УДК 530.145, 539.182, 539.186
PACS 31.15.-p, 31.15.xh, 03.65.Ge
DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.95-103

В.М. Хмара[1], М. Гнатіч[1,2], В.Ю. Лазур[3], О.К. Рейтій[4], В.В. Рубіш[3]

[1] Інститут фізики університету Павла Йозефа Шафарика в Кошицях, 040 01 Кошице, Парк Ангелінум, 9, Словаччина

[2] Інститут експериментальної фізики Словацької Академії Наук, 040 01, Кошице, вул. Ватсонова, 47, Словаччина
e-mail: hnatic@saske.sk

[3] Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Волошина, 54, Україна

[4] Ужгородський національний університет, 88000, Ужгород, вул. Університетська, 14, Україна
e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

ДВОЦЕНТРОВІ ПОПРАВКИ ДО СФЕРИЧНОГО І ПАРАБОЛІЧНОГО БАЗИСІВ АТОМА ВОДНЮ

Введено сферичний, параболічний та сфероїдальний базиси атома водню, а також приведено додаткові інтеграли руху. Обчислено сфероїдальні поправки до сферичного і параболічного базисів атома водню методами теорії збурень при великих та малих відстанях R між фокусами сфероїдальної системи координат. Показано, що в кожному порядку теорії збурень поправки до кулонівських сфероїдальних хвильових функцій виражаються через скінчене число базисних функцій зображення.

Ключові слова: атом водню, сферичний базис, параболічний базис, теорія збурень, двоцентрові поправки, додатковий інтеграл руху.

Вступ

Задача квантування атома водню (АВ) або водневоподібного іона в сферичній, параболічній і витягнутій сфероїдальній системах координат розглядалась багатьма авторами. Оскільки рівні енергії при квантуванні в будь-якій системі координат одні і ті ж, то мова йде тільки про визначення хвильових функцій.

При теоретичному описі поведінки водневоподібного атома у зовнішніх електричних і магнітних полях зручно використовувати кулонівські сфероїдальні хвильові функції, які визначались різними авторами як прямим шляхом, який використовує явний вигляд базисних функцій [1, 2, 3], так і опосередкованим – за допомогою додаткових інтегралів руху [4–9]. Для заданих n і m (n – головне квантове число, m – магнітне квантове число) задача зводиться до розв'язування системи лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь порядку $n-|m|$. При малих $n-|m|$ цю систему рівнянь можна розв'язати аналітично. Однак для довільних $n-|m|$ і R (R – відстань між фокусами сфероїдальної системи координат) отримати загальний розв'язок неможливо.

В загальному вигляді кулонівські сфероїдальні хвильові функції визначені в двох граничних випадках великих та малих R. В першому випадку вони представляються у вигляді лінійної комбінації кулонівських параболічних функцій [1, 10], а в другому – у вигляді лінійної комбінації кулонівських сферичних функцій [10]. В даній праці визначено сфероїдальні поправки до сферичного і параболічного базисів атома водню при великих і малих R. Наш підхід базується на використанні стандартного апарата теорії збурень (ТЗ) Релея-Шредінгера і додаткових інтегралів руху. В першому розділі введено сферичний, параболічний та сфероїдальний базиси атома водню, а також приведено додаткові інтеграли руху. У другому розділі методом теорії збурень обчислено сфероїдальні поправки до сферичного і параболічного базисів атома водню при малих та великих міжцентрових відстанях. Показано, що в кожному порядку теорії збурень поправки до кулонівських сфероїдальних хвильових функцій виражаються через скінчене число базисних функцій зображення.

1. Сферичний, параболічний та сфероїдальний базиси атома водню

Одноцентрова кулонівська задача допускає відокремлення змінних в трьох системах координат: сферичній, параболічній і витягнутій сфероїдальній, причому перші дві координатні системи є граничними випадками третьої (див. §1 книги [1]). Тому розв'язки водневоподібної задачі в сфероїдальних координатах можна знайти, не звертаючись до рівнянь для кулонівських сфероїдальних квазірадіальних та квазікутових хвильових функцій. У цьому розділі ми побудуємо розв'язки водневоподібної задачі, користуючись додатковими інтегралами руху та відомими розв'язками цієї ж задачі в інших координатних системах [5, 10].

