сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р2-89-814

А.Н.Сисакян, И.В.Луценко,* Л.Г.Мардоян*,
Г.С.Погосян*

ОБОБЩЕНИЕ МЕЖБАЗИСНОГО ОСЦИЛЛЯТОРНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ "ЦИЛИНДР - СФЕРА" В ПОЛЕ КОЛЬЦЕОБРАЗНОГО ПОТЕНЦИАЛА

*Ереванский государственный университет

1989

Введение

В работе/I/ были получены коэффициенты преобразования между декартовыми, цилиндрическими и сферическими волновыми функциями изотропного осциллятора.

Известно/2/, что переменные в уравнении Шредингера для кольцеобразного потенциала

$$V(r,\theta) = \frac{r^2}{2} + \frac{\beta}{r^2 \sin^2\theta} \tag{I}$$

разделяются в четырех системах координат: сферических, цилиндрических, вытянутых и сплюснутых сфероидальных координатах. Здесь β — положительный параметр.

Целью нашей работы является обобщение коэффициентов, связывающих цилиндрические и сферические волновые функции изотропного осциллятора на случай потенциала (I).

I. Базисы и квантовые числа

Согласно работе/2/ сферические и цилиндрические базисы кольцеобразного потенциала (I) имеют вид

$$\Psi_{N\lambda m}(r,\theta,\varphi) = R_{N\lambda}(r)\, Z_{\lambda\mu}(\cos\theta)\, \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \tag{2}$$

$$\Psi_{N\nu m}(\rho, z,\varphi) = R_{N\nu\mu}(\rho)\, Z_{\nu}(z)\, \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}. \tag{3}$$

Энергия для кольцеобразного потенциала (I) принимает только дискретные значения и по форме совпадает с энергетическим спектром трехмерного изотропного осциллятора

$$E_N = N + \frac{3}{2}.$$

Здесь

$$N = 2N_\rho + \nu + |\mu| = 2N_r + \lambda ,$$

где $|\mu| = (m^2 + 2\beta)^{1/2}$, $\lambda = t + |\mu|$, а числа t, ν, N_ρ и N_r являются целыми и положительными. Принятые в формуле (2) и (3) обозначения имеют следующий вид:

$$R_{N\lambda}(r) = C_{N\lambda}\, e^{-r^2/2}\, r^\lambda\, F\left(-\frac{N-\lambda}{2};\ \lambda + \frac{3}{2};\ r^2\right), \tag{4.а}$$

$$C_{N\lambda} = \frac{1}{\Gamma(\lambda+\frac{3}{2})}\sqrt{\frac{2\Gamma\left(\frac{N+\lambda}{2}+\frac{3}{2}\right)}{\left(\frac{N-\lambda}{2}\right)!}}\ , \tag{4.б}$$

$$Z_{\lambda\mu}(\cos\theta) = 2^{|\mu|}\,\Gamma\left(|\mu|+\frac{1}{2}\right)\sqrt{\frac{(2\lambda+1)(\lambda-|\mu|)!}{2\pi\,\Gamma(\lambda+|\mu|+1)}}\,(\sin\theta)^{|\mu|} \times \tag{4.в}$$
$$\times\ C^{|\mu|+1/2}_{\lambda-|\mu|}(\cos\theta)\ ,$$

$$R_{N\nu\mu}(\rho) = C_{N\nu\mu}\,\rho^{|\mu|}\, e^{-\rho^2/2}\, F\left(-\frac{N-|\mu|-\nu}{2};\ |\mu|+1;\ \rho^2\right), \tag{5.а}$$

$$C_{N\nu\mu} = \frac{1}{\Gamma(|\mu|+1)}\sqrt{\frac{2\Gamma\left(\frac{N+|\mu|-\nu}{2}+1\right)}{\left(\frac{N-|\mu|-\nu}{2}\right)!}}\ , \tag{5.б}$$

$$Z_\nu(z) = \frac{e^{-z^2/2}}{\pi^{1/4}\sqrt{2^\nu \nu!}}\,H_\nu(z), \tag{5.в}$$

где $C_N^2(\lambda)$ и $H_\nu(z)$ – полиномы Гегенбауера и Эрмита соответственно.

