

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

B 486

P11-87-303

С.И.Виницкий, В.А.Ростовцев

**ПРИМЕНЕНИЕ СИСТЕМЫ REDUCE В ЗАДАЧАХ
ОБ АТОМЕ ВОДОРОДА
В ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ**

Направлено в Оргкомитет Европейской
конференции по компьютерной алгебре
"Еврокал - 87", Лейпциг, ГДР, июнь 1987 г.

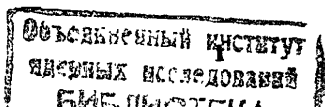
1987

1. В последнее время системы атом + поле интенсивно исследуются как теоретически, так и экспериментально, см., например, обзор ^{/1/}. При теоретическом описании таких систем необходимо прежде всего построить теорию возмущений (Т В). Для реализации Т В удобно использовать систему REDUCE ^{/2/}.

В наших предыдущих работах ^{/3,4/} мы использовали REDUCE для вычисления энергии и волновых функций атома водорода в неоднородном электрическом поле. В данной работе для простоты ограничимся рассмотрением однородного поля F. Цель работы - продемонстрировать возможности применения REDUCE для решения задач Т В квантовой механики на современном языке группы динамической симметрии. Напомним, что для атома водорода в отсутствие поля такой группой является $SO(4)$, введенная В.А.Фоком ^{/5/}.

2. Наш подход ^{/6/} основан на использовании динамической группы $so(4,2)$ ^{/7/}, которая позволяет включить в рассмотрение и внешнее поле. Унитарное неприводимое представление алгебры $so(4,2)$ связано дилатационным преобразованием с функциями дискретного спектра атома водорода, а возмущения полиномиального вида непосредственно выражаются через генераторы алгебры $so(4,2)$. Поэтому решение исходной спектральной задачи сводится к чисто алгебраической процедуре, идеально приспособленной для ее реализации с помощью REDUCE. В отличие от стандартных Т В здесь в каждом конечном порядке поправки к собственным функциям выражаются в виде линейной комбинации конечного числа базисных функций унитарного неприводимого представления $so(4,2)$. Поправки к собственным значениям и коэффициенты этой линейной комбинации выражаются в виде полиномов от собственных значений полного набора коммутирующих генераторов алгебры $so(4,2)$, характеризующих невозмущенную задачу. Для эффекта Штарка такой набор $[n \Delta m]$ определяется параболическими квантовыми числами $[n_1, n_2, m]$: $n = n_1 + n_2 + m + 1$ - главное квантовое число, $-\Delta = n_2 - n_1$ - третья проекция вектора Рунге-Ленца и m - третья проекция орбитального момента электрона на поле F.

3. В данной работе алгебраическая Т В реализована на языке REDUCE ^{/2/}. Ниже дано краткое описание Т В и приведен текст программы STARK. STARK позволяет получать в k - м порядке Т В ана-



литические выражения в виде полиномов от трех переменных n, Δ и m для поправок к энергии и для коэффициентов $b_{st}^{(k)}$, $-2k \leq s, t \leq 2k$ линейной комбинации базисных функций, соответствующей k -й поправке к волновой функции. Последние возникают за счет наложения однородного поля F на водородоподобный атом (с зарядом Z_a), находящийся в произвольном состоянии $|n_1 n_2 m\rangle$. Здесь и далее используются атомные единицы. В качестве теста приведены выражения для $E^{(F)}$ и $b_{st}^{(p)}$, $p=1,2$. Предложенная процедура допускает обобщение для других полиномиальных полей, а также других систем, например, для квантово-механического осциллятора во внешнем полиномиальном поле. В последнем случае необходимо использовать осцилляторное представление группы $so(4,2)$ или $so(2,1)$ /7/.