Спочатку введемо позначення та дамо означення сферичного $\psi_{nlm}^{сф}$, параболічного $\psi_{n_1n_2m}^{пар}$ та сфероїдального $\psi_{nqm}^{сфр}$ базисів АВ в дискретному спектрі.

А. Сферичний базис. Хвильова функція АВ у сферичних координатах $\psi_{nlm}^{сф}$ є власною функцією для операторів (тут і нижче прийнято атомну систему одиниць: $e = m_e = \hbar = 1$):

$$\hat{H}\psi_{nlm}^{сф} = E_n\psi_{nlm}^{сф}, \quad \hat{\vec{L}}^2\psi_{nlm}^{сф} = l(l+1)\psi_{nlm}^{сф}, \quad \hat{L}_z\psi_{nlm}^{сф} = m\psi_{nlm}^{сф}. \tag{1}$$

Тут $\hat{\vec{L}} = [\vec{r}\times\hat{\vec{p}}]$ і $\hat{L}_z$ – оператори орбітального моменту кількості руху та його проекції на міжцентрову вісь $\vec{R}$, $\hat{H}$ – гамільтоніан одноцентрової кулонівської задачі:

$$\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^{\,2}}{2m} - \frac{1}{r}, E_n = -\frac{1}{2n^2}, n = l + n_r + 1. \tag{2}$$

У співвідношеннях (1), (2) числа $n > l \geq m$ – цілі, l – орбітальне квантове число.

Б. Параболічний базис. Хвильова функція АВ в параболічних координатах $\psi_{n_1n_2m}^{пар}$ є власною функцією для набору операторів

$$\hat{H}\psi_{n_1n_2m}^{пар} = E_n\psi_{n_1n_2m}^{пар}, \quad \hat{A}_z\psi_{n_1n_2m}^{пар} = (n_1 - n_2)\psi_{n_1n_2m}^{пар}, \quad \hat{L}_z\psi_{n_1n_2m}^{пар} = m\psi_{n_1n_2m}^{пар}, \tag{3}$$

де цілі невід'ємні n_1, n_2 – параболічні квантові числа, так що $n = n_1 + n_2 + m + 1$. Оператор, що фігурує в рівняннях (3), є вектором Рунге-Ленца

$$\hat{\vec{A}} = n\left\{\frac{1}{2}[\hat{\vec{L}}\times\hat{\vec{p}}] - \frac{1}{2}[\hat{\vec{p}}\times\hat{\vec{L}}]\frac{\vec{r}}{r}\right\}, \tag{4}$$

який комутує з гамільтоніаном атома водню $\hat{H}$ і, отже, є інтегралом руху.

В. Сфероїдальний базис. Хвильова функція АВ в сфероїдальних координатах $\psi_{nqm}^{сфр}$ є власною функцією для набору операторів

$$\hat{H}\psi_{nqm}^{сфр} = E_n\psi_{nqm}^{сфр}, \quad \hat{\Lambda}\psi_{nqm}^{сфр} = \lambda_q\psi_{nqm}^{сфр}, \quad \hat{L}_z\psi_{nqm}^{сфр} = m\psi_{nqm}^{сфр}, \tag{5}$$

де k та q – сфероїдальні квантові числа, причому $k + q + m + 1 = n$. Відокремлення змінних для розглядуваної кулонівської задачі у витягнутих сфероїдальних координатах [1] можливе тому, що поряд з гамільтоніаном $\hat{H}$ і проекцією моменту на міжцентрову вісь $\hat{L}_z$ в задачі присутній також додатковий інтеграл руху – константа відокремлення:

$$\hat{\Lambda} = -\hat{\vec{L}}^2 - \frac{R}{n}\hat{A}_z. \tag{6}$$

Тут R – параметр, який входить в означення сфероїдальних координат.