Здесь следует отметить, что волновые функции (2) и (3) можно получить по аналогии из волновых функций изотропного осциллятора с точностью до фазового множителя.

2. Межбазисные разложения в изотропном осцилляторе

Прежде чем перейти к рассмотрению межбазисных разложений в кольцеобразном потенциале, приведем вид коэффициента разложения цилиндрического базиса изотропного осциллятора по сферическому, полученному в работе /1/. Разложение "цилиндр - сфера" в осцилляторном поле имеет вид

$$\Psi_{nn_3m}(\rho,z,\varphi) = \sum_{\ell=|m|,|m|+1}^{n}{}' \ W^{\ell m}_{nn_3}\ \Psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi).$$

Таблица 1 $n_3 = 0$

n	l	$(-1)^{\frac{m+\lvert m\rvert}{2}} W^{lm}_{nn_3}$
m	m	1
$\lvert m\rvert+2$	$\lvert m\rvert$	$\sqrt{\frac{2(\lvert m\rvert+1}{2\lvert m\rvert+3}}$
	$\lvert m\rvert+2$	$\sqrt{\frac{1}{2\lvert m\rvert+3}}$
$\lvert m\rvert+4$	$\lvert m\rvert$	$2\sqrt{\frac{(\lvert m\rvert+1)(\lvert m\rvert+2)}{(2\lvert m\rvert+3)(2\lvert m\rvert+5)}}$
	$\lvert m\rvert+2$	$2\sqrt{\frac{(\lvert m\rvert+\_)}{(2\lvert m\rvert+3)(2\lvert m\rvert+7)}}$
	$\lvert m\rvert+4$	$\sqrt{\frac{3}{(2\lvert m\rvert+5)(2\lvert m\rvert+7)}}$

Таблица 2 $n_3 = 1$

n	l	$(-1)^{\frac{m+\lvert m\rvert}{2}} W^{lm}_{nn_3}$
$\lvert m\rvert+1$	$\lvert m\rvert+1$	1
$\lvert m\rvert+3$	$\lvert m\rvert+1$	$\sqrt{\frac{2(\lvert m\rvert+1)}{2\lvert m\rvert+5}}$
	$\lvert m\rvert+3$	$\sqrt{\frac{3}{2\lvert m\rvert+5}}$
$\lvert m\rvert+5$	$\lvert m\rvert+1$	$2\sqrt{\frac{(\lvert m\rvert+1)(\lvert m\rvert+2)}{(2\lvert m\rvert+5)(2\lvert m\rvert+7)}}$
	$\lvert m\rvert+3$	$2\sqrt{\frac{3(\lvert m\rvert+2}{(2\lvert m\rvert+5)(2\lvert m\rvert+9)}}$
	$\lvert m\rvert+3$	$\sqrt{\frac{15}{(2\lvert m\rvert+7)(2\lvert m\rvert+9)}}$

Таблица 3 $n_3 = 2$

n	l	$(-1)^{\frac{m+\lvert m\rvert}{2}} W^{lm}_{nn_3}$
$\lvert m\rvert+2$	$\lvert m\rvert$	$-\sqrt{\frac{1}{2\lvert m\rvert+3}}$
	$\lvert m\rvert+2$	$\sqrt{\frac{2(\lvert m\rvert+1}{2\lvert m\rvert+3}}$
$\lvert m\rvert+4$	$\lvert m\rvert$	$-2\sqrt{\frac{\lvert m\rvert+1}{(2\lvert m\rvert+3)(2\lvert m\rvert+5)}}$
	$\lvert m\rvert+2$	$\frac{2\lvert m\rvert+1}{\sqrt{(2\lvert m\rvert+3)(2\lvert m\rvert+7)}}$
	$\lvert m\rvert+4$	$2\sqrt{\frac{3(\lvert m\rvert+2)}{(2\lvert m\rvert+5)(2\lvert m\rvert+7)}}$

