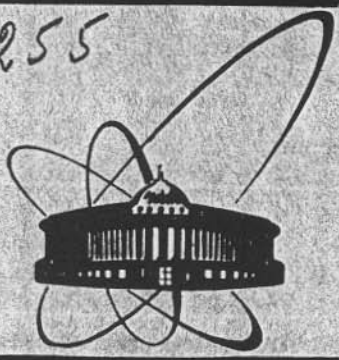


83-899

ЛЯП

M-255



Объединенный
Институт
Ядерных
Исследований
Дубна

1703/84

P2-83-899

Л.Г.Мардоян, Г.С.Погосян, А.Н.Сисакян,
В.М.Тер-Антонян

СКРЫТАЯ СИММЕТРИЯ,
РАЗДЕЛЕНИЕ ПЕРЕМЕННЫХ
И МЕЖБАЗИСНЫЕ РАЗЛОЖЕНИЯ
В ДВУМЕРНОМ АТОМЕ ВОДОРОДА

Направлено в "Journal of Physics A"

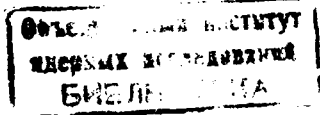
1983

ВВЕДЕНИЕ

До последнего времени при работе с системами, наделенными скрытой симметрией, пользовались в основном двумя методами ^{/1,2/}; первый из них состоит в перефразировке уравнения Шредингера и придании ему такого вида, в котором до того скрытая симметрия становится явной, а второй - в построении интегралов движения, выступающих в роли генераторов группы скрытой симметрии.

В этой работе мы хотим обратить внимание на глубокую связь скрытой симметрии с разделяемостью переменных в уравнении Шредингера. Осознание этой связи сравнительно недавно привело к интенсивному применению метода разделения переменных к уравнениям математической физики и дало значительное количество новых результатов в этой области математики ^{/3/}. Метод разделения переменных проще упомянутых выше двух методов. В его рамках собственные значения генераторов группы скрытой симметрии приобретают смысл констант разделения, а собственные функции, общие для гамильтониана и каждого из генераторов, являются решениями, или, как мы их называем, фундаментальными базисами, уравнения Шредингера в различных координатах. В отсутствие внешних полей фундаментальные базисы равноценны, и выбор между ними может быть произведен только из соображений удобства. Включение внешнего поля приводит обычно к нарушению скрытой симметрии гамильтониана невозмущенной системы, и если переменные в возмущенной задаче все еще разделяются, то соответствующий этим координатам базис выделяется среди остальных и приобретает смысл правильного нулевого приближения в задаче со случайно вырожденным энергетическим спектром. Может оказаться, что фундаментальные базисы не исчерпывают всех получающихся в рамках метода разделения переменных решений уравнения Шредингера и внешнее поле в зависимости от своей собственной симметрии выделяет именно этот базис в качестве правильного нулевого приближения.

В теории систем со скрытой симметрией часто приходится иметь дело с матричными элементами операторов по одному из базисов системы. Обычно эти операторы являются линейными комбинациями степеней генераторов группы скрытой симметрии. Вычисление таких матричных элементов может быть порой проведено лишь в том случае, когда известны разложения базиса, соответствующего матричному элементу, по каждому из фундаментальных базисов. В связи со сказанным проблема отыскания межбазисных разложений стала неотъемлемой частью теории скрытой симметрии и представляет



Большой интерес как для чистой математики^{/3/}, так и для физических приложений^{/4,5/}.

В широком смысле проблема межбазисных разложений может быть сформулирована двумя способами. В первой постановке проблемы предполагаются известными базисы и ищутся коэффициенты разложения. При такой постановке наиболее прямой путь вычисления коэффициентов межбазисных разложений заключается во взятии интеграла перекрытия между базисами. Однако эти интегралы, как правило, сложны, и поэтому приходится прибегать к другим методам^{/6-8/}. Во второй постановке проблемы явный вид разлагаемого базиса неизвестен. В этом случае очень продуктивен метод разделения переменных. Ниже мы столкнемся с обеими постановками проблемы на примере двумерного атома водорода, выбранного нами в качестве своеобразного полигона для испытания возможностей метода разделения переменных. Такой выбор объясняется простотой системы, ее причастностью к широкому кругу вопросов, связанных с исследованием поверхностных явлений в конденсированных средах^{/9/}, со спектроскопией ридберговских атомов^{/10/} и, конечно, не в последнюю очередь, - с высокой разделяемостью переменных, вследствие которой двумерный атом водорода обладает четырьмя базисами, из которых три являются фундаментальными.

Работа построена следующим образом. В первом разделе с помощью метода разделения переменных устанавливается группа скрытой симметрии $O(3)$ двумерного атома водорода в области дискретного спектра. В разделе 2 вычисляются коэффициенты, определяющие взаимные разложения между полярным и двумя параболическими базисами. Показывается, что все эти коэффициенты с точностью до фазового множителя совпадают с d -функциями Вигнера от прямого угла. В третьем разделе методом разделения переменных установлен интеграл движения, специфический для эллиптического базиса, в четвертом с помощью этого интеграла строится эллиптический базис - сначала в виде суперпозиции полярных базисов, затем - в виде суперпозиции параболических. В пятом разделе исследуются полярный ($R \rightarrow 0$) и параболический ($R \rightarrow \infty$) пределы эллиптического базиса.

1. ФУНДАМЕНТАЛЬНЫЕ БАЗИСЫ ДВУМЕРНОГО АТОМА ВОДОРОДА

Информация о группе скрытой симметрии $O(3)$ двумерного атома водорода в области дискретного спектра представлена в табл.1. Генераторы этой группы обозначены через L , \hat{P} и \hat{K} . Общие собственные функции гамильтониана \hat{H} и каждого из генераторов L , \hat{P} и \hat{K} , то есть фундаментальные базисы двумерного атома водорода, имеют смысл решений уравнения Шредингера, полученных методом разделения переменных в полярной и двух повернутых друг относительно друга на прямой угол параболических координатах. Полярный базис^{/11/} удобен для описания спектроскопии атома, параболиче-

Генераторы группы скрытой симметрии O(3) и фундаментальные базисы.