Із властивостей алгебри $\mathrm{SO}(4)$ випливає, що ненульові матричні елементи третьої компоненти $\hat{A}_z$ вектора Рунге-Ленца $\hat{\vec{A}}$ (4) у сферичному базисі (1) задаються формулою [11]

$$\left(\hat{A}_z\right)_{l'l} = \int \left(\psi^{сф}_{nl'm}\right)^* \hat{A}_z \psi^{сф}_{nlm} dV = -\left\{\frac{(l+|m|)(l-|m|)(n-l)(n+l)}{(2l+1)(2l-1)}\right\}^{1/2} \delta_{l',l-1} - -\left\{\frac{(l+|m|+1)(l-|m|+1)}{(2l+1)} \times \times \frac{(n-l-1)(n+l+1)}{(2l+3)}\right\}^{1/2} \delta_{l',l+1}. \quad (7)$$

Запишемо за допомогою коефіцієнтів Клебша-Гордана перетворення, які зв'язують між собою сферичні і параболічні хвильові функції атома водню в дискретному спектрі [10, 11]:

$$\psi^{пар}_{n_1 n_2 m} = (-1)^{n_2 + \frac{m-|m|}{2}} \times \sum_{l=|m|}^{n-1} (-1)^l C^{l,|m|}_{\frac{n-1}{2},\frac{n_1-n_2+|m|}{2};\frac{n-1}{2},\frac{n_2-n_1+|m|}{2}} \psi^{сф}_{nlm}, \quad (8а)$$

$$\psi^{сф}_{nlm} = (-1)^{l + \frac{m-|m|}{2}} \times \sum_{n_2=0}^{n-|m|-1} (-1)^{n_2} C^{l,|m|}_{\frac{n-1}{2},\frac{n-1}{2}-n_2;\frac{n-1}{2},n_2+|m|-\frac{n-1}{2}} \psi^{пар}_{n_1 n_2 m}. \quad (8б)$$

Такий розклад зводить обчислення матричних елементів від оператора $\hat{\vec{L}}^2$ за параболічними функціями $\psi^{пар}_{n_1 n_2 m}$ (3) до простішої задачі обчислення матричних елементів від того ж оператора $\hat{\vec{L}}^2$ за сферичним базисом (1). Отриманий таким чином (див. [10]) вираз для $(\hat{\vec{L}}^2)_{n_2 n_2'}$ можна записати у вигляді

$$\left(\hat{\vec{L}}^2\right)_{n_2 n_2'} = [(n_2+1)(n-|m|-n_2-1) + +(n-n_2)(n_2+|m|)]\delta_{n_2',n_2} - -[(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)(n-n_2-1) \times \times (n_2+|m|+1)]^{1/2} \delta_{n_2',n_2+1} - -[n_2(n-|m|-n_2)(n-n_2) \times \times (n_2+|m|)]^{1/2} \delta_{n_2',n_2-1}. \quad (9)$$

Нарешті, приведемо розклад сфероїдального базису (5) за параболічним базисом (3):

$$\psi^{сфр}_{nqm} = \sum_{n_2=0}^{n-|m|-1} U^{n_2}_{nqm} \psi^{пар}_{n_1 n_2 m}. \quad (10)$$

Для коефіцієнтів $U^{n_2}_{nqm}$ цього розкладу в статті [10] було отримано наступні тричленні рекурентні співвідношення:

$$[\lambda_q + (n_2+1)(n-|m|-n_2-1) + +(n-n_2)(n_2+|m|) + +\frac{R}{n}(n-|m|-2n_2-1)]U^{n_2}_{nqm} = =\left[n_2(n-|m|-n_2)(n-n_2)(n_2+|m|)\right]^{1/2} U^{n_2-1}_{nqm} + +[(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)(n-n_2-1) \times \times (n_2+|m|+1)]^{1/2} U^{n_2+1}_{nqm}. \quad (11)$$

Наведені вище інтеграли руху разом з гамільтоніаном $\hat{H}$ (2) АВ утворюють квадратичну алгебру. При фіксованих від'ємних значеннях енергії інтеграли руху утворюють алгебру $\mathrm{SO}(4)$, а при додатніх значеннях енергії – $\mathrm{SO}(3.1)$. Завдяки прихованій симетрії задача про атом водню факторизується не тільки в сферичних та параболічних, але і в сфероїдальних координатах.

