объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р2-87-323

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

# KS-ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ТРЕХМЕРНЫХ ВЫТЯНУТЫХ СФЕРОИДАЛЬНЫХ КООРДИНАТ

Направлено в журнал "Nuovo Cimento A"

*Ереванский государственный университет

1987

$KS$ - преобразованием принято называть небиективное квадратичное преобразование $R^4 \to R^3$, которое каждой точке $u_1, \ldots, u_4$ четырехмерного пространства $R^4$ ставит в соответствие точку $x, y, z$ трехмерного пространства $R^3$ согласно правилу/1/

$$x = 2(u_1 u_4 + u_2 u_3),$$
$$y = 2(u_2 u_4 - u_1 u_3), \tag{I}$$
$$z = u_3^2 + u_4^2 - u_1^2 - u_2^2 .$$

Полезность этого преобразования для физики водородоподобных систем объясняется следующим замечательным свойством: на языке переменных $u_1, u_2, u_3, u_4$ задача о свободном атоме водорода тождественна задаче о четырехмерном изотропном осцилляторе с некоторыми дополнительными условиями ж). Включение внешних электрических и магнитных полей нарушает такое простое соответствие и приводит в $u$ - пространстве к появлению ангармонических членов. Ангармонический осциллятор исследовался в связи с некоторыми специальными вопросами квантовой теории поля, и это привело к развитию мощных приближенных методов/3/. Не исключено, что указанные методы могут оказаться более эффективными, чем приближенные методы, применяемые до сих пор в исходном физическом пространстве с координатами $x, y, z$. Во всех случаях $KS$ - 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. Последняя мысль уже неоднократно высказывалась многими авторами (см. ссылки в/2/).

В связи со случайной вырожденностью энергетического спектра свободного атома водорода построение любой теории возмущений в

---

ж) Подробные ссылки и связь $KS$ - преобразований с физикой водородоподобных систем освящены в работе/2/.

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. $KS$ – преобразование сферических и параболических координат и их разложения по волновым функциям четырехмерного изотропного осциллятора известны[4,5]. В настоящей работе установлено $KS$ – преобразование трехмерной сфероидальной системы координат и тем самым обеспечена возможность подключения $KS$ – формализма к квантовомеханической задаче о двух кулоновских центрах.

Введем в $u$ – пространстве сфероидальные координаты $\xi$, $\eta$, $\varphi_{12}$, $\varphi_{34}$ следующим образом:

$$u_1 = \frac{d}{2}\,\mathrm{sh}\,\xi \sin\eta \sin\varphi_{12}, \qquad u_3 = \frac{d}{2}\,\mathrm{ch}\,\xi \cos\eta \sin\varphi_{34},$$
$$u_2 = \frac{d}{2}\,\mathrm{sh}\,\xi \sin\eta \cos\varphi_{12}, \qquad u_4 = \frac{d}{2}\,\mathrm{ch}\,\xi \cos\eta \cos\varphi_{34}. \tag{2}$$

Здесь $d$ – произвольный параметр ($0 \le d < \infty$), а в области изменения координат $\xi$, $\eta$, $\varphi_{12}$ и $\varphi_{34}$ таковы:

$$0 \le \xi < \infty, \quad 0 \le \eta \le \frac{\pi}{2}, \quad 0 \le \varphi_{12} < 2\pi, \quad 0 \le \varphi_{34} < 2\pi.$$

Подставляя (2) в (I) и вводя обозначения

$$R = \frac{d^2}{4}, \quad \mu = 2\xi, \quad \nu = 2\eta, \quad \varphi = \varphi_{12} + \varphi_{34},$$

приходим к трехмерным вытянутым сфероидальным координатам[6]

$$x = \frac{R}{2}\,\mathrm{sh}\,\mu \sin\nu \sin\varphi,$$
$$y = \frac{R}{2}\,\mathrm{sh}\,\mu \sin\nu \cos\varphi, \tag{3}$$
$$z = \frac{R}{2}\left[\mathrm{ch}\,\mu \cos\nu + 1\right].$$

