сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р2-86-431

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

ТОЧНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ КИБЛЕРА - РОНВИКСА - НЕГАДИ

* Ереванский государственный университет

1986

1. Введение. В недавно вышедшей статье Киблера, Ронвикса и Негади [1] была сформулирована важная для физики водородоподобных атомов во внешних полях задача о разложениях параболического и сферического базисов атома водорода / $\underline{\mathcal{H}}$ / по базисам четырехмерного изотропного осциллятора / $\underline{O}$ /. В [1] было установлено разложение параболического базиса $\underline{\mathcal{H}}$ по двойному полярному базису $\underline{O}$, выведены некоторые правила отбора и билинейные соотношения, а также составлены программы численных и аналитических расчетов на ЭВМ и высказано намерение реализовать эти расчеты в ближайшем будущем.

В настоящей работе нами получено точное решение упомянутой выше задачи. Наши результаты выражаются через хорошо изученные и достаточно полным образом протабулированные "объекты" - коэффициенты Клебша-Гордана и функцию Вигнера.

2. Метод. Суть предлагаемого здесь метода заключается в использовании двух тождеств:

$$\langle \underline{O}, R | \underline{\mathcal{H}}, n \rangle = \sum \langle \underline{O}, R | \underline{O}, W \rangle \langle \underline{O}, W | \underline{\mathcal{H}}, n \rangle , \qquad /1/$$

$$\langle \underline{O}, R | \underline{\mathcal{H}}, s \rangle = \sum \langle \underline{O}, R | \underline{O}, z \rangle \langle \underline{O}, z | \underline{\mathcal{H}}, s \rangle . \qquad /2/$$

Скобки Дирака имеют смысл коэффициентов межбазисных разложений, через $|\underline{\mathcal{H}}, n\rangle$ и $|\underline{\mathcal{H}}, s\rangle$ обозначены параболический и сферический базисы $\underline{\mathcal{H}}$, символы R, W и z маркируют базисы $\underline{O}$. В качестве $|\underline{O}, W\rangle$ и $|\underline{O}, z\rangle$ удобно выбрать двойной полярный $|\underline{O}, 2P\rangle$ и неканонический $|\underline{O}, N\rangle$ базисы $\underline{O}$. В самом деле, ниже будет показано, что матрицы $\langle \underline{O}, 2P | \underline{\mathcal{H}}, n\rangle$ и $\langle \underline{O}, N | \underline{\mathcal{H}}, s\rangle$ диагональны, и, стало быть, при таком выборе автоматически решается вопрос о суммировании по "промежуточным состояниям" в /1/ и /2/. Добавим, что коэффициенты $\langle \underline{O}, R | \underline{O}, 2P\rangle$ и $\langle \underline{O}, R | \underline{O}, N\rangle$ были вычислены нами в работе [2].

3. Выбор координат. Определим используемые координаты. Декартовы координаты $\underline{\mathcal{H}}$ и $\underline{O}$ обозначим через x, y, z и u_1, u_2, u_3, u_4, соответственно. Введем сферические координаты для $\underline{\mathcal{H}}$ согласно правилу $x = r \sin\theta \sin\varphi$, $y = r \sin\theta \cos\varphi$, $z = r\cos\theta$. Такой выбор соответствует так называемому каноническому дереву [3] и удобен