Таблица 4 $n_3 = 3$

n	l	$(-1)^{\frac{m+\lvert m\rvert}{2}} W^{lm}_{nn}$
$\lvert m\rvert+3$	$\lvert m\rvert+1$	$-\sqrt{\frac{3}{2\lvert m\rvert+5}}$
	$\lvert m\rvert+3$	$\sqrt{\frac{2(\lvert m\rvert+1}{2\lvert m\rvert+5}}$
$\lvert m\rvert+5$	$\lvert m\rvert+1$	$-2\sqrt{\frac{3(\lvert m\rvert+1}{(2\lvert m\rvert+5)(2\lvert m\rvert+7)}}$
	$\lvert m\rvert+3$	$\frac{2\lvert m\rvert-1}{\sqrt{(2\lvert m\rvert+5)(2\lvert m\rvert+9)}}$
	$\lvert m\rvert+5$	$2\sqrt{\frac{5(\lvert m\rvert+2)}{(2\lvert m\rvert+7)(2\lvert m\rvert+9)}}$

Здесь штрих над знаком суммы означает, что ℓ пробегает значения, имеющие четность числа n.

$$W^{\ell m}_{nn_3} = (-1)^{\frac{m+|m|}{2}} \, C^{c\gamma}_{a\alpha;\, b\beta}\,, \tag{6}$$

где

$$a=\frac{n+|m|}{4}\,, \quad b=\frac{n-|m|-1}{4}\,, \quad c=\frac{2\ell-1}{4}\,,$$

$$\alpha=\frac{n+|m|-2n_3}{4}\,, \quad \beta=\frac{2n_3+|m|-n-1}{4}\,, \quad \gamma=\frac{2|m|-1}{4}\,, \tag{6.a}$$

$C^{c\gamma}_{a\alpha;b\beta}$ – представляет из себя аналитическое продолжение коэффициентов Клебша - Гордана на четвертьцелые значения момента.

Для большей наглядности в конце приведены несколько частных значений коэффициентов Клебша - Гордана (см. таблицы I-4).

3. Разложение цилиндрического базиса кольцеобразного потенциала по сферическому

Искомое разложение имеет вид

$$\Psi_{N\nu m}(\rho,z,\varphi) = {\sum_{t=0,1}^{N-|\mu|}}' \, T^{\lambda\mu}_{N\nu}\, \Psi_{N\lambda m}(r,\theta,\varphi). \tag{7}$$

Известно[3], что радиальные волновые функции атома водорода и изотропного осциллятора удовлетворяют следующим специфическим условиям ортогональности по орбитальному моменту ℓ :

$$\int_0^\infty R_{n\ell}(r)\,R_{n\ell'}(r)\,dr = \left(\frac{\partial E_n}{\partial \ell}\right)_{n_r} \frac{2\,\delta_{\ell'\ell}}{2\ell+1}\,. \tag{8}$$

Аналогичное условие ортогональности имеет место и для потенциалов

$$\mathcal{U}(r,\theta) = -\frac{1}{r} + \frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}\,; \qquad \mathcal{U}(r,\theta)=\frac{r^2}{2}+\frac{\beta}{r^2\sin^2\theta}\,,$$

$$\int_0^\infty R_{N\lambda}(r)\,R_{N\lambda'}(r)\,dr = \left(\frac{\partial E_N}{\partial \lambda}\right)_{N_r} \frac{2\,\delta_{\lambda'\lambda}}{2\lambda+1}\,. \tag{9}$$

В частности, для потенциала (I) это специфическое условие ортогональности имеет вид

$$\int_0^\infty R_{N\lambda}(r)\,R_{N\lambda'}(r)\,dr = \frac{2\,\delta_{\lambda'\lambda}}{2\lambda+1}\,. \tag{10}$$

Причиной как ортогональности (8), так и ортогональности (9) является случайное вырождение энергетических спектров.

