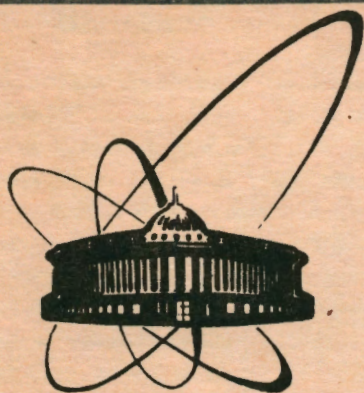


92-302



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P2-92-302

С. И. Виноцкий, Л. Г. Мардоян*, Г. С. Погосян,
А. Н. Сисакян, Т. А. Стриж

АТОМ ВОДОРОДА В ИСКРИВЛЕННОМ ПРОСТРАНСТВЕ.
РАЗЛОЖЕНИЕ ПО СВОБОДНЫМ РЕШЕНИЯМ
НА ТРЕХМЕРНОЙ СФЕРЕ

Направлено в журнал "Ядерная физика"

*Ереванский государственный университет

1992

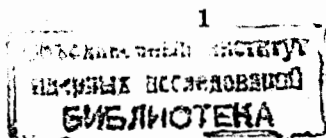
1 Введение

Волновые функции $\Psi_S^\alpha(\omega, R)$ атома водорода с гармоническим потенциалом $V_S^\alpha = -\alpha R^{-1} \text{ctg} \chi$ – решением уравнения Лапласа ($\alpha > 0$) на трехмерной сфере $S_R^3(\chi, \vartheta, \varphi) \ni \omega$ радиуса R , в четырехмерном евклидовом пространстве $M_4 \sim R^4 \setminus \{0\}$, впервые были рассмотрены Э.Шредингером, а также Л.Инфельдом и А.Стивенсоном в работах ^{/1-3/}. Шредингеровские волновые функции $\Psi_S^\alpha(\omega, R)$ на S_R^3 в пределе $R \rightarrow \infty$ можно сравнивать при $\chi \sim r/R$ с известными кулоновскими функциями $\Psi_c^\alpha(\vec{r})$ атома водорода с гармоническим потенциалом $V_c^\alpha = -\alpha r^{-1}$ – решением уравнения Лапласа ($\alpha = e^2 Z > 0$) в трехмерном евклидовом пространстве $M_3 \sim R^3 \setminus \{0\}$ в стандартной сферической системе координат $\vec{r} = (r, \vartheta, \varphi)$. Эти функции интересны тем, что их можно использовать в ряде квантовомеханических задач, имеющих практический интерес. В частности, при построении нерелятивистской модели кваркония ^{/4/} или моделей более сложных экзотических трехчастичных систем. Однако свойства $\Psi_S^\alpha(\omega, R)$ до настоящего времени мало изучены, несмотря на то, что они рассматривались неоднократно рядом авторов, например, ^{/5,6,7/}. Наибольший интерес представляет исследование различных асимптотик $\Psi_S^\alpha(\omega, R)$, а также их разложений по известным специальным функциям. Последнее особенно важно для исследования асимптотических состояний трехчастичной задачи рассеяния ^{/8/} и построения новых эффективных алгоритмов ее решения ^{/9/}.

В настоящей работе найдены разложения шредингеровских функций $\Psi_S^\alpha(\omega, R)$ атома водорода с гармоническим потенциалом V_S^α по свободным $\alpha = 0$ решениям $\Psi_S^0(\omega, R)$ на S_R^3 и установлено их соответствие при $R/r \rightarrow \infty$ с известными $\Psi_c^\alpha(\vec{r})$ функциями дискретного $\Psi_d^\alpha(\vec{r})$ и непрерывного $\Psi_e^\alpha(\vec{r})$ спектров обычного атома водорода с кулоновским потенциалом V_c^α и свободными $\alpha = 0$ решениями $\Psi^0(\vec{r})$ и M_3 . Приведены явные выражения для квазирадиальных шредингеровских функций атома водорода и некоторых коэффициентов разложения по свободным квазирадиальным решениям на S_R^3 при значениях орбитального момента $l = n - 1, n - 2$.

