

КУЛОНОВСКАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА
ДЛЯ РАСЧЕТА БРЕЙТОВСКИХ ПОПРАВКИ

П. Г. Бодашко, С. А. Запрягаев и У. И. Сафронова

Приведены результаты расчета матричных элементов оператора Брейта для изоэлектронных последовательностей He, Be и Ne. Рассчитаны три члена оператора Брейта: $H^{(1)} = -\alpha^2 \frac{p^4}{8}$; $H^{(4')} = \frac{\alpha^2}{2} \pi Z \delta(\mathbf{r})$, $H^{(3')} = \frac{\alpha^2}{2} Z \frac{\mathbf{LS}}{r^3}$. Расчет проводился с функциями нулевого и первого порядка теории возмущений по электростатическому взаимодействию. Для вычислений была использована кулоновская функция Грина, что позволило провести расчеты с большой точностью. Для рассматриваемых изоэлектронных последовательностей были получены аналитические формулы со снятым суммированием по проекциям моментов. Окончательные результаты представлены в виде двух членов ряда по $1/Z$.

Теория возмущений для матричных элементов оператора Брейта была сформулирована ранее в [1-5]. В общем виде для $\langle H_B \rangle$ имеем (a — конфигурация, LSJ — суммарные орбитальный, спиновый и полный моменты LS -терма соответственно)

$$\begin{aligned} \langle aLSJ | H_B | a'L'S'J \rangle = & \frac{\alpha^2}{4} [E_0^* Z^4 \delta(aLS, a'L'S') + \Delta E_1^* Z^3 \delta(LS, L'S')] + \\ & + (-1)^{L+S'+J} \left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ S' & L' & 1 \end{matrix} \right\} \frac{\alpha^2}{4} (Z-A)^3 [\delta(a, a') E^{(0)}(Z-B) + \epsilon_{SO}] + (-1)^{L+S'J} \times \\ & \times \left\{ \begin{matrix} L & S & J \\ S' & L' & 2 \end{matrix} \right\} \frac{\alpha^2}{4} (Z-A)^3 \epsilon_{SS}. \end{aligned} \quad (1)$$

Здесь использованы обозначения, принятые в работе [8]. Первые два члена в (1) описывают сдвиг терма, а остальные — расщепление. Разделим оператор Брейта на сумму одночастичных (H_1) и двухчастичных (H_2) операторов. Как известно, для средних значений $\langle H_1 \rangle$ и $\langle H_2 \rangle$ имеем

$$\begin{cases} \langle \Psi | H_1 | \Psi \rangle \simeq aZ^4 + bZ^3 + \dots, \\ \langle \Psi | H_2 | \Psi \rangle \simeq a'Z^3 + b'Z^2 + \dots, \end{cases} \quad (2)$$

где Ψ — точные нерелятивистские функции. Расчет a и a' проводился с водородными функциями. Для расчета b использовались функции первого порядка теории возмущений по межэлектронному взаимодействию на водородном базисе. Таким образом, для расчета b необходимо уметь вычислять спектральные суммы по полному набору состояний дискретного и непрерывного спектра. Ранее в работах [4, 5] расчет суммы такого вида проводился непосредственным суммированием матричных элементов по дискретному спектру, а интегрирование по непрерывному спектру проводилось по точкам. Такой расчет нагляден, но не претендует на большую точность. Использование кулоновских функций Грина резко повышает точность расчета и делает ее практически неограниченной. В настоящей работе приводятся результаты расчета всех выражений, необходимых для вычисления поправок первого порядка для трех одночастичных операторов Брейта (p^4 , $\delta(\mathbf{r})$, $\mathbf{LS}/r^3$). Рассмотрены изоэлектронные последовательности He, Be, Ne.

Общие формулы

В представлении вторичного квантования операторы $(H^{(1)}(\mathbf{r}, \sigma) = -\frac{\alpha^2}{8} p^4$, $H^{(4')}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{\alpha^2}{2} \pi Z \delta(\mathbf{r})$, $H^{(3')}(\mathbf{r}, \sigma) = \frac{\alpha^2}{2} Z \frac{\mathbf{L}_i \mathbf{S}_i}{r_i^3}$) имеют вид

$$H^{(k)} = \sum_{j_1 j_2} V_{j_1 j_2}^{(k)} a_{j_1}^+ a_{j_2}, \quad (3)$$

где

$$V_{j_1 j_2}^{(k)} = \int d\mathbf{r} \sum_{\sigma} \Psi_{j_1}^*(\mathbf{r}, \sigma) H^{(k)}(\mathbf{r}, \sigma) \Psi_{j_2}(\mathbf{r}, \sigma). \quad (4)$$

