

УДК 539.184.5

О ВЫЧИСЛЕНИИ КУЛОНОВСКИХ РАДИАЛЬНЫХ МАТРИЧНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

И. Л. Бейгман, Л. А. Вайнштейн, С. В. Костин

Излагается новый метод вычисления кулоновских интегралов, основанный на интегральном представлении функции Аппеля F_1 . Приводятся формулы, пригодные для численного вычисления монопольных, дипольных и квадрупольных матричных элементов.

При вычислении сечений возбуждения атомов и ионов в рамках метода парциальных волн [1] возникает необходимость вычисления полюсных радиальных матричных элементов вида

$$M_{l_1, l_2}^\lambda = \frac{1}{k_1^\lambda} \int_0^\infty F_{l_1}(k_1 r) \frac{1}{r^{\lambda+1}} F_{l_2}(k_2 r) dr. \quad (1)$$

Здесь l_1, k_1 – орбитальный момент и волновое число рассеиваемой частицы до столкновения, l_2, k_2 – те же величины после столкновения, λ – мультипольность взаимодействия. Квантовые числа l_1, l_2 и мультипольность λ – целые неотрицательные числа. Из сохранения в процессе возбуждения орбитального момента следует условие треугольника $|l_1 - l_2| \leq \lambda \leq |l_1 + l_2|$, а из сохранения четности следует четность суммы $l_1 + l_2 + \lambda$. Объединяя эти условия, находим

$$l_2 = l_1 - \lambda, l_1 - \lambda + 2, \dots, l_1 + \lambda. \quad (2)$$

Кулоновская радиальная волновая функция $F_l(kr)$ определяется равенством [2]

$$F_l(kr) = \frac{|\Gamma(l+1+i\eta)|}{2\Gamma(2l+2)} e^{-\frac{\pi}{2}\eta} (2kr)^{l+1} e^{-ikr} F(l+1-i\eta; 2l+2; 2ikr). \quad (3)$$

Здесь F – вырожденная гипергеометрическая функция, а η – безразмерный кулоновский параметр, равный

$$\eta = \frac{Z_1 Z_2 e^2 \mu}{\hbar^2 k} = \frac{C}{k}, \quad (4)$$

где μ – приведенная масса сталкивающихся частиц, Z_1e – заряд рассеиваемой частицы, Z_2e – заряд иона. Атом рассматривается как ион с зарядом равным нулю. Параметр η характеризует взаимодействие частицы с кулоновским полем иона. Случай $\eta = 0$ соответствует возбуждению нейтрального атома. Кулоновская функция $F_l(kr)$ и матричный элемент M_{l_1, l_2}^λ безразмерны и действительны.

Рассмотрим вопрос о сходимости интеграла (1). Функция $f(r)$, стоящая под знаком интеграла в формуле (1), вещественна и непрерывна на луче $(0, +\infty)$. Из формулы $f(r) \sim r^{l_1+l_2-\lambda+1}$, $r \rightarrow 0$ и равенства (2) следует, что функция $f(r)$ непрерывна и равна нулю в точке $r = 0$. Следовательно, интеграл (1) не имеет особенностей при $r = 0$. При больших r [2]

$$F_l(kr) = \sin\left(kr - \frac{\pi}{2}l - \eta \ln 2kr + \delta_l\right) + O\left(\frac{1}{r}\right), \quad r \rightarrow +\infty, \quad (5)$$

где $\delta_l = \arg \Gamma(l + 1 + i\eta)$ – кулоновский фазовый сдвиг. Отсюда следует, что $f(r) = O(1/r^{\lambda+1})$, $r \rightarrow +\infty$ и интеграл (1) сходится абсолютно при $\lambda \geq 1$. С помощью признака Дирихле можно показать, что интеграл (1) сходится условно при $\lambda = 0$ и $k_1 \neq k_2$. При $\lambda = 0$ и $k_1 = k_2$ интеграл (1) расходится.

Интеграл, входящий в формулу (1), симметричен относительно замены $l_1 \leftrightarrow l_2$, $k_1 \leftrightarrow k_2$. Поэтому не ограничивая общности можно считать, что $k_1 \geq k_2$. Мы будем в дальнейшем рассматривать случай $k_1 > k_2$. Если $\lambda \geq 1$, то интеграл (1) сходится равномерно относительно k_2 и случай $k_1 = k_2$ может быть получен с помощью предельного перехода $k_2 \rightarrow k_1 - 0$ при фиксированном k_1 . Положим $a = k_2/k_1$, $a = 1 - \xi$, где $\xi > 0$. Безразмерный параметр ξ характеризует часть энергии, потраченную рассеиваемой частицей на возбуждение иона. Если в интеграле (1) произвести замену переменной $r' = k_1 r$, то легко увидеть, что матричный элемент M_{l_1, l_2}^λ является функцией двух безразмерных параметров ξ и $\eta = \eta_1$.