для дальнейших вычислений. Параболические координаты для $\underline{\mathcal{H}}$ определены обычным образом: $x = \sqrt{\mu\nu}\sin\varphi$, $y = \sqrt{\mu\nu}\cos\varphi$, $z = (\nu-\mu)/2$. Для $\underline{O}$ помимо декартовых координат рассмотрим канонические координаты $/ u_1 = u\sin\psi\sin\theta\sin\varphi$, $u_2 = u\sin\psi\sin\theta\cos\varphi$, $u_3 = u\sin\psi\cos\theta$, $u_4 = u\cos\psi /$, неканонические координаты $/ u_1 = u\sin\alpha\sin\beta$, $u_2 = u\sin\alpha\cos\beta$, $u_3 = u\cos\alpha\sin\gamma$, $u_4 = u\cos\alpha\cos\gamma /$ и двойные полярные координаты $/ u_1 = \rho_1\sin\beta$, $u_2 = \rho_1\cos\beta$, $u_3 = \rho_2\sin\gamma$, $u_4 = \rho_2\cos\gamma /$. В определения неканонических и двойных полярных координат входят одни и те же углы β и γ. Координаты изменяются в пределах: $0 \le \psi, \theta \le \pi$, $0 \le \varphi, \beta, \gamma < 2\pi$, $0 \le \alpha \le \pi/2$, $0 \le \rho_1, \rho_2 < \infty$.

<u>4. KS -преобразование.</u> Как известно+), задачи о $\underline{\mathcal{H}}$ и $\underline{O}$ связаны так называемым KS -преобразованием. Это преобразование, отображающее "фиктивное" четырехмерное пространство R^4 в физическое пространство R^3, впервые было предложено Кустаанхеймо [4] для регуляризации пространственной задачи двух тел в небесной механике и затем применено Кустаанхеймо и Штифелем [5] к случаю возмущенного движения. С точки зрения обсуждаемой нами задачи, KS -преобразование - это правило, связывающее декартовы координаты $\underline{\mathcal{H}}$ с декартовыми координатами $\underline{O}$:

$$
\begin{aligned}
x &= 2(u_1 u_4 + u_2 u_3), \\
y &= 2(u_2 u_4 - u_1 u_3), \qquad\qquad /3/ \\
z &= u_3^2 + u_4^2 - u_1^2 - u_2^2 .
\end{aligned}
$$

Теория KS -преобразований основательно изложена в [6], её применение к связи $\underline{\mathcal{H}}$ и $\underline{O}$ можно найти в [I] и [7].

<u>5. Обозначения.</u> Декартов $|\underline{O}, c\rangle$, канонический $|\underline{O}, K\rangle$, неканонический $|\underline{O}, N\rangle$ и двойной полярный $|\underline{O}, 2P\rangle$ базисы $\underline{O}$ зависят от присущих им четырех квантовых чисел: $|\underline{O}, c\rangle = |n_1, n_2, n_3, n_4\rangle$, $|\underline{O}, K\rangle = |n', j, m_1, m_2\rangle$, $|\underline{O}, N\rangle = |n', j, k_1, k_2\rangle$, $|\underline{O}, 2P\rangle = |t_1, t_2, q_1, q_2\rangle$. Спектр энергий $E = \hbar\omega(n_0+2)$, $n_0 = n_1 + n_2 + n_3 + n_4$, кратность вырождения энергии $d = (n_0+1)(n_0+2)(n_0+3)/6$; $2n' + j = n_0$; $2t_1 + 2t_2 + q_1 + q_2 = n_0$; $j = 0, 2, \dots, n_0$ либо $j = 1, 3, \dots n_0$ для четных и нечетных n_0; $0 \le m_1 \le j$, $|m_2| \le m_1$; $|k_1| \le j$, $|k_2| = 0, 2, \dots, j - |k_1|$ либо $|k_2| = 1, 3, \dots \dots j - |k_1|$; $|\underline{\mathcal{H}}, n\rangle = |p_1, p_2, m\rangle$, $|\underline{\mathcal{H}}, s\rangle = |n, l, m\rangle$. Явный вид базисов приведен в пункте 8.

+) Подробные ссылки указаны в [I].

