ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ РЕШЕНИЯ КВАНТОВОЙ ЗАДАЧИ О ДВИЖЕНИИ ЧАСТИЦЫ В ПОЛЕ ДВУХ КУЛОНОВСКИХ ЦЕНТРОВ

Ю.Н.Демков

Задача о связанных состояниях частицы в поле двух кулоновских центров имеет в некоторых частных случаях простые аналитические решения. Эти решения могут служить для контроля численных расчетов (подобные расчеты проводятся в последнее время в связи с мезомолекулярными задачами [1]). Кроме того, представляет интерес сам факт существования таких решений для задачи, которая в молекулярной физике играет столь же фундаментальную роль, как задача об атоме водорода в атомной физике. Задача эта исследуется более сорока лет, и удивительно, что эти решения не были, по-видимому, обнаружены ранее.

Обозначим заряды кулоновских центров Z_1, Z_2, а R – расстояние между ними. Будем считать, что $Z_1 > 0$ и $Z_2 < Z_1$ и, кроме того, что Z_1 и Z_2 взаимно простые целые числа. Общий множитель легко устранить масштабным преобразованием. Тогда переменные разделяются в эллипсоидальных координатах $\xi = (r_1 + r_2)/R$, $\eta = (r_1 - r_2)/R$, ϕ, и, представляя волновую функцию в виде $\psi = F(\xi)G(\eta)\exp(im\phi)$, мы получаем для F уравнение, содержащее в качестве параметра только $Z_1 + Z_2$, а для G – только $Z_1 - Z_2$. Отсюда следует, что если энергия системы (без взаимодействия ядер) равна $(Z_1 + Z_2)^2/2n_1^2$ $(n_1 = 1, 2, \ldots)$ и число узлов функции F в интервале $(1, +\infty)$ не больше $n_1 - |m| - 1$: то F соответствует задаче одного центра, т.е. может быть представлена в виде

$$F = (\xi^2 - 1)^{m/2} P(\xi) \exp[-R(Z_1 + Z_2)\,\xi/2n_1], \qquad (1)$$

где P – полином. То же самое справедливо для функции G, если энергия равна $(Z_1 - Z_2)^2/2n_2^2$ и число узлов G в интервале $(-1, +1)$, не больше $n_2 - |m| - 1$. Если же одновременно выполняются оба условия, то задача двух центров сводится к двум водородоподобным задачам о движении частицы в поле заряда $Z_1 + Z_2$ для функции F и заряда $Z_1 - Z_2$ для функции G и, тем самым, решается точно.

Условие $E = (Z + Z_2)^2/2n_1^2 = (Z_1 - Z_2)^2/2n_2^2$ может быть выполнено для нечетно-нечетных Z_1, Z_2 лишь если $n_1 = n(Z_1 + Z_2)/2$, $n_2 = n(Z_1 - Z_2)/2$ $(n = 1, 2, \ldots)$. Тогда $E = -2/n^2$, т.е. энергия совпадает с уровнями энергии системы He^+. Для Z_1, Z_2 разной четности $n_1 = n(Z_1 + Z_2)$, $n_2 = n(Z_1 - Z_2)$, $E = -1/2n^2$, т.е. энергия должна совпадать с уровнями энергии водорода. Выполнение этих условий еще не означает, что решение имеет элементарный вид, так как может не выполняеться указанное выше условие, налагаемое на число узлов.

Если $Z_2 = 0$, то уравнения для функций F и G точно совпадают, а поскольку обе функции должны быть регулярны в точке $\xi = 1$, то совпадают и сами функции, и решение водородоподобной задачи имеет вид

$$\psi = F(\xi)\, F(\eta) \exp(im\phi). \qquad (2)$$

Таким образом, водородоподобная задача в эллипсоидальных координатах сводится к одному уравнению с двумя параметрами – энергией и константой разделения, которые нужно подобрать так, чтобы решение было регулярно в трех точках: $-1, +1, +\infty$, т.е. мы получаем своеобразную задачу на двойное собственное значение.

Поскольку водородоподобные функции F и G регулярны в точках -1, $+1$, $+\infty$, мы можем поменять местами ξ и η в функции (1), что эквивалентно замене $n_1 \rightleftarrows n_2$ или же изменению знака Z_2. Таким образом, мы получаем условие взаимности: если имеется элементарное решение для системы с зарядами Z_1, Z_2, то при том же расстоянии R и той же энергии E имеется элементарное решение для системы $Z_1 - Z_2$.