Кулоновская функция $F_l(kr)$ вычисляется обычно путем численного интегрирования волнового уравнения Кулона [2]. При больших l такое интегрирование становится затруднительным, поскольку функция $F_l(kr)$ при малых r ведет себя как степенная функция с большим показателем степени. Соответственно, становится затруднительным непосредственное вычисление кулоновского интеграла по формуле (1). Сложность прямого численного вычисления интеграла (1) связана также с осциллирующим характером подинтегральной функции $f(r)$. Таким образом, возникает задача развития альтернативных методов вычисления матричных элементов. Особый интерес представляют монополюсный ($\lambda = 0$), дипольный ($\lambda = 1$) и квадрупольный ($\lambda = 2$) случаи.

При вычислении кулоновских интегралов полезными оказываются рекуррентные соотношения [3, 4], связывающие матричные элементы с различными значениями l_1, l_2 и λ . В частности, при любом $\lambda \geq 1$, кроме $\lambda = 2$, рекуррентные соотношения позволяют выразить матричный элемент порядка λ через матричные элементы порядка $\lambda - 1$. Отметим, однако, что в ряде случаев использование рекуррентных соотношений может привести к заметной потере точности, а многократное применение этих соотношений обычно сопровождается накоплением вычислительной ошибки.

В работе [5] дипольные матричные элементы с помощью рекуррентных соотношений сводятся к монопольным. Последние выражаются через гипергеометрическую функцию Гаусса и вычисляются путем суммирования соответствующего ряда. Отметим возникающие при этом трудности. 1) При $\xi \rightarrow +0$ монопольные матричные элементы стремятся к $+\infty$ и потому вычисление через них дипольного матричного элемента сопровождается существенной потерей точности. 2) При большом η члены ряда осциллируют и точное вычисление его суммы сталкивается со значительными трудностями. 3) Окончательный результат – матричный элемент (1) – действителен, а для его вычисления приходится суммировать ряд с комплексными членами.

Выше указывалось, что матричные элементы с $\lambda = 2$ не могут быть с помощью рекуррентных соотношений сведены к матричным элементам низшего порядка. Однако, вычислив каким-либо образом несколько квадрупольных матричных элементов, можно затем с помощью рекуррентных соотношений получить все остальные квадрупольные матричные элементы. Такой метод реализован в программе, описанной в работе [6]. Программа обеспечивает относительную погрешность менее 10^{-7} при $\xi > 10^{-2}$. Однако она применима только для $l \leq 500$, тогда как в ряде случаев необходим учет существенно большего числа парциальных волн. Кроме того, в программе не предусмотрена возможность задания требуемой точности вычислений.

Предельный переход $\xi \rightarrow 0, \eta \rightarrow \infty, \xi\eta \rightarrow \text{const}$ соответствует переходу к классическому описанию рассеиваемой частицы, когда она рассматривается как материальная точка, движущаяся по гиперболической траектории. Поэтому при малых ξ и больших η (но таких, что их произведение порядка единицы) применимо квазиклассическое приближение. Используя квазиклассическое приближение для радиальной волновой функции $F_l(kr)$, можно выразить матричный элемент (1) через соответствующий классический орбитальный интеграл [3, 4]. Вычисление этого интеграла также сталкивается с определенными трудностями вследствие осциллирующего характера подынтегральной функции. Квазиклассическое приближение применимо в ограниченной области значе-

ний параметров ξ и η , а попытка его уточнения приводит к очень громоздким выражениям.

Предлагаемый в настоящей работе метод обладает более широкой областью применимости, чем описанные выше методы. Он применим для вычисления монопольных, дипольных и квадрупольных матричных элементов при любых значениях параметров ξ и η . Метод основывается на представлении матричного элемента (1) в виде определенного интеграла по отрезку $[-1, 1]$ от непрерывной и действительной на этом отрезке функции. Последний интеграл вычисляется численно с помощью квадратурных формул Гаусса, причем число точек интегрирования удваивается до тех пор, пока не будет достигнута требуемая точность.