2. Теорія збурень Релея-Шредінгера

Розглянемо рівняння на власні значення оператора $\hat{\Lambda}$ при малих R:

$$\left(-\hat{\vec{L}}^2 - \frac{R}{n}\hat{A}_z\right)\psi^{сфр}_{nqm} = \lambda_q \psi^{сфр}_{nqm}. \quad (12)$$

При $R \ll 1$ другий доданок в лівій частині рівняння (12) є збуренням, а сфероїдальний базис формує незбурені функції нульового наближення. Використовуючи явний вигляд (7) матричних елементів оператора $\hat{A}_z$ і стандартні формули звичайної теорії збурень Релея-Шредінгера [12], отримуємо власні значення $\lambda_q(R)$ і хвильові функції $\psi_{nqm}^{сфр}$ аж до членів 3-ого порядку включно:

$$\lambda_q(R) = -l(l+1) + \frac{R^2}{2n^2}\left[\frac{A_{n,l+1}B_{l+1,m}}{l+1} - \frac{A_{n,l}B_{l,m}}{l}\right] + \mathrm{O}(R^4), \tag{13}$$

$$\begin{aligned}
\psi_{nqm}^{сфр} &= \psi_{nlm}^{сф} - \frac{R}{2n}\frac{\sqrt{A_{n,l}B_{l,m}}}{l}\psi_{n,l-1,m}^{сф} + \frac{R}{2n}\frac{\sqrt{A_{n,l+1}B_{l+1,m}}}{l+1}\psi_{n,l+1,m}^{сф} - \\
&- \frac{R^2}{8n^2}\left[\frac{A_{n,l+1}B_{l+1,m}}{(l+1)^2} + \frac{A_{n,l}B_{l,m}}{l^2}\right]\psi_{nlm}^{сф} + \frac{R^2}{4n^2}\frac{\sqrt{A_{n,l-1}A_{n,l}B_{l-1,m}B_{l,m}}}{l(2l-1)}\psi_{n,l-2,m}^{сф} + \\
&+ \frac{R^2}{4n^2}\frac{\sqrt{A_{n,l+2}A_{n,l+1}B_{l+2,m}B_{l+1,m}}}{(2l+3)(l+1)}\psi_{n,l+2,m}^{сф} - \\
&- \frac{R^3}{24n^3 l(l-1)}\sqrt{\frac{A_{n-2,l}A_{n-1,l}A_{n,l}B_{l-2,m}B_{l-1,m}B_{l,m}}{(2l+1)(2l-3)(2l-1)^3}}\psi_{n,l-3,m}^{сф} + \\
&+ \frac{R^3}{24n^3}\frac{\sqrt{A_{n,l+3}A_{n,l+2}A_{n,l+1}B_{l+3,m}B_{l+2,m}B_{l+1,m}}}{(l+1)(l+2)(2l+3)}\psi_{n,l+3,m}^{сф} + \\
&+ \frac{R^3\sqrt{A_{n,l+1}B_{l+1,m}}}{16n^3(l+1)^3}\left[\frac{2(l+1)A_{n-1,l}B_{l+2,m}}{(2l+3)(2l+5)} - \frac{l^2-1}{l^2}A_{n,l}B_{l,m} + \right. \\
&\left. + 3A_{n,l+1}B_{l+1,m}\right]\psi_{n,l+1,m}^{сф} - \frac{R^3\sqrt{A_{n,l}B_{l,m}}}{16n^3 l^3}\left[\frac{2l^2 A_{n,l-1}B_{l-1,m}}{2l-1} - 3A_{n,l}B_{l,m} + \right. \\
&\left. + \frac{l(l+2)A_{n,l+1}B_{l+1,m}}{(l+1)^2}\right]\psi_{n,l-1,m}^{сф} + \mathrm{O}(R^4),
\end{aligned} \tag{14}$$

де

$$A_{n,l} = \frac{n^2 - l^2}{2l+1}, \quad B_{l,m} = \frac{l^2 - m^2}{2l-1}.$$

Відмітимо, що поправки до власних значень першого $\lambda_q^{(1)} \sim R^1$ і третього $\lambda_q^{(3)} \sim R^3$ порядків тут рівні нулю. Це пов'язано з тим, що матричний елемент $\left(A_z\right)_{ll}$ для поправок усіх непарних степенів тотожно рівний нулю.

