ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
МЕЖВУЗОВСКОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
«ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ФИЗИКА
И МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ»

(Волгоград, сентябрь 1988)

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

К ПРОБЛЕМЕ МЕЖБАЗИСНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

$\mathcal{KS}$ /Кустаанхеймо-Штифель/-преобразованием принято называть небиективное квадратичное преобразование $R^4 \to R^3$, которое каждой точке $/u_1, u_2, u_3, u_4/$ четырёхмерного пространства R^4 ставит в соответствие точку $/x, y, z/$ трёхмерного пространства R^3 согласно правилу [1]

$$
\begin{aligned}
x &= 2(u_1 u_4 + u_2 u_3) \\
y &= 2(u_2 u_4 - u_1 u_3) \\
z &= u_3^2 + u_4^2 - u_1^2 - u_2^2
\end{aligned}
\qquad /1/
$$

Как известно [2], $\mathcal{KS}$-преобразование квантовомеханическую задачу об атоме водорода приводит к задаче о четырёхмерном изотропном осцилляторе с некоторыми дополнительными условиями. Включение внешних электрических и магнитных /однородных/ полей приводит в u-пространстве к появлению ангармонических членов. Таким образом $\mathcal{KS}$-преобразование устанавливает связь между задачами атомной и ядерной физики, и использование этого факта может привести к взаимному обогащению вычислительных возможностей как той, так и другой области физики.

В связи со случайной вырожденностью энергетического спектра свободного атома водорода построение любой теории возмущений в присутствии внешних полей основывается на правильных волновых функциях невозмущенной системы. В качестве таковых, в зависимости от симметрии внешнего поля, выбираются решения в сферических, параболических либо в более общих, сфероидальных координатах. $\mathcal{KS}$-прообразами сферических и параболических координат являются гиперсферические неканонические и двойные полярные координаты соответственно. Этот факт отмечался в работах [3,4]. В настоящей работе нас интересует вопрос: чему в u-пространстве соответствуют вытянутые сфероидальные координаты, определенные в исходном, физическом трёхмерном x-пространстве? Структура искомых координат может быть установлена следующей цепочкой рассуждений. Вытянутые сфероидальные координаты

$$x = \frac{R}{2}\,sh\mu \sin\vartheta \sin\varphi$$
$$y = \frac{R}{2}\,sh\mu \sin\vartheta \cos\varphi \qquad /2/$$
$$z = \frac{R}{2}(ch\mu \cos\vartheta + 1)$$

при $R \to 0$ и $R \to \infty$ вырождаются в сферические и параболические координаты. Очевидно, KS-прообразом вытянутых сфероидальных координат должны соответствовать такие координаты, которые переходили бы в нужных пределах в неканонические и двойные полярные координаты. Искомый KS-прообраз сфероидальных координат должен иметь вид

$$u_1 = \frac{d}{2}\,sh\xi \sin\eta \sin\varphi_1, \qquad u_3 = \frac{d}{2}\,ch\xi \cos\eta \sin\varphi_2$$
$$u_2 = \frac{d}{2}\,sh\xi \sin\eta \cos\varphi_1, \qquad u_4 = \frac{d}{2}\,ch\xi \cos\eta \cos\varphi_2 \qquad /3/$$

Здесь d - произвольный параметр $/0 \le d < \infty/$, а ξ, η, φ_1 и φ_2 - четырёхмерные сфероидальные координаты, причем:

$$0 \le \xi < \infty, \quad 0 \le \eta \le \frac{\pi}{2}, \quad 0 \le \varphi_1 < 2\pi, \quad 0 \le \varphi_2 < 2\pi$$

При $d \to 0$ четырёхмерные сфероидальные координаты переходят в гиперсферические неканонические

$$u_1 = u \sin\alpha \sin\varphi_1, \qquad u_3 = u \cos\alpha \sin\varphi_2$$
$$u_2 = u \sin\alpha \cos\varphi_1, \qquad u_4 = u \cos\alpha \cos\varphi_2$$

а при $d \to \infty$ в двойные полярные координаты

$$u_1 = \rho_1 \sin\varphi_1, \qquad u_3 = \rho_2 \sin\varphi_2$$
$$u_2 = \rho_1 \cos\varphi_1, \qquad u_4 = \rho_2 \cos\varphi_2$$

Если подставить формулы /3/ в преобразование /I/ и сравнить полученный результат с формулами /2/, то можно установить следующие соотношения

$$R = d^2/4, \quad \mu = 2\xi, \quad \vartheta = 2\eta, \quad \varphi = \varphi_1 + \varphi_2 \qquad /4/$$

связывающие вытянутые сфероидальные координаты с их четырёхмерными KS-прообразами.