Выражение матричного элемента через функцию Аппеля. Для того, чтобы преобразовать интеграл (1) к более удобному виду, необходимо ввести под знак интеграла множитель сходимости:

$$M_{l_1, l_2}^{\lambda, q} = \frac{1}{k_1^\lambda} \int_0^\infty F_{l_1}(k_1 r) \frac{e^{-q k_1 r}}{r^{\lambda+1}} F_{l_2}(k_2 r) dr, \quad (6)$$

где q – безразмерный действительный положительный параметр. Можно считать, что $q \in (0, 1)$. Очевидно, что интеграл (6) сходится абсолютно при любом $q > 0$ и матричный элемент (6) действителен. Интеграл (6) сходится равномерно относительно $q \in (0, 1)$. Кроме того, функция $f(r, q)$, стоящая под знаком интеграла в формуле (6), при $q \rightarrow +0$ равномерно относительно r стремится к функции $f(r)$. Поэтому законен предельный переход $q \rightarrow +0$ под знаком интеграла (6). Переходя к пределу, находим

$$M_{l_1, l_2}^\lambda = \lim_{q \rightarrow +0} M_{l_1, l_2}^{\lambda, q}. \quad (7)$$

Подставляя в формулу (6) выражение (3) для радиальной волновой функции и используя интегральное представление для вырожденной гипергеометрической функции [7], приходим к формуле

$$M_{l_1, l_2}^{\lambda, q} = C_1 \int_0^\infty dr \int_0^1 du \int_0^1 dv \left[u^{l_1 - i\eta_1} v^{l_2 - i\eta_2} (1-u)^{l_1 + i\eta_1} (1-v)^{l_2 + i\eta_2} r^{l_1 + l_2 - \lambda + 1} e^{-i(k_1 + k_2 - iq)(1-ux - vy)r} \right].$$

Здесь введены обозначения $x = 2/(1+a-iq)$, $y = 2a/(1+a-iq)$. Благодаря наличию множителя сходимости $e^{-q k_1 r}$, интеграл по r от функции, стоящей в квадратных скобках, сходится равномерно относительно $(u, v) \in [0, 1] \times [0, 1]$. Это позволяет переставить

порядок интегрирования и, выполнив интегрирование по r , получить

$$M_{l_1, l_2}^{\lambda, q} = C_2 \int_0^1 \int_0^1 [u^{l_1 - i\eta_1} v^{l_2 - i\eta_2} (1-u)^{l_1 + i\eta_1} (1-v)^{l_2 + i\eta_2} (1-ux - vy)^{-(l_1 + l_2 - \lambda + 2)}] du dv.$$

Последний интеграл выражается через гипергеометрическую функцию Аппеля F_2 [7]. Окончательно приходим к следующему выражению для матричного элемента (6):

$$M_{l_1, l_2}^{\lambda, q} = \frac{|\Gamma(l_1 + 1 + i\eta_1)| |\Gamma(l_2 + 1 + i\eta_2)|}{\Gamma(2l_1 + 2) \Gamma(2l_2 + 2)} \Gamma(l_1 + l_2 - \lambda + 2) e^{-\frac{\pi}{2}(\eta_1 + \eta_2)} \frac{2^{l_1 + l_2} a^{l_2 + 1}}{[i(1 + a - iq)]^{l_1 + l_2 - \lambda + 2}} \times \\ \times F_2\left(l_1 + l_2 - \lambda + 2, l_1 + 1 - i\eta_1, l_2 + 1 - i\eta_2; 2l_1 + 2, 2l_2 + 2; \frac{2}{1 + a - iq}, \frac{2a}{1 + a - iq}\right). \quad (8)$$

Функции Аппеля $F_1(a, b, b'; c; x, y)$ и $F_2(a, b, b'; c, c'; x, y)$ – многозначные функции двух комплексных переменных x и y , аналитические в односвязной области $G = \{|\arg(1-x)| < \pi\} \times \{|\arg(1-y)| < \pi\}$. По теореме о монодромии функции F_1 и F_2 распадаются в области G на регулярные ветви. Во всех формулах символы F_1 и F_2 обозначают регулярные ветви, порожденные элементами, заданными в точке $x = 0, y = 0$ посредством соответствующих рядов Аппеля [7].

Имеет место следующее соотношение, связывающее функции Аппеля F_1 и F_2 [4]:

$$F_2(a, b, b'; c, a; x, y) = (1-y)^{-b'} F_1\left(b, a - b', b'; c; x, \frac{x}{1-y}\right), \quad (x, y) \in G. \quad (9)$$

Степенная функция, стоящая в правой части равенства (9), регулярна в области G и однозначно определяется формулами

$$z^\alpha = e^{\alpha \ln z}, \quad \ln z = \ln |z| + i \arg z, \quad |\arg z| < \pi. \quad (10)$$