В рассматриваемых нами частных случаях для $V_{j_1 j_2}^{(k)}$ имеем

$$V_{j_1 j_2}^{(1)} = \delta(m_1, m_2) \delta(m_{s_1}, m_{s_2}) M^{(1)}(n_1 l_1, n_2 l_2) \frac{\alpha^2}{4} Z^4, \quad V_{j_1 j_2}^{(4')} = \delta(m_1, m_2) \delta(m_{s_1}, m_{s_2}) \times \\ \times \delta(m_1, 0) M^{(4')}(n_1 l_1, n_2 l_2) \frac{\alpha^2}{4} Z^4, \quad V_{j_1 j_2}^{(3')} = \frac{\alpha^2}{4} Z^4 \delta(l_1, l_2) M^{(3')}(n_1 l_1, n_2 l_2) \times \\ \times \sum_{\mu} (-1)^{l_1 + m_2 - 1/2 + m_{s_2} + \mu} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & 1 \\ m_2 & -m_1 & \mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ m_{s_2} & -m_{s_1} & -\mu \end{pmatrix}, \quad (5)$$

где

$$M^{(1)}(n_1 l_1, n_2 l_2) = -\frac{1}{2} \delta(l_1, l_2) \int_0^{\infty} dr R_{n_1 l_1}(r) R_{n_2 l_2}(r) \left(2 - \frac{r}{n_1^2}\right) \left(2 - \frac{r}{n_2^2}\right), \quad M^{(4')}(n_1 l_1, n_2 l_2) = \\ = \frac{1}{2} \delta(l_1, 0) \delta(l_2, 0) R_{n_1 0}(0) R_{n_2 0}(0), \quad M^{(3')}(n_1 l_1, n_2 l_2) = \\ = \sqrt{\frac{3}{2}} l_1(l_1 + 1)(2l_1 + 1) \delta(l_1, l_2) P(n_1 l_1, n_2 l_2), \quad P(n_1 l_1, n_2 l_2) = \int_0^{\infty} dr r R_{n_1 l_1}(r) R_{n_2 l_2}(r), \quad (6) \\ \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{pmatrix} - 3jm\text{-символ Вигнера.}$$

В общем случае для функции Ψ с учетом электростатического взаимодействия имеем

$$\Psi_Q = \frac{S_{\gamma}(0, -\infty) |\Phi_Q\rangle}{\langle \Phi_Q | S_{\gamma}(0, \infty) | \Phi_Q \rangle}, \quad (7)$$

где

$$\Phi_Q = \frac{1}{n!} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q a_{\beta_1}^+ \dots a_{\beta_n}^+ \Phi_0. \quad (8)$$

В этом случае, если Φ_0 не содержит электронов, для функции Ψ_Q в первом порядке по электростатическому взаимодействию W получим

$$\Psi_Q^{(1)} = -\frac{1}{Z(n-2)!} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q \frac{1}{2} \sum_{j_1 j_2} W_{j_1 j_2; \beta_2 \beta_1} \times \\ \times \frac{1}{E_{j_1} + E_{j_2} - E_{\beta_1} - E_{\beta_2} + i\gamma} a_{j_1}^+ a_{j_2}^+ a_{\beta_1}^+ \dots a_{\beta_n}^+ \Phi_0. \quad (9)$$

В результате для $\langle \Psi_Q^{(0)} | H | \Psi_Q^{(1)} \rangle + \langle \Psi_Q^{(1)} | H | \Psi_Q^{(0)} \rangle$, вводя кулоновскую функцию Грина $G(E, r_1, r_2)$ и выделяя зависимость от α и Z в явном виде, находим¹

$$\frac{\alpha^2}{4} Z^4 E_0^{(k)} = -\frac{1}{(n-2)!} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} \sum_{\beta'_1 \beta'_2} C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q C_{\beta'_1 \beta'_2 \beta_3 \dots \beta_n}^{Q'} \left\{ \langle \Psi_{\beta'_1}(1) \Psi_{\beta'_2}(2) | \frac{1}{r_{12}} G(E_{\beta'_1} + E_{\beta'_2} - \right. \\ \left. - E_{\beta_2}; 1, 3) H^{(k)}(3) | \Psi_{\beta_2}(2) \Psi_{\beta_1}(3) \rangle + \langle \Psi_{\beta'_1}(1) \Psi_{\beta'_2}(2) | H^{(k)}(1) G(E_{\beta_1} + E_{\beta_2} - \right. \\ \left. - E_{\beta'_2}; 1, 3) \frac{1}{r_{23}} | \Psi_{\beta_2}(2) \Psi_{\beta_1}(3) \rangle \right\}. \quad (10)$$

