MÓDOSÍTOTT EGYCENTRUMÚ KÖLCSÖNHATÁSI INTEGRÁLOK SZÁMÍTÁSA

ARATÓ MÁTYÁS és FREUD GÉZA

ÖSSZEFOGLALÁS

Szerzők módszert ismertetnek az

$$I_{m,n}\,(r_0) = \iint \frac{r_1^m r_2^n}{r_{12}+r_0}\, e^{-(r_1+r_2)}\, dT_1\, dT_2$$

integrálok számítására és kiszámítják azokat $m, n = 0, 1, 2, 3$ esetén.

Bevezetés

Ha két elektron egy Q pontszerű töltés Coulomb-terében mozog, a két elektron kölcsönhatási energiáját a kvantummechanikai perturbációszámítás elsőrendű közelítésében számolva

$$\iint \frac{R_1(r_1)\, R_2(r_2)\, e^{-\alpha(r_1+r_2)}}{r_{12}}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{1}$$

alakú integrálokra jutunk (l. pl. [1] 72—73. o.), ahol R_1 és R_2 kis fokszámú polinomok. r_1, r_2, r_{12} jelentése az ábráról leolvasható, a $d\tau_1$ és $d\tau_2$ szerinti térfogati integrálást külön-külön az egész háromdimenziós térre kell kiterjeszteni.

Hasonlósági transzformációval elérhető, hogy $\alpha = 1$ legyen, és ekkor (1) az

$$I_{mn}(0) = \iint \frac{r_1^m r_2^n e^{-(r_1+r_2)}}{r_{12}}\, d\tau_1\, d\tau_2 \tag{2}$$

alakú integrálok lineáris kifejezésére bontható. Az ilyen integrálok számítását először *R. H. Hassé* [2] végezte el és alkalmazta.

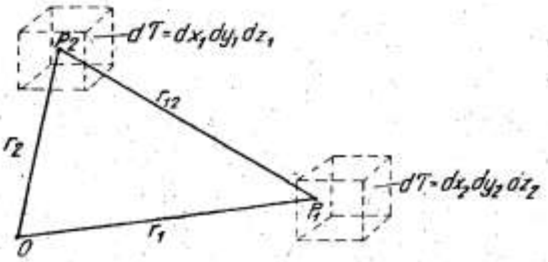
Hassé eredményét azóta általánosították arra az esetre, ha a két elektron 2, vagy 3 pontszerű mag terében mozog; ennek a kérdésnek kiterjedt irodalma van, amely pl. *H. J. Kopineck* [3] dolgozatában (amely az eddig ismert legáltalánosabb eredmény) megtalálható.

Román Pál fizikus egy kutatási problémájával kapcsolatban az Eötvös

Loránd Tudományegyetem Fizikai Intézete Intézetünkhöz fordult azzal a kéréssel, hogy adjunk számítási eljárást az alábbi módosított integrálokra:

$$I_{mn}(r_0) = \iint \frac{r_1^m r_2^n e^{-(r_1+r_2)}}{r_{12} + r_0} d\tau_1 d\tau_2 , \tag{3}$$

ahol m és n egész számok.



1. ábra

A konkrét fizikai problémánál r_0 10^{-5} nagyságrendű állandó.

A szerzőknek sikerült olyan eljárást kidolgozniok, melynek segítségével (3) előállítható, mint egy finit analitikus kifejezés és egy jelentéktelen korrekciót eredményező integrál összege. Az integrálalakban előállított korrekciós tag nagyságrendje $r_0^{m+n+5} \log 1/r_0$. r_0 kis értékei esetén $I_{mn}(r_0)$ nagy pontossággal közelíthető 3–4 tagú kifejezésekkel és ezekre a hibabecslést $0 \leqq r_0 \leqq 10^{-4}$ esetén elvégeztük. Miután eredményeink elméleti fizikai számítások szempontjából nem látszanak érdektelennek, azokat ezúton kívánjuk a kutatók számára hozzáférhetővé tenni.

A közölt számításokat Arató Mátyás IV. éves alkalmazott matematikaszakos hallgató végezte nyári termelési gyakorlata során Intézetünkben, Freud Géza irányításával.

