Краткие сообщения по физике № 11 1982

ОБ ОДНОМ ПРАВИЛЕ СУММ В ТЕОРИИ ВОЗМУЩЕНИЙ ВТОРОГО ПОРЯДКА

Л. А. Вайнштейн

УДК 539.186

Приводится замкнутое выражение для суммы, возникающей в расчетах поправки к энергии второго порядка для центрального поля на кулоновском базисе.

При проведении расчетов по теории возмущений, особенно при вычислении частичных сумм, встречаются суммы вида:

$$X_n = \sum_{k\neq n} \langle n|V(r)|k\rangle\langle k|U(r)|n\rangle/(E_k - E_n),$$

где $|k\rangle$ и E_k – собственные функции и энергии волнового уравнения с центральным полем $U(r)$: $[H_0 + U(r) - E_k]|k\rangle = 0$, а $V(r)$ – произвольное центральное поле. (Ниже используются атомные единицы.) Перепишем X_n в виде:

$$X_n = \sum_k \langle n|V|k\rangle\langle k|\tilde{U}|n\rangle/(E_k - E_n) =$$

$$= \sum_k \langle n|V|k\rangle\langle k|\, \frac{1}{H_0 + U - E_n}\, \tilde{U}|n\rangle = \langle n|V|f\rangle,$$

где $\tilde{U} = U - \langle n|U|n\rangle$, $[H_0 + U - E_k]f = \tilde{U}|n\rangle$. Пусть ψ_k^λ и E_k^λ – собственные функции и энергии уравнения $[H_0 + \lambda U - E_k]\psi_k^\lambda = 0$. Дифференцируя его по λ, умножая на ψ_n и интегрируя, находим:

$$\tilde{U} = U - \left.\frac{\partial E_n^\lambda}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=1}, \quad f = -\left.\frac{\partial \psi_n^\lambda}{\partial\lambda}\right|_{\lambda=1}.$$

Откуда

$$X_n = -\frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial\lambda}\langle n,\lambda|V(r)|n,\lambda\rangle\Big|_{\lambda=1}.$$

Особый интерес представляет случай кулонова поля:

$$U = -\frac{1}{r},\; H_0 = -\frac{1}{2}\nabla^2,\quad \psi_n^\lambda(r) = \lambda^{1/2}\psi_n(\lambda r).$$

При этом выражение для X_n упрощается:

$$X_n = -\frac{1}{2}\langle n|\frac{\partial}{\partial\lambda}V(r/\lambda)|n\rangle\Big|_{\lambda=1},$$

то есть

$$X_n \equiv \sum_{k\neq n}\langle n|V(r)|k\rangle\langle k|-1/r|n\rangle/(E_k - E_n) = \frac{1}{2}\langle n|r\frac{\partial V(r)}{\partial r}|n\rangle.$$

Приведем несколько частных случаев:

$$\text{I)}\quad V = -1/r,\quad rV'(r) = 1/r.$$

Используя теорему вириала, получаем:

$$X_n = \sum_{k\neq n}\frac{1}{E_k - E_n}\left|\langle n|\frac{1}{r}|k\rangle\right|^2 = -E_n = 1/2n^2.$$

$$\text{2)}\quad V(r) = -\int_0^\infty \frac{1}{r_>}P_0^2(r_1)dr_1,\quad r_> = \max(r,r_1).$$

$$X_n = \frac{1}{2n^2} - \frac{1}{2}\int_0^\infty P_n^2(r)\frac{1}{r}\int_r^\infty P_0^2(r_1)dr_1dr,$$

где $P_0(r)$ и $P_n(r)$ – радиальные кулоновы функции.

$$\text{3)}\qquad V(r) = \int_r^\infty\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_1}\right)P_0^2(r_1)dr_1.$$

$$X_n = -\frac{1}{2}\int_0^\infty P_n^2(r)\,\frac{1}{r}\int_r^\infty P_0^2(r_1)\,dr_1\,dr.$$

Автор выражает глубокую признательность И. Л. Бейгману и У. И. Сафроновой за обсуждение настоящей работы.

Поступила в редакцию
3 июня 1982 г.