КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 539.182

ПРИВЕДЕННАЯ КУЛОНОВСКАЯ ФУНКЦИЯ ГРИНА РАДИАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

А. И. Шерстюк

Для расчета спектроскопических свойств атомов в последнее время широкое распространение приобретает применение теории возмущений по межэлектронному взаимодействию, использующей водородоподобные функции в качестве базисных функций невозмущенной задачи [1]. При этом для вычисления бесконечных рядов удобно использовать аппарат кулоновской функции Грина (КФГ) $G(\mathbf{x}, \mathbf{x}', E)$, впервые полученной в работе [2]. Применение теории возмущений для расчета связанных состояний предполагает использование приведенной КФГ $G_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$, определяемой соотношением

$$G_k(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \lim_{E \to \varepsilon_k} \left[G(\mathbf{x}, \mathbf{x}'; E) - \sum_l \frac{\varphi_{kl}(\mathbf{x}) \varphi^*_{kl}(\mathbf{x}')}{E - \varepsilon_k} \right], \tag{1}$$

где ε_k и φ_{kl} — энергия и собственные функции κ-го стационарного состояния, E — энергетический параметр.

В случае, когда возмущающий потенциал центрально-симметричен или содержит конечное число членов разложения по функциям угловых переменных, вместо полной функции Грина можно ограничиться использованием радиальной КФГ.

Выражение для приведенной КФГ основного $1s$-состояния атома водорода получено в нескольких работах [3, 4]. Однако в ряде случаев требуется определять поправки к волновым функциям возбужденных состояний. В частности, это необходимо при нахождении методами теории возмущений волновой функции валентного электрона в поле замкнутых оболочек остова многоэлектронного атома [5]. В настоящей работе получено выражение приведенной КФГ для расчета состояний с произвольными значениями главного n и азимутального l квантовых чисел.

В случае кулоновского поля уравнение для радиальной волновой функции можно представить в виде

$$Q[R] \equiv \frac{d}{dr}\left[r^2 \frac{d}{dr} R(r)\right] + [2Zr - l(l+1) - \tau^2 r^2] R(r) = 0, \tag{2}$$

где $\tau = \sqrt{-2E}$, Z — заряд ядра (в атомных единицах).

Если τ выбрано таким образом, что $\lambda = 0$ не является собственным значением уравнения

$$Q[R] + \lambda r^2 R(r) = 0, \tag{3}$$

то функцию Грина G_l оператора Q можно выразить через произведение решений дифференциального уравнения (2), регулярных при $r \to 0$ и $r \to \infty$

$$G_l(r, r', \tau) = \frac{\Gamma(l + 1 - Z/\tau)}{2\tau r r' (2l+1)!} M_{\tau^{-1}, l+\frac{1}{2}}(2\tau r_<) W_{\tau^{-1}, l+\frac{1}{2}}(2\tau r_>), \tag{4}$$

где $M_{\tau^{-1}, l+\frac{1}{2}}$ и $W_{\tau^{-1}, l+\frac{1}{2}}$ — функции Уиттекера, $r_< = \frac{1}{2}(r + r' - |r - r'|)$, $r_> = \frac{1}{2}(r + r' + |r + r'|)$. Из-за наличия функции $\Gamma(l + 1 - Z/\tau)$ функция $G_l(r, r'; \tau)$ имеет простые полюсы при $Z/\tau = p + l + 1$, где $p = 0, 1, 2 \ldots$

При $\tau = Z/n$ уравнение (3) имеет собственное значение $\lambda_n = 0$ и выражение (4) не будет более иметь места. Можно, однако, ввести приведенную (обобщенную) функцию Грина $G_l^n(r, r')$ [6], удовлетворяющую уравнению

$$Q[G_l^n(r, r')] = R_{nl}(r) R_{nl}(r') - \delta(r - r'). \tag{5}$$

Функцию G_l^n можно получить, исходя из соотношения

$$G_l^n(r, r') = \frac{n}{Z} \frac{d}{d\tau} \left[\left(\tau^2 - \frac{Z^2}{n^2} \right) G_l(r, r'; \tau) \right]_{\tau = \frac{Z}{n}}. \tag{6}$$