Соотношение (9) имеет принципиальное значение для всего последующего изложения. Оно позволяет выразить функцию Аппеля F_2 , у которой параметр c' равен параметру a , через функцию Аппеля F_1 . Для последней функции существует следующее представление в виде одномерного интеграла [7]:

$$F_1(a, b, b'; c; 2u, 2v) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)\Gamma(c-a)} \frac{2^{1-c}}{(1-u)^b (1-v)^{b'}} \int_{-1}^1 \frac{(1-z)^{a-1} (1+z)^{c-a-1}}{\left(1 - \frac{zu}{1-u}\right)^b \left(1 - \frac{zv}{1-v}\right)^{b'}} dz. \quad (11)$$

Все степенные функции, стоящие в правой части равенства, понимаются в смысле (10). Представление (11) справедливо при $(2u, 2v) \in G, \operatorname{Re} a > 0, \operatorname{Re}(c-a) > 0$. Первое

условие означает, что точки $z = (1-u)/u$ и $z = (1-v)/v$, в которых стоящие в знаменателе скобки обращаются в ноль, не принадлежат отрезку интегрирования $[-1, 1]$. Второе и третье условия обеспечивают сходимость интеграла (11), вообще говоря, в несобственном смысле.

Вычисление матричного элемента $M_{l, l+\lambda}^\lambda$. В данном случае $l_1 = l$, $l_2 = l + \lambda$, где $l \geq 0$. Функция Аппеля F_2 , входящая в формулу (8), имеет равные значения параметров a и c . Воспользовавшись формулой симметрии [7], поставим параметр c на место параметра c' . Применяя теперь соотношение (9) и интегральное представление (11) для функции F_1 , получим следующее выражение для матричного элемента (6):

$$M_{l, l+\lambda}^{\lambda, q} = \frac{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|}{|\Gamma(l+\lambda+1+i\eta_2)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_1-\eta_2)} \frac{a^{l+\lambda+1}}{2^{\lambda+1}(1+q^2)^{l+1}} \int_{-1}^1 \frac{[(1-z)(1+z)]^{l+\lambda}}{\left[\left(1-\frac{za}{1-iq}\right)\left(1+\frac{za}{1+iq}\right)\right]^{l+1}} e^{i\varphi(z, q)} dz. \quad (12)$$

Здесь функция $\varphi(z, q)$ определяется равенством

$$\varphi(z, q) = \eta_1 \ln \frac{1+iq+za}{1-iq-za} + \eta_2 \ln \frac{1-z}{1+z}. \quad (13)$$

Функция, стоящая под знаком интеграла в формуле (12), принимает комплексно сопряженные значения в точках, симметричных относительно середины отрезка интегрирования. Поэтому матричный элемент $M_{l, l+\lambda}^{\lambda, q}$, как и должно быть, действителен.

Подынтегральная функция непрерывна на прямоугольнике $[-1, 1] \times [0, 1]$. Поэтому законен предельный переход $q \rightarrow +0$ под знаком интеграла (12). Переходя к пределу и учитывая (7), приходим к следующему выражению для кулоновского матричного элемента $M_{l, l+\lambda}^\lambda$:

$$M_{l, l+\lambda}^\lambda = \frac{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|}{|\Gamma(l+\lambda+1+i\eta_2)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_1-\eta_2)} \frac{a^{l+\lambda+1}}{2^{\lambda+1}} \int_{-1}^1 \frac{(1-z^2)^{l+\lambda}}{(1-z^2a^2)^{l+1}} e^{i\varphi(z)} dz. \quad (14)$$

Здесь функция $\varphi(z)$ определяется равенством

$$\varphi(z) = \eta_1 \ln \frac{1+za}{1-za} + \eta_2 \ln \frac{1-z}{1+z}. \quad (15)$$

Функция $\varphi(z)$ нечетна. Поэтому формулу (14) можно переписать в виде

$$M_{l, l+\lambda}^\lambda = \frac{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|}{|\Gamma(l+\lambda+1+i\eta_2)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_1-\eta_2)} \frac{a^{l+\lambda+1}}{2^{\lambda+1}} \int_{-1}^1 \frac{(1-z^2)^{l+\lambda}}{(1-z^2a^2)^{l+1}} \cos \varphi(z) dz. \quad (16)$$

Таким образом, получено представление матричного элемента $M_{i,l+\lambda}^\lambda$ в виде определенного интеграла по отрезку $[-1, 1]$ от непрерывной и действительной на этом отрезке функции. Формула (16) применима для численного вычисления монопольного матричного элемента $M_{i,l}^0$, дипольного матричного элемента $M_{i,l+1}^1$ и квадрупольного матричного элемента $M_{i,l+2}^2$.