Розглянемо тепер область великих R. Домножимо рівняння (12) на n/R і перепишемо його в наступній формі:

$$\left(\hat{A}_z - \frac{n}{R}\hat{\vec{L}}^2\right)\psi_{nqm}^{сфр} = \frac{n}{R}\lambda_q\psi_{nqm}^{сфр}. \tag{15}$$

Як видно з цього рівняння, роль оператора збурення тепер відіграє другий член $n\hat{\vec{L}}^2/R$ в лівій частині (15). В рамках теорії збурень за $n\hat{\vec{L}}^2/R$ параболічний базис набуває при великих R статус незбурених хвильових функцій, за якими слід проводити розклад (10) кулонівських сфероїдальних функцій $\psi_{nqm}^{сфр}$. Ця обставина сильно спрощує побудову теорії збурень на основі базису (3) при значних між'ядерних відстанях R. Враховуючи явний вигляд (9) матричних елементів оператора збурення $n\hat{\vec{L}}^2/R$ і використовуючи стандартну схему теорії збурень Релея-Шредінгера [12] до 3-го порядку включно, отримуємо власні значення $\lambda_q(R)$ та хвильові функції $\psi_{nqm}^{сфр}$ у вигляді асимптотичних рядів за степенями R^{-1}:

$$
\begin{aligned}
\lambda_q(R) = &-\frac{R}{n}\left(n-|m|-2n_2-1\right)-(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)-\\
&-(n-n_2)(n_2+|m|)+\frac{n}{2R}[n_2(n-|m|-n_2)(n-n_2)(n_2+|m|)-\\
&-(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)(n-n_2-1)(n_2+|m|+1)]-\\
&-\frac{n^2}{2R^2}[(2n_2-n-|m|)n_2(n-|m|-n_2)(n-n_2)(n_2+|m|)-\\
&-(2n_2-n+|m|+2)(n_2+1)(n-|m|-n_2-1)(n-n_2-1)(n_2+|m|+1)],
\end{aligned}
\tag{16}
$$

$$
\begin{aligned}
\psi^{сфр}_{nqm} = &\ \psi^{пар}_{n_1 n_2 m}-\frac{n}{2R}\sqrt{C_{n_2+1/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1-1,n_2+1,m}+\frac{n}{2R}\sqrt{C_{n_2-1/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1+1,n_2-1,m}-\\
&-\frac{n^2}{8R^2}[C_{n_2+1/2,|m|}+C_{n_2-1/2,|m|}]\psi^{пар}_{n_1 n_2 m}+\\
&+\frac{n^2}{4R^2}\Big\{\sqrt{C_{n_2-1/2,|m|}}\left[(n-n_2)(2n-2n_2-|m|-3)+2(n_2+|m|)\right]\psi^{пар}_{n_1+1,n_2-1,m}+\\
&+\sqrt{C_{n_2+1/2,|m|}}\left[(n-n_2)(2n-2n_2-|m|-3)+2(n_2+|m|+2)\right]\psi^{пар}_{n_1-1,n_2+1,m}\Big\}+\\
&+\frac{n^2}{8R^2}\left[\sqrt{C_{n_2+1/2,|m|}C_{n_2+3/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1-2,n_2+2,m}+\sqrt{C_{n_2-1/2,|m|}C_{n_2-3/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1+2,n_2-2,m}\right]-\\
&-\frac{n^3}{4R^3}[C_{n_2+1/2,|m|}(2n_2-n+|m|+2)+C_{n_2-1/2,|m|}(2n_2-n+|m|)]\psi^{пар}_{n_1 n_2 m}+\\
&+\frac{n^2}{16R^3}\sqrt{C_{n_2+1/2,|m|}}\Big[8(2n_2-n+|m|+2)^2+C_{n_2-1/2,|m|}-3C_{n_2+1/2,|m|}+\\
&+C_{n_2+3/2,|m|}\Big]\psi^{пар}_{n_1-1,n_2+1,m}-\frac{n^3}{16R^3}\sqrt{C_{n_2-1/2,|m|}}\Big[8(2n_2-n+|m|)^2+\\
&+C_{n_2+1/2,|m|}-3C_{n_2-1/2,|m|}+C_{n_2-3/2,|m|}\Big]\psi^{пар}_{n_1+1,n_2-1,m}+\\
&+\frac{n^3}{8R^3}(4n_2-2n+2m+5)\sqrt{C_{n_2+1/2,|m|}C_{n_2+3/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1-2,n_2+2,m}+\\
&+\frac{n^3}{8R^3}(4n_2-2n+2m-1)\sqrt{C_{n_2-1/2,|m|}C_{n_2-3/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1+2,n_2-2,m}+\\
&+\frac{n^3}{48R^3}\sqrt{C_{n_2+1/2,|m|}C_{n_2+3/2,|m|}C_{n_2+5/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1-3,n_2+3,m}-\\
&-\frac{n^3}{48R^3}\sqrt{C_{n_2-1/2,|m|}C_{n_2-3/2,|m|}C_{n_2-5/2,|m|}}\psi^{пар}_{n_1+3,n_2-3,m},
\end{aligned}
\tag{17}
$$