$x = r \cos \varphi$ $y = r \sin \varphi$	$0 \leq r < \infty$ $0 \leq \varphi < 2\pi$	$\hat{X} \Psi_{Nm} = E_N \Psi_{Nm}$ $\hat{L} \Psi_{Nm} = m \Psi_{Nm}$	$\Psi_{Nm} = (\frac{2\omega}{\pi})^{1/2} \frac{\sqrt{ N-m !} (2\omega r)^{ m } / (2 m)! e^{-\omega r} F(N-m , 2 m +1, 2\omega r) e^{im\varphi}}{\sqrt{(N- m)! (2\omega r)^{ m } / (2 m)!}} e^{-\omega r} F(N-m , 2 m +1, 2\omega r) e^{im\varphi}$ $\hat{L} = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}; -N \leq m \leq N$ и целое, $\omega = \sqrt{-2E_N}$
$x = \frac{u^2 - v^2}{2}$ $y = uv$	$0 \leq u < \infty$ $-\infty < v < \infty$	$\hat{X} \Psi_{Np} = E_N \Psi_{Np}$ $\hat{P} \Psi_{Np} = p \Psi_{Np}$	$\Psi_{Np} = (\frac{2}{\pi})^{1/2} \frac{e^{-\frac{1}{2}(u^2+v^2)}}{\sqrt{2^{2N} (N+p)! (N-p)!}} H_{N,p}(\sqrt{\omega} u) H_{N-p}(\sqrt{\omega} v)$ $\hat{P} = \frac{1}{2\omega} \frac{1}{u+v} [u^2 \frac{\partial^2}{\partial v^2} - v^2 \frac{\partial^2}{\partial u^2} + 2(u^2 - v^2)]$
$x = \bar{u} \bar{v}$ $y = \frac{\bar{u}^2 - \bar{v}^2}{2}$	$0 \leq \bar{u} < \infty$ $-\infty < \bar{v} < \infty$	$\hat{X} \Psi_{Nk} = E_N \Psi_{Nk}$ $\hat{K} \Psi_{Nk} = k \Psi_{Nk}$	Ψ_{Nk} и \hat{X} получаются из Ψ_{Np} и \hat{P} заменой $p \rightarrow k, u \rightarrow \bar{u}, v \rightarrow \bar{v}$, p и $k \in \mathbb{N}, n$ и целые.

ские^{/12/} - для вычислений, проводимых при исследовании эффекта Штарка, причем первая строка таблицы соответствует случаю, когда внешнее однородное электрическое поле направлено по оси x , вторая - по оси y . Все фундаментальные базисы при данном N выбраны ортонормированными по второму квантовому индексу. Генераторы \hat{L}, \hat{P} и \hat{K} коммутируют с гамильтонианом \hat{H} и удовлетворяют коммутационным соотношениям $\{\hat{P}, \hat{K}\} = i\hat{L}, \{\hat{L}, \hat{P}\} = i\hat{K}$ и $\{\hat{K}, \hat{L}\} = i\hat{P}$. Вид генераторов \hat{L}, \hat{P} и \hat{K} определяется в рамках метода разделения переменных следующим образом. В кулоновских единицах ($\hbar = m = e = 1$) двумерный атом водорода описывается уравнением Шредингера

$$\hat{H}\psi = \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + \frac{1}{\sqrt{x^2 + y^2}} \right\} \psi = E\psi.$$

В параболических координатах u, v это уравнение принимает вид

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial v^2} + [4 - \omega^2(u^2 + v^2)] \psi = 0.$$

Переменные в последнем уравнении разделяются, а само оно переходит в два обыкновенных дифференциальных уравнения:

$$\left[\frac{d^2}{du^2} + 2 - \omega^2 u^2 \right] \psi_1(u) = -\beta \psi_1(u),$$

$$\left[\frac{d^2}{dv^2} + 2 - \omega^2 v^2 \right] \psi_2(v) = \beta \psi_2(v),$$

в которых через β обозначена константа разделения. Исследование этих уравнений тем же методом, который используется в задаче

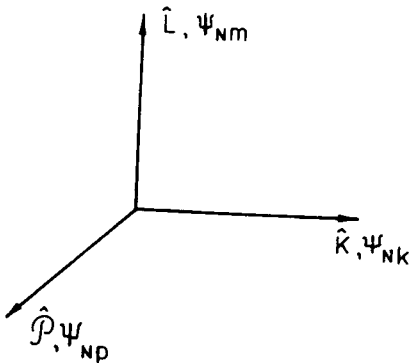
о трехмерном атоме водорода в параболических координатах /13/, показывает, что

$$E_N = -\frac{2}{(2N+1)^2}, \quad N = 0, 1, 2, \dots, \quad \beta = 2\omega p, \quad -N \leq p \leq N,$$

то есть параболический базис $\psi_{Np}(u, v)$ определяется двумя квантовыми числами. Исключив теперь из приведенных выше обыкновенных дифференциальных уравнений энергетический параметр ω^2 , получим уравнение $\hat{P}\psi_{Np}(u, v) = p\psi_{Np}(u, v)$. Аналогично решаются проблемы собственных функций и собственных значений для полларного и второго параболического базиса и получаются остальные результаты, приведенные в табл.1, которые подтверждают высказанное во введении утверждение о том, что метод разделения переменных является хорошим приемом для отыскания группы скрытой симметрии гамильтониана.

2. РАЗЛОЖЕНИЯ МЕЖДУ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫМИ БАЗИСАМИ

Полученные выше фундаментальные базисы являются альтернативными описаниями двумерного атома водорода, и произвольное состояние с данной энергией может быть представлено в виде разложения по любому из этих базисов. В частном случае разлагаемое состояние может быть также фундаментальным. В этом разделе речь пойдет о разложениях именно такого типа. Им можно придать геометрический смысл, взяв в пространстве группы скрытой симметрии $O(3)$ декартову систему координат, каждой оси которой ставится в соответствие свой фундаментальный базис /см.рисунок/. Из коммутационных соотношений между L , \hat{P} и \hat{K} и самого смысла фундаментального базиса следует, что разложения между этими базисами могут быть интерпретированы как повороты на прямой угол в соответствующих координатных плоскостях. Так как повороты плоские, то коэффициенты разложений с точностью до фазовых множителей должны совпадать с d -функцией Вигнера от прямого угла.



К сожалению, вид фазовых множителей перед d -функциями невозможно получить на основе простых геометрических рассуждений. Перед тем как перейти к прямому вычислению, подтверждающему описанную картину, приведем окончательные результаты /табл.2/. В первом столбце и верхней строке этой таблицы представлены фундаментальные базисы двумерного атома водорода, а в остальных - коэффициенты межбазисных разложений. Речь идет о разложениях базисов левого

Таблица 2

Кoeffициенты фундаментальных межбазисных разложений

	$\Psi_{Nm}(r, \varphi)$	$\Psi_{NP}(u, v)$	$\Psi_{Nk}(\bar{u}, \bar{v})$
$\Psi_{Nm}(r, \varphi)$	1	$(i)^{N-p} d_{pm}^N(\pi/2)$	$(i)^{N+k+m} d_{km}^N(\pi/2)$
$\Psi_{NP}(u, v)$	$(i)^{N-p} d_{pm}^N(\pi/2)$	1	$d_{kp}^N(\pi/2)$
$\Psi_{Nk}(\bar{u}, \bar{v})$	$(i)^{N+k+m} d_{km}^N(\pi/2)$	$d_{kp}^N(\pi/2)$	1

столбца по базисам верхней строки. Эти разложения включают в себя суммирование по квантовым числам p , k и m соответственно. Начнем с разложения первого параболического базиса по полярному:

$$\psi_{NP}(u, v) = \sum_{m=-N}^N V_{pm}^N \psi_{Nm}(r, \phi). \quad /2.1/$$

Легко убедиться, что интеграл перекрытия между этими базисами достаточно сложен для вычисления. Гораздо эффективнее следующий прием. При больших Γ базисы значительно упрощаются и содержат Γ в одной и той же степени. Поэтому в этом пределе зависимости от Γ в обеих частях разложения /2.1/ сокращаются, и условие ортонормируемости функций $e^{im\phi}$ приводит к результату

$$V_{pm}^N = \frac{(-1)^{N-m}}{2\pi} \sqrt{\frac{(N+m)!(N-m)!}{(N+p)!(N-p)!}} \int_0^{2\pi} (1+\cos\phi)^{\frac{N+p}{2}} (1-\cos\phi)^{\frac{N-p}{2}} e^{im\phi} d\phi.$$