Преобразование матричного элемента $M_{i,l-\lambda}^\lambda$. В данном случае $l_1 = l$, $l_2 = l - \lambda$, где $l \geq \lambda$. Аналогично тому, как была получена формула (12), приходим к формуле

$$M_{i,l-\lambda}^{\lambda,q} = \frac{|\Gamma(l-\lambda+1+i\eta_2)|}{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_2-\eta_1)} \frac{2^{-\lambda-1} a^{l-\lambda+1}}{(a^2+q^2)^{l-\lambda+1}} \int_{-1}^1 \frac{[(1-z)(1+z)]^l}{\left[\left(1 - \frac{z}{a-iq}\right) \left(1 + \frac{z}{a+iq}\right) \right]^{l-\lambda+1}} e^{i\psi(z,q)} dz. \quad (17)$$

Здесь функция $\psi(z, q)$ определяется равенством

$$\psi(z, q) = \eta_1 \ln \frac{1-z}{1+z} + \eta_2 \ln \frac{a+iq+z}{a-iq-z}. \quad (18)$$

Функция, стоящая под знаком интеграла в формуле (17), при $q = 0$ имеет особенности в точках $z = a$ и $z = -a$, принадлежащих отрезку интегрирования. Поэтому предельный переход $q \rightarrow +0$ под знаком интеграла (17) невозможен.

Подынтегральная функция регулярна в верхней полуплоскости $D_+ = \{\text{Im } z > 0\}$ и непрерывна вплоть до отрезка $[-1, 1]$. Поэтому, согласно интегральной теореме Коши, интеграл по отрезку $[-1, 1]$ в формуле (17) можно заменить на интеграл по полуокружности $\gamma_+ = \{z = -e^{-it}, 0 \leq t \leq \pi\}$. Теперь законен предельный переход $q \rightarrow +0$ под знаком интеграла (17). Переходя к пределу и учитывая (7), приходим к следующему выражению для кулоновского матричного элемента $M_{i,l-\lambda}^\lambda$:

$$M_{i,l-\lambda}^\lambda = \frac{|\Gamma(l-\lambda+1+i\eta_2)|}{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_2-\eta_1)} \frac{a^{-(l-\lambda+1)}}{2^{\lambda+1}} \int_{\gamma_+} \frac{(1-z^2)^l}{(1-z^2/a^2)^{l-\lambda+1}} e^{i\psi(z)} dz. \quad (19)$$

Здесь функция $\psi(z)$ определяется равенством

$$\psi(z) = \eta_1 \ln \frac{1-z}{1+z} + \eta_2 \ln \frac{a+z}{a-z}. \quad (20)$$

Выполняя в интеграле (19) замену переменной $z = 1/w$, имеем

$$M_{i,l-\lambda}^\lambda = \frac{|\Gamma(l-\lambda+1+i\eta_2)|}{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_2-\eta_1)} \frac{a^{l-\lambda+1}}{2^{\lambda+1}} (-1)^\lambda \int_{\gamma_-} \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2/a^2)^{l-\lambda+1}} e^{i\chi(w)} \frac{dw}{w^{2\lambda}}. \quad (21)$$

Здесь $\gamma_- = \{w = -e^{it}, 0 \leq t \leq \pi\}$, а функция $\chi(w)$ определяется равенством

$$\chi(w) = \psi\left(\frac{1}{w}\right) = \eta_1 \ln \frac{w-1}{w+1} + \eta_2 \ln \frac{wa+1}{wa-1}. \quad (22)$$

Функция $\chi(w)$ регулярна в нижней полуплоскости $D_- = \{\text{Im } w < 0\}$ и непрерывна в области D_- вплоть до интервала $I = (-1, 1)$. Найдем значение функции $\chi(w)$ в точке $w \in I$. Рассмотрим луч $l = (w - i\infty, w]$. На бесконечности функция $\chi(w)$ равна $\chi(\infty) = \psi(0) = 0$. Следовательно,

$$\chi(w) = \eta_1 \ln \left| \frac{w-1}{w+1} \right| + \eta_2 \ln \left| \frac{wa+1}{wa-1} \right| + i\eta_1 \Delta_l \arg \frac{w-1}{w+1} + i\eta_2 \Delta_l \arg \frac{1+wa}{1-wa}, \quad w \in I.$$

Приращения аргумента вдоль луча l равны соответственно $-\pi$ и π . Поэтому

$$\chi(w) = \omega(w) - i\pi(\eta_1 - \eta_2), \quad w \in I. \quad (23)$$

Здесь функция $\omega(w)$ определяется равенством

$$\omega(w) = \eta_1 \ln \frac{1-w}{1+w} + \eta_2 \ln \frac{1+wa}{1-wa}. \quad (24)$$