Сформулируем теперь связь между пространствами R^4 и R^3 индуцируемую KS-преобразованием на языке уравнения Шрёдингера для кулоновского поля $V = -Ze^2/r$. Решить уравнение Шрёдингера

$$\Delta_x \psi(\vec{r}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E + \frac{2e^2}{r}\right]\psi(\vec{r}) = 0 \qquad /5/$$

-это то же самое, что найти такие решения уравнения

$$\Delta_u \Phi(\vec{u}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\varepsilon - \frac{\mu\omega^2 u^2}{2}\right]\Phi(\vec{u}) = 0 \qquad /6/$$

которые удовлетворяют двум дополнительным условиям

а/ $\Phi(-\vec{u}) = \Phi(\vec{u})$

б/ $\hat{X}\,\Phi(\vec{u}) = 0$

Здесь введены обозначения: $\vec{u}$ - радиус-вектор в R^4, $u^2 = u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 + u_4^2 = (x^2+y^2+z^2)^{1/2}$, $\varepsilon = 4 Z e^2$, $-4E = \mu\omega^2/2$

$$\hat{X} = u_1\frac{\partial}{\partial u_2} - u_2\frac{\partial}{\partial u_1} + u_4\frac{\partial}{\partial u_3} - u_3\frac{\partial}{\partial u_4} \qquad /7/$$

Условие /а/ отражает квадратичность преобразования /I/: точкам $-\vec{u}$ и $\vec{u}$ соответствует одна и та же точка пространства R^3. Условие /б/ отбирает среди решений уравнения /6/ лишь те, которые зависят только от трёх переменных x, y, z. В самом деле, в сфероидальных координатах /3/ оператор /7/ имеет вид

$$\hat{X} = \frac{\partial}{\partial \varphi_2} - \frac{\partial}{\partial \varphi_1}$$

Введем новые независимые переменные $\varphi_\pm = \varphi_2 \pm \varphi_1$. Очевидно, оператор $\hat{X}$ зависит лишь от переменной φ_-, а именно

$$\hat{X} = 2\frac{\partial}{\partial \varphi_-}$$

Отсюда ясно, что условие /б/ выделяет решения, зависящие от трёх переменных ξ, η, φ_+.

Теперь разделяя переменные в уравнениях /5/ и /6/ в сфероидальных координатах /2/ и /3/ соответственно, т.е. полагая

$$\psi(\mu, \nu, \varphi, R) = \Pi(\mu; R)\,\Xi(\nu; R)\,\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}} \qquad /8/$$

$$\Phi(\xi, \eta, \varphi_1, \varphi_2, d^2) = X(\xi; d^2)\,Y(\eta; d^2)\,\frac{e^{i(m_1\varphi_1 + m_2\varphi_2)}}{2\pi} \qquad /9/$$

приходим к двум системам обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\begin{cases} \dfrac{1}{\operatorname{sh}\mu}\dfrac{d}{d\mu}\left[\operatorname{sh}\mu\dfrac{d\Pi}{d\mu}\right]+\left[\dfrac{\mu E R^2}{2\hbar^2}\operatorname{ch}^2\mu+\dfrac{\mu Z e^2 R}{\hbar^2}\operatorname{ch}\mu-\dfrac{m^2}{\operatorname{sh}^2\mu}-A(R)\right]\Pi=0 & /10а/ \\ \dfrac{1}{\sin\nu}\dfrac{d}{d\nu}\left[\sin\nu\dfrac{d\Xi}{d\nu}\right]-\left[\dfrac{\mu E R^2}{2\hbar^2}\cos^2\nu+\dfrac{\mu Z e^2 R}{\hbar^2}\cos\nu+\dfrac{m^2}{\sin^2\nu}-A(R)\right]\Xi=0 & /10б/ \end{cases}$$

$$\frac{1}{\operatorname{sh}2\xi}\frac{d}{d\xi}\left[\operatorname{sh}2\xi\frac{dX}{d\xi}\right]+\left[\frac{\mu E d^2}{4\hbar^2}\operatorname{ch}2\xi-\frac{\mu^2\omega^2 d^4}{64\hbar^2}\operatorname{ch}^2 2\xi+\frac{m_1^2}{\operatorname{ch}^2\xi}-\frac{m_2^2}{\operatorname{sh}^2\xi}-Q(d)\right]X=0 \quad /11а/$$

$$\frac{1}{\sin 2\eta}\frac{d}{d\eta}\left[\sin 2\eta\frac{dY}{d\eta}\right]-\left[\frac{\mu E d^2}{4\hbar^2}\cos 2\eta-\frac{\mu^2\omega^2 d^4}{64\hbar^2}\cos^2 2\eta+\frac{m_1^2}{\cos^2\eta}+\frac{m_2^2}{\sin^2\eta}-Q(d)\right]Y=0 \quad /11б/$$