Вычисляя этот интеграл, сравнивая ответ для V_{pm}^N с известной из теории углового момента ^{14/} формулой

$$d_{M, M'}^J\left(\frac{\pi}{2}\right) = \frac{(-1)^{M-M'}}{2^J} \sqrt{\frac{(J+M)!(J-M)!}{(J+M')!(J-M')!}} \sum (-1)^k \binom{J+M'}{k} \binom{J-M'}{k+M-M'}$$

и учитывая соотношение симметрии $d_{M, M'}^J(\beta) = (-1)^{M-M'} d_{M', M}^J(\beta)$, приходим к выводу, что разложение /2.1/ имеет вид

$$\psi_{Np}(u, v) = (-i)^{N-p} \sum_{m=-N}^N d_{p,m}^N \left(\frac{\pi}{2}\right) \psi_{Nm}(r, \phi), \quad /2.2/$$

что соответствует данным табл.2. Функции Вигнера $d_{pm}^N(\pi/2)$ достаточно полным образом протабулированы, и поэтому нет проблем в использовании разложения /2.2/ при конкретных значениях квантовых чисел N и p . Перейдем теперь к разложению второго параболического базиса по первому:

$$\psi_{Nk}(\bar{u}, \bar{v}) = \sum_{p=-N}^N T_{kp}^N \psi_{Np}(u, v).$$

Коэффициенты этого разложения могут быть вычислены аналогичным методом. Однако, по-видимому, здесь более уместен следующий подход. Параболические координаты первого и второго типа связаны преобразованием вращения на угол $\pi/2$: $\bar{u} = (u+v)/\sqrt{2}$, $\bar{v} = (u-v)/\sqrt{2}$. В^{17/} показано, что при вращении системы координат на угол α произведение полиномов Эрмита преобразуется согласно правилу

$$\begin{aligned} & \frac{H_{N+k}(x \cos \alpha - y \sin \alpha) H_{N-k}(x \sin \alpha + y \cos \alpha)}{\sqrt{(N+k)!(N-k)!}} = \\ & = \sum_{p=-N}^N d_{k,p}^N(2\alpha) \frac{H_{N+p}(x) H_{N-p}(y)}{\sqrt{(N+p)!(N-p)!}}. \end{aligned}$$

Пользуясь этим правилом, сразу имеем

$$\psi_{Nk}(\bar{u}, \bar{v}) = \sum_{p=-N}^N d_{k,p}^N \left(\frac{\pi}{2}\right) \psi_{Np}(u, v). \quad /2.3/$$

Разложение второго параболического базиса по полярному может быть получено с помощью теоремы сложения^{14/}:

$$\sum_{M''=-J}^J d_{M'',M'}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) d_{M'',M}^J \left(\frac{\pi}{2}\right) e^{-i\frac{\pi}{2}M''} = (-1)^{-M'} (-i)^{M+M'} d_{M',M}^J \left(\frac{\pi}{2}\right),$$

и имеет вид

$$\psi_{Nk}(\bar{u}, \bar{v}) = (-i)^{N+k} \sum_{m=-N}^N (-i)^m d_{k,m}^N \left(\frac{\pi}{2}\right) \psi_{Nm}(r, \phi). \quad /2.4/$$

Итак, аналитический подход в самом деле подтверждает простую геометрическую картину, с которой мы начали изложение. Коэффициенты разложений, обратных разложениям /2.2/ - /2.3/, совпадают

с теми, которые приведены в табл.2. Этот факт является следствием ортонормированности фундаментальных базисов, приводящей к ортонормированности коэффициентов разложений.

3. ЭЛЛИПТИЧЕСКИЙ ИНТЕГРАЛ ДВИЖЕНИЯ

Во введении отмечалось, что фундаментальные базисы, вообще говоря, не исчерпывают всех получающихся в рамках метода разделения переменных решений уравнения Шредингера. В двумерном атоме водорода таким дополнительным базисом является эллиптический. Необходимые сведения об этом базисе выделены нами в табл.3.

Эллиптический базис $\psi_{Nq}^{(\pm)}(\xi, \eta; R) = f_{Nq}^{(\pm)}(\xi; R) g_{Nq}^{(\pm)}(\eta; R)$ является собственной функцией гамильтониана \hat{H} и получаемого методом разделения переменных дополнительного эллиптического интеграла движения $\hat{\Lambda}$. Собственные значения $\lambda_{Nq}^{(\pm)}$ оператора $\hat{\Lambda}$ имеют смысл констант разделения в эллиптических координатах. Эллиптический базис разбивается на два подбазиса $\psi_{Nq}^{(+)}$ и $\psi_{Nq}^{(-)}$, первый из которых четен, а второй нечетен относительно замены $\eta \rightarrow -\eta$. Возможность такого разбиения является следствием инвариантности операторов \hat{H} и $\hat{\Lambda}$ относительно инверсии по переменной η . Целое положительное число q нумерует в порядке возрастания значения константы разделения $\lambda_{Nq}^{(\pm)}$ и определяет число нулей функций $g_{Nq}^{(\pm)}(\eta, R)$ - так называемых угловых эллиптических функций. В четном по η подбазисе $0 \leq q \leq N$, в нечетном - $1 \leq q \leq N$. Число нулей радиальной эллиптической функции $f_{Nq}^{(\pm)}(\xi, R)$ дается разностью $N - q$. Общее число нулей эллиптического базиса при данном дискретном значении энергии E_N равно N . Эллиптический параметр R может изменяться в пределах $0 \leq R < \infty$, и в нашей задаче он имеет чисто кинематический смысл. В двухцентрковой задаче, для которой эллиптический базис двумерного атома водорода является правильным нулевым приближением, R совпадает с расстоянием между неподвижными кулоновскими центрами. Покажем теперь, каким образом, пользуясь методом разделения переменных, можно определить вид

Таблица 3

Эллиптический интеграл движения и эллиптический базис

$x = \frac{R}{2} (\text{ch } \xi \cos \eta + 1)$	$0 \leq \xi < \infty$	$\hat{H} \psi_{Nq}^{(\pm)} = E_N \psi_{Nq}^{(\pm)}$	$\hat{\Lambda} = -\frac{2}{R^2 \text{ch}^2 \xi \cos^2 \eta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) + \frac{1}{R \text{ch} \xi \cos \eta}$
$y = \frac{R}{2} \text{sh } \xi \sin \eta$	$0 \leq \eta \leq 2\pi$	$\hat{\Lambda} \psi_{Nq}^{(\pm)} = \lambda_{Nq}^{(\pm)} \psi_{Nq}^{(\pm)}$	$\hat{\Lambda} = -\hat{L}^2 - \omega R \hat{P}$

