85-503

сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р2-85-503

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

КИНЕМАТИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ МЕЖБАЗИСНЫХ РАЗЛОЖЕНИЙ В СИСТЕМАХ СО СКРЫТОЙ СИММЕТРИЕЙ

* Ереванский государственный университет

1985

Давтян Л.С. и др. Р2-85-503
Кинематические аспекты межбазисных разложений в системах со скрытой симметрией

Найден произвольным образом ориентированный эллиптический базис двумерного атома водорода. Выяснена связь этого базиса с генераторами группы скрытой симметрии O(3). Рассмотрены кинематические аспекты межбазисных разложений в других квантовых системах со скрытой симметрией.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985

Перевод О.С.Виноградовой

Davtyan L.S. et al. P2-85-503
Kinematic Aspects of Interbasis Expansions in Systems with Hidden Symmetry

The arbitrary orientated elliptic basis of a two- dimensional hvdrogen atom is found. The connection of this basis is established with generators of the hidden-symmetry group O(3). Kinematic aspects of interbasis expansions are considered for other quantum systems with hidden symmetry.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985

ВВЕДЕНИЕ

Как известно[1], генераторы $\hat{L}$, $\hat{P}$ и $\hat{K}$ группы O(3) скрытой симметрии двумерного атома водорода /ДАВ/ вместе с гамильтонианом $\hat{H}$ образуют три полных набора $(\hat{H},\hat{L})$, $(\hat{H},\hat{P})$ и $(\hat{H},\hat{K})$ операторов, собственные функции которых /фундаментальные базисы ДАВ/ есть решения уравнения Шредингера, получающиеся разделением переменных в полярных и двух повернутых друг относительно друга на прямой угол параболических системах координат. Возникает вопрос - существует ли такой общий базис ДАВ /набор собственных функций гамильтониана $\hat{H}$/, который: 1/ включает в себя информацию о всех трех генераторах $\hat{L}$, $\hat{P}$ и $\hat{K}$; 2/ в некоторых предельных случаях переходит в указанные выше фундаментальные базисы; 3/ имеет факторизованный вид, т.е. является решением в разделенных переменных? В работе[2] разделением переменных в эллиптических координатах было достигнуто "объединение" лишь двух фундаментальных базисов - полярного $(\hat{H},\hat{L})$ и параболического $(\hat{H},\hat{P})$. В настоящей работе показано, что дальнейшее обобщение, удовлетворяющее всем трем отмеченным выше требованиям, достигается разделением переменных в уравнении Шредингера в произвольным образом ориентированной относительно фиксированной декартовой системы координат эллиптической системе координат.

1. ЭЛЛИПТИЧЕСКИЙ ИНТЕГРАЛ ДВИЖЕНИЯ ДАВ

Введем эллиптические координаты $\xi^{(a)}\,|0\le\xi^{(a)}<\infty|$ и $\eta^{(a)}$ $|0\le\eta^{(a)}\le 2\pi|$ следующим образом:

$$x = \frac{R}{2}\cos a\,(\operatorname{ch}\xi^{(a)}\cos\eta^{(a)}+1) - \frac{R}{2}\sin a\,\operatorname{sh}\xi^{(a)}\sin\eta^{(a)},$$

$$y = \frac{R}{2}\sin a\,(\operatorname{ch}\xi^{(a)}\cos\eta^{(a)}+1) + \frac{R}{2}\cos a\,\operatorname{sh}\xi^{(a)}\sin\eta^{(a)}. \qquad /1/$$

Свободный размерный параметр R изменяется в пределах $0\le R<\infty$. При $a=0$ из /1/ получаются координаты $\xi^{(0)}$, $\eta^{(0)}$, использованные в работе[2].

В атомных единицах гамильтониан ДАВ имеет вид

$$\hat{H} = -\frac{2}{R^2(\operatorname{ch}^2\xi^{(a)}-\cos^2\eta^{(a)})}\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi^{(a)2}}+\frac{\partial^2}{\partial\eta^{(a)2}}\right) - \frac{2}{R(\operatorname{ch}\xi^{(a)}+\cos\eta^{(a)})}. \qquad /2/$$

Разделяя переменные и вводя константу разделения Q , приходим к "эллиптическому" интегралу движения

$$\hat{Q} = \frac{1}{\mathrm{ch}^2\xi^{(a)} - \cos^2\eta^{(a)}}\left(\cos^2\eta^{(a)}\frac{\partial^2}{\partial\xi^{(a)2}} + \mathrm{ch}^2\xi^{(a)}\frac{\partial^2}{\partial\eta^{(a)2}}\right) - \frac{R\,\mathrm{ch}\,\xi^{(a)}\cos\eta^{(a)}}{\mathrm{ch}\,\xi^{(a)} + \cos\eta^{(a)}}. \qquad /3/$$