¹ Для $\langle \Psi_Q^{(0)} | H | \Psi_Q^{(1)} \rangle$ соответственно имеем: $\frac{\alpha^2}{4} Z^4 E_0^{(k)} = \frac{1}{(n-1)!} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} \sum_{\beta'_1} C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q \times \\ \times C_{\beta'_1 \beta_2 \dots \beta_n}^{Q'} V_{\beta'_1 \beta_2}^{(k)}.$

Диаграммным образом мы представили два члена в (10) на рис. 1. Приведенные формулы полностью описывают вклад от релятивистских поправок в первом порядке по $1/Z$ для систем с любым числом электронов при пустом остова.

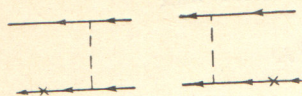


Рис. 1. Диаграммы с пустым остовом.

Обычно принято выделять заполненные оболочки, что позволяет упростить угловую зависимость, т. е. из $C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q$ выделить часть, отвечающую заполнен-

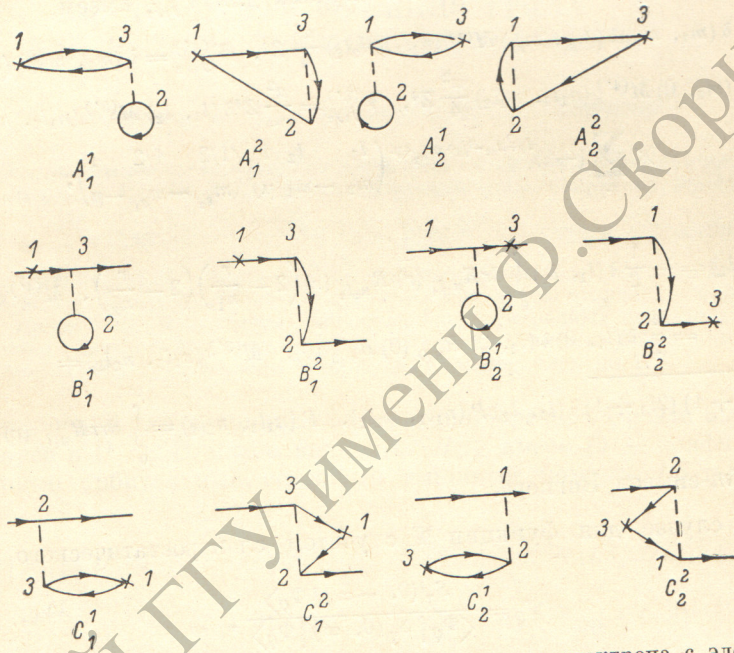


Рис. 2. Диаграммы, описывающие взаимодействие внешнего электрона с электронами заполненных оболочек.

ным оболочкам. Введение заполненного остова приводит к появлению дополнительных диаграмм (помимо диаграмм на рис. 1), приведенных на рис. 2. Опущенная промежуточные выкладки, вклады от диаграмм рис. 2 представим в следующем виде:

$$\begin{aligned} \frac{\alpha^2}{4} Z^3 (E_{A_1^1} + E_{A_1^2} + E_{A_2^1} + E_{A_2^2}) = & - \sum_{j, j' \in F_0} \left\langle \Psi_{j'}(1) \Psi_j(2) \left| \frac{1}{r_{23}} H^{(k)}(1) G(E; 1, 3) (1 - P_{23}) \right| \right\rangle \times \\ & \times \Psi_j(2) \Psi_{j'}(3) \rangle - \sum_{j, j' \in F_0} \left\langle (1 - P_{12}) \Psi_{j'}(1) \Psi_j(2) \left| \frac{1}{r_{12}} G(E; 1, 3) H^{(k)}(3) \right| \right\rangle \times \\ & \times \Psi_j(2) \Psi_{j'}(3) \rangle, \end{aligned} \quad (11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\alpha^2}{4} Z^3 (E_{B_1^1} + E_{B_1^2} + E_{B_2^1} + E_{B_2^2}) = & - \frac{1}{(n-1)!} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} \sum_{\beta'_1} C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q C_{\beta_1, \beta_2 \dots \beta_n}^{Q'} \times \\ & \times \left\{ \sum_j \left\langle \Psi_{\beta_1}(1) \Psi_j(2) \left| \frac{1}{r_{23}} H^{(k)}(1) G(E_{\beta_1}; 1, 3) (1 - P_{23}) \right| \Psi_j(2) \Psi_{\beta_1}(3) \right\rangle + \right. \\ & \left. + \sum_j \left\langle (1 - P_{12}) \Psi_{\beta_1}(1) \Psi_j(2) \left| \frac{1}{r_{12}} G(E_{\beta_1}; 1, 3) H^{(k)}(3) \right| \Psi_j(2) \Psi_{\beta_1}(3) \right\rangle \right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