4. Введем обозначения и напомним основные свойства группы $so(4,2)$. Алгебра Ли $so(4,2)$ образована 15 генераторами $L_{\alpha\beta} = -L_{\beta\alpha}$, где $\alpha, \beta = 1, \dots, 6$:

$$[L_{\alpha\beta}, L_{\alpha\gamma}] = i g_{\alpha\alpha} L_{\beta\gamma}, \quad g_{\alpha\alpha} = (1111-1-1). \quad (I)$$

В x -представлении $L_{\alpha\beta}$ определены соотношениями ($i, j, k=1,2,3$)

$$L_{ij} = x_i p_j - x_j p_i \equiv \epsilon_{ijk} L_k$$

$$L_{i4} = 1/2(x_i \tilde{p}^2 + 2ip_i - 2\tilde{x}\tilde{p}p_i - x_i) \equiv A_i$$

$$L_{i5} = 1/2(x_i \tilde{p}^2 + 2ip_i - 2\tilde{x}\tilde{p}p_i + x_i)$$

$$L_{46} = 1/2(r\tilde{p}^2 - r), \quad L_{56} = 1/2(r\tilde{p}^2 + r)$$

$$L_{45} = -i(1+\tilde{x}\tilde{p}), \quad L_{i6} = -r_i,$$

где $p_k = -i \partial / \partial x_k$, L_k и A_k — компоненты импульса, орбитального момента и вектора Рунге-Ленца электрона, $\tilde{x} = \{x_1, x_2, x_3\}$ — его координаты, $r = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)^{1/2}$. Операторы (2) действуют в гильбертовом пространстве функций со скалярным произведением

$$\langle f | g \rangle = \int d^3x f^*(\tilde{x}) r^{-1} g(\tilde{x}), \quad (3)$$

относительно которого они являются самосопряженными. Для эффекта Штарка в качестве базиса выбираем собственные функции трех коммутирующих операторов L_{56} , L_{34} и L_{12} :

$$L_{56} |n_1 \bar{n}_2 m\rangle = n |n_1 \bar{n}_2 m\rangle$$

$$L_{34} |n_1 \bar{n}_2 m\rangle = (n_2 - n_1) |n_1 \bar{n}_2 m\rangle \quad (4)$$

$$L_{12} |n_1 \bar{n}_2 m\rangle = m |n_1 \bar{n}_2 m\rangle.$$

Явный вид базисных функций $\langle \tilde{x} | n_1 \bar{n}_2 m \rangle$ дан в работе /6/. Они отличаются от кулоновских функций водородоподобного атома нормировкой и отсутствием зависимости в аргументе от $\sqrt{-2E^{(0)}}$ энергии невозмущенного атома $E^{(0)} = -Za/(2n^2)$, т.е. образуют штурмовский базис с равномерной асимптотикой. Их нормировка определяется скалярным произведением (3), однако мы используем ненормированные функции

$$|n_1 n_2 m\rangle = c_{n_1 n_2 m}^{-1} |n_1 \bar{n}_2 m\rangle \quad (5)$$

$$c_{n_1 n_2 m} = \sqrt{2} \{n_1! n_2! / [(n_1+m)! (n_2+m)!]\}^{1/2}.$$

Действие операторов L_{46} и L_{56} в этом базисе задано соотношениями

$$(L_{46} - L_{35}) |n_1 n_2 m\rangle = (n_1+m) |n_1-1 n_2 m\rangle + (n_1+1) |n_1+1 n_2 m\rangle, \quad (6)$$

$$(L_{46} + L_{35}) |n_1 n_2 m\rangle = (n_2+m) |n_1 n_2-1 m\rangle + (n_2+1) |n_1 n_2+1 m\rangle.$$

Такое определение позволяет избежать появления полуполных степеней при задании действия операторов L_{46} и L_{35} на базис, сократить число алгебраических подстановок и существенно сократить компьютерное время.