6. Диагональность матриц $\langle \underline{\varrho},2\mathcal{P}\,|\,\underline{\varkappa},n\rangle$ и $\langle \underline{\varrho},N\,|\,\underline{\varkappa},s\rangle$. Диагональность матрицы $\langle \underline{\varrho},2\mathcal{P}\,|\,\underline{\varkappa},n\rangle$ была установлена в работе [I]:

$$\langle \underline{\varrho},2\mathcal{P}\,|\,\underline{\varkappa},n\rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2}\delta_{p_1 t_1}\,\delta_{p_2 t_2}\,\delta_{m q_1}\,\delta_{m q_2}\,, \qquad /4/$$

где a - боровский радиус, а $n = 1, 2, \cdots$ определяет спектр атома водорода.

Докажем диагональность матрицы $\langle \underline{\varrho},N\,|\,\underline{\varkappa},s\rangle$. Начнем с тождества

$$|\underline{\varkappa},s\rangle = \sum \langle \underline{\varrho},N\,|\,\underline{\varkappa},s\rangle\,|\underline{\varrho},N\rangle\,. \qquad /5/$$

Переводя в левой части /5/ с помощью $\varkappa S$ -преобразования /3/ трехмерные сферические координаты в неканонические / $\theta = 2\alpha$, $\varphi = \beta + \gamma$ /, пользуясь ортогональностью функций $\exp(i k_1 \beta)$ и $\exp(i k_2 \gamma)$ и учитывая связь полиномов Якоби с полиномами Лежандра [8]

$$(l+|l|)!\,(\sin 2\alpha)^{|l|}\,P_{L-|l|}^{(|l|,|l|)}(\cos 2\alpha) = 2^{|l|}\,P_L^{|l|}(\cos 2\alpha)\,,$$

получим требуемый ответ

$$\langle \underline{\varrho},N\,|\,\underline{\varkappa},s\rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2}\xi_m\,\delta_{j/2,l}\,\delta_{m k_1}\,\delta_{m k_2}\,, \qquad /6/$$

где $\xi_m = \exp\{i\pi(m+|m|)/2\}$.

Итак, матрицы /4/ и /6/ диагональны. Связываемые ими базисы $\underline{\varkappa}$ и $\underline{\varrho}$ получаются друг из друга одним лишь $\varkappa S$ -преобразованием. При этом, конечно, нужно учитывать и нормировку базисов $\underline{\varkappa}$ и $\underline{\varrho}$.

7. Использование разложения Тартера. Вычислим коэффициенты $\langle \underline{\varrho},N\,|\,\underline{\varkappa},n\rangle$ и $\langle \underline{\varrho},2\mathcal{P}\,|\,\underline{\varkappa},n\rangle$. Известно [9], что разложение параболического базиса $\underline{\varkappa}$ по сферическому базису $\underline{\varkappa}$ определяется так называемой матрицей Тартера. Согласно [10]

$$\langle \underline{\varkappa},s\,|\,\underline{\varkappa},n\rangle = (-1)^{l+\frac{n-1}{2}}\,\xi_{-m}\,T^{l,m}_{(n-1)/2,\,p_1}\,. \qquad /7/$$

Смысл символа ξ_m уже пояснялся выше, а матрицы Тартера выражаются через коэффициенты Клебша-Гордана

$$T_{a,b}^{c,m} = C_{a,a-b;a,b-a+|m|}^{c,|m|} . \qquad /8/$$

Воспользуемся тождеством

$$\langle \underline{\varrho}, \varkappa | \underline{\varkappa}, n \rangle = \sum \langle \underline{\varrho}, \varkappa | \underline{\varkappa}, s \rangle \langle \underline{\varkappa}, s | \underline{\varkappa}, n \rangle . \qquad /9/$$

Подставляя в /9/ соотношения /6/ и /7/, получим

$$\langle \underline{\varrho}, \varkappa | \underline{\varkappa}, n \rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2} (-1)^{j/2+p_1+|m|} \delta_{m\kappa_1} \delta_{m\kappa_2} \cdot T_{(n-1)/2,\, p_1}^{j/2,\, m} . \qquad /10/$$

Аналогичным образом может быть установлена и следующая формула :

$$\langle \underline{\varrho}, 2\mathcal{P} | \underline{\varkappa}, s \rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2} (-1)^{j/2+t_1} \xi_{-m} \delta_{mq_1} \delta_{mq_2} T_{(n-1)/2,\, t_1}^{\ell, m} . \qquad /11/$$

Для перехода от /10/ и /11/ к самим разложениям нужно ещё точно определить, по каким значениям квантовых чисел производится суммирование. Эта процедура вполне очевидна и поэтому мы её опускаем.

