объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р2-84-110

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

К ЭЛЛИПТИЧЕСКОМУ БАЗИСУ ДВУМЕРНОГО АТОМА ВОДОРОДА

Направлено в "Journal of Physics, A,
Math.Gen.Letters to the Editor"

*Ереванский государственный университет

1984

1. При исследовании явлений вблизи границы конденсированных сред приходится иметь дело с двумерными аналогами многих известных и хорошо изученных квантовых систем. Важнейшим из них является двумерный атом водорода, рассмотренный в полярных, параболических и эллиптических координатах /1–4/. В эллиптических координатах задача приводится к раскручиванию трехчленных рекуррентных соотношений и решению алгебраических уравнений произвольно высокого порядка, т.е. к вычислительной программе, которую невозможно осуществить в аналитическом виде. В связи с этим важно иметь какую-либо приближенную схему вычислений. Параметром, характеризующим наши возможности решения этой задачи в рамках обычной теории возмущений, является произведение ωR, где $\omega = \sqrt{-2E}$, а R - положительная величина, входящая в определение эллиптических координат. Полученные ниже решения адекватны точным лишь при условии $\omega R \ll 1$ и $\omega R \gg 1$.

При данной энергии $E_N = -2/(2N+1)^2$* эллиптические волновые функции /эллиптический базис/ удовлетворяют уравнению

$$(-\hat{L}^2 - \omega R\hat{P})\,\psi^{(\pm)}_{Nq}(\xi,\eta;R) = \lambda^{(\pm)}_{Nq}(R)\,\psi^{(\pm)}_{Nq}(\xi,\eta;R), \qquad /1/$$

где $\lambda^{(\pm)}_{Nq}(R)$ - эллиптические константы разделения, каждая из которых удовлетворяет своему алгебраическому уравнению N-й степени, знаки "+" и "-" фиксируют четность решений по отношению к инверсии полярного угла ϕ, q - число, нумерующее значения $\lambda^{(\pm)}_{Nq}(R)$ в порядке их возрастания и меняющееся в интервалах $0 \le q \le N$ и $1 \le q \le N$ для четного и нечетного решений. Операторы $\hat{L}$ и $\hat{P}$ - это те из трех генераторов группы скрытой симметрии двумерного атома водорода /5/, для которых полярное и параболическое решения являются собственными функциями, соответствующими целым собственным значениям m и p. Как и эллиптический базис /1/, эти решения имеют определенную четность, и для нечетных решений $1 \le m \le N$, $p = -N+1, -N+3, \ldots, N-3, N-1$, для четных - $0 \le m \le N$, $p = -N, -N+2, \ldots, N-2, N$. Эллиптические координаты ξ и η изменяются в пределах $0 \le \xi < \infty$, $-\pi \le \eta \le \pi$ и выражаются через полярные следующим образом:

$$\mathrm{ch}\,\xi = \frac{r}{R} + \sqrt{\frac{r^2}{R^2} - \frac{2r}{R}\cos\phi + 1}, \quad \cos\eta = \frac{r}{R} - \sqrt{\frac{r^2}{R^2} - \frac{2r}{R}\cos\phi + 1}.$$

---

*Мы используем кулоновские единицы $e = \mu = \hbar = 1$. Квантовое число N пробегает целые неотрицательные значения.

2. При $\omega R \ll 1$ оператор $\omega R\hat{P}$ может считаться возмущением. Невозмущенными волновыми функциями при этом будут полярные волновые функции с определенной четностью, и решение уравнения /1/ следует искать в виде

$$\psi^{(\pm)}_{Nq}(\xi, \eta; R) = \sum_m T^{(\pm)}_{Nqm}(R)\,\psi^{(\pm)}_{Nm}(r, \phi). \qquad /2/$$

Суммирование по m здесь ведется в пределах $0 \le m \le N$ и $1 \le m \le N$ для четных и нечетных решений соответственно. Разложение /2/ вне рамок теории возмущений имеет смысл разложения между двумя эквивалентными решениями одного и того же уравнения Шредингера.