Энергию E водородоподобного атома в однородном электрическом поле F можно представить разложением

$$E(F) = E^{(0)} + \sum_{k=1} F^k E^{(k)}. \quad (7)$$

Тогда уравнение Шредингера сводится к следующему уравнению для вектора состояния $|\Phi\rangle$ /6/:

$$\{L_{56} - n - \sum_{k=1} F^k V^{(k)}(x_3, r)\} |\Phi\rangle = 0. \quad (8)$$

Здесь

$$v^{(1)}(x_3, r) = \{E^{(1)}_R - rZ\} n/z_a$$

$$v^{(2)}(x_3, r) = \{E^{(k)}_r\} n/z_a$$

$$x_3 = (L_{35} - L_{34})n/z_a, \quad r = (L_{56} - L_{46})n/z_a$$

Соответственно решение (8) ищем в виде

$$|\phi\rangle = |\bar{n}_1 \bar{n}_2 m\rangle + \sum_{k=1} |\phi^{(k)}\rangle F^k, \quad (9)$$

и вместо (8) получаем систему неоднородных уравнений для определения

$E^{(k)}$ и $|\phi^{(k)}\rangle$:

$$L(n) |\bar{n}_1 \bar{n}_2 m\rangle = \{L_{56} - n\} |\bar{n}_1 \bar{n}_2 m\rangle = 0 \quad (10)$$

$$L(n) |\phi^{(k)}\rangle = v^{(k)}(x_3, r) / n_1 \bar{n}_2 m + \sum_{p=1}^{k-1} v^{(k-p)}(x_3, r) / \phi^{(p)} \equiv f^{(k)}$$

Принимая во внимание соотношения (4), (6) и полиномиальный вид $v^{(k)}$, разложим правые части $f^{(k)}$ и поправки $|\phi^{(k)}\rangle$ по векторам состояний

$$|st\rangle = |n_1 + s, n_2 + t, m\rangle C_{n_1 n_2 m}, \quad (11)$$

нормированным так, что $|\infty\rangle = |\bar{n}_1 \bar{n}_2 m\rangle$,

$$f^{(k)} = \sum_{s=-2k}^{2k} \sum_{t=-2k}^{2k} f_{st}^{(k)} |st\rangle = \quad (12)$$

$$= v^{(k)}(x_3, r) |\infty\rangle + \sum_{p=1}^{k-1} v^{(k-p)}(x_3, r) |\phi^{(p)}\rangle$$

$$|\phi^{(k)}\rangle = \sum_{s=-2k}^{2k} \sum_{t=-2k}^{2k} b_{st}^{(k)} |st\rangle, \quad b_{\infty}^{(k)} = 0, \quad b_{s-s}^{(k)} = 0. \quad (13)$$

Учитывая ортогональность функций $|st\rangle$ в смысле (3), а также соотношение (4): $L(n)|st\rangle = (s+t)|st\rangle$, вместо (10) имеем

$$(s+t)b_{st}^{(k)} |st\rangle = f_{st}^{(k)} |st\rangle \quad (14)$$

$$f_{\infty}^{(k)} = 0.$$

Программа STARK

COMMENT AT FIRST ONE NEEDS TO READ IN THIS PROGRAM FILE;

OPERATOR X3,R,F,A,B,EE,KET; NONCOM X3,R;

COMMENT CALCULATE THE PERTURBATION IN THE K-TH ORDER;

PROCEDURE V(K,X,Y);

IF K < 1 THEN 0 ELSE IF K = 1 THEN

SUB(X1=X,Y1=Y,EE(1)*Y1 - Y1*X1)
ELSE SUB(Y1=Y,EE(K)*Y1);

COMMENT CALCULATE THE RIGHT HAND SIDE OF THE ALGEBRAIC EQUATION
IN K-TH ORDER;

FOR ALL K LET F(K)=

N/ZA*(V(K,X3,R)*KET(0,0) +

FOR P1:=1:K-1 SUM V(K-P1,X3,R)*

(FOR S:=-2*P1:2*P1 SUM

FOR TT:=-2*P1:2*P1 SUM B(P1,S,TT)*KET(S,TT));

COMMENT FORMAL SUBSTITUTIONS;

LET X3=X3(), R=R();

FOR ALL X,Y LET X3()*KET(X,Y)=X3(X,Y), R()*KET(X,Y)=R(X,Y);

FOR ALL X,Y LET R(X,Y)=((N+X+Y)*KET(X,Y)-

1/2*((X+N1+M)*KET(X-1,Y)+

(X+N1+1)*KET(X+1,Y)+

(Y+N2+M)*KET(X,Y-1)+

(Y+N2+1)*KET(X,Y+1))*N/ZA;