Подставляя выражение (4) в формулу (6) и производя соответствующие преобразования, находим окончательно[1]

$$G_l^n(r, r') = -\frac{2Z}{n} \frac{p!\,(xx')^l}{(n+l)!} \exp\left[-\frac{1}{2}(x + x')\right] \left\{ \left[\ln x_> + \frac{x + x'}{2n} - \right.\right.$$

$$\left. - \psi(n-l) - \frac{2s+3}{2n} \right] L_p^s(x)\, L_p^s(x') + \frac{1}{n} \left[x L_{p-1}^{s+1}(x)\, L_p^s(x') + x' L_{p-1}^{s+1}(x')\, L_p^s(x) \right] +$$

$$+ (n+l)! \left[\sum_{k=0}^{p-1} A_k x_>^k - \sum_{k=1}^{s} \frac{(k-1)!}{(k+p)!\,(s-k)!} x_>^{-k} \right] L_p^s(x_<) +$$

$$+ (n+l)!\, L_p^s(x_>) \sum_{k=1}^{p} B_k x_<^k + \frac{(-1)^{n-l}}{(n-l)!\,(n+l+1)} \times$$

$$\left. \times L_p^s(x_>)\, x_<^{n-l}\, {}_2F_2(1, 1; n+l+2, n-l+1; x_<) \right\}, \tag{7}$$

где $x = \frac{2Zr}{n}$, $x' = \frac{2Zr'}{n}$, $x_>$ и $x_<$ — соответственно большее и меньшее из значений x и x', $s = 2l + 1$, $p = n - l - 1$, $\psi(q)$ — логарифмическая производная Г-функции, ${}_2F_2$ — обобщенный гипергеометрический ряд, $L_p^s(x)$ — обобщенные многочлены Лагерра [7];

$$A_k = \frac{(-1)^k}{k!\,(p-k)!\,(s+k)!} \sum_{j=k+1}^{p} \frac{2j+s}{j(j+s)},$$

$$B_k = \frac{(-1)^k}{k!\,(p-k)!\,(s+k)!} \sum_{i=0}^{k-1} (p-i)^{-1}.$$

Отметим, что все входящие в выражение (7) функции элементарны, за исключением ${}_2F_2$. Последний ряд, однако, сходится быстрее, чем ряд для показательной функции и может быть легко проинтегрирован.

Во всех важных для приложений случаях формула (7) имеет достаточно простой вид. В частности, при $Z = 1$, $n = 1$, $l = 0$ выражение (7) полностью совпадает с выражением, полученным в [3], учитывая что $\frac{x}{2}\, {}_2F_2(1, 1; 3, 2; x) = f(x)$.

В заключение автор выражает глубокую признательность П. П. Павинскому за интерес и внимание к работе.

Литература

[1] D. Layzer. Intern. J. Quantum Chem. Symposium № 1, 45, 1967.
[2] L. C. Hostler. J. Math. Phys., *5*, 591, 1964.
[3] H. F. Hameka. J. Chem. Phys., *47*, 2728, 1967; *48*, 4810, 1968.
[4] L. C. Hostler. Phys. Rev., *178*, 126, 1969.
[5] П. П. Павинский, А. И. Шерстюк. Вестн. ЛГУ, № 22, 11, 1968.
[6] Р. Курант, Д. Гильберт. Методы математической физики, т. 1, гл. V. ГИТТЛ, М.—Л., 1951.
[7] Г. Бейтмен, А. Эрдейи. Высшие трансцендентные функции, т. 1. М. Изд. «Наука», 1968.

Поступило в Редакцию 6 мая 1970 г.

---

[1] Выражение для G_l^n было приведено автором в докладе на Международном симпозиуме в г. Вильнюсе (июнь 1969 г.).