в которых через A и Q обозначены кулоновская и осцилляторная константы разделения. Сравнение этих уравнений приводит к следующим выводам: во первых условие /б/ отбирает лишь решения /9/, для которых $m_1 = m_2 = m$, во вторых, если обозначить через n, q, k /$n = q + k + |m|$/ и N, t, p /$N = 2t + 2p + |m_1| + |m_2|$/ главные квантовые числа и число нулей радиальных и угловых функций Π, Ξ и X, Y соответственно, то условие однозначности /а/ отбирает лишь решения /9/ с $N = 2n$ и $p = q$. В-третьих, кулоновская константа разделения A получается из осцилляторной константы разделения Q с помощью простой формулы

$$A_{nqm} = \frac{1}{4} Q_{2n,q,m}$$

Итак, переход от кулоновского сфероидального базиса к осцилляторному тривиален, т.е. не требует отдельного межбазисного разложения или, иными словами, коэффициент этого межбазисного разложения представляет символ Кроннекера по соответствующим квантовым числам. Столь простая связь между базисами кулоновского и осцилляторного полей известна лишь для разложения сферического и параболического базисов атома водорода по неканоническому и двойному полярному базису четырёхмерного осциллятора [3,4]. Стало быть указанное свойство сохраняется при переходе от этих предельных базисов к более общим сфероидальным "партнёрам" по $\mathcal{K}S$ -преобразованию.

Выше мы говорили о правилах отбора, позволяющих выделить на осцилляторного базиса базис атома водорода. Рассмотрим теперь сфероидальный базис четырёхмерного изотропного осциллятора более детально. Сфероидальному базису /9/ должен соответствовать некоторый оператор $\hat{Q}$ для которого константа разделения Q и функции /9/ являются собственным значением и собственными функциями:

$$\hat{Q}\,\Phi(\vec{u}) = Q\,\Phi(\vec{u}) \qquad /12/$$

Явный вид оператора $\hat{Q}$ может быть получен из уравнений /11/ простым методом, именно, посредством исключения из них энергии $\mathcal{E}$. Приведем окончательный ответ:

$$\hat{Q} = -\frac{1}{\operatorname{ch}2\xi-\cos 2\eta}\left\{\frac{\cos 2\eta}{\operatorname{sh}2\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\operatorname{sh}2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\frac{\operatorname{ch}2\xi}{\sin 2\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\sin 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)+\right.$$
$$\left.+\left(\frac{\operatorname{ch}2\xi}{\sin^2\eta}+\frac{\cos 2\eta}{\operatorname{sh}^2\xi}\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\left(\frac{\operatorname{ch}2\xi}{\cos^2\eta}-\frac{\cos 2\eta}{\operatorname{ch}^2\xi}\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\right\}+\frac{\mu^2\omega^2\alpha^4}{64\hbar^2}\operatorname{ch}2\xi\cos 2\eta \qquad /13/$$

Этот оператор, конечно, коммутирует с гамильтонианом и поэтому является дополнительным интегралом движения, фиксирующим сфероидальный базис осциллятора. В отличие от гамильтониана, в котором зависимость от параметра α фиктивна, т.е. исчезает с переходом к декартовым координатам, оператор $\hat{Q}$ реально зависит от α. В этом можно убедиться с помощью довольно трудоемких вычислений, переводящих оператор $\hat{Q}$ на язык декартовых координат.

$$\hat{Q} = \hat{\vec{J}}^2 + \frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{\alpha^2}{4}\hat{\mathcal{S}} - \left(\frac{\mu\omega}{\hbar}\right)^2\frac{\alpha^4}{64} \qquad /14/$$