2 Свободные квазирадиальные решения на трехмерной сфере

Координаты $\vec{x} = \{x_1, x_2, x_3, x_4\}$ плоского евклидова пространства $M_4 \sim$



$R^4 \setminus \{0\}$ связаны с координатами $\omega = \{\chi, \vartheta, \varphi\}$ вложенной трехмерной сферы $\widehat{M}_4 \sim S_R^3$ радиуса $0 < R < \infty$ соотношениями:

$$\begin{aligned} x_1 &= R \sin \chi \sin \vartheta \cos \varphi, \quad x_2 = R \sin \chi \sin \vartheta \sin \varphi, \\ x_3 &= R \sin \chi \cos \vartheta, \quad x_4 = R \cos \chi, \\ 0 &\leq \chi \leq \pi, \quad 0 \leq \vartheta \leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi. \end{aligned} \quad (1)$$

Угловая часть четырехмерного оператора Лапласа $\widehat{\square}$ и элемент объема $d\widehat{M}_4$ в \widehat{M}_4 имеют вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{R^2} \widehat{\square} &= \frac{1}{R^2} \left[\frac{1}{\sin^2 \chi} \frac{\partial}{\partial \chi} \sin^2 \chi \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{l^2}{\sin^2 \chi} \right], \\ d\widehat{M}_4 &= \sin^2 \chi d\chi R^3 d\widehat{M}_3, \end{aligned}$$

где

$$l^2 = - \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right],$$

$$d\widehat{M}_3 = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

— оператор квадрата углового момента на $\widehat{M}_3 \sim S^2(\vartheta, \varphi)$.

Соотношение $\chi \sim r/R$ при $R/r \rightarrow \infty$ обеспечивает соответствие оператора Лапласа $\widehat{\square}$ на $S_R^3 \hookrightarrow M_4$ обычному трехмерному оператору Δ на M_3 :

$$\Delta = - \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} r^2 \frac{\partial}{\partial r} - \frac{l^2}{r^2}, \quad dM_3 = r^2 dr d\widehat{M}_3$$

в стандартной сферической параметризации M_3 .

Уравнение Шредингера с гармоническим потенциалом V_S^α на S_R^3 при каждом значении $R \in B = R_+^1$ можно записать в следующей форме

$$\left[- \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} \widehat{\square} + V_S^\alpha \right] \Psi_S^\alpha(\omega, R) = E^\alpha(R) \Psi_S^\alpha(\omega, R). \quad (2)$$

Решение уравнения для свободного движения на \widehat{M}_4 , т.е. при $\alpha = 0$ и $V_S^\alpha \equiv 0$, имеет вид

$$\Psi_{Jlm}^{\alpha=0}(\omega, R) = S_{JR}(\chi, R) Y_{lm}(\vartheta, \varphi), \quad (3)$$

где

$$S_{Jl}(\chi, R) = \frac{2^{l+1} l!}{R} \sqrt{\frac{(J+1)(J-l)!}{2\pi R(J+l+1)!}} (\sin \chi)^l C_{J-l}^{l+1}(\cos \chi), \quad (4)$$

а энергетический спектр определяется формулой

$$E_J^{\alpha=0}(R) = \frac{\hbar^2}{2\mu R^2} J(J+2).$$

Здесь $C_{J-l}^{l+1}(\cos \chi)$ — полиномы Гегенбауэра, $J = l, l+1, \dots$ — гипермомент, $Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \in L^2(\widehat{M}_3, d\widehat{M}_3)$ — шаровые функции на $S^2(\vartheta, \varphi)$

$$l^2 Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = l(l+1) Y_{lm}(\vartheta, \varphi).$$

Волновые функции (3) нормированы условием

$$R^3 \int_0^\pi \sin^2 \chi S_{Jl}(\chi, R) S_{J'l'}(\chi, R) d\chi = \delta_{JJ'}. \quad (5)$$

Соотношение полноты для функций (3)

$$R^3 \sum_{J=l}^\infty S_{Jl}(x) S_{Jl}(x') = \frac{\delta(x-x')}{(1-x^2)^{1/2}}, \quad x = \cos \chi$$

следует из условия полноты для полиномов Гегенбауэра

$$\sum_{n=0}^\infty \frac{1}{h_n} C_n^\nu(x) C_n^\nu(x') = \frac{\delta(x-x')}{(1-x^2)^{\nu-1/2}},$$

где

$$h_n = \int_{-1}^1 (1-x^2)^{\nu-1/2} [C_n^\nu(x)]^2 dx$$

— нормировочный интеграл.