Согласно формулам стационарной теории возмущений [6],

$$\lambda^{(\pm)}_{Nq}(R) = \lambda^{(\pm)}_{Nq}(0) - \omega R P^{(\pm)}_{qq} + \omega^2 R^2 \sum_m{}' \frac{|\hat{P}^{(\pm)}_{mq}|^2}{m^2 - q^2},$$

$$\psi^{(\pm)}_{Nq}(\xi, \eta; R) = \psi^{(\pm)}_{Nq}(r, \phi) + \omega R \sum_m{}' \frac{P^{(\pm)}_{mq}}{q^2 - m^2}\,\psi^{(\pm)}_{Nm}(r, \phi),$$

где

$$P^{(\pm)}_{mq} = \int \psi^{*(\pm)}_{Nm}(r, \phi)\,\hat{P}\,\psi^{(\pm)}_{Nq}(r, \phi)\,dv. \qquad /3/$$

Для вычисления этого матричного элемента воспользуемся тем, что $\psi^{(+)}_{Nm}(r, \phi) = \mathrm{Re}\,\psi_{Nm}(r, \phi)$, $\psi^{(-)}_{Nm}(r, \phi) = i\,\mathrm{Im}\,\psi_{Nm}(r, \phi)$, где

$$\psi_{Nm}(r, \phi) = R_{Nm}(r)\frac{e^{im\phi}}{\sqrt{2\pi}};$$

$$R_{Nm}(r) = (2\omega)^{1/2}\sqrt{\frac{(N+m)!}{(N-m)!}}\,\frac{(2\omega r)^m}{(2m)!} \times e^{-\omega r} F(-N+m;\, 2m+1;\, 2\omega r).$$

Тогда $P^{(\pm)}_{mq}$ есть следующая комбинация матричных элементов оператора $\hat{P}$ по волновым функциям ψ_{Nm}:

$$P_{mq} = \frac{1}{4}\,[P_{mq} + P_{-m,-q} \pm P_{m,-q} \pm P_{-m,q}]. \qquad /4/$$

В [4] было получено разложение параболического базиса двумерного атома водорода по полярному, согласно которому

$$\psi_{Nq}(r, \phi) = \sum_{p=-N}^{N} (-i)^{N-p}\, d^N_{p,q}\left(\frac{\pi}{2}\right)\psi_{Np}(u, v). \qquad /5/$$

Коэффициенты $d^N_{p,q}(\pi/2)$ этого разложения являются функциями Вигнера из квантовой теории углового момента [7]. Подставляя /5/ в /4/ и учитывая соотношения

$$p\,d^N_{pm}\left(\frac{\pi}{2}\right) = -\frac{1}{2}\sqrt{(N+m)(N-m+1)}\,d^N_{p,m-1}\left(\frac{\pi}{2}\right) - \frac{1}{2}\sqrt{(N-m)(N+m+1)}\,d^N_{p,m+1}\left(\frac{\pi}{2}\right),$$

$$\sum_{p=-N}^{N} d^N_{pm}\left(\frac{\pi}{2}\right) d^N_{pm'}\left(\frac{\pi}{2}\right) = \delta_{mm'},$$

получим

$$P^{(\pm)}_{mq} = -\frac{1}{4}\sqrt{(N-q)(N+q+1)}\,\delta_{m,q+1} - \frac{1}{4}\sqrt{(N+q)(N-q+1)}\,\delta_{m,q-1} - \frac{1+(-1)^t}{8}\sqrt{(N+q)(N-q+1)}\,\delta_{m,1-q}, \qquad /6/$$

где t - четность состояния, по которому берутся матричные элементы /3/. Из формулы /6/ следует, что $P^{(\pm)}_{qq} = 0$. Учитывая, что согласно [4], $\lambda^{(\pm)}_{Nq}(0) = -q^2$, получим, что при $\omega R \ll 1$

$$\lambda^{(\pm)}_{Nq}(R) = -q^2 - \frac{\omega^2 R^2}{8}\,\frac{N^2 + N + q^2}{4q^2 - 1} + \frac{1+(-1)^t}{2}\,\frac{\omega^2 R^2}{8} N(N+1)\left(\delta_{q0} - \frac{3}{2}\delta_{q1}\right)$$

$$\psi^{(\pm)}_{Nq}(\xi, \eta; R) = \psi^{(\pm)}_{Nq}(r, \phi) + \frac{\omega R}{4}\Big\{\frac{(N-q)(N+q+1)}{2q+1}\,\psi^{(\pm)}_{N,q+1}(r, \phi) - \frac{\sqrt{(N+q)(N-q+1)}}{2q-1}\,\psi^{(\pm)}_{N,q-1}(r, \phi) - \frac{1+(-1)^t}{2}\,\frac{\sqrt{(N+q)(N-q+1)}}{2q-1}\,\psi^{(\pm)}_{N,1-q}(r,\phi)\Big\}.$$