<u>8. Осцилляторные коэффициенты.</u> Для полного решения задачи остается вычислить коэффициенты $\langle \underline{\varrho}, \kappa | \underline{\varkappa}, s \rangle$, $\langle \varrho, c | \underline{\varkappa}, n \rangle$, $\langle \underline{\varrho}, \kappa | \underline{\varkappa}, n \rangle$ и $\langle \varrho, c | \underline{\varkappa}, s \rangle$. Из формул /1/, /2/, /4/ и /6/ следует, что эти коэффициенты получаются тривиальным образом из матриц $\langle \varrho, \kappa | \underline{\varrho}, 2\mathcal{P} \rangle$, $\langle \underline{\varrho}, c | \underline{\varrho}, 2\mathcal{P} \rangle$, $\langle \varrho, \kappa | \varrho, \varkappa \rangle$ и $\langle \underline{\varrho}, c | \varrho, \varkappa \rangle$, характеризующих межбазисные разложения в самом осцилляторе. Мы не выписываем здесь явный вид осцилляторных матриц: их можно найти в работе [2]. Приведем лишь окончательные результаты :

$$\langle \underline{\varrho}, \kappa | \underline{\varkappa}, s \rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2} (-1)^{\ell+|m|} (i)^{|m|-m_1} \delta_{m_2 m} \delta_{j/2,\ell} \cdot T_{\ell,\ell}^{m_1, m} , \qquad /12/$$

$$\langle \underline{\varrho}, c | \underline{\varkappa}, n \rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2} (-1)^{p_1+p_2} (-i)^{n_1+n_3} d_{m/2,\nu_1}^{\tau_1}(\pi/2)\, d_{m/2,\nu_2}^{\tau_2}(\pi/2) , \qquad /13/$$

$$\langle \underline{\varrho}, K | \underline{\varkappa}, n \rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2} (-1)^{p_1} (i)^{|m|-m_1} \delta_{n_2 m}\, T^{m_1, m}_{j/2, j/2} \cdot T^{j/2, m}_{(n-1)/2, p_1} , \qquad /14/$$

$$\langle \underline{\varrho}, C | \underline{\varkappa}, S \rangle = \frac{1}{2n}\left(\frac{\pi z}{a}\right)^{1/2} (-1)^{\ell-|m|} (i)^{m+n_4-n_1}\, T^{\ell, m}_{(n-1)/2, (n_1+n_2-|m|)/2} \cdot$$

$$d^{\tau_1}_{m/2, \nu_1}(\pi/2)\, d^{\tau_2}_{m/2, \nu_2}(\pi/2) . \qquad /15/$$

В формулах /12/ - /15/ введены обозначения: $\tau_1 = (n_1+n_2)/2$, $\tau_2 = (n_3+n_4)/2$, $\nu_1 = (n_1 - n_2)/2$, $\nu_2 = (n_3 - n_4)/2$.

Итак, искомые матрицы выражаются через символы Кронекера, коэффициенты Клебша-Гордана и значения функции Вигнера $d^{j}_{\mu\nu}(\beta)$ при $\beta = \pi/2$.

