



Объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P5-87-211

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

ОБОБЩЕННОЕ KS -ПРЕОБРАЗОВАНИЕ:
ОТ 5-МЕРНОГО АТОМА ВОДОРОДА
К 8-МЕРНОМУ ИЗОТРОПНОМУ ОСЦИЛЛЯТОРУ

Направлено в журнал "Journal of Physics A"

* Ереванский государственный университет

1987

Известно^{1/}, что задача об атоме водорода может быть приведена к задаче о 4-мерном изотропном осцилляторе с помощью так называемого **KS** - преобразования. Означает ли это, что многие хорошо разработанные методы квантовой теории поля и ядерной физики смогут найти эффективное применение также при исследовании поведения водородо-подобных атомов во внешних электрических и магнитных полях? Каковы взаимосвязи между группами динамической симметрии атома водорода и 4-мерного изотропного осциллятора? Каков явный вид преобразований, связывающих волновые функции атома водорода с волновыми функциями 4-осциллятора? Обобщается ли отмеченный выше факт на другие размерности, т.е. сводится ли f -мерный атом водорода к изотропному осциллятору какой-либо размерности? Относительно первого вопроса авторы работы^{1/} высказываются оптимистически. Второй вопрос исследовался в работе^{2/}, а третий был сформулирован и доведен до уровня, при котором возможно вычисление на ЭВМ в работе^{3/} и затем решен точно, т.е. аналитическим путем, в работе^{4/}. Прокомментируем теперь последний, четвертый, вопрос. При $f = 2$ переход от атома водорода к осциллятору осуществляется преобразованием $x = u_1^2 - u_2^2$, $y = 2u_1u_2$. Здесь не возникает, как это имеет место при $f = 3$, необходимости повышать размерность пространства. Приведенный пример, как и **KS** - преобразование, относится к классу так называемых небиективных квадратичных преобразований, важнейшим свойством которых является выполнение тождества Эйлера

$$(u_1^2 + \dots + u_n^2)^2 = x_1^2 + \dots + x_f^2. \quad (I)$$

В нашем контексте x_i и u_k - это координаты, относящиеся к атому водорода и к изотропному осциллятору соответственно. Известно^{5/}, что тождество (I) выполняется лишь для следующих четырех пар, составленных из индексов размерности пространств n и f :

$$(f, n) = (1, 1), (2, 2), (3, 4), (5, 8). \quad (2)$$

Пары (2,2) и (3,4) соответствуют преобразованиям, о которых говорилось выше. Возникает вопрос: переводит ли преобразование, связанное с парой (5,8), задачу о 5-мерном атоме водорода в задачу о 8-мерном изотропном осцилляторе? Настоящая статья дает положительный ответ на этот вопрос. Таким образом, за исключением пары (1,1), набор (2) полностью исчерпывает возможные небиективные квадратичные преобразования, переводящие водородную задачу в осцилляторную.

Введем небиективное квадратичное преобразование, связывающее координаты (x_1, \dots, x_5) пространства \mathbb{R}^5 с координатами (u_1, \dots, u_8) пространства \mathbb{R}^8

$$q_m = \sum_{j=1}^8 T_{mj} u_j, \quad (3)$$

где $\vec{q} = (x_1, \dots, x_5, 0, 0, 0)$, а T_{mj} имеет следующий вид:

$$T_{mj} = \begin{bmatrix} u_2 & u_1 & u_4 & u_3 & u_6 & u_5 & -u_8 & -u_7 \\ u_4 & -u_3 & -u_2 & u_1 & u_8 & u_7 & u_6 & u_5 \\ u_6 & -u_5 & -u_8 & -u_7 & -u_2 & u_1 & -u_4 & -u_3 \\ u_8 & u_7 & u_6 & -u_5 & -u_4 & u_3 & u_2 & -u_1 \\ u_1 & -u_2 & u_3 & -u_4 & u_5 & u_6 & u_7 & -u_8 \\ u_3 & u_4 & -u_1 & -u_2 & u_7 & -u_8 & -u_5 & u_6 \\ u_5 & u_6 & -u_7 & u_8 & -u_1 & -u_2 & u_3 & -u_4 \\ u_7 & -u_8 & u_5 & u_6 & -u_3 & -u_4 & u_1 & u_2 \end{bmatrix} \quad (4)$$