A számítási módszer

Vezessük be az

$$s = r_1 + r_2 , \quad t = r_1 - r_2 , \quad u = r_{12} .$$

Hilleraas-féle koordinátákat. (V. ö. E. A. Hilleraas [4], vagy Gombás Pál loc. cit. [1], 166–167. old.) Ebben a koordinátarendszerben

$$I_{mn}(r_0) = \frac{\pi^2}{2^{m+n}} \int_0^\infty e^{-s} ds \int_0^s \frac{u\, du}{u + r_0} \int_{-u}^{+u} (s-t)^{m+1} (s+t)^{n+1} dt \tag{4}$$

(4)-ben a t és u szerinti integrálás közvetlenül elvégezhető:

$$\int_0^s \frac{u\, du}{u + r_0} \int_{-u}^{+u} (s-t)^{m+1} (s+t)^{n+1} dt = \sum_{k=0}^{N} [a_k + b_k \log (r_0 + s)] \tag{5}$$

ahol a_k és b_k az r_0 egyszerű alakú függvényei. Ilymódon

$$
\begin{aligned}
I_{mn}(r_0) &= \int_0^{\infty} \sum_{k=0}^{N} [a_k + b_k \log(s + r_0)]\, s^k e^{-s}\, ds = \\
(6) \qquad &= \sum_{k=0}^{N} k!\, a_k + e^{r_0} \int_{r_0}^{\infty} \sum_{k=0}^{N} b_k (x - r_0)^k \log x\, e^{-x}\, dx = \\
&= \sum_{k=0}^{N} k!\, a_k + e^{r_0} \int_{r_0}^{\infty} \sum_{k=0}^{N} c_k x^k \log x\, e^{-x}\, dx .
\end{aligned}
$$

Ahol a c_k-k, mint az r_0 függvényei, a

$$
(7) \qquad \sum_{k=0}^{N} b_k (x - r_0)^k \equiv \sum_{k=0}^{N} c_k x^k
$$

azonosságból számíthatók. Most már csak azt kell észrevennünk, hogy

$$
(8) \qquad \int_{r_0}^{\infty} e^{-x} x^k \log x\, dx = \Gamma'(k+1) - \int_0^{r_0} e^{-x} x^k \log x\, dx ,
$$

amit (6)-ba helyettesítve:

$$
(9) \qquad I_{mn}(r_0) = \sum_{k=0}^{N} k!\, a_k + e^{r_0} \sum_{k=0}^{N} \Gamma'(k+1)\, c_k - e^{r_0} \int_0^{r_0} \left(\sum_{k=0}^{N} c_k x^k \right) e^{-x} \log x\, dx .
$$

Vizsgáljuk meg most közelebbről az (5) kettős integrált:

$$
Q(u,s) = \int_{-u}^{+u} (s - t)^{m+1} (s + t)^{n+1}\, dt
$$

s-ben és u-ban homogén $m + n + 3$-adfokú polinom, tehát

$$
\frac{uQ(u,s)}{u + r_0} = \frac{-r_0 Q(-r_0, s)}{u + r_0} + R(u,s) ,
$$

ahol $R(u, s)$ u-ban és s-ben polinom. Ilymódon (5) jobboldalán

$$
\sum_{k=0}^{N} b_k s^k = -r_0\, Q(-r_0, s)
$$

r_0-ban és s-ben homogén $N = m + n + 4$-edfokú polinom. Tekintettel (7)-re, $\sum_{k=0}^{N} c_k x^k$ is r_0-ban és x-ben homogén $m + n + 4$-edfokú polinom lesz, tehát az

$$\int_0^{r_0} \left(\sum_{k=0}^{N} c_k x^k \right) e^{-x} \log x \, dx$$

integrál nagyságrendje $r_0^{m+n+5} \log 1/r_0$.

Számítási eredmények

A) *Pontos képletek*

$$I_{00}(r_0) = \frac{\pi^2}{3} \Big\{ 60 - 32 r_0 - 2 r_0^2 (1 + 6 \log r_0) + 2 r_0^3 (1 + r_0 \log r_0) +$$
$$+ r_0^2 e^{r_0} [6\Gamma'(3) - 12 r_0 \Gamma'(2) + 4 r_0^2 \Gamma'(1)] -$$
$$- r_0^2 e^{r_0} \int_0^{r_0} (6x^2 - 12 r_0 x + 4 r_0^2) \, e^{-x} \log x \, dx \Big\}$$

$$I_{11}(r_0) = \frac{\pi^2}{60} \Big\{ 7920 - 2944 \, r_0 - 24 r_0^2 \left(\frac{17}{2} + 30 \log r_0 \right) + 108 r_0^3 +$$
$$+ 2 r_0^4 (3 + 20 \log r_0) - 6 r_0^5 - 6 r_0^6 \log r_0 + r_0^2 e^{r_0} [30 \Gamma'(5) - 120 \Gamma'(4) \, r_0 +$$
$$+ 160 \Gamma'(3) \, r_0^2 - 80 \Gamma'(2) \, r_0^3 + 16 \Gamma'(1) \, r_0^4] -$$
$$- r_0^2 e^{r_0} \int_0^{r_0} (30 x^4 - 120 r_0 x^3 + 160 r_0^2 x^2 - 80 r_0^3 x + 16 r_0^4) \, e^{-x} \log x \, dx \Big\}$$