9. <u>Базисы осциллятора.</u> Для однозначного определения межбазисных разложений важно знать не только функциональную зависимость базисов от соответствующих координат, но и точный вид стоящих перед ними фазовых множителей. Пренебрежение этим обстоятельством, т.е. умалчивание выбора фаз, делает межбазисные разложения практически бесполезными в работе. Поэтому прежде всего договоримся о фазах. В дальнейшем/в смысле функциональной зависимости/ параболический и сферический базисы $\underline{\varkappa}$ взяты из [11], сферические функции, функция Вигнера и коэффициенты Клебша-Гордана/в смысле фаз/ - из [12], двойной полярный базис $\underline{\varrho}$ - [1], канонический и неканонический базисы $\underline{\varrho}$ - из [2], декартов базис $\underline{\varrho}$ выбран стандартным образом. Приведем для полноты явный вид базисов осциллятора :

а/ декартов базис

$$|\underline{\varrho}, C\rangle = \lambda^2 \bar{H}_{n_1}(\lambda u_1)\, \bar{H}_{n_2}(\lambda u_2)\, \bar{H}_{n_3}(\lambda u_3)\, \bar{H}_{n_4}(\lambda u_4)$$

$$\bar{H}_n(x) = \frac{e^{-x^2/2}}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!}} H_n(x) \qquad , \quad \lambda = \sqrt{\mu\omega/\hbar} ,$$

б/ канонический и неканонический базисы

$$|\underline{\varrho}, K\rangle = R_{n' j}(u)\, Y_{j m_1 m_2}(\psi, \theta, \varphi) ,$$

$$|\varrho, N\rangle = R_{n'j}(u)\,\widetilde{Y}_{jK_1K_2}(\alpha,\beta,\gamma),$$

$$u = \sqrt{u_1^2+u_2^2+u_3^2+u_4^2},$$

$$R_{n'j}(u) = \left\{\frac{2\lambda^4(n'+j+1)!}{(n')!}\right\}^{1/2}\frac{(\lambda u)^j}{(j+1)!}\,e^{-\lambda^2u^2/2}\,F(-n', j+2; \lambda^2u^2),$$

$$Y_{jm_1m_2}(\psi,\theta,\varphi) = \frac{(-1)^{\widetilde{m}_2}(j)!\{(2j+2)(j-m_1)!(j+m_1+1)!\}^{1/2}}{\pi^{1/2}(2j+1)!\,2^{m_1-2j+1}}\,\cdot$$

$$\cdot(\sin\psi)^{m_1}\,P_{j-m_1}^{(\widetilde{m}_1,\widetilde{m}_1)}(\cos\psi)\,Y_{m_1m_2}(\theta,\varphi),$$

где $Y_{m_1m_2}(\theta,\varphi)$ - обычная сферическая функция, $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ - полином Якоби.

$$\widehat{Y}_{jK_1K_2}(\alpha,\beta,\gamma) = \frac{1}{\pi}\left\{\frac{(j+1)(j_0+\sigma_1)!(j_0-\sigma_1)!}{2(j_0+\sigma_2)!(j_0-\sigma_2)!}\right\}^{1/2}\cdot$$

$$\cdot(\sin\alpha)^{|K_1|}(\cos\alpha)^{|K_2|}\,P_{j_0-\sigma_1}^{(|K_2|,|K_1|)}(\cos 2\alpha)\,e^{i\beta K_1}\cdot e^{i\gamma K_2}.$$

Разъясним принятые обозначения: $\widetilde{m}_1 = (2m_1+1)/2$, $\widetilde{m}_2 = (m_2-|m_1|)/2$, $j_0 = j/2$, $\sigma_1 = (|K_1|+|K_2|)/2$, $\sigma_2 = (|K_1|-|K_2|)/2$.

