_{n_1+1,n_2-1,m}^{\text{пр}}.$$

Первая формула получена во втором, а остальные три — в первом порядке теории возмущений. Поправки более высокого порядка вычисляются аналогично.

В заключение выражаем благодарность Г. С. Саакяну, Я. А. Смородинскому, Л. И. Пономареву и С. И. Виницкому за полезные обсуждения.

Литература

[1] *Комаров И. В., Пономарев Л. И., Славянов С. Ю.* Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.
[2] *Tarter C. B.*— J. Math. Phys., 1970, *11*, 3192—3195.
[3] *Mardoyn L. G., Pogosyan G. S., Sissakian A. N., Ter-Antonyan V. M.*— J. Phys., 1983, *A16*, 711—728.
[4] *Park D.* Z. Phys., 1960, *159*, 155—158.
[5] *Coulson C., Joseph A.*— Proc. Phys. Soc. London, 1967, *90*, 887—893.
[6] *Фок В. А.* Начала квантовой механики. М.: Наука, 1976.
[7] *Арутюнян М. Г., Погосян Г. С., Тер-Антонян В. М.*— Изв. АН АрмССР, физика, 1978, *13*, 152—154.
[8] *Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
[9] *Englefield M. J.* Group Theory and The Coulomb problem. New-York – Sydney – Toronto : Wiley-Interscience, 1972.

Объединенный институт
ядерных исследований

Поступила в редакцию
8.VIII.1984 г.