Переход от искривленного пространства $\widehat{M}_4 \sim S_R^3$ к плоскому M_3 осуществляется при пределе $R \rightarrow \infty$. Для больших J , сравнимых с R : $J \sim k_0 R$, где k_0 — фиксированная величина, из (4) имеем $E_0 = \hbar k_0^2 / 2\mu$. Далее, вспоминая известное соотношение для полиномов Якоби ^{/10/}

$$\lim_{n \rightarrow \infty} [n^{-\alpha} P_n^{(\alpha, \beta)}(\cos \frac{z}{n})] = \lim_{n \rightarrow \infty} [n^{-\alpha} P_n^{(\alpha, \beta)}(1 - \frac{z^2}{2n^2})] = \left(\frac{z}{2}\right)^{-\alpha} J_\alpha(z),$$

где $J_\alpha(z)$ — функция Бесселя, и заменяя в (5)

$$\delta_{JJ'} \Rightarrow \frac{1}{R} \delta(k_0 - k_0'),$$

можно установить соответствие между волновыми функциями (3) в \widehat{M}_4 и волновыми функциями свободного движения в $M_3^{11/}$

$$\lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ J/R \rightarrow k_0}} \sqrt{R} S_{Jl}(\chi, R) = \sqrt{\frac{k_0}{r}} J_{l+1/2}(k_0 r). \quad (6)$$

Последнее соотношение дает основание называть функции (3) свободными квазирадиальными решениями на S_R^3 .

3 Квазирадиальные решения атома водорода на трехмерной сфере

Переменные в уравнении Шредингера (2) с гармоническим потенциалом $V_S^\alpha = -\alpha R^{-1} \text{ctg} \chi$ при $\alpha = e^2 Z > 0$ также разделяются

$$\Psi_s^\alpha(\omega, R) = \Psi_s^\alpha(\chi, R) Y_{lm}(\vartheta, \varphi),$$

и для функций $\Psi_S^\alpha(\chi, R)$ в единицах $e = \hbar = \mu = 1$ имеем уравнение

$$\left\{ -\frac{1}{2R^2} \left[\frac{1}{\sin^2 \chi} \frac{\partial}{\partial \chi} \sin^2 \chi \frac{\partial}{\partial \chi} - \frac{l(l+1)}{\sin^2 \chi} \right] - \frac{\alpha}{R} \text{ctg} \chi \right\} \Psi_s^\alpha(\chi, R) = E^\alpha(R) \Psi_S^\alpha(\chi, R). \quad (7)$$

Задача Штурма-Лиувилля для уравнения (7) на конечном интервале $\chi \in [0, \pi]$ имеет только дискретный спектр при всех $R \in (0, \infty)$. Э. Шредингер впервые нашел вырожденный (по l и m) энергетический спектр атома водорода в искривленном пространстве (1), пользуясь методом факторизации ^{1/1/}:

$$E_n^\alpha(R) = \frac{\hbar^2(n^2 - 1)}{2\mu R^2} - \frac{\mu\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}. \quad (8)$$

Здесь $n = 1, 2, \dots$ — главное квантовое число. Решение уравнения (7) имеет вид ^{1/2,5,8/}, $\Psi_S^\alpha(\chi, R) = \Psi_{nl\sigma}(\chi, R)$:

$$\Psi_{nl\sigma}(\chi, R) = C_{nl\sigma} (\sin \chi)^l \exp[-i\chi(n-l-1-i\sigma)] \times \\ \times {}_2F_1(-n+l+1, l+1+i\sigma, 2l+2, 1-e^{2i\chi}), \quad (9)$$

где

$$\sigma = \frac{\mu\alpha R}{\hbar^2 n} = \frac{R}{an}, \quad a = \frac{\hbar^2}{\mu\alpha}, \quad \alpha = e^2 Z > 0.$$