Входящие в эту формулу безразмерные операторы $\hat{\vec{J}}^2$ и $\hat{\mathcal{S}}$ не зависят от параметра α и определены следующим образом:

$$\hat{\vec{J}}^2 = -\sum_{i<j}\left(u_i\frac{\partial}{\partial u_j}-u_j\frac{\partial}{\partial u_i}\right)^2 \equiv \sum_{i<j}\left(\hat{L}_{ij}\right)^2$$

$$\hat{\mathcal{S}} = \frac{\hbar}{2\mu\omega}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2}+\frac{\partial^2}{\partial u_2^2}-\frac{\partial^2}{\partial u_3^2}-\frac{\partial^2}{\partial u_4^2}\right)+\frac{\mu\omega}{\hbar}\left(u_3^2+u_4^2-u_1^2-u_2^2\right)$$

Из приведенных формул следует, что оператор $\hat{Q}$ действительно зависит от параметра d. Прямая проверка показывает, что операторы $\hat{\mathcal{L}}_{ij}$, $\hat{J}^2$ и $\hat{\Gamma}$ коммутируют с гамильтонианом, а операторы $\hat{J}^2$ и $\hat{\Gamma}$ между собой не коммутируют. В работе [5] нами было показано, что неканонический идвойной полярный базисы четырёхмерного осциллятора определяются полными наборами операторов $\{\hat{\mathcal{H}}, \hat{J}^2, \hat{\mathcal{L}}_{12}, \hat{\mathcal{L}}_{34}\}$ и $\{\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Gamma}, \hat{\mathcal{L}}_{12}, \hat{\mathcal{L}}_{34}\}$. В этом же смысле полный набор операторов $\{\hat{\mathcal{H}}, \hat{Q}, \hat{\mathcal{L}}_{12}, \hat{\mathcal{L}}_{34}\}$ фиксирует сфероидальный базис, из которого, как это подсказывает формула /14/, отмеченные выше два базиса получаются в пределах малых и больших значений параметра d. Сказанное приводит к следующей классификации состояний по квантовым числам. Обозначим через N_1 и N_2 главные квантовые числа, соответствующие двумерным осцилляторам, отнесенным к координатам / u_1, u_2 / и / u_3, u_4 /, та что $N = N_1 + N_2$. Согласно [5], числа N и $|m_1|+|m_2|$ обязаны иметь одинаковую четность, а собственные значения операторов $\hat{\Gamma}$ и $\hat{J}^2$ равны $N_2 - N_1$ и $j(j+2)$, причем при данных N, m_1 и m_2 квантовые числа j и N_2 пробегают значения:

$$j = |m_1|+|m_2|,\ |m_1|+|m_2|+2, \ldots, N$$

$$N_2 = |m_2|,\ |m_2|+2, \ldots, N-|m_1| \qquad /15/$$

Волновая функция /9/ зависит от четырех квантовых чисел: главного квантового числа N, определяющего спектр энергии $E = \hbar\omega(N+2)$, двух азимутальных квантовых чисел m_1 и m_2 и специфического для сфероидальных координат квантового числа q, нумерующего дискретные значения сфероидальной константы разделения Q. Факт дискретности собственных значений константы Q при фиксированном d не очевиден, но может быть установлен стандартными методами, используемыми с этой целью в теории кулоновских сфероидальных функций [6] при анализе уравнений аналогичных уравнениям /11/.

Введем для удобства вместо оператора $\hat{Q}$ оператор

$$\hat{\Lambda} = \hat{J}^2 + \frac{\mu\omega}{\hbar}\frac{d^2}{4}\hat{\Gamma} \qquad /16/$$

и обозначим соответствующие ему собственные значения через λ_q.

Наша задача заключается в исследовании уравнения

$$\hat{\Lambda}\Phi_q = \lambda_q \Phi_q \qquad /17/$$

Будем действовать двумя параллельными путями. Разложим сфероидальный базис φ_ℓ по неканоническому и по двойному полярному базисам ψ_j и χ_{N_2} :

$$\varphi_\ell = \sum_j W_\ell^j \psi_j$$
$$\phi_\ell = \sum_{N_2} U_\ell^{N_2} \chi_{N_2} \qquad /18/$$

Здесь индексом, по которым ведется суммирование, пробегают значения диктуемые формулами /15/, а неизвестными являются коэффициенты W_ℓ^j и $U_\ell^{N_2}$. Подставляя /18/ в /17/ и используя /16/, приходим к алгебраическим уравнениям

$$[\lambda_\ell - j(j+2)] W_\ell^j = \frac{\mu\omega d^2}{4t} \sum_{j'} W_\ell^{j'} \int \psi_j^* \hat{j} \psi_{j'} dv$$
$$[\lambda_\ell - \frac{\mu\omega d^2}{4t}(N_2-N_1)] U_\ell^{N_2} = \sum_{N_2'} U_\ell^{N_2'} \int \chi_{N_2}^* \hat{f} \chi_{N_2'} dv \qquad /19/$$