де

$$
\begin{aligned}
C_{n_2,|m|} = &\ (n_2+1/2)(n-|m|-n_2-1/2)\times\\
&\times(n-n_2-1/2)(n_2+|m|+1/2)
\end{aligned}
$$

Підкреслимо, що формули (13)-(14) та (16)-(17) отримані в третьому порядку теорії збурень. Відмітимо також, що в приведеній в [10] у першому порядку ТЗ формули для сфероїдальних функцій $\psi^{сфр}_{nqm}$ при великих R двійка у другому і третьому доданках повинна фігурувати замість чисельника в знаменнику.

4. Висновки

В даній праці проведено короткий аналіз фундаментальних базисів атома

водню, тобто базисів, які є власними функціями гамільтоніану $\hat{H}$ (2) і одного з генераторів групи прихованої симетрії $\mathrm{SO}(4)$. Проаналізовано розклади одного з фундаментальних базисів за іншим з точки зору додаткових інтегралів руху. Інформація про додаткові інтеграли руху дозволила за допомогою чисто алгебраїчної схеми теорії збурень Релея-Шредінгера обчислити сфероїдальні поправки до сферичного і параболічного базисів атома водню при малих та великих міжцентрових відстанях *R*. Показано, що в кожному порядку теорії збурень поправка до хвильової функції виражається через скінчене число базисних функцій.

СПИСОК ВИКОРИСТАНОЇ ЛІТЕРАТУРИ

1. Комаров И.В. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции / Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. – М: Наука, 1976. – 320 с.
2. Tarter C.B. Coefficients Connecting the Stark and Field-Free Wavefunctions for Hydrogen / C.B. Tarter // Journal of Mathematical Physics. – 1970. – V. 11. – Iss. 11. – P. 3192–3195.
3. Mardoyan L.G. Spheroidal analysis of the hydrogen atom / L.G. Mardoyan, G.S. Pogosyan, A.N. Sissakian, V.M. Ter-Antonyan // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 1983. – V. 16. – Iss. 4. – P. 711–728.
4. Park D. Relation between the parabolic and spherical eigenfunctions of hydrogen / D. Park // Zeitschrift fur Physik. – 1960. – V. 159. – Iss. 2. – P. 155–157.
5. Coulson C.A. Spheroidal wave functions for the hydrogen atom / C.A. Coulson, A. Joseph // Proceedings of the Physical Society. – 1967. – V. 90. – Iss. 4. – P. 887– 893.
6. Rubish V.V. Non-geometrical symmetry and separation of variables in the two-centre problem with a confinement-type potential / V.V. Rubish, V.Yu. Lazur, V. M. Dobosh, S. Chalupka, M. Salak // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2004. – V. 37. – P. 9951–9963. [doi:10.1088/0305-4470/37/42/008].
7. Lazur V.Yu. Hidden symmetry and separation of variables in the two-center problem with a confinement-type potential / V.Yu. Lazur, V. M. Dobosh, V.V. Rubish, S. Chalupka, M. Salak // Acta Physica Slovaca. –2002. – V. 52. – No.2. – P. 41 – 54.
8. Лазур В.Ю. Динамічна симетрія і відокремлення змінних у рівнянні Шредінгера з двоцентровим потенціалом утримуючого типу / В.Ю. Лазур, В.М. Добош, В.В. Рубіш, М.Д. Меліка // Український фізичний журнал. – 2002. – Т. 47. – № 1. – С. 90 – 98.
9. Лазур В.Ю. Прихована симетрія і відокремлення змінних в задачі двох центрів з потенціалом утримуючого типу / В.Ю. Лазур, В.М. Добош, В.В. Рубіш, М.Д. Меліка // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія: Математика і інформатика. – 2001. – вип. 6. – С. 82 – 94.
10. Мардоян Л.Г. Сфероидальные поправки к сферическому и параболическому базисам атома водорода / Л.Г. Мардоян, Г.С. Погосян, А.Н. Сисакян, В.М. Тер-Антонян // Теоретическая и математическая физика. – 1985. – Т. 64. – № 1. – Р. 171–175.
11. Englefield M.J. Group Theory and the Coulomb Problem / Englefield M.J. – New-York – Sydney – Toronto: Wiley-Interscience. – 1972, – 128 p.
12. Ландау Л.Д. Теоретическая физика в 10 томах. Том III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – М: Наука, 1989. – 768 с.

