ФУНКЦІЯ ГРІНА КВАНТОВОМЕХАНІЧНОЇ ЗАДАЧІ ДВОХ КУЛОНІВСЬКИХ ЦЕНТРІВ

М.В.Хома, В.Ю.Лазур, М.І. Карбованець.

Ужгородський державний університет, 88000, м. Ужгород, вул Волошина, 32

На основі тричленних рекурентних співвідношень отримано аналітичний вираз для одноелектронної функції Гріна для руху електрона в потенціалі двох кулонівських центрів. В граничному переході до моделі об'єднаного атома побудована функція переходить у одноцентрову кулонівську функцію Гріна.

У багатьох випадках задача двох кулонівських центрів Z_1eZ_2 [1] є базовою для дослідження багаточастинкових ($n \geq 3$) систем в атомній та молекулярній фізиці [2-4]. Застосування таких методів теоретичного дослідження багаточастинкових взаємодій як варіаційний, теорія збурень [5,6] стикається із значними труднощами, тоді як використання математичного апарату функції Гріна дозволяє уникнути об'ємних обчислювальних процедур, а в ряді випадків отримати замкнуті аналітичні вирази для шуканих величин. В цьому зв'язку функція Гріна двох кулонівських центрів набуває особливо важливого значення [7-12]. Успішне використання методу квантового дефекту (МКД) при отриманні атомної функції Гріна у випадку екранованого потенціалу дозволило застосувати аналогічний підхід і до молекулярного двоцентрового потенціалу [8, 9,12]. Однак використання МКД з одного боку не можна вважати цілком аналітичним (оскільки передбачає використання параметрів, що визначаються з експериментальних даних) а з іншого – досить часто не забезпечує необхідної точності у розв'язанні прикладних задач. Більш загальним є підхід розроблений у [13], де на основі рекурентних співвідношень отримано вираз для радіальної функції Гріна водневоподібного молекулярного іона H_2^+. Основним недоліком запропонованого в [13] методу є незручність у практичному застосуванні.

В даній роботі отримано аналітичне зображення для радіальної кулонівської двоцентрової функції Гріна на основі тричленних рекурентних співвідношень, зручних для подальшого використання як у прикладних розрахункових задачах так і в теоретичних дослідженнях.

Функція Гріна для руху електрона в аксіально – симетричному полі молекули задовольняє рівнянню

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla_r^{\,2} + V(\vec{r}) - E\right)G(E,\vec{r},\vec{r}\,') = \delta(\vec{r}-\vec{r}\,'), \quad (1)$$

тут $V(\vec{r}) = -Z_1/r_1 - Z_2/r_2$ – двоцентровий молекулярний потенціал, $\vec{r}$ – радіус-вектор електрона відносно вибраного центру, r_1, r_2 – відстані від електрона до зарядів Z_1 та Z_2 відповідно, E – енергія зв'язаного стану, (всі інші позначення загальноприйняті [1]). Надалі обмежимося у розгляді симетричного випадку $Z_1 = Z_2 = Z$, як найбільш цікавого в практичному застосуванні. В цьому випадку розв'язок (1) можна подати у вигляді парціального розкладу за повною ортогональною системою функцій $S_{m\ell}(p,\eta)\cdot\exp(\pm im\phi)$ [1]:

$$G(E,\vec{r},\vec{r}\,') = \sum_{m\ell}\Pi_{m\ell}(E,\xi,\xi')S_{m\ell}(p,\eta)S^{*}_{m\ell}(p,\eta')\frac{e^{im(\varphi-\varphi')}}{2\pi}. \quad (2)$$

Тут ξ, η, φ – витягнуті сфероїдальні координати [1]:

$$\xi = \frac{r_1 + r_2}{R}, \quad \eta = \frac{r_1 - r_2}{R}, \quad \varphi = arctg\left(\frac{y}{x}\right); \tag{3}$$
$$1 \le \xi < \infty, \quad -1 \le \eta \le 1, \quad 0 \le \varphi < 2\pi;$$