Теперь перейдем непосредственно к вычислению коэффициента межбазисного разложения (7). Для этого, перейдя в левой части соотношения (7) к сферическим координатам, устремляя угол $\theta \to 0$ и пользуясь условием ортогональности (10), получим

$$T^{\lambda\mu}_{N\nu} = 2^{|\mu|}\,\Gamma(|\mu|+1)\sqrt{\frac{(2\lambda+1)(\lambda-|\mu|)!}{2\,\Gamma(\lambda+|\mu|+1)}}\; C_{N\nu\mu}\, I^{\lambda\mu}_{N\nu}\,, \tag{11}$$

где

$$I^{\lambda\mu}_{N\nu} = \int_0^\infty r^{|\mu|}\, e^{-r^2/2}\, H_\nu(r)\, R_{N\lambda}(r)\,dr. \tag{12}$$

Теперь, пользуясь формулами (II) и (I2), запишем несколько частных случаев разложения (7). Магнитное квантовое число m, а вместе с ним параметр μ, произвольны:

$\nu = 0$,

$$\Psi_{|\mu|,0,m}(\rho,z,\varphi) = \Psi_{|\mu|,|\mu|,m}(r,\theta,\varphi),$$

$$\Psi_{|\mu|+2,0,m}(\rho,z,\varphi)=\sqrt{\frac{2(|\mu|+1)}{2|\mu|+3}}\;\Psi_{|\mu|+2,|\mu|,m}(r,\theta,\varphi)+\sqrt{\frac{1}{2|\mu|+3}}\;\Psi_{|\mu|+2,|\mu|+2,m}(r,\theta,\varphi),$$

$$\Psi_{|\mu|+4,0,m}(\rho,z,\varphi) = 2\sqrt{\frac{(|\mu|+1)(|\mu|+2)}{(2|\mu|+3)(2|\mu|+5)}}\;\Psi_{|\mu|+4,|\mu|,m}(r,\theta,\varphi) +$$

$$+2\sqrt{\frac{|\mu|+2}{(2|\mu|+3)(2|\mu|+7)}}\;\Psi_{|\mu|+4,|\mu|+2,m}(r,\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{3}{(2|\mu|+5)(2|\mu|+7)}}\;\Psi_{|\mu|+4,|\mu|+4,m}(r,\theta,\varphi),$$

$\nu = 1.$

$$\Psi_{|\mu|+1,1,m}(\rho,z,\varphi) = \Psi_{|\mu|+1,|\mu|+1,m}(r,\theta,\varphi),$$

$$\Psi_{|\mu|+3,1,m}(\rho,z,\varphi) = \sqrt{\frac{2(|\mu|+1)}{2|\mu|+5}}\;\Psi_{|\mu|+3,|\mu|+1,m}(r,\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{3}{2|\mu|+5}}\;\Psi_{|\mu|+3,|\mu|+3,m}(r,\theta,\varphi),$$

$$\Psi_{|\mu|+5,1,m}(\rho,z,\varphi) = 2\sqrt{\frac{(|\mu|+1)(|\mu|+2)}{(2|\mu|+5)(2|\mu|+7)}}\;\Psi_{|\mu|+5,|\mu|+1,m}(r,\theta,\varphi) +$$

$$+2\sqrt{\frac{3(|\mu|+2)}{(2|\mu|+5)(2|\mu|+7)}}\;\Psi_{|\mu|+5,|\mu|+3,m}(r,\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{15}{(2|\mu|+7)(2|\mu|+9)}}\;\Psi_{|\mu|+5,|\mu|+5,m}(r,\theta,\varphi).$$