Теперь основная задача сводится к вычислению матричных элементов , стоящих в правых частях уравнений /19/. Воспользуемся известным из [5] разложением неканонического базиса по двойному полярному

$$\psi_j = \sum_{N_2} E_j^{N_2} \chi_{N_2} \qquad /20/$$

Матрицы $E_j^{N_2}$ суть коэффициенты Клебша-Гордана

$$E_j^{N_2} = (-1)^{(N-j+N_2-|m|)/2} C_{a\alpha;\, b\beta}^{c,\gamma} .$$
$$c = j/2, \qquad \gamma = (|m_1|+|m_2|)/2$$
$$a = (N-|m_1|+|m_2|)/2, \quad \alpha = \frac{N_2}{2} - (N-|m_1|-|m_2|)/4$$
$$b = (N+|m_1|-|m_2|)/2, \quad \beta = -\frac{N_2}{2} + (N+|m_1|+|m_2|)/4$$

После подстановки /20/ в /19/ интегралы берутся элементарно и остается вычислить суммы, в которых входит произведение коэффициентов $E_j^{N_2} E_j^{N_2'}$ на факторы (N_2-N_1) и $j(j+2)$ соответственно. Эта вспомогательная задача решается с помощью известных [7] рекуррентных соотношений и условий нормировки для коэффициентов Клебша-Гордана. На этом пути легко доказать, что

$$\int \psi_{j}^{*} \hat{\mathcal{P}} \psi_{j'} dV = A_{j+2} \delta_{j';j+2} + A_j \delta_{j';j-2} + B_j \delta_{j';j}$$

$$\int \chi_{N_2}^{*} \hat{\mathbf{J}}^2 \chi_{N_2'} dV = C_{N_2+2} \delta_{N_2';N_2+2} + C_{N_2} \delta_{N_2';N_2-2} + \mathcal{D}_{N_2} \delta_{N_2';N_2}$$

где коэффициенты A, B, C и $\mathcal{D}$ определены выражениями

$$A_j = -\sqrt{\frac{(j+|m_1|+|m_2|)(j-|m_1|-|m_2|)(j+|m_1|-|m_2|)(j-|m_1|+|m_2|)(N-j-2)(N+j+4)}{4j^2(j-1)(j+1)}}$$

$$B_j = -\frac{(|m_1|+|m_2|)(|m_1|-|m_2|)(N+2)}{j(j+2)}$$

$$C_{N_2} = -\sqrt{(N_2-|m_2|)(N_2+|m_2|)(N-N_2-|m_1|-2)(N-N_2+|m_1|-2)}$$

$$\mathcal{D}_{N_2} = 2(N_2+1)(N-N_2+1)+m_1^2+m_2^2-2$$

Возвращаясь к полученным выше двум алгебраическим уравнениям /19/ приходим к трехчленным рекуррентным соотношениям:

$$\begin{cases} A_{j+2} W_2^{j+2} + \left\{ B_j + \frac{4\ell}{\hbar\omega d^2}\left[j(j+2)-\lambda_2\right]\right\} W_2^{j} + A_j W_2^{j-2} = 0 \\ \sum_j |W_2^j|^2 = 1 \end{cases}$$

$$\begin{cases} C_{N_2+2} U_2^{N_2+2} + \left[\mathcal{D}_{N_2} + \frac{\hbar\omega d^2}{4\ell}(2N_2-N)-\lambda\right] U_2^{N_2} + C_{N_2} U_2^{N_2-2} = 0 \\ \sum_{N_2} |U_2^{N_2}|^2 = 1 \end{cases}$$

Каждое из этих рекуррентных соотношений вместе с приложенным к нему условием нормировки служит основой для чисто алгебраической схемы точного, либо приближенного решения задачи о сфероидальном базисе четырёхмерного осциллятора.

Литература

1. Kustaanheimo P, Stiefel E. J Reine Angew Math 1965, 218, 204

2. Kibler M., Negadi T. Croatica Cemica Acta, CCACAA, 1984, 57(6), 1509

3. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Сообщения ОИЯИ, Р2-86-431, Дубна, 1986.

4. Kibler M., Ronveaux A., Negadi T. J. Math. Phys., 1986, 27 (9).

5. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Сообщения ОИЯИ, Р2-86-436, Дубна, 1986.

6. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. Наука, М., 1976.

7. Варшалович Д.А., Москалёв А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. Наука, Л., 1975.