R відстань між зарядами; ℓ, m - орбітальне і магнітне квантові числа електрона в квазімолекулярній частинці; $S_{m\ell}(p,\eta)$ - нормовані витягнуті кутові сфероїдальні функції [1], які при $R=0$ виражаються через приєднані поліноми Лежандра:

$$S_{m\ell}(0,\eta) = \sqrt{\frac{(2\ell+1)(\ell-|m|)!}{2(\ell+|m|)!}} P_\ell^m(\eta). \tag{4}$$

Якщо записати рівняння (1) у координатах (3) і відокремити кутові зміні η та φ прийдемо до наступного рівняння для парціальної радіальної функції Гріна $\Pi_{m\ell}(E,\xi,\xi')$:

$$\left(\frac{d}{d\xi}(\xi^2-1)\frac{d}{d\xi} - p^2(\xi^2-1) + 2p\alpha\xi - \lambda - \frac{m^2}{\xi^2-1}\right)\cdot \Pi_{m\ell}(E,\xi,\xi') = \frac{4}{R}\delta(\xi-\xi'), \tag{5}$$
$$p = \frac{1}{2}R(-2E)^{1/2}; \quad \alpha = 2Z(-2E)^{-1/2}.$$

Тут λ – константа відокремлення яку визначаємо з кутового рівняння. Зробимо заміну змінної і запровадимо нову функцію:

$$x = p(\xi+1),$$

$$\tilde{\Pi}_{m\ell}(E,x,x') = \frac{\alpha}{8Z}\left(\frac{\xi+1}{\xi-1}\right)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{\xi'+1}{\xi'-1}\right)^{\frac{m}{2}} \times \Pi_{m\ell}(E,\xi,\xi') \tag{6}$$

тоді рівняння (5) приймає вигляд

$$\left(\frac{d}{dx}x^2\frac{d}{dx} - x^2 + 2\alpha x - \nu(\nu+1)\right)\cdot\tilde{\Pi}_{m\ell}(E,x,x') + \frac{p}{x-2p}\left[2(m+1)x\frac{d}{dx} + \left(\frac{\nu(\nu+1)-\lambda}{p} + 2\alpha\right)x - 2\nu(\nu+1)\right]\cdot\tilde{\Pi}_{m\ell}(E,x,x') = \delta(x-x'). \tag{7}$$

Тут ν – довільна постійна, зміст якої буде зрозумілий з граничної умови переходу при $p \to 0$ отриманої функції Гріна в одноцентрову. Функцію Гріна $\tilde{\Pi}_{m\ell}(E,x,x')$ побудуємо стандартним чином [16] через добуток двох лінійно незалежних розв'язків однорідного рівняння (7), які зобразимо у вигляді наступних розкладів:

$$\tilde{\Pi}^R_{m\ell}(E,x) = \sum_{n=0}^{\infty} h_n R_{\nu+n}(x),$$
$$R_\nu(x) = x^\nu e^{-x}\phi(-\alpha+\nu+1, 2\nu+2, 2x), \tag{8}$$

$$\tilde{\Pi}^N_{m\ell}(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \tilde{h}_n \tilde{R}_{\nu+n}(x),$$
$$\tilde{R}_\nu(x) = x^\nu e^{-x}\psi(-\alpha+\nu+1, 2\nu+2, 2x), \tag{9}$$

тут $\phi(a,c,x)$, $\psi(a,c,x)$ – вироджені гіпергеометричні функції [15].