Константа Q является собственным значением оператора $\hat{Q}$. Переходя в /3/ к декартовым координатам и учитывая явный вид генераторов $\hat{L}$, $\hat{P}$ и $\hat{K}$ [1]

$$\hat{L} = -i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right), \quad \hat{K} = \frac{2N+1}{4}\left[-\frac{\partial}{\partial y} + 2\left(y\frac{\partial^2}{\partial x^2} - x\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\right) + \frac{2y}{\sqrt{x^2+y^2}}\right],$$

$$\hat{P} = \frac{2N+1}{4}\left[-\frac{\partial}{\partial x} - 2\left(x\frac{\partial^2}{\partial y^2} - y\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\right) + \frac{2x}{\sqrt{x^2+y^2}}\right],$$

можно доказать соотношение

$$\hat{Q} = -\hat{L}^2 - \frac{2R\cos a}{2N+1}\hat{P} - \frac{2R\sin a}{2N+1}\hat{K} - \frac{R^2}{2}\hat{H}, \qquad /4/$$

в котором N - целое число, определяющее спектр ДАВ ($E_N = -2/(2N+1)^2$). Назовем базис, представляющий собственные функции операторов $\hat{H}$ и $\hat{Q}$, записанных в эллиптических координатах /1/ - произвольно ориентированным эллиптическим базисом. Из /4/ следует, что этот базис удовлетворяет трем выдвинутым выше требованиям, наиболее полным образом вбирая информацию о группе скрытой симметрии ДАВ.

2. РАЗЛОЖЕНИЕ ПО ПОЛЯРНОМУ БАЗИСУ ДАВ

Произвольным образом ориентированный эллиптический базис ДАВ связан с эллиптическим базисом, полученным в работе [2] преобразованием вращения. В работе [2] было показано, что эллиптический базис ДАВ определяется разложением

$$\Psi_N(\xi^{(0)}, \eta^{(0)}; R) = \sum_{m=-N}^{N} W_m(R)\Psi_{Nm}(r,\phi), \qquad /5/$$

в котором Ψ_{Nm} - полярный базис ДАВ, а коэффициенты $W_m(R)$ и собственные значения эллиптической константы разделения Q получаются из трехчленного рекуррентного соотношения

$$\frac{1}{2}\sqrt{(N-m)(N+m+1)}\,W_{m+1} + \frac{1}{2}\sqrt{(N+m)(N-m+1)}\,W_{m-1} =$$

$$= \frac{(2N+1)^2 Q - R^2}{2R(2N+1)} W_m \qquad /6/$$

и дополнительных условий

$$W_{N+1} = W_{-N-1} = 0, \qquad \sum_{m=-N}^{N} |W_m|^2 = 1.$$

Таким образом, искомый, произвольным образом ориентированный эллиптический базис имеет вид

$$\Psi_N(\xi^{(a)}, \eta^{(a)}, R) = \sum_{m=-N}^{N} W_m(R)e^{-ima}\Psi_{Nm}(r,\phi). \qquad /7/$$

Подчеркнем, что базис /7/ получается в два этапа: 1/ введение эллиптического базиса /5/, учитывающего специфику кулонова поля; 2/ вращение, включающее в игру "недостающий" генератор группы скрытой симметрии и носящее чисто кинематический характер. В рекуррентное соотношение /6/ не входит угол a , и поэтому собственные значения константы разделения Q инвариантны относительно вращений в плоскости (x, y). С другой стороны, в операторе /4/ угол a фигурирует. Указанное несоответствие устраняется, если заметить, что при переходе в /4/ к "сопутствующим" координатам (x', y'), повернутым относительно (x,y) на угол a , зависимость от a вообще исчезает. Механизм, объясняющий независимость собственных значений оператора /4/ от угла a , может быть установлен и на более формальной основе.

Уравнения

$$\hat{H}\Psi_N(\xi^{(a)}, \eta^{(a)}; R) = -\frac{2}{(2N+1)^2}\Psi_N(\xi^{(a)}, \eta^{(a)}; R),$$

$$\hat{Q}\Psi_N(\xi^{(a)}, \eta^{(a)}; R) = Q\Psi_N(\xi^{(a)}, \eta^{(a)}; R),$$

разложение

$$\Psi_N(\xi^{(a)}, \eta^{(a)}; R) = \sum_{m=-N}^{N} T_m(a)\,\Psi_{Nm}(r,\phi)$$

и взятые из работы [2] формулы

$$\int \Psi^*_{Nm'}(r,\phi)\,\hat{P}\,\Psi_{Nm}(r,\phi)\,dV = (i)^m(-i)^{m'}\int \Psi^*_{Nm'}(r,\phi)\,\hat{K}\,\Psi_{Nm}(r,\phi)\,dV =$$

$$= -\frac{1}{2}\sqrt{(N-m)(N+m+1)}\,\delta_{m,m'+1} - \frac{1}{2}\sqrt{(N+m)(N-m+1)}\,\delta_{m,m'-1}$$