эллиптического интеграла движения $\hat{\Lambda}$. Процесс разделения переменных в эллиптических координатах порождает константу разделения Q и приводит к паре обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + R \operatorname{ch} \xi - \frac{\omega^2 R^2}{4} \operatorname{ch}^2 \xi\right) \psi_1(\xi) = -Q \psi_1(\xi),$$

$$\left(\frac{d^2}{d\eta^2} - R \cos \eta + \frac{\omega^2 R^2}{4} \cos^2 \eta\right) \psi_2(\eta) = Q \psi_2(\eta),$$

исключая из которых энергетический параметр ω^2 , получим оператор

$$\hat{Q} = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \xi - \cos^2 \eta} \left(\cos^2 \eta \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} + \operatorname{ch}^2 \xi \frac{\partial^2}{\partial \eta^2} \right) - \frac{R \operatorname{ch} \xi \cos \eta}{\operatorname{ch} \xi + \cos \eta}. \quad /3.1/$$

Собственным значением этого оператора является константа Q , а собственными функциями - решения уравнения $\hat{H}\psi = E_N \psi$. Так как в пределах $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ эллиптическая система координат, представленная в табл.3, переходит в полярную и первую параболическую, то заранее очевидно, что оператор \hat{Q} должен быть такой линейной комбинацией операторов \hat{L} и $\hat{\mathcal{P}}$, которая в этих пределах переходит в \hat{L}^2 и $\hat{\mathcal{P}}$ соответственно. Выбор \hat{L}^2 вместо \hat{L} связан с тем, что при $R \rightarrow 0$, то есть $\eta \rightarrow \phi$, свойство четности относительно инверсии $\eta \rightarrow -\eta$ сохраняется. Для определения весовых множителей и свободной константы в отмеченной выше линейной комбинации перейдем в выражении /3.1/ к декартовым координатам и сравним получающийся результат с видом операторов \hat{L}^2 , $\hat{\mathcal{P}}$ и \hat{H} , выписанных также в терминах декартовых координат. После довольно скучных вычислений получим $\hat{Q} = -\hat{L}^2 - \omega R \hat{\mathcal{P}} - \frac{R^2}{2} \hat{H}$. Из этой формулы следует, что эллиптические базисы $\psi_{Nq}^{(+)}$ и $\psi_{Nq}^{(-)}$ являются собственными функциями оператора $\hat{\Lambda}$, приведенного в табл.3, которому соответствуют собственные значения $\Lambda_q^{(\pm)} = Q_q^{(\pm)} - \omega^2 R^2/4$. В последующих формулах мы будем иметь дело с константами $\lambda_q^{(\pm)}$, а не с $Q_q^{(\pm)}$, и поэтому при описании табл.3 мы, не нарушая общности, называли их эллиптическими константами разделения.

4. ЭЛЛИПТИЧЕСКИЙ БАЗИС

Мы уже говорили о двух возможных постановках проблемы межбазисных разложений /в зависимости от того, предполагается или нет известным явный вид разлагаемого базиса/. Во втором разделе мы в этом смысле имели дело с первой постановкой проблемы. Здесь будет построен эллиптический базис, причем речь пойдет не о буквальном решении тем или иным способом уравнения Шредин-

гера в эллиптических координатах, то есть не о том, что сделано в /15/, а о построении таких суперпозиций полярных либо первых параболических базисов /при данной энергии/, которые были бы собственными функциями эллиптического интеграла движения $\hat{\Lambda}$, соответствующими собственным значениям $\lambda_q^{(\pm)}$. Идею об использовании добавочных интегралов движения для определения межбазисных разложений мы заимствовали из /16/, где она была высказана и применена в связи с задачей отыскания сфероидальных волновых функций атома водорода. Рассмотрим сначала суперпозиции полярных базисов

$$\psi_{Nq}^{(\pm)}(\xi, \eta; \mathbf{R}) = \sum_{m=-N}^N W_{Nqm}^{(\pm)}(\mathbf{R}) \psi_{Nm}(r, \phi). \quad /4.1/$$

По определению, эти суперпозиции являются собственными функциями оператора $\hat{\Lambda}$, соответствующими собственным значениям $\lambda_q^{(\pm)}$:

$$\hat{\Lambda} \psi_{Nq}^{(\pm)} = \lambda_q^{(\pm)} \psi_{Nq}^{(\pm)}. \quad /4.2/$$

При $\eta \rightarrow -\eta$ полярный угол ϕ меняет знак, и поэтому, учитывая свойства симметрии эллиптических подбазисов $\psi_{Nq}^{(+)}$ и $\psi_{Nq}^{(-)}$ относительно инверсии $\eta \rightarrow -\eta$, получаем из /4.1/ условие

$$W_{Nq,-m}^{(\pm)}(\mathbf{R}) = \pm W_{Nqm}^{(\pm)}(\mathbf{R}). \quad /4.3/$$

Подставим /4.1/ в /4.2/, умножим получающееся уравнение на $\psi_{Nm}^*(r, \phi)$ и проинтегрируем его по двумерному объему. Тогда из ортонормированности полярного базиса следуют две системы однородных уравнений, которым должны удовлетворять коэффициенты разложения /4.1/:

$$\sum_{m=-N}^N \left(\mathcal{P}_{m,m} + \frac{\lambda_q^{(\pm)} + m^2}{\omega \mathbf{R}} \delta_{m,m} \right) W_{Nqm}^{(\pm)}(\mathbf{R}) = 0. \quad /4.4/$$

Здесь под $\mathcal{P}_{m,m}$ понимается матричный элемент генератора $\hat{\mathcal{P}}$ по полярным базисам, то есть

$$\mathcal{P}_{m,m} = \int \psi_{Nm}^*(r, \phi) \hat{\mathcal{P}} \psi_{Nm}(r, \phi) dv. \quad /4.5/$$

Вычисление этого матричного элемента может быть выполнено двумя методами в зависимости от того, записывается ли оператор $\hat{\mathcal{P}}$ в полярных координатах или полярные базисы разлагаются по параболическим. Для создания более четкого представления о вычислительных возможностях техники межбазисных разложений, ниже приведем оба метода. Рассмотрим сначала первый из них. Запишем оператор $\hat{\mathcal{P}}$ в полярных координатах:

$$\hat{\mathcal{P}} = \frac{1}{\omega} \left\{ \cos \phi \left(1 + \frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial r} \right) + \sin \phi \left(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r} \right) \frac{\partial}{\partial \phi} \right\}.$$

После подстановки этого оператора в выражение для матричного элемента $\mathcal{P}'_{m'm}$ и тривиального интегрирования по полярному углу, приходим к формуле

$$\mathcal{P}'_{m'm} = \frac{1}{2\omega} (\delta_{m',m+1} t_{m+1,m} + t_{m,m-1} \delta_{m',m-1}),$$

в которой величина $t_{m,m-1}$ получается из $t_{m+1,m}$ путем замены $m \rightarrow m-1$, а $t_{m+1,m}$ имеет вид

$$t_{m+1,m} = \int_0^{\infty} r R_{N,m+1}(r) \left[1 + (m + \frac{1}{2}) \left(-\frac{d}{dr} - \frac{m}{r} \right) \right] R_{Nm}(r) dr.$$