Отримаємо рекурентні формули для базисних функцій $R_\nu(x)$ та $\tilde{R}_\nu(x)$ методом запропонованим у [14]. Покладемо

$$R_\nu(x) = x(AR_{\nu-1}(x) + BR_\nu(x) + CR_{\nu+1}(x)),$$
$$\frac{d}{dx}R_\nu(x) = KR_{\nu-1}(x) + LR_\nu(x) + MR_{\nu+1}(x), \tag{10}$$

$$\begin{aligned}&\widetilde{R}_\nu(x)=x\left(\widetilde{A}\widetilde{R}_{\nu-1}(x)+\widetilde{B}\widetilde{R}_\nu(x)+\widetilde{C}\widetilde{R}_{\nu+1}(x)\right),\\&\frac{d}{dx}\widetilde{R}_\nu(x)=\widetilde{K}\widetilde{R}_{\nu-1}(x)+\widetilde{L}\widetilde{R}_\nu(x)+\widetilde{M}\widetilde{R}_{\nu+1}(x)\end{aligned}\quad(11)$$

Щоб отримати коефіцієнти цих співвідношень, виходимо з інтегральних представлень [15] для базисних функцій:

$$R_\nu(x)=\frac{\Gamma(2\nu+2)x^\nu e^{-x}}{\Gamma(-\alpha+\nu+1)\Gamma(\alpha+\nu+1)}\int_0^1 e^{2xu}u^{-\alpha+\nu}(1-u)^{\alpha+\nu}\,du, \quad (12)$$

$$\widetilde{R}_\nu(x)=\frac{x^\nu e^{-x}}{\Gamma(-\alpha+\nu+1)}\int_0^\infty e^{-2xu}u^{-\alpha+\nu}(1+u)^{\alpha+\nu}\,du. \quad (13)$$

Почленним інтегруванням по частинам можна зробити рівними показники степені x у всіх членах правої та лівої частини кожного із співвідношень (10), (11). Після чого, прирівнюючи коефіцієнти при однакових підінтегральних функціях до нуля, знаходимо

$$A=1,\qquad B=\frac{\alpha}{\nu(\nu+1)},\qquad C=\frac{\alpha^2-(\nu+1)^2}{(\nu+1)^2(2\nu+1)(2\nu+3)}, \quad (14)$$

$$K=\nu,\qquad L=0,\qquad M=-\frac{\alpha^2-(\nu+1)^2}{(\nu+1)(2\nu+1)(2\nu+3)}, \quad (15)$$

$$\widetilde{A}=-\frac{\alpha+\nu}{2\nu(2\nu+1)},\qquad \widetilde{B}=\frac{\alpha}{\nu(\nu+1)},\qquad \widetilde{C}=\frac{2(-\alpha+\nu+1)}{(\nu+1)(2\nu+1)}, \quad (16)$$

$$\widetilde{K}=-\frac{\alpha+\nu}{2(2\nu+1)},\qquad \widetilde{L}=0,\qquad \widetilde{M}=-\frac{2(-\alpha+\nu+1)}{2\nu+1}. \quad (17)$$

Тепер, скориставшись (10), (11) і (14)-(17) легко отримати тричленні рекурентні співвідношення для коефіцієнтів h_n та $\widetilde{h}_n$ у розкладах (8), (9):

$$\begin{aligned}&h_{n-1}\cdot 2p\frac{\left((\nu+n)^2-\alpha^2\right)(\nu+n+m)}{(n+\nu)(2n+2\nu-1)(2n+2\nu+1)}+\\&+h_n\left[(\nu+n)(\nu+n+1)-\lambda\right]\\&-h_{n+1}\cdot 2p(n+\nu+1)(\nu+n+1-m)=0,\\&h_{-1}=0,\end{aligned}\quad(18)$$

$$\begin{aligned}&\widetilde{h}_{n+1}\cdot p\frac{(\alpha+n+\nu+1)(\nu+n-m+1)}{2n+2\nu+3}+\\&+\widetilde{h}_n\left[(\nu+n)(\nu+n+1)-\lambda\right]-\\&-\widetilde{h}_{n-1}\cdot 4p\frac{(-\alpha+n+\nu)(\nu+n+m)}{(2n+2\nu-1)}=0,\\&\widetilde{h}_{-1}=0.\end{aligned}\quad(19)$$