приводят к рекуррентному соотношению

$$\frac{1}{2}\sqrt{(N-m)(N+m+1)}\,e^{ia}\,T_{m+1}(a) + \frac{1}{2}\sqrt{(N+m)(N-m+1)}\,e^{-ia}\,T_{m-1} =$$

$$= \frac{(2N+1)^2 Q - R^2}{2R(2N+1)}T_m(a). \qquad /8/$$

Теперь очевидно, что /8/ переходит в /6/, если совершить замену

$T_m(a) = e^{-ima}\,W_m$.

3. ДРУГИЕ СИСТЕМЫ СО СКРЫТОЙ СИММЕТРИЕЙ

Эллиптический базис кругового осциллятора и сфероидальные базисы атома водорода и трехмерного изотропного осциллятора в работах [3-5] обсуждались с позиций дополнительных интегралов движения, получающихся в рамках метода разделения переменных. Обобщение результатов этих работ на случай произвольной ориентации направления, вдоль которого вводится размерный параметр R, может быть совершено тем же путем, что и выше. В связи с этим мы здесь приведем лишь формулы, определяющие дополнительные интегралы движения:

а/ круговой осциллятор ($\hbar=\mu=\omega=1$)

$$\hat{Q}=-\hat{L}^2-\frac{R^2}{2}\cos 2\alpha\,\hat{P}-\frac{R^2}{2}\sin 2\alpha\,\hat{K}+\frac{R^4}{64},$$

$$\hat{P}=\frac{1}{4}\left(x^2-\frac{\partial^2}{\partial x^2}-y^2+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right),\quad \hat{K}=\frac{1}{2}\left(xy-\frac{\partial^2}{\partial x\partial y}\right),\quad \hat{L}=-i\frac{\partial}{\partial\phi};$$

б/ атом водорода

$$\hat{Q}=-\hat{L}^2-\frac{R}{n}(\cos\alpha\sin\beta\,\hat{A}_x+\sin\alpha\sin\beta\,\hat{A}_y+\cos\beta\,\hat{A}_z)-\frac{R^2}{2}\hat{H},$$

$$\hat{A}_i=-n\left[\frac{\partial}{\partial x_i}(\vec{r}\cdot\vec{\nabla})-x_i\Delta+\frac{x_i}{r}\right];$$

$\hat{L}$ - квадрат полного момента, n - главное квантовое число;

в/ трехмерный изотропный осциллятор ($\hbar=\mu=\omega=1$)

$$\hat{Q}=\hat{L}^2+\frac{R^2}{4}[\sin^2\beta\cos\gamma\,\hat{A}_{11}+\sin^2\beta\sin^2\gamma\,\hat{A}_{22}+\cos^2\beta\,\hat{A}_{33}-$$

$$-\sin^2\beta\sin 2\gamma\,\hat{A}_{21}-\cos\gamma\sin 2\beta\,\hat{A}_{31}+\sin\gamma\sin 2\beta\,\hat{A}_{32}],$$

$$\hat{A}_{ik}=x_i x_k-\frac{\partial^2}{\partial x_i\partial x_k}.$$

Легко понять, что коэффициенты, входящие в разложение базисов, генерируемых выписанными операторами, по соответствующим полярному и сферическим базисам содержат в себе экспоненты и D-функции Вигнера, зависящие от углов, задающих ориентацию системы координат.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Итак, произвольно ориентированный эллиптический базис ДАВ зависит от двух параметров - R и α, первый из которых носит

динамический характер /скрытая симметрия/, второй - кинематический /центральная симметрия/. Еще одним подтверждением сказанного является тот факт, что формулу /4/ можно получить также из интеграла движения, приведенного в работе [2], совершая поворот плоскости (x,y) на угол α и учитывая векторный /относительно этого поворота/ характер генераторов $\hat{P}$ и $\hat{K}$.

Мы признательны С.И.Виницкому, Л.Г.Мардояну и Я.А.Смородинскому за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Englefield M.J. Group Theory and Coulomb Problem. Wiley-Interscience, New York, London, Sydney. Toronto, 1972.
2. Mardoyan L.G. J.Phys.A18, 1985, p.3.
3. Mardoyan L.G.JINR,E2-84-517, Dubna, 1984.
4. Мардоян Л.Г. и др. ТМФ, 64, № 1, 1985, стр.171.
5. Мардоян Л.Г. и др. ОИЯИ, Р2-85-139, Дубна, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 августа 1985 года.