Таблица

№	n_1, n_2	Z_1, Z_2	E	Состояние		R	
				$Z_2 > 0$	$Z_2 < 0$		
I	3,2	5,1	−2	$3p\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{10}/3$	
II	4,1	5,3	−2	$3s\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{10}$	
III	4,1	5,3	−2	—	$2p\pi$	2,519	(1)
IV	4,2	3,1	−1/2	$4p\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{3}$	
V	4,3	7,1	−2	$4p\sigma$	$3p\sigma$	0,726	(2)
VI	4,3	7,1	−2	$4d\sigma$	$3d\sigma$	2,241	(2)
VII	4,3	7,1	−2	$4d\pi$	$3p\pi$	$\sqrt{7}/3$	
VIII	5,1	3,2	−1/2	$4s\sigma$	$2p\sigma$	$\sqrt{15}$	
IX	5,1	3,2	−1/2	—	$2p\pi$	3,335	(3)
X	5,2	7,3	−2	$4s\sigma$	$3p\sigma$	3,911	(4)
XI	5,2	7,3	−2	$4p\sigma$	$3d\sigma$	5,330	(4)
XII	5,2	7,3	−2	$5p\sigma$	$2p\sigma$	0,735	(4)
XIII	5,2	7,3	−2	$4p\pi$	$3d\pi$	$\sqrt{21}$	
XIV	5,2	7,3	−2	—	$3p\pi$	3,313	(5)

Уравнения, определяющие R, следующие:

(1) $R^3 + 2R^2 - 9R - 6 = 0$,

(2) $R^2 = x^2/6 + 17x/9 + 14/3$; $15x^3 + 296x^2 + 1652x + 2688 = 0$,

(3) $23R^3 + 168R^2 - 576R - 720 = 0$,

(4) $R^2 = x^2/4 + x/2$; $5x^3 + 38x^2 - 336x - 1120 = 0$,

(5) $5R^4 + 24R^3 - 71R^2 - 192R - 60 = 0$.

Задача об отыскании этих решений сводится к отысканию таких значений R и константы разделения, которые обращают в нуль два определителя порядка $n_1 - |m|$ и $n_2 - |m|$. Исследование поведения корней этих определителей при малых и больших R позволяет получить полное число элементарных решений для данных n_1, n_2, m, классифицировать состояния и т.п. Например, общее число решений при $m = 0$ равно $n_2[(n_1 - n_2 + 1)/2] - 1$ ([ ] – целая часть числа). Так, при $n_1 = 10$, $n_2 = 5$ имеем 14 решений ($Z_1 = 3$, $Z_2 = 1$, $E = -2/25 = -0,08$).

В некоторых случаях на одном терме может иметься две или более точек, соответствующих элементарным решениям. В статье приведена таблица простейших элементарных решений.

Выпишем также простейшую волновую функцию, соответствующую решению I в таблице, $(Z_2 > 0)$

$$\psi = N(5\xi^2 - 2\sqrt{10}\,\xi - 7)(5\eta + \sqrt{10})\exp[-\sqrt{10}(\xi + \eta)/3]. \qquad (3)$$

Решения I и VI можно сравнить с расчетами в работе [1] (рис.3,5). В пределах точности чертежа точки, соответствующие этим решениям, ложатся на рассчитанные там кривые. Зная волновые функции, нетрудно вычислить такие величины, как наклон термов (из теоремы вириала), поляризуемость и т.п. для этих решений.

Помимо решений типа (2), при $m \neq 0$, существуют еще элементарные решения вида

$$F(\xi) = [(\xi - 1)/(\xi + 1)]^{m/2} P(\xi)\exp[-(Z_1 + Z_2)\,\xi R/2n_1], \qquad (4)$$

которые расходятся при $\xi = -1$. Для этих решений условие взаимности не имеет места, решения существуют только при $Z_2 < 0$. Такими в нашей таблице являются решения III, IX, XIV.

Оба типа полиномиальных решений для каждого из уравнений для F и G по отдельности были рассмотрены в работе [2]. Однако автор сделал неверный вывод, что все остальные решения нерегулярны и пришел к бессмысленным результатам.

Отметим, наконец, что для случаев $Z_1 = \pm Z_2$ элементарные решения отсутствуют, элементарный вид здесь может иметь только функция $F(Z_1 = Z_2)$ или функция $G(Z_1 = -Z_2)$.

В заключение я благодарю И.В.Комарова. Идея данной работы возникла в результате обсуждения с ним этого круга вопросов.

Ленинградский
Государственный университет

Поступило в редакцию
27 ноября 1967 г.

Литература

[1] Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина. Препринт ОИЯИ Р2-3009, 1966; ЖЭТФ, 52, 1273, 1967.

[2] A.H.Wilson. Proc. Roy. Soc., A118, 617, 1928.