Стаття надійшла до редакції 20.12.2017

В.М. Хмара[1], М. Гнатич[1,2], В.Ю. Лазур[3], А.К. Рейтий[4], В.В. Рубиш[3]

[1] Институт физики университета Павла Йозефа Шафарика в Кошицах, 040 01 Кошице, ул. Парк Ангелинум, 9,Словакия

[2] Институт экспериментальной физики Словацкой Академии Наук, 040 01 Кошице, ул. Ватсонова, 47, Словакия

e-mail: hnatic@saske.sk

[3] Ужгородский национальний университет, 88000, Ужгород, ул. Волошина, 54, Украина

[4] Ужгородский национальний университет, 88000, Ужгород, ул. Университетская, 14, Украина

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

ДВУХЦЕНТРОВЫЕ ПОПРАВКИ К СФЕРИЧЕСКОМУ И ПАРАБОЛИЧЕСКОМУ БАЗИСАМ АТОМА ВОДОРОДА

Введены сферический, параболический и сфероидальный базисы атома водорода, а также приведены дополнительные интегралы движения. Вычислены сфероидальные поправки к сферическому и параболическому базисам атома водорода методами теории возмущений при больших и малых расстояниях *R* между фокусами сфероидальной системы координат. Показано, что в каждом порядке теории возмущений поправки к кулоновским сфероидальным волновым функциям выражается через конечное число базисных функций представления.

Ключевые слова: атом водорода, сферический базис, параболический базис, теория возмущений, двохцентровые поправки, дополнительный интеграл движения.

PACS 31.15.-p, 31.15.xh, 03.65.Ge

DOI: 10.24144/2415-8038.2017.42.95-103

V.M. Khmara[1], M. Hnatič[1,2], V.Yu. Lazur[3], O.K. Reity[4], V.V. Rubish[3]

[1] Institute of Physics, Pavol Jozef Šafárik University, Park Angelinum 9, 040 01 Košice, Slovak Republic

[2] Institute of Experimental Physics, Slovak Academy of Sciences, Watsonova 47, 040 01 Košice, Slovak Republic

e-mail: hnatic@saske.sk

[3] Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Voloshina Str., 54, Ukraine

[4] Uzhhorod National University, 88000, Uzhhorod, Universytetska Str., 14, Ukraine

e-mail: volodymyr.lazur@uzhnu.edu.ua

TWO-CENTER CORRECTIONS TO THE SPHERICAL AND PARABOLIC BASES OF THE HYDROGEN ATOM

Introduction. In the theoretical description of the behavior of a hydrogen-like atom in external electric and magnetic fields, it is convenient to use Coulomb spheroidal wave functions. Generally, they are defined in two limiting cases of large and small distances *R* between the foci of the spheroidal coordinate system. The Coulomb spheroidal wave functions are presented in the form of a linear combination of the Coulomb parabolic functions in the first case and the spherical functions in the second case. In order to find the expansions, which connect these bases, the standard perturbation theory as well as the additional integrals of motion were used.

Purpose. Determine the spheroidal corrections to the spherical and parabolic bases of the hydrogen atom at large and small intercenter distances *R*.
Results. The asymptotical expressions for the eigenvalues and eigenfunctions (the Coulomb spheroidal functions $\psi_{nqm}^{сфр}$) of the hydrogen atom system in the form of series in *R* for small (*R*<<1) and in R^{-1} for large (*R*>>1) internuclear distances were obtained. For this purpose, the additional integrals of motion and the standard Raeleigh-Schrödinger perturbation theory scheme within the terms of 3[rd] order were used. It is shown that in each order of perturbation theory the corrections to the Coulomb spheroidal functions are expressed in a finite number of the basic functions of the corresponding representation.
Conclusion. In this paper, a brief analysis of the fundamental bases of the hydrogen atom, which are the eigenfunctions of its Hamiltonian and of the one of the generators of the hidden symmetry group SO (4) is carried out. The expansion of the one of the fundamental bases with respect to another one was analyzed in terms of additional integrals of motion. The information about additional integrals of motion allowed to calculate the spheroidal corrections to the spherical and parabolic bases of the hydrogen atom at small and large intercenter distances R using a purely algebraic scheme of the Rayleigh-Schrödinger perturbation theory.
Keywords: hydrogen atom, spherical basis, parabolic basis, perturbation theory, two-center corrections, additional integral of motion.
PACS NUMBER: 31.15.-p, 31.15.xh, 03.65.Ge