$$\frac{\alpha^2}{4} Z^3 (E_{C_1^1} + E_{C_1^2} + E_{C_2^1} + E_{C_2^2}) = - \frac{1}{(n-1)!} \sum_{\beta_1 \dots \beta_n} \sum_{\beta'_1} C_{\beta_1 \dots \beta_n}^Q C_{\beta_1, \beta_2 \dots \beta_n}^{Q'} \times$$

$$\times \left\{ \sum_j \left\langle \Psi_j(1) \Psi_{\beta_1}(2) \left| \frac{1}{r_{23}} H^{(k)}(1) G(E_j + E_{\beta_1} - E_{\beta_1}; 1, 3) (1 - P_{23}) \right| \Psi_j(3) \Psi_{\beta_1}(2) \right\rangle + \right. \\ \left. + \sum_j \left\langle \Psi_{\beta_1}(1) \Psi_j(2) (1 - P_{12}) \left| G(E_j - E_{\beta_1} - E_{\beta_1}; 3, 2) \frac{1}{r_{12}} H^{(k)}(3) \right| \Psi_j(3) \Psi_{\beta_1}(1) \right\rangle \right\}. \quad (13)$$

Обсуждение результатов расчета

Проводя суммирование по проекциям моментов в формулах (11)–(13), нетрудно выразить их через радиальные матричные элементы

$$R_{IL}^{\epsilon}(n_1 l_1 n_2 l_2; n_3 l_3 n_4 l_4) = \langle R_{n_1 l_1}(1) R_{n_2 l_2}(2) | P^{(i)}(1) g_l(\epsilon; 1, 3) U_L(3, 2) | \times \\ \times R_{n_3 l_3}(3) R_{n_4 l_4}(2) \rangle, \quad (14)$$

где $g_l(\epsilon; 1, 3)$ — радиальная часть кулоновской функции Грина,

$$P^{(1)}(1) = \left(\frac{2}{r_1} - \frac{1}{n_1^2} \right) \left(\frac{2}{r_1} - \frac{1}{n_2^2} \right), \quad P^{(4')}(1) = \delta(r_1, 0), \quad P^{(3')}(1) = \frac{1}{r_1^3}, \quad U_L = \frac{r_1^L}{r_{L+1}^L}; \quad (15)$$

R_{nl} — радиальная часть водородной функции.

Расчет выражений R_{IL}^{ϵ} описан в Приложении. Перейдем теперь к обсуждению результатов расчета.

В табл. 1 и 2 приведены результаты расчета для двух одночастичных операторов $H^{(1)}$ и $H^{(4')}$. Мы привели вклад матричных элементов для этих операторов

Таблица 1
 $E_0^{\epsilon}(l_1, l_2); a = 2l_1 3l_2, b = 1s^2 2l_1 3l_2^2, c = 1s^2 2s^2 2p^6 2l_1^{-1} 3l_2$

	ss	sp	sd	ps	pp	pd
a	−0.211806	−0.187114	−0.167361	−0.128472	−0.103780	−0.084627
b	−1.211806	−1.187114	−1.167361	−1.128472	−1.103780	−1.084627
c	−1.649305	−1.624614	−1.604861	−1.732640	−1.707948	−1.688195