в/ двойной полярный базис

$$|\varrho, 2P\rangle = \frac{\lambda^2}{\pi}f_{t_1q_1}(\lambda^2\rho_1^2)f_{t_2q_2}(\lambda^2\rho_2^2)\,e^{iq_1\beta}\,e^{iq_2\gamma},$$

$$f_{tq}(x) = \left\{\frac{(t+|q|)!}{(t)!}\right\}^{1/2}\frac{e^{-x/2}}{|q|!}(x)^{|q|/2}F(-t, |q|+1; x).$$

Все базисы нормированы на единицу. Выше при выводе формулы /6/ нами использован явный вид сферического базиса $\mathcal{K}$ и неканонического базиса ϱ. Заметим еще, что с методом построения произвольного гиперсферического базиса многомерного изотропного осциллятора и соответствующей проблемой межбазисных разложений можно ознакомиться по работе [13].

IO. Заключение. Итак, нами вычислены коэффициенты, входящие в разложения параболического и сферического базиса атома водорода по двойному полярному, каноническому, неканоническому и декартову базису четырехмерного изотропного осциллятора. Решение задачи было разделено на три этапа: I/ выявление диагональных коэффициентов; 2/ использование матриц Тартера; 3/ использование явного вида коэффициентов, определяющих межбазисные разложения в самом осцилляторе. На указанном пути не возникает трудностей, характерных для метода, опирающегося на прямом исследовании интегралов перекрытия [I], которые в этой задаче имеют вид многократных интегралов от произведения специальных функций с "сильно перепутанными" аргументами. Отмеченное преимущество позволило решить задачу точно.

Мы благодарны М.Киблеру, любезно приславшему нам работу [I] и тем самым обратившему наше внимание на эту задачу. Мы также признательны С.И.Виницкому, Л.С.Давтяну, И.В.Луценко и Л.И.Пономарёву за полезные обсуждения.

Литература

1. Kibler M., Ronveaux A., Negadi T. LYCEN/8545, 1985.
2. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М., Сообщения ОИЯИ Р2-86-329, Дубна, 1986.
3. Виленкин Н.Я., Кузнецов Г.И. Смородинский Я.А., ЯФ, 1965, 2, 906.
4. Kustaanheimo P. Ann.Univer. Turky, Ser. A1, 73, 1964.
5. Kustaanheimo P., Steifel E. J.Reine angew. Math. 218, 204, 1965.
6. Штифель Е., Штефеле Г. Линейная и регулярная небесная механика, "Наука", М., 1975.
7. Chen A. Phys.Rev., A22, 333-335, 1980.
8. Сегё Г. Ортогональные многочлены, Физматгиз, Москва, 1962.
9. Tarter C.B. J.Math.Phys., 11, 3192, 1970.
10. Арутюнян М.Г., Погосян Г.С., Тер-Антонян В.М. Изв. АН Арм.ССР, 13, № 2, 1978.
11. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. "Наука", М. 1974.
12. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента, "Наука", Л., 1975.
13. Погосян Г.С., Смородинский Я.А., Тер-Антонян В.М. Сообщения ОИЯИ, Р2-82-118, Дубна, 1982.

Рукопись поступила в издательский отдел
2 июля 1986 года.

Мардоян Л.Г. и др. P2-86-431
Точное решение задачи Киблера - Ронвикса - Негади

Точно решена задача о разложениях, связывающих параболический и сферический базисы атома водорода с базисами четырехмерного изотропного осциллятора. Результаты выражены через достаточно полным образом протабулированные коэффициенты Клебша - Гордана группы SU(2) и функцию Вигнера.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод авторов

Mardoyan L.G. et al. P2-86-431
Exact Solution to the Kibler - Ronveaux - Negadi Problem

The problem is exactly solved for expansions of the parabolic and spherical bases of a hydrogen atom over bases of a four-dimensional isotropic oscillator. The results are expressed in terms of tabulated Clebsch - Gordon coefficients of SU(2) group and the Wigner function.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986

10 коп.

Редактор Е.К.Аксенова. Макет Н.А.Киселевой.

Подписано в печать 07.07.86.
Формат 60x90/16. Офсетная печать. Уч.-изд.листов 0,69.
Тираж 490. Заказ 37916.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.
Дубна Московской области.