FOR ALL X,Y LET X3(X,Y)=(1/2*(-(X+N1+M)*KET(X-1,Y)-

(X+N1+1)*KET(X+1,Y)+

(Y+N2+M)*KET(X,Y-1)+

(Y+N2+1)*KET(X,Y+1))-

(Y-X-D)*KET(X,Y))*N/ZA;

COMMENT CALCULATE RIGHT HAND SIDES OF MATRIX ELEMENTS IN K-TH ORDER;

ARRAY C(1);

PROCEDURE FK(K);

BEGIN SCALAR U,U1;

U:=F(K); U1:=DEN U; U:=NUM U;

FOR I:=-2*K:2*K DO

FOR J:=-2*K:2*K DO

F(K,I,J):=IF COEFF(U,KET(I,J),C) NEQ 0 THEN C(1)/U1
ELSE 0

END;

COMMENT CALCULATE THE ENERGY IN K-TH ORDER;

PROCEDURE EK(K);

BEGIN SCALAR U;

U:=NUM F(K,0,0);

COEFF(U,EE(K),C);

U:=-U/C(1)+EE(K);

EE(K):=U

END;

COMMENT CALCULATE EXPANSION COEFFICIENTS OF THE STATE VECTOR IN K-TH ORDER;

```
PROCEDURE BK(K);
  FOR I:=-2*K:2*K DO
    FOR J:=-2*K:2*K DO
      IF F(K,I,J) NEQ 0 AND I+J NEQ 0 THEN
        B(K,I,J):=F(K,I,J)/(I+J)
      ELSE B(K,I,J):=0;
```

COMMENT TRANSFORM NUMBERS N1,N2 INTO N,D,M;

LET N1=(N+D-M-1)/2, N2=(N-D-M-1)/2;

FOR ALL X,Y,Z SUCH THAT X <= 0 LET B(X,Y,Z)=0;

COMMENT OUTPUT OF RESULTS UP TO K-TH ORDER;

```
PROCEDURE PR(K);
  FOR L := 1 : K DO
    BEGIN
      WRITE EE(L) := EE(L);
      FOR I := -2*L : 2*L DO
        FOR J := -2*L : 2*L DO
          WRITE B(L,I,J) := B(L,I,J)
    END;
```

END OF THE PROGRAM FILE;

COMMENT INPUT OF INITIAL DATA - READ THE DATA UP TO (K-1) ORDER;

IN STARKIN;

COMMENT OUTPUT OF THE RESULTS UP TO K-TH ORDER TO A FILE. ASSIGN THE VALUE TO THE VARIABLE K: K:=〈INTEGER〉 ;

LINELENGTH(65); OFF NAT,ECHO; OUT STARKOUT;

FK(K); EK(K); BK(K); PR(K);

WRITE "END"; SHUT STARKOUT; ON NAT,ECHO;

END OF RUN;

COMMENT EXAMPLES OF RESULTS AS THEY HAVE WRITTEN TO THE FILE STARKOUT;

EE(1) := (3*D*N)/(2*ZA)\$

B(1,0,2) := (N**3*(D**2 + 2*D*M - 2*D*N - 4*D + M**2 - 2*M*N - 4*M + N**2 + 4*N + 3))/(32*ZA**3)\$

EE(2) := (N**4*(3*D**2 + 9*M**2 - 17*N**2 - 19))/(16*ZA**4)\$

B(2,0,2) := (N**6*(D**4 + 2*D**3*M + 2*D**3*N + 4*D**3 + D**2*M**2 + 6*D**2*M*N + 12*D**2*M - 3*D**2*N**2 - 6*D**2*N - 5*D**2 + 4*D*M**2*N + 8*D*M**2 + 12*D*M*N + 16*D*M - 4*D*N**3 - 36*D*N**2 - 92*D*N - 72*D + 4*M**2*N**2 + 22*M**2*N + 24*M**2 - 8*M*N**3 - 60*M*N**2 - 136*M*N - 96*M + 4*N**4 + 38*N**3 + 124*N**2 + 162*N + 72))/(128*ZA**6)\$