Таблица 2
 $\Delta E_1^{\epsilon}(l_1, l_2, L, S)$

Конфигурация	Терм	a	b	c
2s3s	1S	0.13047750	2.603558	10.039000
	3S	0.08843017	2.561511	9.996958
2s3p	1P	0.08538003	2.483675	9.760748
	3P	0.08604152	2.484336	9.761409
2s3d	1D	0.050884222	2.312265	9.416250
	3D	0.06515316	2.326534	9.430519
2p3p	1S	0.11031740	2.297058	10.213391
	3S	0.06303597	2.249777	10.148004
	1P	0.06077845	2.247520	10.158731
	3P	0.09112105	2.277862	10.158731
	1D	0.09879959	2.285541	10.161215
	3D	0.06168146	2.248423	10.154440
2p3s	1P	0.10797375	2.369500	10.397972
	3P	0.10097025	2.362497	10.389989
2p3d	1P	0.03894551	2.088773	9.817215
	3P	0.04186327	2.091690	9.831549
	1D	0.04822625	2.098053	9.829316
	3D	0.05363240	2.103459	9.829316
	1F	0.04805234	2.097879	9.827718
	3F	0.04027423	2.090101	9.830751

сразу для трех рассматриваемых нами состояний: $2l_1 3l_2$ (a), $1s^2 2l_1 3l_2$ (b) и $1s^2 2s^2 2p^6 2l_1^{-1} 3l_2$ (c). Нулевой порядок от этих операторов, не зависящий от

термов, приведен в табл. 1. В табл. 2 для $\Delta E'_1(l_1, l_2, L, S)$ мы выписали и термы, которые являются одними и теми же для всех трех рассматриваемых нами состояний.

Для вклада от оператора $H^{(3')}$ мы имеем аналогично

$$\langle \Psi_Q | H^{(3')} | \Psi_{Q'} \rangle = \frac{\alpha^2}{4} (E^{(0)} Z^3 + \Delta E^{(1)} Z^3). \quad (16)$$

Как показывает сопоставление с экспериментом, для расчета расщепления термина выражение (16) удобно представить в следующем виде:

$$\langle \Psi_Q | H^{(3')} | \Psi_{Q'} \rangle = \frac{\alpha^2}{4} E^{(0)} Z (Z - A)^3, \quad (17)$$

где

$$A = -\frac{\Delta E^{(1)}}{3E^{(0)}}.$$

Результаты расчета $E^{(0)}$ и A приведены в табл. 3 и 4. Мы объединили двух- и четырехэлектронные системы в табл. 3, так как $E^{(0)}$ для этих двух систем совпадают. Для A мы получаем естественно различные результаты.

Таблица 3

Матрица $\langle Q | H^{(3')} | Q' \rangle = \frac{\alpha^2}{4} B_1 E^{(0)} Z (Z - A)^3$ для двух- и четырехэлектронных систем

Конфигурация	LS	L'S'	$E^{(0)}$	$A (2l3l')$	$A (1s^2 2l3l')$
$2p3s$	$3P$	$3P$	0.25	0.044385	1.536863
	$3P$	$1P$	0.176777	0.046474	1.538952
	$3P$	$3P$	0.162306	0.183587	1.690176
	$1S$	$3P$	0.132303	0.195059	1.704134
$2p3p$	$3S$	$1P$	-0.132303	0.137024	1.646109
	$3S$	$3P$	-0.101571	-0.140361	1.321517
	$1P$	$3D$	0.147919	0.135399	1.644487
	$3P$	$1D$	-0.147919	0.189313	1.698400
	$3P$	$3D$	-0.113560	-0.117321	1.344557
	$1D$	$3D$	0.139082	-0.129691	1.332187
	$3D$	$3D$	0.362927	0.136575	1.643164
	$1P$	$3P$	-0.062199	-0.097550	1.364328
	$3D$	$3D$	0.033127	0.553172	2.520804
	$1D$	$3D$	0.023424	0.690251	2.657884
$2p3d$	$3P$	$3P$	-0.102778	0.201228	1.590957
	$1P$	$3P$	0.104100	0.138147	1.702370
	$3D$	$3D$	0.120775	0.235175	1.836261
	$1D$	$3D$	-0.046361	0.391404	1.683817
	$3F$	$3F$	0.348760	0.112897	1.655722
	$1F$	$3F$	-0.194348	0.142953	1.571545
	$3P$	$3D$	-0.203675	0.102499	1.565054
	$1P$	$3D$	0.162164	0.0679556	1.587032
	$3P$	$1D$	-0.162161	0.0946520	1.613728
	$3D$	$3F$	-0.207414	0.113047	1.575594
	$1D$	$3F$	0.165141	0.104019	1.623080
	$3D$	$1F$	-0.165141	0.079099	1.598159
$2s3p$	$3P$	$3P$	0.074074	0.406398	1.971549
	$3P$	$1P$	-0.052378	0.473818	2.038969

Для полного расчета сдвигов уровней энергии по формуле (1) не достаёт лишь результатов расчета двухэлектронных операторов. Эти операторы дают вклад в члены $\Delta E'_1$, B , $\mathcal{E}_{S0}$ и $\mathcal{E}_{SS}$. Их расчет проводился только с водородными функциями, так как учет функций первого порядка привел бы к расчету членов, пропорциональных Z^2 . В настоящее время такие расчеты еще не проводились.