Волновые функции (9) в работах ^{1/5,6/} нормированы разными способами так, что полученные результаты различаются. Поэтому мы считаем нужным в данной работе еще раз вернуться к этому важному вопросу. Оператор $H(R)$ в левой части уравнения (7), самосопряженный на конечном интервале $\chi \in [0, \pi]$, имеет дискретный вещественно-аналитический спектр при $R \in (0, \infty)$. Его собственные функции также вещественно-аналитические и удовлетворяют условиям ортогональности и полноты:

$$R^3 \int_0^\pi \sin^2 \chi \Psi_{nl\sigma}^*(\chi, R) \Psi_{n'l'\sigma'}(\chi, R) d\chi = \delta_{nn'},$$

$$R^3 \sum_{n=l+1}^\infty \Psi_{nl\sigma}(x, R) \Psi_{nl\sigma}^*(x', R) = \frac{\delta(x-x')}{(1-x^2)^{1/2}}, \quad (10)$$

$$x = \cos \chi.$$

Поскольку область изменения аргумента гипергеометрической функции (9) на действительной оси находится на отрезке $[0, 2]$, удобно перейти к гипергеометрической функции от аргумента $e^{2i\chi}$, область изменения которого на действительной оси лежит на отрезке $[0, 1]$. Пользуясь известным соотношением для гипергеометрических функций

$$F(a, b, c, z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} F(a, b, a+b-c+1, 1-z) + \\ + \frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b+c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} (1-z)^{c-a-b} F(c-a, c-b, c-a-b+1, 1-z),$$

можно переписать (9) в следующем виде

$$\Psi_{nl\sigma}(\chi, R) = C_{nl\sigma} \frac{(2l+1)!\Gamma(n-i\sigma)}{(n+l)!\Gamma(l+1-i\sigma)} (\sin \chi)^l \cdot \\ \cdot \exp[-i\chi(n-l-1-i\sigma)] {}_2F_1(-n+l+1, l+1+i\sigma, -n+1+i\sigma, e^{2i\chi}). \quad (11)$$

Теперь, подставив в (10) функции (11), запишем гипергеометрические функции в виде многочленов, произведем интегрирование согласно формуле ^{1/12/}

$$\int_0^\pi (\sin t)^\alpha e^{i\beta t} dt = \frac{\pi}{2^\alpha} \frac{\Gamma(1+\alpha) e^{i(\pi/2)\beta}}{\Gamma(1+\frac{\alpha+\beta}{2}) \Gamma(1+\frac{\alpha-\beta}{2})} \quad (12)$$

при $\Re\alpha > 0$ и воспользуемся известным соотношением^{/12/}

$$\frac{\Gamma(z)}{\Gamma(z-n)} = (-1)^n \frac{\Gamma(-z+n+1)}{\Gamma(-z+1)}.$$

Тогда для $n = n'$ имеем

$$\frac{\pi R^3}{2^{2l+2}} (2l+2)! \left(\frac{(2l+1)! |\Gamma(n-i\sigma)|}{(n+l)! |\Gamma(l+1-i\sigma)|} \right)^2 |C_{nl\sigma}|^2 e^{-\pi\sigma}. \quad (13)$$

$$\sum_{s=0}^{n-l-1} \frac{(-1)^s (-n+l+1)_s (l+1+i\sigma)_s}{(-n+1+i\sigma)_s \Gamma(l+2-s-i\sigma) \Gamma(l+2+s+i\sigma)}$$

$${}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -n+l+1, & l+1-i\sigma, & -l-1-s-i\sigma \\ -n+1+i\sigma, & l-2-s-i\sigma \end{matrix} \middle| 1 \right\} = 1.$$

Теперь, дважды пользуясь соотношением^{/13/}

$${}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} a, & a', & -N \\ b', & 1-N-b \end{matrix} \middle| 1 \right\} = \frac{(a+b)_N}{(b)_N} {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} a, & b'-a', & -N \\ b', & a+b \end{matrix} \middle| 1 \right\}, \quad (14)$$

получим, что

$${}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -n+l+1, & l+1-i\sigma, & -l-1-s+i\sigma \\ -n+1-i\sigma, & l-2-s-i\sigma \end{matrix} \middle| 1 \right\} =$$

$$= \frac{(-s)_{n-l-1}}{(l+1+i\sigma)_s} \frac{(-n-l-1)}{(s-n+i\sigma)_{n-l-1}} {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -n+l+1, & -l-1-s-i\sigma, & -1 \\ -s, & -n-l-1 \end{matrix} \middle| 1 \right\},$$