3. Рассмотрим теперь случай, когда $\omega R \gg 1$. Разделив обе части уравнения /1/ на ωR и считая $(-\hat{L}^2/\omega R)$ возмущением, а параболические волновые функции - собственными волновыми функциями невозмущенной системы, вместо разложения /2/ получим

$$\psi^{(\pm)}_{Nq}(\xi, \eta; R) = \sum_p U^{(\pm)}_{Nqp}(R)\,\psi^{(\pm)}_{Np}(u, v).$$

При четных и нечетных волновых функциях суммирование ведется по значениям p, имеющим ту же четность, что N или N − 1 соответственно. Согласно [4],

$$\lim_{R\to\infty} \frac{\lambda^{(\pm)}_{Nq}(R)}{\omega R} = -q^{(\pm)},$$

где $q^+ = 2q - N$, $q^- = 2q - N - 1$. Отсюда следует, что при $\omega R \gg 1$ с точностью до первого порядка теории возмущений

$$\lambda^{(\pm)}_{Nq}(R) = -\omega R q^{\pm} - (\hat{L}^2)_{q^{\pm},q^{\pm}} ,$$

$$U^{(\pm)}_{Nqp}(R) = \delta_{p,q^{\pm}} - \frac{1}{\omega R}\,\frac{(\hat{L}^2)_{q^{\pm},p}}{q^{\pm} - p} ,$$

причем во втором члене нижнего соотношения $q^{\pm} \neq p$. Матричные элементы оператора $\hat{L}^2$ по параболическим базисам с определенной четностью вычисляются по тому принципу, которого мы придерживались при выводе формулы /6/:

$$(\hat{L}^2)_{kp} = -\frac{1}{4}\sqrt{(N+k)(N+k-1)(N-k+1)(N-k+2)}\,\delta_{p,k-2} -$$
$$-\frac{1}{4}\sqrt{(N+k+1)(N+k+2)(N-k)(N-k-1)}\,\delta_{p,k+2} + \frac{1}{2}(N^2+N-k^2)\,\delta_{p,k} .$$

Пользуясь этим результатом, легко показать, что при $\omega R \gg 1$

$$\lambda^{(\pm)}_{Nq}(R) = -\omega R q^{\pm} - \frac{N^2 + N - (q^{\pm})^2}{2} ,$$

$$\psi^{(\pm)}_{Nq}(\xi,\eta;R) = \psi^{(\pm)}_{Nq^{\pm}}(u,v) + \frac{1}{8\omega R}\{\sqrt{(N-q^{\pm})(N-q^{\pm}-1)(N+q^{\pm}+1)(N+q^{\pm}+2)}\times$$
$$\times\,\psi_{N,q^{\pm}+2}(u,v) + \sqrt{(N+q^{\pm})(N+q\;-1)(N-q^{\pm}+1)(N-q^{\pm}+2)}\,\psi^{(\pm)}_{N,q^{\pm}-2}(u,v)\}.$$

Знание матричных элементов $P^{(\pm)}_{mq}$ и $(\hat{L}^2)_{q^{\pm}p}$ позволяет вычислить и следующие члены ряда теории возмущений.

В заключение выражаем искреннюю признательность Я.А.Смородинскому, Л.И.Пономареву, А.В. Матвеенко и С.И.Виницкому за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Zaslow B., Zandler M.E. Am.J.Phys., 1967, 35, p.1118.
2. Cisneros A., McIntosh H.V. J.Math.Phys., 1968, 10, p.277.
3. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. ОИЯИ, Р2-83-475, Дубна, 1983.
4. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. ОИЯИ, Р2-83-899, Дубна, 1983.
5. Englefield M.J. "Group Theory and the Coulomb problem". Wiley-Interscience, New-Yord, London, Sydney, Toronto, 1972.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. "Наука", М.,1974.
7. Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. "Наука", Л., 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
20 февраля 1984 года

Мардоян Л.Г. и др. Р2-84-110
К эллиптическому базису двумерного атома водорода

Получен явный вид эллиптического базиса двумерного атома водорода и эллиптической константы разделения при больших и малых значениях произведения ωR, в котором $\omega = \sqrt{-2E}$, а R - свободный параметр, входящий в определение эллиптических координат.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1984

Перевод Т.Ю.Думбрайс

Mardoyan L.G. et al. P2-84-110
On Elliptic Basis of a Two-Dimensional Hydrogen Atom

An explicit form is found for the elliptic basis of a two-dimensional hydrogen atom and elliptic seperation constant at large and small values of the product $R\omega$ ($\omega = \sqrt{-2E}$ and R is a free parameter entering into the definition of elliptic coordinates).

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1984