Таблица 4

Матрица $\langle Q | H^{(3')} | Q' \rangle = \frac{\alpha^2}{4} B_1 (Z - A)^3 Z E^{(0)}$ для десятиэлектронной системы

Конфигурация	LS	L'S'	E ⁽⁰⁾	A
$1s^2 2s^2 2p^6 3p$	3P	3P	0.070737	4.889150
	1P	1P	-0.052378	4.956570
	3P	3P	-0.0879630	2.460348
	1S	3P	-0.0718215	2.320569
$1s^2 2s^2 2p^5 3p$	3S	1P	0.0718215	2.471648
	3S	3P	0.187105	3.552584
	1P	3D	-0.0802989	2.464865
	3P	1D	0.0802989	2.457465
	3P	3D	0.209189	3.554044
	1D	3D	0.256628	3.551314
	3D	3D	-0.196691	2.469389
	1P	3P	0.114768	3.568450
	3P	3P	-0.25	3.159578
	3P	1P	-0.176777	3.157489
$1s^2 2s^2 2p^5 3s$	3D	3D	0.033127	6.941608
	1D	3D	0.023424	8.078687
$1s^2 2s^2 2p^6 3d$	3P	3P	0.147220	3.660827
	1P	3P	-0.0726750	2.338321
	3D	3D	-0.0655637	4.601876
	1D	3D	0.135031	4.239923
	3F	3F	-0.274850	2.648494
	1F	3F	0.246610	3.559347
	3P	3D	0.229334	3.359231
	1P	3D	-0.144020	2.684292
	3P	1D	0.144020	2.920019
	3D	3F	0.233545	3.388155
$1s^2 2s^2 2p^5 3d$	1D	3F	-0.146664	2.931552
	3D	1F	0.146664	2.947381

ПРИЛОЖЕНИЕ

Рассмотрим для примера расчет $R_{LL}^{\epsilon}(n_1 l_1 n_2 l_2; n_3 l_3 n_4 l_4)$ (формула (14)) для случая $P^{(3')}$. Вычисление для других одночастичных операторов проводится аналогичным образом.

Для функции Грина используется разложение [6]:

$$g_{\epsilon}(\epsilon; 1, 2) = \frac{4\mu}{\hbar^2} \frac{Z}{\lambda a_0} (x_1 x_2)^l e^{-\frac{x_1 + x_2}{2}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n! L_n^{2l+1}(x_1) L_n^{2l+1}(x_2)}{(n+2l+1)! (n+l+1-\lambda)}, \quad (\text{П. 1})$$

где $x_1(x_2) = \frac{2r_1}{\lambda a_0}(r_2)$; $\nu = \{-2\epsilon\}^{-1/2}$, $\epsilon = E(2Ry)^{-1}$, $\lambda = Z\nu$.

Таким образом,

$$R_{LL}^{\epsilon}(n_1 l_1 n_2 l_2; n_3 l_3 n_4 l_4) = \left(\prod_{i=1}^4 N(i) \right) \lambda^{7+k} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{n!}{(n+2l+1)!} \frac{1}{n+l+1-\lambda} \times$$

$$\times \sum_{m_1=0}^{n_{r_1}} \frac{(-n_{r_1})_{m_1}}{m_1! (2l_1+2)_{m_1}} \left[\frac{\lambda}{n_1} \right]^{m_1+l_1} T_n^{(1)}(k, m_1) \sum_{m_2=0}^{n_{r_2}} \frac{(-n_{r_2})_{m_2}}{m_2! (2l_2+2)_{m_2}} \left[\frac{\lambda}{n_2} \right]^{m_2+l_2} \times$$

$$\times \sum_{m_3=0}^{n_{r_3}} \frac{(-n_{r_3})_{m_3}}{m_3! (2l_3+2)_{m_3}} \left[\frac{\lambda}{n_3} \right]^{m_3+l_3} \sum_{m_4=0}^{n_{r_4}} \frac{(-n_{r_4})_{m_4}}{m_4! (2l_4+2)_{m_4}} \left[\frac{\lambda}{n_4} \right]^{m_4+l_4} T_n^{(2)}(m_2, m_3, m_4), \quad (\text{П. 2})$$