Прямое вычисление этого интеграла является долгим и утомительным. Легче воспользоваться следующим приемом. Запишем два радиальных уравнения Шредингера: одно с квантовым числом m , другое с m' , умножим первое на $R_{Nm'}$, второе - на R_{Nm} , вычтем одно из другого и проинтегрируем по dr . Совершая перечисленные действия, легко установить тождество

$$\int_0^{\infty} r R_{Nm'}(r) \left[\frac{d}{dr} - \frac{m'^2 - m^2 - 1}{2r} \right] R_{Nm}(r) dr = 0,$$

из которого следует, что вклад в интеграл $t_{m+1,m}$ дает лишь первый член в квадратных скобках, так что

$$t_{m+1,m} = \int_0^{\infty} r R_{N,m+1}(r) R_{Nm} dr = -\omega \sqrt{(N-m)(N+m+1)},$$

и для матричного элемента $\mathcal{P}'_{m'm}$ имеем

$$\mathcal{P}'_{m'm} = -\frac{1}{2} \sqrt{(N-m)(N+m+1)} \delta_{m,m-1} - \frac{1}{2} \sqrt{(N+m)(N-m+1)} \delta_{m,m+1}. \quad /4.6/$$

Следуя теперь рецепту второго метода: подставив в /4.5/ разложение полярного базиса по первому параболическому базису, можно сразу прийти к формуле

$$\mathcal{P}'_{m'm} = \sum_{p=-N}^N p d_{pm}^N \left(\frac{\pi}{2} \right) d_{pm'}^N \left(-\frac{\pi}{2} \right).$$

Стоящая в правой части сумма вычисляется с помощью рекуррентного соотношения известного из теории углового момента ^{/14/}

$$-M d_{MM'}^J \left(\frac{\pi}{2} \right) = \frac{1}{2} \sqrt{(J+M')(J-M'+1)} d_{M,M'-1}^J \left(\frac{\pi}{2} \right) + \frac{1}{2} \sqrt{(J-M')(J+M'+1)} d_{M,M'+1}^J \left(\frac{\pi}{2} \right)$$

и условия ортонормируемости

$$\sum_{M''=J}^J d_{M''M}^J(\beta) d_{M''M'}^J(\beta) = \delta_{MM'}$$

Отсюда следует полученный выше результат /4.6/. На основе приведенных выкладок легко оценить эффективность использования межбазисных разложений при вычислении матричных элементов. Формула /4.6/ и система уравнений /4.1/ приводят к трехчленным рекуррентным соотношениям:

$$-\frac{1}{2} \sqrt{(N-m)(N+m+1)} W_{Nqm+1}^{(\pm)}(R) + \frac{\lambda_q^{(\pm)}(R) + m^2}{\omega R} W_{Nqm}^{(\pm)}(R) - \\ - \frac{1}{2} \sqrt{(N+m)(N-m+1)} W_{Nqm-1}^{(\pm)}(R) = 0. \quad /4.8/$$

Полученный результат является исходным пунктом в программе вычисления коэффициентов разложения /4.1/. Эти рекуррентные соотношения являются системой $2N+1$ линейных однородных уравнений, из которых в силу условия /4.3/ независимыми при знаке "+" являются всего $N+1$ уравнений ($0 \leq m \leq N$), а при знаке "-" - N уравнений ($1 \leq m \leq N$). Поскольку система уравнений однородна, нетривиальные решения возможны лишь при соблюдении условия равенства нулю соответствующих детерминантов. Это условие приводит к уравнению, на основе которого определяются допустимые значения констант разделения $\lambda_q^{(\pm)}(R)$. После определения собственных значений эллиптических констант разделения $\lambda_q^{(\pm)}(R)$ рекуррентные соотношения /4.8/ решаются совместно с условиями нормировки

$$\sum_{m=-N}^N W_{Nqm}^{(\pm)*}(R) W_{Nqm}^{(\pm)}(R) = 1. \quad /4.9/$$

Так как эти условия билинейны по коэффициентам $W_{Nqm}^{(\pm)}(R)$, то нужно договориться о смысле операции извлечения квадратного корня. Мы везде пользуемся арифметическим корнем. Выражения для $W_{Nqm}^{(\pm)}(R)$, полученные описанным способом, приведены в табл.4 и 5. Там же можно найти уравнения, с помощью которых определяются собственные значения констант разделения. Из последнего столбца таблиц 4 и 5 может показаться, что в отличие от полярного и параболического квантовых чисел m и p квантовое число q формально не входит в формулу, определяющую соответствующую ему константу разделения. Однако это не так. Например, при $N=1$ и $m=0$, как это следует из табл.4,

$$\lambda_q^{(\pm)}(R) = -\frac{1}{2} - (-1)^q \sqrt{\frac{1}{4} + \frac{4R^2}{9}}$$

Таблица 4

Коэффициенты разложения четного эллиптического подбазиса по полярному

N	m	$W_{Nqm}^{(+)}(R)$	$\lambda_q^{(+)}$
0	0	1	$\lambda_q^{(+)} = 0$
1	0	$\left\{ \frac{\lambda_q^{(+)} + 1}{2\lambda_q^{(+)} + 1} \right\}^{1/2}$	$\lambda_q^{(+)}(\lambda_q^{(+)} + 1) =$
1	± 1	$\frac{3}{2\sqrt{2}} \frac{\lambda_q^{(+)}}{R} \left\{ \frac{\lambda_q^{(+)} + 1}{2\lambda_q^{(+)} + 1} \right\}^{1/2}$	$= \frac{4}{9} R^2$
2	0	$\left\{ 1 + \frac{25}{12} \left(\frac{\lambda_q^{(+)}}{R} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\lambda_q^{(+)}}{\lambda_q^{(+)} + 4} \right)^2 \right\}^{1/2}$	$\lambda_q^{(+)}(\lambda_q^{(+)} + 1)(\lambda_q^{(+)} + 4) \cdot$
2	± 1	$\frac{5}{2\sqrt{6}} \frac{\lambda_q^{(+)}}{R} \left\{ 1 + \frac{25}{12} \left(\frac{\lambda_q^{(+)}}{R} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\lambda_q^{(+)}}{\lambda_q^{(+)} + 4} \right)^2 \right\}^{1/2}$	$\cdot \frac{16R^2}{25} (\lambda_q^{(+)} + 3)$
2	± 2	$\frac{1}{\sqrt{6}} \frac{\lambda_q^{(+)}}{\lambda_q^{(+)} + 4} \left\{ 1 + \frac{25}{12} \left(\frac{\lambda_q^{(+)}}{R} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\lambda_q^{(+)}}{\lambda_q^{(+)} + 4} \right)^2 \right\}^{1/2}$	