Кожна з рекурентних систем (18), (19) визначає коефіцієнти h_n та $\widetilde{h}_n$ з точністю до довільного сталого множника, який фіксуємо відповідною умовою

$$\sum_{s=0}^{\infty} h_s \frac{\Gamma(2s+2)}{2^s \Gamma(s+1-\alpha)} = 1,$$
$$\sum_{s=0}^{\infty} 2^{-s} \widetilde{h}_s = 1. \tag{20}$$

Кінцевий вираз для парціальної радіальної функції Гріна $\Pi_{m\ell}(E,\xi,\xi')$ можна тепер записати у вигляді

$$\Pi_{ml}(E,\xi,\xi') = \frac{8Z}{\alpha}\left(\frac{\xi-1}{\xi+1}\right)^{\frac{m}{2}}\left(\frac{\xi'-1}{\xi'+1}\right)^{\frac{m}{2}} \widetilde{\Pi}^R_{ml}(x_<)\widetilde{\Pi}^N_{ml}(x_>),$$
$$x_< = min\{x,x'\}, \quad x_> = max\{x,x'\}. \tag{21}$$

В результаті граничного переходу $p=0$ у виразах (18), (19) зберігаються ненульовими тільки доданки h_0 і $\widetilde{h}_0$, звідки легко бачити, що побудована функція (21) переходить у атомну одноцентрову радіальну функцію Гріна, а параметр ν з необхідністю набуває змісту квантового числа орбітального моменту $\nu=\ell$.

Приймаючи до уваги розклади (8), (9) разом з умовами (20) видно, що в границі $R\to 0$ регулярні $\widetilde{\Pi}^R_{m\ell}(x_\pm)$ та нерегулярні $\widetilde{\Pi}^N_{m\ell}(x_\pm)$ розв`язки відповідного (7) однорідного рівняння ведуть себе наступним чином:

$$\widetilde{\Pi}^R_{m\ell}(p(\xi\pm 1)) \xrightarrow[R\to 0]{} \frac{\Gamma(\ell+1-\alpha)}{\Gamma(2\ell+2)} exp\left(-\frac{2Zr}{\alpha}\right)\left(\frac{4Zr}{\alpha}\right)^{\ell} \Phi\left(\ell+1-\alpha, 2\ell+2, \frac{4Zr}{\alpha}\right), \tag{22}$$

$$\widetilde{\Pi}^N_{m\ell}(p(\xi\pm 1)) \xrightarrow[R\to 0]{} exp\left(-\frac{2Zr}{\alpha}\right)\left(\frac{4Zr}{\alpha}\right)^{\ell} \Psi\left(\ell+1-\alpha, 2\ell+2, \frac{4Zr}{\alpha}\right). \tag{23}$$

Звідки випливає, що отримана функція Гріна двоцентрового кулонівського потенціалу переходить в границі об'єднаного атома у добре відому одноцентрову із зарядом ядра 2Z:

$$g_\ell(r,r';E) = \frac{4Z}{\alpha}\frac{\Gamma(\ell+1-\nu)}{\Gamma(2\ell+2)}\left(\frac{2Zr_<}{\alpha}\right)^{\ell}\left(\frac{2Zr_>}{\alpha}\right)^{\ell} exp\left[-\frac{Z}{\alpha}(r_<+r_>)\right]\times$$
$$\Phi\left(\ell+1-\nu, 2\ell+2, \frac{2Zr_<}{\alpha}\right)\Psi\left(\ell+1-\nu, 2\ell+2, \frac{2Zr_>}{\alpha}\right). \tag{24}$$

Побудована таким чином двоцентрова радіальна функція Гріна (21) є точним розв'язком рівняння (5). Деталі розрахунків значень регулярних та нерегулярних розв'язків $\widetilde{\Pi}^R_{m\ell}(x_\pm)$, $\widetilde{\Pi}^N_{m\ell}(x_\pm)$ а також застосування отриманого виразу (21) в конкретних розрахунках буде представлено в окремій публікації.