где

$$N(i) = \frac{1}{(2l_i+1)!} \sqrt{\frac{(n_i+l_i)!}{(n_i-l_i-1)! 2n_i}}, \quad k = -3, \quad n_{r_i} = n_i - l_i - 1, \quad T_n^{(1)}(k, m_1) \equiv$$

$$\begin{aligned}
& \equiv \int_0^{\infty} x_1^{l_1+l+2+m_1+k} e^{-Sx_1} L_n^{2l+1}(x_1) dx_1 = \frac{(2l+2)_n (l_1+l+m_1+2+k)!}{n! S^{l_1+l+m_1+3+k}} F_{21}(-n, l_1+l+ \\
& + m_1+3+k; 2l+2; s^{-1}), \quad T_n^{(2)}(m_2, m_3, m_4) \equiv \int_0^{\infty} x_1^{\lambda_1} e^{-S_1 x_1} L_n^{2l+1}(x_1) \times \\
& \times \frac{x_2^L}{x_2^{L+1}} x_2^{\lambda_2} e^{-S_2 x_2} dx_1 dx_2 = \frac{(2l+2)_n}{n!} \left[\frac{(\lambda_1-L-1)! (\lambda_2+L)!}{S_1^{\lambda_1-L} S^{\lambda_2+L+1}} F_{21}(-n, \lambda_1-L; 2l+2; S_1^{-1}) - \right. \\
& - \sum_{p=0}^{\lambda_1+L} \frac{(\lambda_2+L)! (\lambda_1+p-L-1)!}{p! S_2^{\lambda_2+L+1-p} (S_1+S_2)^{\lambda_1+p+L}} F_{21}(-n, \lambda_1+p-L; 2l+2; (S_1+S_2)^{-1}) + \\
& \left. + \frac{(\lambda_2-L-1)!}{S_2^{\lambda_2-L}} \sum_{p=0}^{\lambda_2-L-1} \frac{S_2^p (\lambda_1+L+p)!}{p! (S_1+S_2)^{\lambda_1+L+p+1}} F_{21}(-n, \lambda_1+L+p+1; 2l+2; (S_1+S_2)^{-1}) \right], \\
& S = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\lambda}{n_1} \right), \quad S_1 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\lambda}{n_3} \right), \quad S_2 = \frac{\lambda}{2} \left(\frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_4} \right), \quad \lambda_1 = l + l_3 + m_3 + 2, \\
& \lambda_2 = l_2 + l_4 + m_2 + m_4 + 2, \quad \lambda = (n_3^{-2} + n_4^{-2} - n_2^{-2})^{-1/2}, \quad (\text{П. 3})
\end{aligned}$$

$F_{21}(A, B; C; x)$ — гипергеометрическая функция Гаусса [7]. Отсюда видно, что R_{IL}^{ϵ} является конечной переборкой выражений вида

$$J = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(C)_n}{n! (n-\mu)} F_{21}(-n, A; C; x) F_{21}(-n, B; C; y), \quad (\text{П. 4})$$

где A, B и C — целые числа, $\mu = \lambda - l - 1$. Так как в рассматриваемых нами матричных элементах либо $n_1 = n_3$ и $n_2 = n_4$, либо $n_1 = n_4$ и $n_2 = n_3$, то из определения λ видно, что $\lambda = n_1$ и, следовательно, $S = 1$. Таким образом, в (П. 4) аргумент первой гипергеометрической функции равен единице, т. е. она выражается через гамма-функции [7], и поэтому

$$\begin{aligned}
J &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(C)_n \Gamma(C-A+n) \Gamma(C)}{n! \Gamma(C-A) \Gamma(C+n) (n-\mu)} F_{21}(-n, B; C; y) = \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(C-A)_n}{n! (n-\mu)} F_{21}(-n, B; C; y). \quad (\text{П. 5})
\end{aligned}$$

Данную сумму можно свернуть в конечную переборку гипергеометрических функций. Здесь возможны следующие ситуации.