Таблица 5

Коэффициенты разложения нечетного эллиптического подбазиса по полярному

N	m	$W_{Nqm}^{(-)}(R)$	$\lambda_q^{(-)}$
1	± 1	$\pm \frac{1}{\sqrt{2}}$	$\lambda_q^{(-)} = -1$
2	± 1	$\pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ \frac{\lambda_q^{(-)} + 4}{2\lambda_q^{(-)} + 5} \right\}^{1/2}$	$(\lambda_q^{(-)} + 1)(\lambda_q^{(-)} + 4) =$
2	± 2	$\pm \frac{5}{2\sqrt{2}} \frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{R} \left\{ \frac{\lambda_q^{(-)} + 4}{2\lambda_q^{(-)} + 5} \right\}^{1/2}$	$= \frac{4}{25} R^2$
3	± 1	$\pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ 1 + \frac{49}{10} \left(\frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{R} \right)^2 + \frac{3}{5} \left(\frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{\lambda_q^{(-)} + 9} \right)^2 \right\}^{1/2}$	$(\lambda_q^{(-)} + 1)(\lambda_q^{(-)} + 4)(\lambda_q^{(-)} + 9) =$
3	± 2	$\pm \frac{7}{2\sqrt{5}} \frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{R} \left\{ 1 + \frac{49}{10} \left(\frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{R} \right)^2 + \frac{3}{5} \left(\frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{\lambda_q^{(-)} + 9} \right)^2 \right\}^{1/2}$	$= \frac{16R^2}{49} (\lambda_q^{(-)} + 6)$
3	± 3	$\pm \frac{\sqrt{3}}{\sqrt{10}} \frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{\lambda_q^{(-)} + 9} \left\{ 1 + \frac{49}{10} \left(\frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{R} \right)^2 + \frac{3}{5} \left(\frac{\lambda_q^{(-)} + 1}{\lambda_q^{(-)} + 9} \right)^2 \right\}^{1/2}$	

Дело здесь просто в том, что уравнения, определяющие константы $\lambda_q^{(\pm)}(R)$, за исключением простых случаев, не решаются точно, и это не дает возможности в общем случае конструктивно выявить зависимости $\lambda_q^{(\pm)}(R)$ от q . Описанный выше метод может быть слово в слово повторен для разложения эллиптического базиса по параболическому:

$$\psi_{Nq}^{(\pm)}(\xi, \eta; R) = \sum_{p=-N}^N U_{Nqp}^{(\pm)}(R) \psi_{Np}(u, v). \quad /4.10/$$

Здесь, как и в разложении /4.1/, левая часть предполагается заранее неизвестной, и конструктивная идея заключается в том, что $\psi_{Nqm}^{(\pm)}$ удовлетворяет уравнению /4.2/. На этом пути вычисления приводят к трехчленным рекуррентным соотношениям

$$\begin{aligned} & (\lambda_q^{(\pm)} + \omega p R + \frac{1}{2}(N^2 + N - p^2)) U_{Nqm}^{(\pm)}(R) = \\ & = \frac{1}{4} \sqrt{(N-p)(N-p-1)(N+p+1)(N+p+2)} U_{Nqp+2}^{(\pm)} + \\ & + \frac{1}{4} \sqrt{(N+p)(N+p-1)(N-p+1)(N-p+2)} U_{Nqp-2}^{(\pm)}(R), \end{aligned} \quad /4.11/$$

которые следует решать совместно с условиями нормировки

$$\sum_{p=-N}^N U_{Nqp}^{*(\pm)}(R) U_{Nqp}^{(\pm)}(R) = 1. \quad /4.12/$$

Заранее очевидно, что полученные из /4.11/ и /4.12/ эллиптические подбазисы могут, вообще говоря, отличаться фазовым множителем от подбазисов, строящихся на основе соотношений /4.8/ и /4.9/. Причина такого различия лежит в необходимости взятия квадратных корней в процессе вычислений, при этом нет общего алгоритма для выбора фаз перед корнями, гарантирующего абсолютное совпадение результатов, следующих из /4.8/, /4.9/ и /4.11/, /4.12/. Чтобы обойти эти нудные тонкости и в то же время достичь согласованности фаз, легче просто подставить в /4.1/ разложение полярного базиса по первому параболическому и, сравнив полученный результат с /4.10/, записать

$$U_{Nqp}^{(\pm)}(R) = (i)^{N-p} \sum_{m=-N}^N d_{pm}^N \left(\frac{\pi}{2}\right) W_{Nqm}^{(\pm)}(R). \quad /4.13/$$

Выписанные в табл.6 и 7 значения коэффициентов $U_{Nqp}^{(\pm)}(R)$ вычислены на основе этой формулы. Отметим, что d -функции Вигнера мы выбирали с теми фазами, которые приняты в монографии /14/. При известных $W_{Nqm}^{(\pm)}(R)$ формула /4.13/ более удобна для вычисления коэффициентов $U_{Nqp}^{(\pm)}(R)$, чем рекуррентное соотношение /4.10/.

Таблица 6

Коэффициенты разложения четного эллиптического под-
базиса по параболическому

N	p	$U_{Nqp}^{(+)}(R)$	$\Lambda_q^{(+)}$
0	0	1	$\Lambda_q^{(+)} = 0$
1	1	$-\frac{3}{4R}(\Lambda_q^{(+)} - \frac{2}{3}R) \left\{ \frac{2(\Lambda_q^{(+)} + 1)}{2\Lambda_q^{(+)} + 1} \right\}^{1/2}$	$\Lambda_q^{(+)}(\Lambda_q^{(+)} + 1) =$ $= \frac{4}{9}R^2$
1	1	$+\frac{3}{4R}(\Lambda_q^{(+)} - \frac{2}{3}R) \left\{ \frac{2(\Lambda_q^{(+)} + 1)}{2\Lambda_q^{(+)} + 1} \right\}^{1/2}$	
2	2	$\frac{25}{24}\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{\Lambda_q^{(+)} R^2}{R^2} (\Lambda_q^{(+)} + 1 + \frac{4R}{5}) \left\{ 1 + \frac{25}{12} \left(\frac{\Lambda_q^{(+)} R^2}{R} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\Lambda_q^{(+)} R^2}{\Lambda_q^{(+)} + 4} \right)^2 \right\}^{1/2}$	$\Lambda_q^{(+)}(\Lambda_q^{(+)} + 1)(\Lambda_q^{(+)} + 4) =$ $= \frac{16R^2}{25}(\Lambda_q^{(+)} + 3)$
2	0	$\frac{2}{\Lambda_q^{(+)} + 4} \left\{ 1 + \frac{25}{12} \left(\frac{\Lambda_q^{(+)} R^2}{R} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\Lambda_q^{(+)} R^2}{\Lambda_q^{(+)} + 4} \right)^2 \right\}^{1/2}$	
2	2	$\frac{25}{24}\sqrt{\frac{1}{2}} \frac{R^2}{R^2} (\Lambda_q^{(+)} + 1 - \frac{4R}{5}) \left\{ 1 + \frac{25}{12} \left(\frac{\Lambda_q^{(+)} R^2}{R} \right)^2 + \frac{1}{3} \left(\frac{\Lambda_q^{(+)} R^2}{\Lambda_q^{(+)} + 4} \right)^2 \right\}^{1/2}$	