Матрица (4) отличается от известной в математике матрицы Кэли /5,6/ лишь определенной перестановкой строк. Из (3) и (4) следуют билинейные соотношения, связывающие координаты \vec{x} и \vec{u}

$$\begin{aligned} x_1 &= 2(u_1 u_2 + u_3 u_4 + u_5 u_6 - u_7 u_8), \\ x_2 &= 2(u_1 u_4 - u_2 u_3 + u_5 u_8 + u_6 u_7), \end{aligned} \quad (5)$$

$$x_3 = 2(u_1 u_6 - u_2 u_5 - u_3 u_8 - u_4 u_7),$$

$$x_4 = 2(u_1 u_8 + u_2 u_7 + u_3 u_6 - u_4 u_5),$$

$$x_5 = u_1^2 + u_3^2 + u_5^2 + u_7^2 - u_2^2 - u_4^2 - u_6^2 - u_8^2.$$

Подчеркнем, что каждому элементу в \mathbb{R}^5 соответствует не один элемент, а целое множество элементов в \mathbb{R}^8 , называемое слоем. В этом и состоит свойство небиективности преобразования $\mathbb{R}^5 \leftarrow \mathbb{R}^8$.

Пользуясь явным видом матрицы (4), легко показать, что

$$\sum_{j=1}^8 T_{mj} T_{nj} = u^2 \delta_{mn}, \quad (6)$$

$$\sum_{j=1}^8 \frac{\partial T_{mj}}{\partial u_j} = 0, \quad (7)$$

где $u^2 \equiv u_1^2 + \dots + u_8^2$. Тождество Эйлера (I) имеет вид

$$x^2 \equiv x_1^2 + \dots + x_5^2 = u^4 \quad (8)$$

и проверяется с помощью формул (3) и (6), либо формул (5). Из (4) также следует, что

$$\frac{\partial x_m}{\partial u_j} = 2 T_{mj}. \quad (9)$$

В последней формуле индекс m пробегает значения 1,2,...,5.

Займемся теперь преобразованием производных. Учитывая (9), получим

$$\frac{\partial \mathcal{F}(u)}{\partial u_j} = 2 \sum_{k=1}^5 T_{kj} \frac{\partial \mathcal{F}(u)}{\partial x_k}, \quad (10)$$

где $\mathcal{F}(u)$ — произвольная функция от \vec{u} . Умножая (10) на T_{mj} , суммируя по j и имея в виду условие (6), легко показать, что

$$\frac{\partial \mathcal{F}(u)}{\partial x_m} = \frac{1}{2u^2} \sum_{j=1}^8 T_{mj} \frac{\partial \mathcal{F}(u)}{\partial u_j} \quad (II)$$

(напомним, что в (II) $m = 1, 2, \dots, 5$). Введем следующее обозначение:

$$\frac{\partial}{\partial q_m} \equiv \frac{1}{2u^2} \sum_{j=1}^8 T_{mj} \frac{\partial}{\partial u_j}, \quad (I2)$$

где $m = 1, 2, \dots, 8$. Формула (I2) обобщает соотношение (II) на случай $m = 6, 7, 8$. Совершив в (II) обратное преобразование, с помощью (6) получим операторную формулу, обобщающую (IO):

$$\frac{\partial}{\partial u_j} = 2 \sum_{m=1}^8 T_{mj} \frac{\partial}{\partial q_m}. \quad (I3)$$

Рассмотрим вторые производные. Из (I2) следует, что

$$\sum_{m=1}^8 \frac{\partial^2 F(u)}{\partial q_m^2} = \frac{1}{2} \sum_{m=1}^8 \sum_{j=1}^8 \frac{\partial}{\partial q_m} \left[\frac{1}{u^2} T_{mj} \frac{\partial F(u)}{\partial u_j} \right]. \quad (I4)$$

Повторно применяя формулу (I2) и учитывая условие (6), получим

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^8 \frac{\partial^2 F(u)}{\partial q_m^2} &= \frac{1}{4u^2} \sum_{m=1}^8 \sum_{j=1}^8 \sum_{v=1}^8 T_{mv} \left(\frac{\partial}{\partial u_v} \frac{1}{u^2} T_{mj} \right) \frac{\partial F(u)}{\partial u_j} + \\ &+ \frac{1}{4u^2} \sum_{v=1}^8 \frac{\partial^2 F(u)}{\partial u_v^2}. \end{aligned}$$

В первом члене можно провести дифференцирование по частям и воспользоваться условием (6) и затем тождеством (7), в результате, получим

$$\sum_{m=1}^8 \frac{\partial^2 F(u)}{\partial q_m^2} = \frac{1}{4u^2} \sum_{v=1}^8 \frac{\partial^2 F(u)}{\partial u_v^2}. \quad (I5)$$

Соотношение (I5) вместе с тождеством (8) – это весь "математический арсенал", требующийся для преобразования гамильтониана 5-мерного атома водорода в гамильтониан 8-мерного изотропного осциллятора. Перед тем как заняться этим преобразованием, вернемся к формуле (I2).