1. $A \geq C$. В этом случае ряд обрывается при $n = A - C$.
2. $A < C$. Здесь возможны два варианта.
 - а) $B \geq C$. Используя известное выражение для F_{21} [7]

$$F_{21}(-n, C+m; C; y) = \frac{\Gamma(C)}{\Gamma(C+m)} y^{1-C} \frac{d^m}{dy^m} (y^{C+m-1} (1-y)^n), \quad m \equiv B - C,$$

для J находим

$$\begin{aligned}
J &= \frac{\Gamma(C)}{\Gamma(B)} y^{1-C} \frac{d^{B-C}}{dy^{B-C}} y^{B-1} \frac{1}{-\mu} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(C-A)_n (-\mu)_n}{n! (1-\mu)_n} (1-y)^n = \\
&= -\frac{1}{\mu} \frac{\Gamma(C)}{\Gamma(B)} y^{1-C} \frac{d^{B-C}}{dy^{B-C}} y^{B-1} F_{21}(C-A, -\mu; 1-\mu; 1-y). \quad (\text{П. 6})
\end{aligned}$$

б) $B < C$. В этом случае удобно воспользоваться следующим интегральным представлением для F_{21} [7]:

$$F_{21}(-n, B; C; Y) = \frac{\Gamma(C)}{\Gamma(B) \Gamma(C-B)} \int_0^1 t^{B-1} (1-t)^{C-B-1} (1-ty)^n dt. \quad (\text{П. 7})$$

Подставляя в (П. 5) и вычисляя сумму по n , находим

$$\begin{aligned}
 J &= \frac{\Gamma(C)}{\Gamma(B)\Gamma(C-B)} \frac{1}{-\mu} \int_0^1 t^{B-1} (1-t)^{C-B-1} F_{21}(C-A, -\mu; 1-\mu; 1-ty) dt = \\
 &= \frac{\Gamma(C)}{\Gamma(B)\Gamma(C-B)} \frac{1}{\mu} \sum_{i=0}^{C-B-1} \frac{(1+B-C)_i}{i! y^{B+i}} \sum_{j=0}^{B+i-1} \frac{(1-B-i)_j}{j!} \times \\
 &\quad \times \int_1^{1-y} u^j F_{21}(C-A, -\mu; 1-\mu; u) du. \quad (\text{П. 8})
 \end{aligned}$$

В результате J выражается в виде конечных сумм от интегралов вида

$$\begin{aligned}
 \int_a^b u^j F_{21}(C-A, -\mu; 1-\mu; u) du &\equiv \int_a^b u^{j+\mu-1} [u^{1-\mu} F_{21}(C-A, -\mu, 1-\mu; u)] du = \\
 &= \frac{u^{j+1}}{j+\mu} F_{21}(C-A, -\mu; 1-\mu; u) \Big|_a^b - \frac{1-\mu}{j+\mu} \int_a^b \frac{u^j}{(1-u)^{C-A}} du. \quad (\text{П. 9})
 \end{aligned}$$

Здесь проведено интегрирование по частям и использована формула

$$\frac{d}{dx} (x^a F_{21}(b, a-1; a; x)) = ax^{a-1} F_{21}(b, a; a; x) \equiv \frac{ax^{a-1}}{(1-x)^b}.$$

Интеграл в (П. 9) выражается через элементарные функции. Входящие в выражения для J гипергеометрические функции являются либо полиномами (случай 1), либо выражаются ввиду целочисленности всех параметров через функцию

$$F_{21}(1, 1; 2; x) \equiv -(1-x)^{-1} \ln x.$$

Литература

- [1] A. L. Stewart. Proc. Phys. Soc., 88, 311, 1966.
- [2] M. Cohen, A. Dalgarno. Proc. Roy. Soc., 275, 492, 1963.
- [3] D. Layzer, J. Bahcall. Ann. Phys., 17, 177, 1962.
- [4] У. И. Сафронова. Опт. и спектр., 28, 1050, 1970.
- [5] У. И. Сафронова, В. Н. Харитонов. Опт. и спектр., 28, 1039, 1970.
- [6] Л. П. Рапопорт, Б. А. Зон, Н. Л. Манакон. Теория многофотонных процессов в атомах. Атомиздат, М., 1978.
- [7] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции, т. 1. «Наука», М., 1973.
- [8] L. A. Vainshtein, U. I. Safronova. Atom. data and nucl. data Tables., 21, 49, 1978.

Поступило в Редакцию 6 августа 1980 г.