Таблица 7

Коэффициенты разложения нечетного эллиптического под-
базиса по параболическому

N	p	$U_{Nqp}^{(-)}(R)$	$\Lambda_q^{(-)}$
1	0	i	$\Lambda_q^{(-)} = -1$
2	-1	$-\frac{i}{\sqrt{2}} \frac{5}{2R} (\Lambda_q^{(-)} + 1 + \frac{2R}{5}) \left\{ \frac{\Lambda_q^{(-)} + 4}{2\Lambda_q^{(-)} + 5} \right\}^{1/2}$	$(\Lambda_q^{(-)} + 1)(\Lambda_q^{(-)} + 4) =$ $= \frac{4}{25}R^2$
2	1	$+\frac{i}{\sqrt{2}} \frac{5}{2R} (\Lambda_q^{(-)} + 1 - \frac{2R}{5}) \left\{ \frac{\Lambda_q^{(-)} + 4}{2\Lambda_q^{(-)} + 5} \right\}^{1/2}$	
3	-1	$i \frac{49}{8\sqrt{5}} \frac{\Lambda_q^{(-)} + 1}{R^2} (\Lambda_q^{(-)} + 4 + \frac{4R}{7}) \left\{ 1 + \frac{49}{10} \left(\frac{\Lambda_q^{(-)} R^2}{R} \right)^2 + \frac{3}{5} \left(\frac{\Lambda_q^{(-)} + 1}{\Lambda_q^{(-)} + 9} \right)^2 \right\}^{1/2}$	$(\Lambda_q^{(-)} + 1)(\Lambda_q^{(-)} + 4)(\Lambda_q^{(-)} + 9) =$ $= \frac{16R^2}{49}(\Lambda_q^{(-)} + 6)$
3	0	$i \frac{2\sqrt{6}}{\lambda + 9} \left\{ 1 + \frac{49}{10} \left(\frac{\Lambda_q^{(-)} R^2}{R} \right)^2 + \frac{3}{5} \left(\frac{\Lambda_q^{(-)} + 1}{\Lambda_q^{(-)} + 9} \right)^2 \right\}^{1/2}$	
3	2	$i \frac{49}{8\sqrt{5}} \frac{\Lambda_q^{(-)} + 1}{R^2} (\Lambda_q^{(-)} + 4 - \frac{4R}{7}) \left\{ 1 + \frac{49}{10} \left(\frac{\Lambda_q^{(-)} R^2}{R} \right)^2 + \frac{3}{5} \left(\frac{\Lambda_q^{(-)} + 1}{\Lambda_q^{(-)} + 9} \right)^2 \right\}^{1/2}$	

5. ПРЕДЕЛЫ $R \rightarrow 0$ И $R \rightarrow \infty$ В ЭЛЛИПТИЧЕСКОМ БАЗИСЕ

Ввиду сложности эллиптического базиса имеет смысл отдельно рассмотреть предельные переходы в полученных выше формулах при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$. В выбранных нами эллиптических координатах центр кулоновского поля размещается в начале координат. Поэтому в пределах $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ /координаты протона и электрона считаются фиксированными/ эллиптические координаты переходят в полярные и первые параболические. Заранее очевидно, что каждый из эллиптических подбазисов в процессе таких предельных переходов не меняет характерного для него свойства четности. Это значит, что при $R \rightarrow 0$ речь может идти о переходе в полярные подбазисы с определенной четностью относительно инверсии $\phi \rightarrow -\phi$. В этих подбазисах экспонента $e^{im\phi}$ заменяется косинусом и синусом от $m\phi$, причем $0 \leq m \leq N$ для четного подбазиса и $1 \leq m \leq N$ для нечетного, чтобы кратность вырождения энергетического спектра была бы по-прежнему равна $2N+1$. Параболические подбазисы с данной четностью имеют вид $f^{(\pm)}(u)g^{(\pm)}(v)$, причем для четного базиса квантовые числа N и p имеют одинаковую четность, для нечетного - разную, так что в первом случае $p = -N, -N+2, \dots, N-2, N$ /всего $N+1$ значений/, во втором - $p = -N+1, -N+3, \dots, N-3, N-1$ /всего N значений/. Факт перехода эллиптического базиса в полярный и параболический формально следует из явного вида оператора $\hat{\Lambda}$. Действительно, при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ этот оператор стремится к $(-\hat{L}^2)$ и $(-\omega R^p)$ соответственно. Отсюда ясно, что поведение эллиптических констант разделения $\lambda_q^{(\pm)}(R)$ при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ определяется результатами, приведенными в табл.8. При этих предельных переходах квантовое число q сохраняет смысл величины, дающей число нулей угловой эллиптической функции. Выясним, как ведут себя в рассматриваемых пределах коэффициенты $W_{Nqm}^{(\pm)}(R)$ и $W_{Nqm}^{(-)}(R)$. Из /4.1/ следует, что

$$W_{Nqm}^{(\pm)}(R) = \int \psi_{Nm}^*(r, \phi) \psi_{Nq}^{(\pm)}(\xi, \eta; R) dv; \quad /5.1/$$

Таблица 8

Поведения эллиптических констант разделения в пределах $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$

$\lambda_q^{(-)}(R) \xrightarrow{R \rightarrow 0} -q^2, 0 \leq q \leq N$	$\lambda_q^{(+)}(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} -\omega R(2q-N); 0 \leq q \leq N$
$\lambda_q^{(-)}(R) \xrightarrow{R \rightarrow 0} -q^2; 1 \leq q \leq N$	$\lambda_q^{(-)}(R) \xrightarrow{R \rightarrow \infty} -\omega R(2q-N-1); 1 \leq q \leq N$

и потому зависимость коэффициентов от R определяется только квантовыми числами N и q . Это означает, что при $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ все коэффициенты $W_{Nqm}^{(\pm)}(R)$ в трехчленном рекуррентном соотношении /4.8/ имеют один порядок по R . Умножим теперь /4.8/ на ωR и устремим R к нулю. Из табл.8 следует, что в этом пределе коэффициенты разложения /4.1/ равны нулю при $m \neq q$. Отличные от нуля значения $W_{Nqm}^{(\pm)}(R)$ определяются затем из условия нормировки /4.9/ и равны

$$W_{Nqm}^{(\pm)}(0) = \frac{1}{2} \delta_{qm}, \quad 1 \leq m \leq N, \quad W_{Nq0}^{(\pm)}(0) = \delta_{q0}.$$

Из той же табл.8 видно, что в пределе $R \rightarrow \infty$ /4.8/ переходит в два соотношения:

$$\begin{aligned} -(2q - N) W_{Nqm}^{(+)}(\infty) &= \frac{1}{2} \sqrt{(N-m)(N+m+1)} W_{Nqm+1}^{(+)}(\infty) + \\ &+ \frac{1}{2} \sqrt{(N+m)(N-m+1)} W_{Nqm-1}^{(+)}(\infty), \\ -(2q - N - 1) W_{Nqm}^{(-)}(\infty) &= \frac{1}{2} \sqrt{(N-m)(N+m+1)} W_{Nqm+1}^{(-)}(\infty) + \\ &+ \frac{1}{2} \sqrt{(N+m)(N-m+1)} W_{Nqm-1}^{(-)}(\infty). \end{aligned}$$