REFERENCES

1. Komarov, I.V., Ponomarev L.I., Slavyanov S.Yu. (1976), Spheroidal and Coulomb spheroidal functions [Sferoidalnye i kulonovskie sferoidalnye funktsii], Nauka, Moskow, 320 p.
2. Tarter, C.B (1970), "Coefficients Connecting the Stark and Field-Free Wavefunctions for Hydrogen", Journal of Mathematical Physics, V. 11, Iss. 11, pp. 3192–3195.
3. Mardoyan, L.G., Pogosyan, G.S., Sissakian, A.N., Ter-Antonyan, V.M. (1983), "Spheroidal analysis of the hydrogen atom", Journal of Physics A: Mathematical and General, V. 16, Iss. 4, pp. 711–728.
4. Park, D. (1960), "Relation between the parabolic and spherical eigenfunctions of hydrogen", Zeitschrift fur Physik, V. 159, Iss. 2, pp. 155–157.
5. Coulson, C.A., Joseph, A. (1967), "Spheroidal wave functions for the hydrogen atom", Proceedings of the Physical Society, V. 90, Iss. 4, pp. 887– 893.
6. Rubish, V.V., Lazur, V.Yu., Dobosh, V.M., Chalupka, S., Salak, M. (2004), "Non-geometrical symmetry and separation of variables in the two-centre problem with a confinement-type potential", Journal of Physics A: Mathematical and General, V. 37, pp. 9951–9963. [doi:10.1088/0305-4470/37/42/008].
7. Lazur, V.Yu., Dobosh, V.M., Rubish, V.V., Chalupka, S., Salak, M. (2002), "Hidden symmetry and separation of variables in the two-center problem with a confinement-type potential", Acta Physica Slovaca, V. 52, No.2, pp. 41 – 54.
8. Lazur, V.Yu., Dobosh, V.M., Rubish, V.V., Melika M.D. (2002), "Dynamical symmetry and separation of variables the Schrodinger equation with a two-center confinement-type potential" ["Dynamichna symetriia i vidokremlennia zminnykh u rivnianni Shredinhera z dvotsentrovym potentsialom utrymuiuchoho typu"], Ukrainian Journal of Physics [Ukrainskyi fizychnyi zhurnal], V. 47, No. 1, pp. 90 – 98.
9. Lazur, V.Yu., Dobosh, V.M., Rubish, V.V., Melika M.D. (2001), "Hidden symmetry and separation of variables in the two-center problem with a confinement-type potential" ["Prykhovana symetriia i vidokremlennia zminnykh v zadachi dvokh tsentriv z potentsialom utrymuiuchoho typu"], Scientific bulletin of Uzhhorod university. Series of

Mathematics and Informatics [Naukovyi visnyk Uzhhorodskoho universytetu. Seriia: Matematyka i informatyka], Iss. 6, pp. 82 – 94.

10. Mardoyan, L.G., Pogosyan, G.S., Sissakyan, A.N., Ter-Antonyan, V.M. (1985), "Spheroidal corrections to the spherical and parabolic bases of hydrogen atom" ["Sferoidalnye popravki k sfericheskomu i parabolicheskomu bazisam atoma vodoroda"], Theoretical and Mathematical Physics [Teoreticheskaia i matematicheskaia fizika], V. 64, No. 1. pp. 171–175.
11. Englefield, M.J. (1972), Group Theory and the Coulomb Problem, Wiley-Interscience, New-York – Sydney – Toronto, 128 p.
12. Landau, L.D., Lifshits, E.M. (1989), Theoretical physics in 10 volumes. V. III. Quantum Mechanics (Non-Relativistic Theory) [Teoreticheskaia fizika v 10 tomah. Tom III. Kvantovaia mehanika (nerelyativistskaia teoriia)], Nauka, Moskow, 768 p.