В обеих частях равенства (23) стоят регулярные в области D_- функции, поэтому по теореме единственности оно справедливо для всех $w \in D_-$. Подставляя равенство (23) в формулу (21), находим

$$M_{l, l-\lambda}^\lambda = \frac{|\Gamma(l-\lambda+1+i\eta_2)|}{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_1-\eta_2)} \frac{a^{l-\lambda+1}}{2^{\lambda+1}} (-1)^\lambda \int_{\gamma_-} \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2a^2)^{l-\lambda+1}} e^{i\omega(w)} \frac{dw}{w^{2\lambda}}. \quad (25)$$

Рассмотрение случаев $\lambda = 0$, $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$. Функция, стоящая под знаком интеграла в формуле (25), регулярна во всей комплексной плоскости с разрезами по лучам $(-\infty, -1]$, $[1, +\infty)$ и с выколотой точкой $w = 0$. В монополярном случае $\lambda = 0$ полюс в точке $w = 0$ отсутствует и, согласно интегральной теореме Коши, интеграл по полуокружности γ_- можно заменить интегралом по отрезку $[-1, 1]$. Таким образом, получаем следующую формулу для вычисления матричного элемента $M_{l, l}^0$:

$$M_{l, l}^0 = \frac{|\Gamma(l+1+i\eta_2)|}{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_1-\eta_2)} \frac{a^{l+1}}{2} \int_{-1}^1 \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2a^2)^{l+1}} \cos \omega(w) dw. \quad (26)$$

Здесь мы воспользовались формулой Эйлера и нечетностью функции $\omega(w)$. Формула (25) дает отличный от (16) способ вычисления матричного элемента $M_{l, l}^0$. Непосредственно

равенство правых частей в формулах (16) и (26) совсем не очевидно и представляет собой довольно любопытное математическое тождество. Практически оно может быть использовано для проверки правильности работы программы.

Обратимся теперь к дипольному и квадрупольному случаям. Снова применим формулу Эйлера и представим экспоненту, стоящую под знаком интеграла в формуле (25), в виде

$$e^{i\omega(w)} = \cos \omega(w) + i \sin \omega(w) = 1 - 2 \sin^2 \frac{\omega(w)}{2} + i \sin \omega(w). \quad (27)$$

Интеграл (25) разбивается на сумму трех интегралов:

$$I = I_1 + I_2 + I_3, \quad (28)$$

где

$$I_1 = \int_{\gamma_-} \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2a^2)^{l-\lambda+1}} \frac{dw}{w^{2\lambda}}, \quad (29)$$

$$I_2 = -2 \int_{\gamma_-} \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2a^2)^{l-\lambda+1}} \left(\frac{\sin[\omega(w)/2]}{w^\lambda} \right)^2 dw, \quad (30)$$

$$I_3 = i \int_{\gamma_-} \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2a^2)^{l-\lambda+1}} \sin \omega(w) \frac{dw}{w^{2\lambda}}. \quad (31)$$

Интеграл I_1 с помощью интегрирования по частям может быть приведен к интегралу по отрезку $[-1, 1]$. В дипольном случае, учитывая, что $l \geq \lambda = 1$, имеем:

$$I_1 = - \int_{\gamma_-} \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2a^2)^l} d\left(\frac{1}{w}\right) = \int_{\gamma_-} \frac{1}{w} d\left[\frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2a^2)^l}\right] = -2l(1-a^2) \int_{\gamma_-} \frac{(1-w^2)^{l-1}}{(1-w^2a^2)^{l+1}} dw.$$

В последнем члене подынтегральная функция не имеет особенностей в точке $w = 0$, а потому интеграл по полуокружности γ_- можно заменить интегралом по отрезку $[-1, 1]$:

$$I_1 = -2l(1-a^2) \int_{-1}^1 \frac{(1-w^2)^{l-1}}{(1-w^2a^2)^{l+1}} dw, \quad \lambda = 1. \quad (32)$$

В квадрупольном случае аналогично получаем

$$I_1 = \frac{4}{3} l(l-1)(1-a^2)^2 \int_{-1}^1 \frac{(1-w^2)^{l-2}}{(1-w^2a^2)^{l+1}} dw, \quad \lambda = 2. \quad (33)$$

Перейдем теперь к исследованию интеграла I_2 . Функция $\omega(w)$, определяемая формулой (24), регулярна в точке $w = 0$. Разложим ее в ряд Тейлора в этой точке:

$$\omega(w) = 2(\eta_2 a - \eta_1)w + \frac{2}{3}(\eta_2 a^3 - \eta_1)w^3 + O(w^5).$$