Из сравнения этих коэффициентов с коэффициентами, приведенными в таблицах I и 2, видим, что коэффициенты $T^{\lambda\mu}_{N\nu}$ можно получить из коэффициентов Клебша - Гордана, делая следующие подстановки:

$$\ell \to \lambda,\quad |m| \to |\mu|,\quad n \to N,\quad n_3 \to \nu.$$

Для вычисления коэффициентов $T^{\lambda\mu}_{N\nu}$ при больших значениях квантовых чисел необходимо иметь общее выражение для $T^{\lambda\mu}_{N\nu}$. Вычисляя интеграл (I2), получим

$$I^{\lambda\mu}_{N\nu} = 2^{\nu-1} C_{N\lambda}\,\frac{\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|}{2}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|-\nu}{2}+1\right)} \times$$

$$\times\; {}_3F_2\left\{\begin{matrix} -\frac{N-\lambda}{2},\; \frac{\lambda+|\mu|+1}{2},\; \frac{\lambda+|\mu|}{2}+1 \\ \lambda+\frac{3}{2},\; \frac{\lambda+|\mu|-\nu}{2}+1 \end{matrix}\;\middle|\; 1\right\}.$$

Далее, учитывая соотношение (4.б) и пользуясь формулой [4]

$${}_3F_2\left\{\begin{matrix} c,\, b,\, \ell-a \\ \ell,\, 1+b+c-f \end{matrix}\;\middle|\; 1\right\} = \frac{\Gamma(1-f+a)\Gamma(1+b+c-f)}{\Gamma(1+\ell-f)\Gamma(1-\ell-f+a+b+c)}\;{}_3F_2\left\{\begin{matrix} \ell-a,\, \ell-b,\, \ell-c \\ \ell,\, 1+\ell-f \end{matrix}\;\middle|\; 1\right\},$$

имеем

$$I^{\lambda\mu}_{N\nu} = \frac{2^{\nu-1}\left(\frac{N-|\mu|-\nu}{2}\right)!\;\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|}{2}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|-\nu}{2}+1\right)\Gamma\left(\frac{\lambda-|\mu|-\nu}{2}+1\right)} \times$$

$$\times \left\{\frac{2}{\left(\frac{N-\lambda}{2}\right)!\;\Gamma\left(\frac{N+\lambda}{2}+\frac{3}{2}\right)}\right\}^{1/2} {}_3F_2\left\{\begin{matrix} -\frac{N-\lambda}{2},\; -\frac{\nu}{2},\; -\frac{\nu-1}{2} \\ \frac{\lambda+|\mu|-\nu}{2}+1,\; \frac{\lambda-|\mu|-\nu}{2}+1 \end{matrix}\;\middle|\; 1\right\}.$$

Подставляя последнее выражение в (II) и учитывая (5.б), получим

$$T^{\lambda\mu}_{N\nu} = \frac{2^{|\mu|}}{\pi^{1/4}} \left\{\frac{2^{\nu-1}(2\nu+1)(\lambda-|\mu|)!\left(\frac{N-|\mu|-\nu}{2}\right)!\;\Gamma\left(\frac{N+|\mu|-\nu}{2}+1\right)}{\nu!\left(\frac{N-\lambda}{2}\right)!\;\Gamma(\lambda+|\mu|+1)\;\Gamma\left(\frac{N+\lambda}{2}+\frac{3}{2}\right)}\right\}^{1/2} \times$$

$$\times \frac{\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|+1}{2}\right)\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|}{2}+1\right)}{\Gamma\left(\frac{\lambda+|\mu|-\nu}{2}+1\right)\Gamma\left(\frac{\lambda-|\mu|-\nu}{2}+1\right)}\;{}_3F_2\left\{\begin{matrix} -\frac{N-\lambda}{2},\; -\frac{\nu}{2},\; -\frac{\nu-1}{2} \\ \frac{\lambda+|\mu|-\nu}{2}+1,\; \frac{\lambda-|\mu|-\nu}{2}+1 \end{matrix}\;\middle|\; 1\right\}.$$