Сравнение этих формул с рекуррентными соотношениями /4.7/ убеждает, что предельные значения коэффициентов $W_{Nqm}^{(\pm)}(\infty)$ с точностью до фазового множителя, могущего зависеть лишь от квантовых чисел N и q , совпадают с d -функцией Вигнера от прямого угла. Для обеспечения перехода разложения /4.1/ при $R \rightarrow \infty$ в /2.2/ достаточно выбрать эти фазовые множители следующим образом:

$$W_{Nqm}^{(+)}(\infty) = (-i)^{N-(2q-N)} d_{2q-N, m}^N \left(\frac{\pi}{2} \right),$$

$$W_{Nqm}^{(-)}(\infty) = (-i)^{N-(2q-N-1)} d_{2q-N-1, m}^N \left(\frac{\pi}{2} \right).$$

Далее, пользуясь формулой /4.13/, легко убедиться, что в пределах $R \rightarrow 0$ и $R \rightarrow \infty$ разложение /4.10/ переходит в разложение полярного базиса по первому параболическому и в тождественное преобразование соответственно. Известно /15/, что эллиптические константы разделения $\lambda_q^{(\pm)}(R)$ в точке $R=0$ имеют равную нулю производную, то есть величины $\lambda_q^{(\pm)}(R) + q^2$ при $R \rightarrow 0$ имеют порядок R^2 . На языке уравнения /4.2/ этот факт объясняется следующим образом. При малых R оператор $(-\omega R^{\mathcal{P}})$ является возмущением к оператору $(-L^2)$, и поэтому поправка первого порядка к $\lambda_q^{(\pm)}(R)$ есть диагональный матричный элемент оператора $(-\omega R^{\mathcal{P}})$ по полярному базису с определенной четностью. Вычисления, основанные на формуле /4.6/, показывают, что этот матричный элемент равен нулю. Пользуясь формулами теории возмущений, легко установить поведение константы разделения $\lambda_q^{(\pm)}(R)$ при малых R с точностью до R^2 включительно.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В заключение остановимся на практической ценности изложенных выше результатов. Мы уже отмечали, что двумерный атом водорода причастен к явлениям, связанным с поверхностными явлениями в конденсированных средах и со спектроскопией ридберговских атомов. В чем заключается эта причастность?

Нарушение трансляционной симметрии в направлении, перпендикулярном поверхности твердого тела, приводит к тому, что атомы поверхностного слоя находятся в особых условиях. В грубом приближении поведение таких атомов может быть описано добавочным потенциалом, представляющим собой одномерную вдоль оси z яму с бесконечными стенками. Зависимость от координаты z при этом в основном определяется ямой, и поэтому трехмерное кулоновское поле можно заменить двумерным /в плоскости x, y / и далее, разделить переменные, получить вдоль оси z обычное квантование в одномерной бесконечной яме, а в плоскости xy - задачу о двумерном атоме водорода.

Ридберговские атомы - это атомы с большими квантовыми числами $n\ell m$, с хорошей точностью описываемые обычной кулоновской моделью. При $\ell = |m| \gg 1$ движение электрона в кулоновском поле приобретает приблизительно плоский характер /18/, и поэтому ридберговский атом может быть заменен более простой двумерной системой. Стало быть, эксперименты /10/, проводимые с ридберговскими атомами, - это, по существу, эксперименты, касающиеся двумерного атома водорода.

Поведение атомов поверхностного слоя и ридберговских атомов в слабых однородных электрических полях, сосредоточенных в плоскости xy , или в полях соседних зарядов не может быть исследовано только на основе полярного базиса, так как в этих задачах правильными волновыми функциями нулевого приближения являются параболический и эллиптический базисы. Из сказанного ясно, насколько важно иметь информацию как обо всех базисах двумерного атома водорода, так и о связях, в которых находятся между собой эти базисы. Выше мы ограничивали себя областью дискретного спектра.

Полный анализ двумерного атома водорода должен содержать в себе также случай $E > 0$, когда группой скрытой симметрии становится группа $O(2, 1)$. Эта задача значительно сложнее, и мы предполагаем заняться ею в ближайшем будущем.

Мы выражаем искреннюю благодарность Г.С.Саакяну, В.Г.Кадышевскому, Я.А.Сморозинскому, Л.И.Пономареву, А.В.Матвеевко и Л.С.Давтяну за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fock V. Z.Phys., 1935, 98, p.145.
2. Bargmann V. Z.Phys., 1936, 99 p.576.
3. Миллер У. Скрытая симметрия и разделение переменных. "Мир", М., 1981.
4. Комаров И., Пономарев Л., Славянов С. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
5. Малкин И., Манько В. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. "Наука", М., 1979.
6. Погосян Г., Тер-Антонян В. ТМФ, 1979, 40, с.140.
7. Pogosyan G., Smorodinsky Ya., Ter-Antonyan V. J.Phys., 1981, A14, p. 769.
8. Mardoyan L. et al. J.Phys., 1983, A16, p.711.
9. Гомоюнова М. УФН, 1982, 136, вып.1, с.105.
10. Клеппнер Д., Литман М., Циммерман М. УФН, 1982, 137, вып.2, с.339.
11. Zaslav B., Zandler M. Am.J.Phys., 1965, 35, p.1118.
12. Cisneras A., McIntosh H. J.Math.Phys., 1968, 10, p.277.
13. Ландау Л., Лифшиц Е. Квантовая механика. "Наука", М., 1974.
14. Варшалович Д., Москалев А., Херсонский В. Квантовая теория углового момента. "Наука", Л., 1975.
15. Мардоян Л. и др. ОИЯИ, P2-83-475, Дубна, 1983.
16. Coulson C., Joseph A. Proc.Phys.Soc., 1967, 90, p.887.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 декабря 1983 года

Мардоян Л.Г. и др.

P2-83-899

Скрытая симметрия, разделение переменных
и межбазисные разложения в двумерном атоме водорода

На основе метода разделения переменных установлена группа скрытой симметрии $O(3)$ дискретного спектра двумерного атома водорода. Найдены разложения каждого из фундаментальных базисов этой группы по двум другим, определен добавочный интеграл движения, соответствующий эллиптическому базису. Получены представления эллиптического базиса в виде суперпозиции полярных и параболических состояний. Исследовано несколько интересных предельных случаев.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Mardoyan L.G. et al.

P2-83-899

Hidden Symmetry, Separation of Variables
and Interbasis Expansions in the Two-Dimensional
Hydrogen Atom

A group of hidden $O(3)$ symmetry of the discrete spectrum of the two-dimensional hydrogen atom is determined on the basis of the method of separation of variables. Expansions for each fundamental basis of this group over two others are found and an additional integral of motion corresponding to an elliptic basis is determined. Representations of the elliptic basis as a superposition of polar and parabolic states are obtained. Certain interesting limiting cases are investigated.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research, Dubna 1983

Перевод авторов.

Редактор Т.Я.Жабицкая. Макет Н.А.Киселевой.
Набор И.Г.Андреевой, Е.М.Граменшккой.

Подписано в печать 07.02.84.

Формат 60x90/16. Офсетная печать. Уч.-изд.листов 1,45.

Тираж 560. Заказ 34169.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.
Дубна Московской области.