В каждом порядке, начиная с первого, мы последовательно находим

$E^{(k+1)}$ и $b_{st}^{(k+1)}$, решая алгебраическое уравнение для

$$f_{oo}^{(k+1)}(E^{(k+1)}, E^{(p)}, b_{st}^{(p)}, 1 \leq p \leq k) = 0 \quad (I5)$$

$$b_{st}^{(k+1)} = (s+t)^{-1} f_{st}^{(k+1)}(E^{(p)}, 1 \leq p \leq k+1, b_{st}^{(\ell)}, 1 \leq \ell \leq k). \quad (I6)$$

Начальные условия для рекуррентной процедуры (I5), (I6) определяются соотношениями

$$E^{(o)} = -z_a^2 / (2n^2), \quad b_{st}^{(o)} = 0. \quad (I7)$$

Отметим, что процедура (I5)-(I7) фиксирует собственный вектор $|\Phi\rangle$ с точностью до нормировки. В рассмотренном варианте T В свободный параметр $b_{oo}^{(t)}$ был выбран тождественно равным нулю. В случае необходимости найденный вектор $|\Phi\rangle$ можно легко отнормировать, используя определение (3).

В данной работе процедура (I5)-(I7) реализована на входном языке системы аналитических преобразований REDUCE в виде программы STARK. В ней использованы следующие обозначения:

$$x_3 = x_3, \quad R \equiv r, \quad F \equiv f^{(k)}, \quad EE = E^{(k)}$$

$$v = b_{st}^{(k)}, \quad \text{KET}(st) \equiv |st\rangle$$

$$N = n, \quad N1 \equiv n_1, \quad N2 = n_2, \quad M \equiv m, \quad D \equiv \Delta.$$

Отметим, что в программе набор параболических чисел $\{N1N2M\}$ в ходе вычислений заменяется эквивалентным набором $\{NDM\}$.

В заключение авторы благодарят А.Г.Абрашкевича за помощь в работе.

Литература

1. Clark C.W., Lu K.T. and Stence A.F. 1984 in Progress in Atomic Spectroscopy Part C, ed. H.J. Beyer and H.Kleinpoppen (New York: Plenum) pp. 247-320.
2. Hearn A.C. REDUCE USER'S MANUAL ver.3.0 RAND Publ. C p.78(4/83). The Rand Corporation, Santa Monica, CA 90406, 1983.
3. Виницкий С.И., Ростовцев В.А. Совещание по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению к теоретической физике, ОИЯИ, ДИИ-83-5II, Дубна, 1983, с.242.

4. Виноцкий С.И., Ростовцев В.А. Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. ОИЯИ, ДП-85-791, Дубна, 1985, с.366.
5. Fok V.Z.-Phys. v 98(1935) p.145.
6. Kadmomtsev M.B., Vinitzky S.I.-J. Phys. A v.18(1985) p.1689.
7. Englefield M.J. Group Theory and Coulomb problem, Wiley - Interscience, New York, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 апреля 1987 года.

Виноцкий С.И., Ростовцев В.А. P11-87-303
Применение системы REDUCE в задачах об атоме
водорода в электрическом поле

Продемонстрирована возможность применения системы аналитических вычислений REDUCE для решения задач теории возмущений квантовой механики на современном языке группы динамической симметрии. В качестве примера приведена программа STARK для вычисления в аналитическом виде энергии и волновых функций атома водорода в однородном электрическом поле в произвольном порядке теории возмущений.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Vinitzky S.I., Rostovtsev V.A. P11-87-303
An Use of REDUCE System in Problems
of Hydrogen Atom in an Electric Field

The work demonstrates the possibilities of the REDUCE for solving perturbation theory (PT) problems of quantum mechanics in the language of the dynamic-symmetry group $SO(4,2)$. For example, the subroutine STARK for analytical calculation in k-th order PT of energy and wave functions of a hydrogen atom in a uniform electric field is presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987