Теперь, пользуясь следующей формулой для коэффициентов Клебша-Гордана [5]:

$$C^{c\gamma}_{a\alpha;b\beta} = \frac{\Delta(a,b,c)}{\Gamma(a+b-c+1)\,\Gamma(c-b+\alpha+1)\,\Gamma(c-a-\beta+1)} \times$$

$$\times \left\{\frac{\Gamma(a+\alpha+1)\Gamma(b-\beta+1)\Gamma(c+\gamma+1)\Gamma(c-\gamma+1)(2c+1)}{\Gamma(a-\alpha+1)\,\Gamma(b+\beta+1)}\right\}^{1/2} {}_3F_2\left\{\begin{matrix} c-a-b,\, \alpha-a,\, -b-\beta \\ c-a-\beta+1,\, c-b+\alpha+1 \end{matrix}\;\middle|\; 1\right\},$$

где

$$\Delta(a,b,c)=\sqrt{\frac{\Gamma(a+b-c+1)\,\Gamma(a-b+c+1)\,\Gamma(b-a+c+1)}{\Gamma(a+b+c+2)}}\,,$$

для коэффициентов разложения (7) получим

$$T^{\lambda\mu}_{N\nu}=C^{c\gamma}_{a\alpha;\,b\beta}\,, \tag{13}$$

здесь

$$a=\frac{N+|\mu|}{4}\,,\quad b=\frac{N-|\mu|-1}{4}\,,\quad c=\frac{2\lambda-1}{4}\,,$$
$$\alpha=\frac{N+|\mu|-2\nu}{4}\,,\quad \beta=\frac{2\nu+|\mu|-N-1}{4}\,,\quad \gamma=\frac{2|\mu|-1}{4}\,. \tag{14}$$

Итак, коэффициенты разложения цилиндрического базиса кольцеобразного потенциала по сферическому базису совпадают с коэффициентами Клебша - Гордана группы SU(2), продолженными в область произвольных вещественных значений момента.

В конце мы хотим отметить, что аналогия, замеченная выше для частных значений коэффициентов $T^{\lambda\mu}_{N\nu}$, предсказывает вид коэффициентов $T^{\lambda\mu}_{N\nu}$ с точностью до фазового множителя $(-1)^{\frac{m+|m|}{2}}$.

Мы искренне признательны В.М.Тер-Антоняну за полезные обсуждения.

Литература

1. Г.С.Погосян, В.М.Тер-Антонян. Сообщения ОИЯИ, Р2-11962, 1978.
2. C.Quesne. J.Phys. A, 21, 3093-3103, 1988.
3. Л.Г.Мардоян, Г.С.Погосян, В.М.Тер-Антонян. Изв. АН АрмССР, физика, 19, 3-9, 1984.
4. Я.А.Смородинский, Г.И.Кузнецов. ЯФ, 13, 443-453, 1971.
5. Д.А.Варшалович, А.Н.Москалев, В.К.Херсонский. Квантовая теория углового момента. "Наука", Ленинград, 1975.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 декабря 1989 года.

Сисакян А.Н. и др. P2-89-814

Обобщение межбазисного осцилляторного разложения "цилиндр - сфера" в поле кольцеобразного потенциала

Из аналогии между кольцеобразным и осцилляторным потенциалом получена ортогональность радиальных волновых функций кольцеобразного потенциала по "орбитальному моменту". Показано, что коэффициенты разложения цилиндрического базиса кольцеобразного потенциала по сферическому совпадают с коэффициентами Клебша - Гордана группы SU(2), продолженными в область произвольных вещественных значений момента.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Sissakian A.N. et al. P2-89-814

The Generalization of Interbasis Oscillator Expansions "Cylinder - Sphere" in the Field of a Ring-Shaped Potential

Radial wave functions of a ring-shaped potential are found to be orthogonal with respect to the "angular momentum" following analogy between ring-shaped and oscillator potentials. It is shown that expansion coefficients of a cylindrical basis of the ring-shaped potential over a spherical basis coincide with the Clebsch - Gordon coefficients of the group SU(2) continued into the region of arbitrary real values of the momentum.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989