Поскольку $a = k_2/k_1$ и согласно формуле (4) $\eta_1 k_1 = \eta_2 k_2 = C$, то

$$\omega(w) = \frac{2}{3}\eta_1(a^2 - 1)w^3 + O(w^5). \quad (34)$$

Отсюда следует, что функция, стоящая под знаком интеграла в (30), при $\lambda = 1$ и $\lambda = 2$ регулярна в точке $w = 0$. Следовательно, мы снова можем заменить интеграл по полуокружности γ_- интегралом по отрезку $[-1, 1]$:

$$I_2 = -2 \int_{-1}^1 \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2 a^2)^{l-\lambda+1}} \left(\frac{\sin[\omega(w)/2]}{w^\lambda} \right)^2 dw, \quad \lambda = 1, 2. \quad (35)$$

Нам осталось рассмотреть интеграл I_3 . Подынтегральная функция нечетна, а потому интеграл по полуокружности γ_- отличается только знаком от интеграла по полуокружности γ_+ . Следовательно, мы можем переписать (31) в виде

$$I_3 = \frac{i}{2} \left(\int_{\gamma_-} - \int_{\gamma_+} \right) = \frac{i}{2} \int_{\gamma} \frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2 a^2)^{l-\lambda+1}} \sin \omega(w) \frac{dw}{w^{2\lambda}}, \quad (36)$$

где $\gamma = \gamma_- \gamma_+^{-1}$ — окружность $|w| = 1$, ориентированная против часовой стрелки. В дипольном случае подынтегральная функция регулярна в круге $|w| < 1$ и непрерывна вплоть до его границы. Следовательно, $I_3 = 0$. В квадрупольном случае подынтегральная функция регулярна в круге $|w| < 1$, за исключением полюса первого порядка в точке $w = 0$, и непрерывна вплоть до границы этого круга. Следовательно, согласно основной теореме о вычетах,

$$I_3 = \frac{i}{2} \cdot 2\pi i \operatorname{res}_{w=0} \left[\frac{(1-w^2)^l}{(1-w^2 a^2)^{l-1}} \frac{\sin \omega(w)}{w^4} \right] = \frac{2}{3} \pi \eta_1 (1-a^2), \quad \lambda = 2. \quad (37)$$

Собирая вместе полученные результаты, получаем следующие выражения для матричных элементов $M_{l,l-1}^1$ и $M_{l,l-2}^2$:

$$M_{l,l-1}^1 = \frac{|\Gamma(l+i\eta_2)|}{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_1-\eta_2)} \frac{a^l}{2} \int_{-1}^1 \frac{(1-w^2)^{l-1}}{(1-w^2 a^2)^l} \left[\frac{l(1-a^2)}{1-w^2 a^2} + (1-w^2) \left(\frac{\sin[\omega(w)/2]}{w} \right)^2 \right] dw, \quad (38)$$

$$M_{l, l-2}^2 = \frac{|\Gamma(l-1+i\eta_2)|}{|\Gamma(l+1+i\eta_1)|} e^{\frac{\pi}{2}(\eta_1-\eta_2)} \frac{a^{l-1}}{4} \left\{ \frac{\pi}{3} \eta_1 (1-a^2) + \int_{-1}^1 \frac{(1-w^2)^{l-2}}{(1-w^2a^2)^{l-1}} \left[\frac{2l(l-1)(1-a^2)^2}{3(1-w^2a^2)^2} - (1-w^2)^2 \left(\frac{\sin[\omega(w)/2]}{w^2} \right)^2 \right] dw \right\}. \quad (39)$$

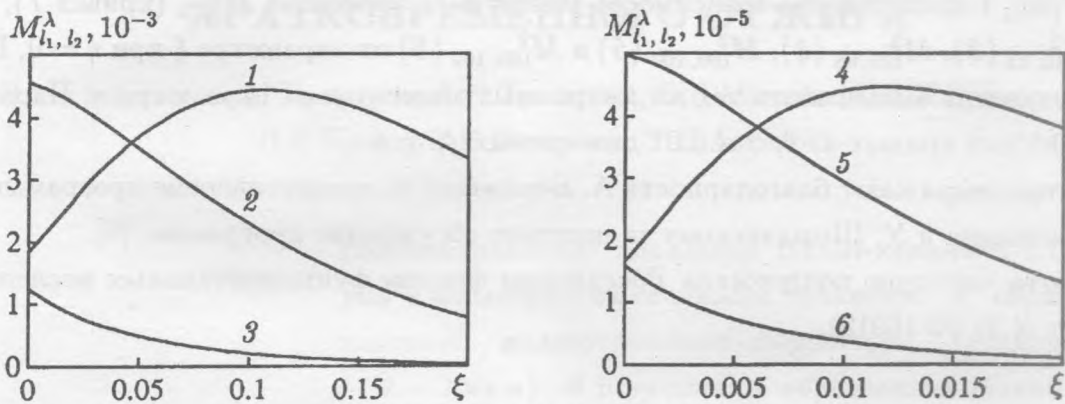


Рис. 1. Зависимость матричных элементов $M_{10,8}^2$ (кривая 1), $M_{10,10}^2$ (2), $M_{10,12}^2$ (3), $M_{100,98}^2$ (4), $M_{100,100}^2$ (5) и $M_{100,102}^2$ (6) от параметра ξ при $\eta = 0$.