Введем операторы

$$\hat{\mathcal{L}}_m = iu^2 \frac{\partial}{\partial q_m} = \frac{i}{2} \sum_{j=1}^8 T_{mj} \frac{\partial}{\partial u_j}. \quad (I6)$$

Из этого определения и формулы (9) следует, что

$$\hat{\mathcal{L}}_m X_k = iu^2 \delta_{mk} = 0,$$

т.к. $m = 6, 7, 8$, а $k = 1, 2, \dots, 5$. Таким образом, операторы (I6) не зависят от координат x_1, \dots, x_5 и поэтому для произвольной функции $F(x)$ справедливо тождество

$$\hat{\mathcal{L}}_m F(x) = 0. \quad (I7)$$

Исходя из формулы (I6) и матрицы (4), можно доказать, что операторы (I6) имеют следующий явный вид:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{L}}_6 &= \frac{i}{2} \left(u_5 \frac{\partial}{\partial u_1} + u_4 \frac{\partial}{\partial u_2} - u_1 \frac{\partial}{\partial u_3} - u_2 \frac{\partial}{\partial u_4} + u_7 \frac{\partial}{\partial u_5} - u_6 \frac{\partial}{\partial u_8} - u_3 \frac{\partial}{\partial u_7} + u_8 \frac{\partial}{\partial u_6} \right) \\ \hat{\mathcal{L}}_7 &= \frac{i}{2} \left(u_5 \frac{\partial}{\partial u_1} + u_6 \frac{\partial}{\partial u_2} - u_7 \frac{\partial}{\partial u_3} + u_8 \frac{\partial}{\partial u_4} - u_4 \frac{\partial}{\partial u_5} - u_5 \frac{\partial}{\partial u_6} + u_3 \frac{\partial}{\partial u_7} - u_2 \frac{\partial}{\partial u_8} \right) \\ \hat{\mathcal{L}}_8 &= \frac{i}{2} \left(u_7 \frac{\partial}{\partial u_1} - u_8 \frac{\partial}{\partial u_2} + u_5 \frac{\partial}{\partial u_3} + u_6 \frac{\partial}{\partial u_4} - u_3 \frac{\partial}{\partial u_5} - u_4 \frac{\partial}{\partial u_6} - u_1 \frac{\partial}{\partial u_7} + u_2 \frac{\partial}{\partial u_8} \right). \end{aligned}$$

Связем теперь задачу о 5-мерном атоме водорода с задачей о 8-мерном изотропном осцилляторе. Пусть (x_1, \dots, x_5) и (u_1, \dots, u_8) – декартовы координаты, относящиеся к первой и второй задаче. Из формулы (I5) с учетом (I6) следует, что лапласианы Δ_x и Δ_u связаны соотношением

$$\Delta_x = \frac{1}{4u^2} \Delta_u + \frac{1}{u^4} \hat{\mathcal{L}}^2, \quad (I8)$$

в котором оператор $\hat{\mathcal{L}}^2$ определяется как

$$\hat{\mathcal{L}}^2 = \hat{\mathcal{L}}_6^2 + \hat{\mathcal{L}}_7^2 + \hat{\mathcal{L}}_8^2. \quad (I9)$$

Соотношение (I8) и формулы (I7) и (I9) позволяют преобразовать уравнение Шредингера для 5-мерного атома водорода

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_x - \frac{e^2}{r}\right)\psi(x) = E\psi(x) \quad (20)$$

к следующему виду:

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_u - 4E u^2\right)\psi(u) = 4e^2\psi(u) \quad (21)$$

Сравним полученное уравнение с уравнением Шредингера для 8-мерного изотропного осциллятора

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_u + \frac{\mu\omega^2 u^2}{2}\right)\Phi(u) = E\Phi(u). \quad (22)$$