Сформулируем теперь отмеченную выше связь между пространствами $R^4$ и $R^3$ на языке уравнения Шредингера. Не вдаваясь в подробности, изложенные в работе[5], приведем следующее утверждение. Решить уравнение Шредингера



$$\Delta_x \psi(\vec{x}) + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[E - V(\vec{x})\right]\psi(\vec{x}) = 0 \tag{4}$$

– это то же самое, что найти такие решения уравнения

$$\Delta_u \Phi(\vec{u}) + \frac{8\mu}{\hbar^2}\left[E u^2 - u^2 V\right]\Phi(\vec{u}) = 0, \tag{5}$$

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 $R^4$, $u^2 = u_1^2 + \dots + u_4^2 = (x^2+y^2+z^2)^{1/2}$,

$$\hat{X} = u_1\frac{\partial}{\partial u_2} - u_2\frac{\partial}{\partial u_1} + u_4\frac{\partial}{\partial u_3} - u_3\frac{\partial}{\partial u_4}. \tag{6}$$

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 (5) лишь те, которые зависят только от трех переменных $x$, $y$, $z$. В самом деле, в сфероидальных координатах (2) оператор (6) имеет простой вид

$$\hat{X} = \frac{\partial}{\partial\varphi_{34}} - \frac{\partial}{\partial\varphi_{12}}.$$

Введем новые независимые переменные $\varphi_\pm = \varphi_{34} \pm \varphi_{12}$. Очевидно, оператор $\hat{X}$ зависит лишь от переменной $\varphi_-$, а именно

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

Отсюда ясно, что условие (б) выделяет решения, зависящие от трех переменных $\xi$, $\eta$, $\varphi_+$.

Разберем подробнее важный случай кулоновского поля $V = -Ze^2/r$. В этом случае уравнение (5) переходит в уравнение Шредингера для четырехмерного изотропного осциллятора

$$\Delta_u \Phi + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left[\varepsilon - \frac{\mu\omega^2 u^2}{2}\right]\Phi = 0 \;; \qquad (7)$$

в котором

$$-4E = \frac{\mu\omega^2}{2}\;, \quad \varepsilon = 4Ze^2\;.$$

Разделяя переменные в уравнениях (7) и (4) в сфероидальных координатах (2) и (3) соответственно, т.е. положив

$$\Phi(\xi,\eta,\varphi_{12},\varphi_{34};d^2) = X(\xi;d^2)\,Y(\eta;d^2)\,\frac{e^{i(m_1\varphi_{12}+m_2\varphi_{34})}}{2\pi}\,, \qquad (8)$$

$$\Psi(\mu,\nu,\varphi;R) = \Pi(\mu;R)\,\Xi(\nu;R)\,\frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}\,, \qquad (9)$$

приходим к двум системам обыкновенных дифференциальных уравнений.

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

$$\left\{\begin{aligned} &\frac{1}{\operatorname{sh}2\xi}\frac{d}{d\xi}\left[\operatorname{sh}2\xi\frac{dX}{d\xi}\right] + \left[\frac{\mu\varepsilon d^2}{4\hbar^2}\operatorname{ch}2\xi - \frac{\mu^2\omega^2 d^4}{64\hbar^2}\operatorname{ch}^2 2\xi + \frac{m_1^2}{\operatorname{ch}^2\xi} - \frac{m_2^2}{\operatorname{sh}^2\xi} - B(d^2)\right]X = 0\,, && (\text{11а})\\ &\frac{1}{\sin 2\eta}\frac{d}{d\eta}\left[\sin 2\eta\frac{dY}{d\eta}\right] + \left[-\frac{\mu\varepsilon d^2}{4\hbar^2}\cos 2\eta + \frac{\mu^2\omega^2 d^4}{64\hbar^2}\cos^2 2\eta - \frac{m_1^2}{\cos^2\eta} - \frac{m_2^2}{\sin^2\eta} + B(d^2)\right]Y = 0\,, && (\text{11б})\end{aligned}\right.$$