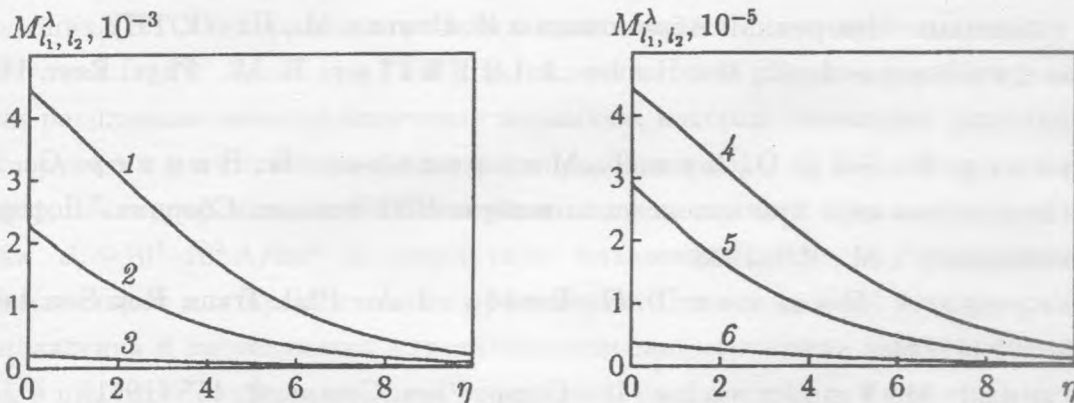


Рис. 2. Зависимость тех же матричных элементов, что и на рис. 1, от параметра η . Параметр ξ равен 0.1 для кривых 1, 2, 3 и 0.01 для кривых 4, 5, 6.

Таким образом, получено представление матричного элемента $M_{l, l-\lambda}^\lambda$, где $\lambda = 0, 1, 2$, в виде определенного интеграла по отрезку $[-1, 1]$ от непрерывной и действительной на этом отрезке функции. Формулы (26), (38), (39) применимы для численного вычисления

монопольного матричного элемента $M_{l,l-1}^0$, дипольного матричного элемента $M_{l,l-1}^1$ и квадрупольного матричного элемента $M_{l,l-2}^2$.

Результаты численных расчетов. Численные расчеты при различных значениях параметров ξ и η показали, что программа, основанная на изложенном в данной работе методе, и программа [6] дают при $\xi > 10^{-2}$ результаты, совпадающие с относительной точностью 10^{-5} .

На рис. 1 представлена зависимость матричных элементов $M_{10,8}^2$ (кривая 1), $M_{10,10}^2$ (2), $M_{10,12}^2$ (3), $M_{100,98}^2$ (4), $M_{100,100}^2$ (5) и $M_{100,102}^2$ (6) от параметра ξ при $\eta = 0$. На рис. 2 представлена зависимость тех же матричных элементов от параметра η . Параметр ξ равен 0.1 для кривых 1, 2, 3 и 0.01 для кривых 4, 5, 6.

Авторы выражают благодарность А. Бёрджессу за предоставление программы до ее опубликования и У. Шмилянскому за полезное обсуждение программы [6].

Работа частично поддержана Российским фондом фундаментальных исследований (проект N 97-02-16919).

ЛИТЕРАТУРА

- [1] В а й н ш т е й н Л. А., Ш е в е л ь к о В. П. Структура и характеристики ионов в горячей плазме. М., Наука, 1986.
- [2] Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами. Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. М., Наука, 1979.
- [3] B i e d e n h a r n L. C., M c N a l e J. L., T h a l e r R. M. Phys. Rev., **100**, 376 (1955).
- [4] А л ь д е р К., Б о р О., Х у с Т., М о т т е л ь с о н Б., В и н т е р О. Изучение структуры ядра при кулоновском возбуждении ионами. Сборник "Деформация атомных ядер". М., ИЛ, 1958.
- [5] B u r g e s s A., H u m m e r D. G., T u l l y J. A. Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., A **266**, 225 (1970).
- [6] S a m u e l M., S m i l a n s k y U. Comp. Phys. Comm., **2**, 455 (1971).
- [7] П р у д н и к о в А. П., Б р ы ч к о в Ю. А., М а р и ч е в О. И. Интегралы и ряды. Дополнительные главы. М., Наука, 1986.

Поступила в редакцию 28 июля 1999 г.