$$I_{22}(r_0) = \frac{\pi^2}{560} \Big\{ 937440 - 270336 r_0 - 6! \, r_0^2 \left(\frac{157}{6} + 70 \log r_0 \right) + 58 \cdot 5! \, r_0^3 +$$
$$+ 4! \, r_0^4 \left(\frac{37}{2} + 70 \log r_0 \right) - 232 r_0^5 - (10 + 84 \log r_0) \, r_0^6 + 10 r_0^7 +$$
$$+ 10 r_0^8 \log r_0 + r_0^2 e^{r_0} [70 \Gamma'(7) - 420 \Gamma'(6) \, r_0 + 980 \Gamma'(5) \, r_0^2 -$$
$$- 1120 \Gamma'(4) \, r_0^3 + 672 \Gamma'(3) \, r_0^4 - 224 \Gamma'(2) \, r_0^5 + 32 \Gamma'(1) \, r_0^6] -$$
$$- r_0^2 e^{r_0} \int_0^{r_0} (70 x^6 - 420 r_0 x^5 + 980 r_0^2 x^4 - 1120 r_0^3 x^3 + 672 r_0^4 x^2 -$$
$$- 224 r_0^5 x + 32 r_0^6) \cdot e^{-x} \log x \, dx \Big\}$$

$$I_{10}(r_0) = \frac{\pi^2}{3} \Big\{ 150 - 64 r_0 - 3 r_0^2 (1 + 6 \log r_0) + 2 r_0^3 + r_0^4 \log r_0 +$$
$$+ r_0^2 e^{r_0} [3 \Gamma'(4) - 9 r_0 \Gamma'(3) + 8 r_0^2 \Gamma'(2) - 2 r_0^3 \Gamma'(1)] -$$
$$- r_0^2 e^{r_0} \int_0^{r_0} [3x^3 - 9x^2 r_0 + 8 x r_0^2 - 2 r_0^3] \, e^{-x} \log x \, dx \Big\}$$

$$I_{20}(r_0) = \frac{\pi^2}{10} \Big\{ 1680 - 576 r_0 - 6 r_0^2 (1 + 20 \log r_0) + 2 r_0^3 - r_0^4 + r_0^5 + r_0^6 \log r_0 +$$

$$+ r_0^2 e^{r_0} [5\Gamma'(5) - 20 r_0 \Gamma'(4) + 30 r_0^2 \Gamma'(3) - 20 r_0^3 \Gamma'(2) + 4 r_0^4 \Gamma'(1)] -$$

$$- r_0^2 e^{r_0} \int_0^{r_0} [5x^4 - 20 r_0 x^3 + 30 r_0^2 x^2 - 20 r_0^3 x + 4 r_0^4] \, e^{-x} \log x \, dx \Big\}$$

$$I_{21}(r_0) = \frac{\pi^2}{60} \Big\{ 27720 - 8832 r_0 - 30 r_0^2 (17 + 60 \log r_0) + 216 r_0^3 +$$

$$+ 3 r_0^4 (3 + 20 \log r_0) - 6 r_0^5 - 3 r_0^6 \log r_0 +$$

$$+ r_0^2 e^{r_0} [15\Gamma'(6) - 75 r_0 \Gamma'(5) + 140 r_0^2 \Gamma'(4) - 129 r_0^3 \Gamma'(3) + 48 r_0^4 \Gamma'(2) -$$

$$- 8 r_0^5 \Gamma'(1)] - r_0^2 e^{r_0} \int_0^{r_0} [15 x^5 - 75 r_0 x^4 + 140 r_0^2 x^3 - 120 r_0^3 x^2 + 48 r_0^4 x -$$

$$- 8 r_0^5] \, e^{-x} \log x \, dx \Big\}.$$

A szerzők $I_{mn}(r_0)$-t $m = 3$, $n = 0, 1, 2, 3$ esetre is kiszámították. Ezekre az értékekre azonban csak a közelítő képleteket közöljük. Amennyiben a pontos kifejezésre is szükség mutatkoznék, azok közvetlen megkeresésre az Intézet útján a kutatók rendelkezésére állnak.

B) *Közelítő képletek*

ha $0 < r_0 < 10^{-4}$

$$I_{00}(r_0) = \frac{\pi^2}{3} \left\{ 60 - 32 r_0 - [2 - 6\Gamma'(3)] \, r_0^2 - 12 r_0^2 \log r_0 \right\} + \varepsilon_{00}(r_0) \, ; \quad |\varepsilon_{00}(r_0)| < 4 \cdot 10^{-11}$$

$$I_{11}(r_0) = \frac{\pi^2}{60} \left\{ 7920 - 2944 r_0 + [30\Gamma'(5) - 204] \, r_0^2 - 720 r_0^2 \log r_0 \right\} + \varepsilon_{11}(r_0) \, ; \quad |\varepsilon_{11}(r_0)| < 10^{-10}$$