в которых через $A$ и $B$ обозначены кулоновская и осцилляторная константы разделения. Сравнение этих уравнений приводит к следующим выводам: во-первых, условие (б) отбирает лишь решения (8), для которых $m_1 = m_2 = m$ , во-вторых, если обозначить через $n$ , $q$ , $k$ ( $n = q + k + |m|$ ) и $N$ , $t$ , $p$ ( $N = 2t + p + |m_1| + |m_2|$ ) главные квантовые числа и число нулей радиальных и угловых функций $\Pi$ , $\Xi$ и $X$ , $Y$ соответственно, то условие однозначности (а) отбирает лишь решения (8) с четными $N$ и $p$ , причем $N = 2n$ , $p = 2q$ . В-третьих, кулоновская константа разделения $A$ получается из осцилляторной константы разделения $B$ с помощью простой формулы

$$A_{nqm} = \frac{1}{4}B_{2n,2q,m}\;.$$

Отметим еще один интересный факт. В случае потенциала, используемого в моделях конфайнмента ,

$$V(r) = -\frac{\alpha}{r} + \beta r\;.$$

Уравнение (5) переходит в уравнение Шредингера

$$\Delta_u \Phi + \frac{8\mu}{\hbar^2}\left[\alpha + E u^2 - \beta u^4\right] = 0$$

для ангармонического четырехмерного осциллятора.

В связи с проведенным выше анализом возникает вопрос: зачем использовать $KS$ – преобразование, если оно приводит после разделения переменных к тем же уравнениям? Во-первых, выясняется, что волновые функции атома водорода – это лишь подкласс более общих специальных функций, соответствующих четырехмерному изотропному осциллятору. В чисто математическом плане ценность указанной информации не вызывает сомнения. Далее, в присутствии внешних полей, например, в задаче о двух неподвижных кулоновских центрах, переменные в уравнении (5) также разделяются в сфероидальных координатах (2), и после такого разделения мы снова приходим к известным из теории атома водорода уравнениям в сфероидальных координатах (3). Таким образом, высказанное выше замечание относится и к этой более сложной задаче. Вычислительные преимущества аппарата $KS$ – преобразований следует искать до разделения переменных, развивая теорию возмущений на основе уравнения (5) и условий (а) и (б).

Мы благодарны С.И.Виницкому, Л.И.Пономареву и Г.Л.Баятяну за полезные беседы.

Литература


I. P.Kustaanheimo, E.Steifel. J.Reine Angew.Math., 218, 204, 1965.
2. M.Kibler, T.Negadi. Croatica Chemica Acta, CCACAA, 57(6), 1509, 1984.
3. C.M.Bender, T.T.Wu. Phys.Rev. D7, 1620 (1973).
4. Л.Г.Мардоян, Г.С.Погосян, А.Н.Сисакян, В.М.Тер-Антонян. Точное решение задачи Киблера-Ронвикса-Негади. Сообщения ОИЯИ, Р2-86-431, Дубна, 1986.
5. M.Kibler, A.Ronveaux, T.Negadi. J.Math.Phys., 26 (9), 1986.
6. И.В.Комаров, Л.И.Пономарев, С.Ю.Славнов. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М., Наука, 1976.



Рукопись поступила в издательский отдел
8 мая 1987 года.




Давтян Л.С. и др. Р2-87-323
KS-преобразование трехмерных вытянутых сфероидальных координат


В работе введены четырехмерные сфероидальные координаты, переходящие при KS-преобразовании в трехмерные вытянутые сфероидальные координаты. Отмечена возможность использования этих координат для KS-формулировки квантовой задачи о двух неподвижных кулоновских центрах.



Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод Г.Г.Сандуковской


Davtyan L.S. et al. P2-87-323
KS Transformation of Three-Dimensional Prolate Spheroidal Coordinates


Four-dimensional spheroidal coordinates are introduced that under KS transformation turn into three-dimensional prolate spheroidal coordinates. A possibility is pointed out of using these coordinates for KS formulation of a quantum problem of two fixed Coulomb centres.



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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987