Уравнение (22) имеет физически допустимые решения, если выполняется условие

$$\frac{E}{\hbar\omega} - 4 = N, \quad N = 0, 1, 2, \dots \quad (23)$$

Из (23) следует, что при заданном ω квантуется E (это стандартная ситуация), и, наоборот, при заданном E квантуется частота ω . Функция $\psi(x)$ будет частным решением уравнения (22), удовлетворяющим тождеству

$$\hat{\mathcal{Z}}_m \Phi(u) = 0,$$

если выполняются условия

$$\frac{\mu\omega^2}{2} = -4E, \quad 4e^2 = E. \quad (24)$$

Кроме того, из (5) следует, что $\psi(x)$ есть четная функция переменных u :

$$\psi(x(u)) = \psi(x(-u)).$$

Поэтому любое решение уравнения (20), $\psi(x)$ может быть разложено по полной системе четных решений $\Phi_{N\alpha}(u)$ (α - остальные квантовые

числа) уравнения (22), т.е.

$$\psi_n(\vec{x}) = \sum_{\alpha} C_{n\alpha} \Phi_{N\alpha}(u),$$

где

$$N = 2n. \quad (25)$$

Нетрудно убедиться, что n совпадает с главным квантовым числом 5-мерного атома водорода. Действительно, подставляя второе условие из (24) и (25) в (23), имеем

$$\omega_n = \frac{2e^2}{\hbar(n+2)}. \quad (26)$$

Таким образом, в нашем случае заданы величины E и квантуется частота ω . Подставляя теперь (26) в первое условие (24), мы приходим к выражению, определяющему энергетический спектр 5-мерного атома водорода

$$E_n = -\frac{\mu e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{(n+2)^2}.$$

Возвратимся теперь к операторам (I6) и переобозначим их следующим образом:

$$\hat{J}_1 = \hat{\mathcal{Z}}_6, \quad \hat{J}_2 = \hat{\mathcal{Z}}_7, \quad \hat{J}_3 = \hat{\mathcal{Z}}_8. \quad (27)$$

Пользуясь явным видом операторов $\hat{\mathcal{Z}}_6$, $\hat{\mathcal{Z}}_7$ и $\hat{\mathcal{Z}}_8$, можно прямым вычислением доказать, что операторы (27) удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$\hat{J}_i \hat{J}_k - \hat{J}_k \hat{J}_i = i e_{ikm} \hat{J}_m,$$

в которых $i, k = 1, 2, 3$. Вычисления показывают, что операторы (27) коммутируют с гамильтонианом осциллятора

$$\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta_u + \frac{\mu\omega^2 u^2}{2}, \quad \hat{J}_i \hat{H}_0 - \hat{H}_0 \hat{J}_i = 0.$$

Таким образом, существуют состояния, в которых одновременно измеримы энергия осциллятора, проекция "момента" J_z и квадрат момента $J(J+1)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Kibler M., Negadi T. Croatica Chemica Acta, CCACAA, 57 (6), 1984, p. 1509.
2. Chen A.C., J.Math.Phys., 23 (3), 1982.
3. Kibler M., Ronveaux A., Negadi T., J.Math.Phys., 27 (6), 1986.
4. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М., препринт ОИЯИ Р2-86-43I, 1986.
5. Жевлаков К.А., Слинько А.М., Шестаков И.П., Ширшов А.И. Кольца, близкие к ассоциативным, Москва, 1978, Наука .
6. Lambert D., Kibler M., LYSEN 8667, Oct. 1986.

Давтян Л.С. и др.

P5-87-211

Обобщенное KS-преобразование:
от 5-мерного атома водорода
к 8-мерному изотропному осциллятору

Показано, что небиективное квадратичное преобразование, генерируемое матрицей Кели, переводит задачу о 5-мерном атоме водорода в задачу о 8-мерном изотропном осцилляторе.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Г.Г.Сандуковской

Davtyan L.S. et al.

P5-87-211

Generalised KS-transformation:
from 5-dimensional Hydrogen Atom
to 8-dimensional Isotope Oscillator

It is shown that non-bijective quadratic transformation generated by the Kelly matrix changes the problem of a 5-dimensional hydrogen atom into the problem of an 8-dimensional oscillator.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987

Рукопись поступила в издательский отдел
3 апреля 1987 года.