Робота виконана при частковій фінансовій підтримці міжнародної асоціації INTAS, грант № **99-1326**.

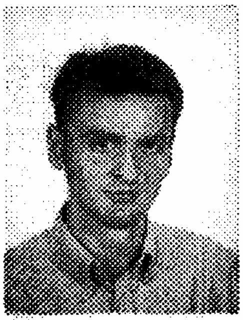
1. И.В. Комаров, Л.И. Пономарев, С.Ю. Славянов, Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, (1976) 319с.
2. В.В. Афросимов, Г.А. Лейко, М.Н. Панов, ЖТФ, **50**, вып.3, №4, с.519, (1980).
3. Т.М. Кереселидзе, ЖЭТФ, **96**, вып.2(8), с.543, (1989).
4. F. Errea, J.D. Gorfinkiel, C. Harel, H. Jouin, A. Macias, L. Mendez, B. Pons, A. Riera, J.Phys.B, **33**, p.3107, (2000).
5. М.Н. Адамов, Т.К.Ребане, Р.А. Эварестов, Опт. и спектр., **22**, с.709, (1967).
6. R.P. McEachran, S.Smith, M.Cohen, Can, J.Chem., **52**, c.3463, (1974).
7. С.И. Ветчинкин, С.В. Христенко, Опт. и спектр. **25**, вып.5, с.650, (1968).
8. N.I. Manakov, V.D. Ovsiannikov, Phys. Lett., **58A**, №6, p.385, (1976).
9. V.E. Chernov, B.A. Zon, J.Phys.B. **29**, p.4161, (1996).
10. В.Ю. Лазур, Т.П. Грозданов, Р.К. Янев, Хим. Физика **5**, *11*, 1471 (1986).
11. Г.О. Ярковой, Функция Грина для задачи – электрон в поле двух кулоновских центров. Препринт ИТФ-75-54р, Киев, (1975).
12. В.А. Давыдкин, Л.П. Рапопорт, Опт. и спектр. **36**, вып.2, с.244, (1974).
13. B.J. Laurenzi, J.Chem.Phys. **55**, *6*, 2681, (1971).
14. D.A. Abramov, S.Yu.Slavyanov, J.Phys.B. **11**, №13, p.2229, (1978).
15. Г.Бейтман, А.Эрдейи, Высшие трансцендентные функции т.1. М.: Наука, (1973) 294с.
16. А.И. Базь, Я.Б. Зельдович, А.М. Переломов. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М.: Наука, (1971) 544с.

GREEN`S FUNCTION FOR QUANTUM MECHANIC PROBLEM OF TWO COULOMB CENTRES

M.V. Khoma, V.Yu. Lazur, M.I. Karbovanets.

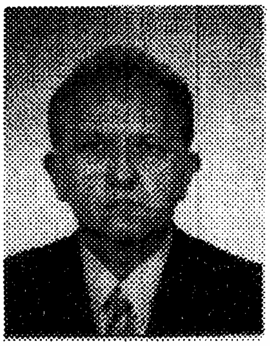
Uzhgorod State University, Voloshina St. 32, Uzhgorod, 88000, Ukraine

On the basis of three-term recurrence relation analytic representation for one-electron Green`s function of two-Coulomb-centre potential with axial symmetry obtained. At the boundary transition to model of joined atom constructed function go over to one-Coulomb-centre Green`s function.



Михайло Васильович Хома – н.с. кафедри теоретичної фізики
Народився в 1975 р. Закінчив фізичний факультет у 1997 р.

Володимир Юрійович Лазур – завідувач кафедри теоретичної фізики, професор
Народився в 1950 р. Закінчив УжДУ в 1972 р. Кандидат фіз.-мат. наук з 1977 р.
Доктор фіз.-мат. наук з 1993 р.



Мирослав Іванович Карбованець – доцент кафедри теоретичної фізики.
Народився в 1955 р. Закінчив УжДУ в 1977 р. Кандидат фіз.-мат. наук з 1977 р.