$$I_{22}(r_0) = \frac{\pi^2}{560} \left\{ 937440 - 270336 r_0 - 5! \, [157 + 420 \log r_0] \, r_0^2 + 70\Gamma'(7) \, r_0^2 \right\} + \varepsilon_{22}(r_0) \, ; \quad |\varepsilon_{22}(r_0)| < 4 \cdot 10^{-10}$$

$$I_{10}(r_0) = \frac{\pi^2}{3} \left\{ 150 - 64 r_0 - [3 - 3\Gamma'(4)] \, r_0^2 - 18 r_0^2 \log r_0 \right\} + \varepsilon_{10}(r_0) \, ; \quad |\varepsilon_{10}(r_0)| < 10^{-11}$$

$$I_{20}(r_0) = \frac{\pi^2}{10} \left\{ 1680 - 576 r_0 + [5\Gamma'(5) - 6] \, r_0^2 - 120 r_0^2 \log r_0 \right\} + \varepsilon_{20}(r_0) \, ; \quad |\varepsilon_{20}(r_0)| < 4 \cdot 10^{-11}$$

$$I_{21}(r_0) = \frac{\pi^2}{60} \left\{ 27720 - 8832 r_0 + [15\Gamma'(6) - 510] \, r_0^2 - 1800 r_0^2 \log r_0 \right\} + \varepsilon_{21}(r_0) \, ; \quad |\varepsilon_{21}(r_0)| < 10^{-10}$$

$$I_{30}(r_0) = \frac{\pi^2}{120} \left\{ 42840 - 13344 r_0 + [15\Gamma'(6) - 330] \, r_0^2 - 1800 r_0^2 \log r_0 \right\} + \varepsilon_{30}(r_0) \, ; \quad |\varepsilon_{30}(r_0)| < 2 \cdot 10^{-11}$$

$$I_{31}(r_0) = \frac{\pi^2}{840} \left\{ 1698480 - 460032 r_0 + [105\Gamma'(7) - 14580] r_0^2 - 75600 r_0^2 \log r_0 \right\} +$$
$$+ \varepsilon_{31}(r_0) \; ; \; |\varepsilon_{31}(r_0)| < 4 \cdot 10^{-10}$$

$$I_{32}(r_0) = \frac{\pi^2}{560} \left\{ 4218480 - 1081344 r_0 - 7! \left[\frac{157}{12} + 35 \log r_0 \right] r_0^2 + 35\Gamma'(8) r_0^2 \right\} +$$
$$+ \varepsilon_{32}(r_0) \; ; \; |\varepsilon_{32}(r_0)| < 10^{-9}$$

$$I_{33}(r_0) = \frac{\pi^2}{10080} \left\{ 350179200 - 83017728 r_0 - 8! r_0^2 \left[\frac{3387}{24} + 315 \log r_0 \right] + \right.$$
$$\left. + 315 r_0^2 \Gamma'(9) \right\} + \varepsilon_{33}(r_0) \; ; \; |\varepsilon_{33}(r_0)| < 4 \cdot 10^{-9}$$

A Γ-függvény differenciálhányadosai a

$$\Gamma'(1) = -C = -0{,}577215664901532\ldots$$

és

$$\Gamma'(n+1) = n! \left[\Gamma'(1) + 1 + \frac{1}{2} + \cdots + \frac{1}{n} \right]$$

képletekből számíthatók. (V. ö. N. Nielsen [5] 9. és 15. oldal.)

IRODALOM

1. *P. Gombás:* Theorie und Lösungsmethoden des Mehrteilchenproblems der Wellenmechanik. Verl. Birkhäuser, Basel, 1950.
2. *H. R. Hassé:* The polarisability of the helium atom. Proc. Cambr. Phil. Soc. 26 (1930).
3. *H. J. Kopineck:* Austausch- und andere Zweizentrenintegrale mit 2s und 2p-Funktionen. Zeitschrift für Naturforschung. 5a (1950), 420—431 old. és 6a (1951) 177—183. old.
4. *E. A. Hylleraas:* Neue Berechnung der Energie des Heliums im Grundzustande sowie des tiefsten Terms von Orto-Helium. Zeitschrift für Physik, 54(1929) 337—366 o.

N. Nielsen: Handbuch der Theorie der Gammafunktion. Verl. Teubner, Leipzig 1906.

ИСЧИСЛЕНИЕ МОДИФИЦИРОВАННЫХ ИНТЕГРАЛОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ОДНИМ ЦЕНТРОМ

М. АРАТО И Г. ФРАЙД

Резюме

Авторы знакомят с методом для исчисления интегралов типа

$$I_{m,n}(r_0) = \iint \frac{r_1^m r_2^n}{r_{12} + r_0} e^{-(r_1 + r_2)} d\tau_1 \, d\tau_2$$

и вычисляют их при $m, n = 0, 1, 2, 3$.