и следовательно,

$$\frac{\pi R^3}{2^{2l+2}} \frac{(n+l+1)\Gamma(n-i\sigma)[(2l+1)!]^2}{(n+l)! \Gamma(l+1-i\sigma)} e^{-\pi\sigma} |C_{nl\sigma}|^2.$$

$$\sum_{s=0}^{n-l-1} \frac{(-1)^s (-n+l+1)_s (l+1+i\sigma)_s}{s! (-n+1+i\sigma)_s \Gamma(l+2+s+i\sigma) \Gamma(n+1-s-i\sigma)}$$

$$\left\{ \frac{\Gamma(n-1-l-s)}{\Gamma(-s)} + \frac{(n-l-1)(l+1+s+i\sigma)\Gamma(n-1-l-s)}{n+l+1\Gamma(1-s)} \right\} = 1.$$

Из последнего выражения замечаем, что первое слагаемое отлично от нуля только при $s = n-l-1$, а второе при $s = 0$ и $s = n-l-1$. Тогда для нормировочного множителя имеем выражение

$$C_{nl\sigma} = \frac{2^{l+1} |\Gamma(l+1-i\sigma)|}{R(2l+1)!} e^{\pi\sigma/2} \sqrt{\frac{(n^2+\sigma^2)(n+l)!}{2\pi n R(n-l-1)!}}, \quad (15)$$

которое совпадает с результатами работы^{/4/}. Пользуясь соотношением

$$F(a, b, c; z) = (1-z)^a F\left(a, c-b; c; \frac{z}{z-1}\right),$$

легко убедиться в вещественности волновых функций (9).

Рассмотрим основные асимптотические свойства функций (9) с нормировочным коэффициентом (15). Для этого их удобно представить в виде

$$\Psi_{nl\sigma}(\chi, R) = D_{nl\sigma}(R) (2\sigma \sin \chi)^l \exp(-i\chi(n-l-1-i\sigma)) \times$$

$$\times {}_2F_1(-n+l+1, l+1+i\sigma, 2l+2, 1-e^{2i\chi}). \quad (9a)$$

Здесь

$$D_{nl\sigma}(R) = \{(2\pi)^{-1/2} |\Gamma(l+1-i\sigma)| e^{\pi\sigma/2} \sigma^{1/2-(l+1)}\} \times$$

$$\times 2 \sqrt{\frac{\sigma n^2 + \sigma^2}{n R^3}} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)! (2l+1)!}} \quad (16)$$

нормировочный коэффициент, который при фиксированном n в пределе $R \rightarrow \infty$ переходит в

$$\lim_{R \rightarrow \infty} D_{nl\sigma}(R) = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n+l)!}{a^3(n-l-1)! (2l+1)!}} = D_{nl} \quad (17)$$

нормировочный коэффициент D_{nl} радиальной волновой функции $\Psi_d^{\sigma}(r)$ дискретного спектра атома водорода в плоском пространстве M_3 ^{/11/}

$$R_{nl}(r) = D_{nl} \left(\frac{2r}{an}\right)^l \exp(-r/an) \times$$

$$\times {}_1F_1(-n+l+1, 2l+2, 2r/an). \quad (18)$$

Предельное соотношение (17) имеет место благодаря тому, что выражение в фигурных скобках^{/13/}

$$\lim_{|y| \rightarrow \infty} \{(2\pi)^{-1/2} |\Gamma(x+iy)| e^{\pi|y|/2} |y|^{1/2-x}\} = 1 \quad (19)$$

в нормировочном коэффициенте (16) в пределе $R \rightarrow \infty$ равно 1. Дальнейшее упрощение нормировочного коэффициента (16) достигается с помощью стандартной подстановки

$$|\Gamma(l+1-i\sigma)| = \sqrt{\frac{\pi\sigma}{sh\pi\sigma}} \prod_{s=1}^l \sqrt{s^2 + \sigma^2}, \quad (20)$$

которая позволяет представить его в виде

$$D_{nl\sigma}(R) = \left\{ \frac{\sigma^{-l}}{\sqrt{1 - e^{-2\pi\sigma}}} \prod_{s=1}^l \sqrt{s^2 + \sigma^2} \right\} \times \\ \times 2 \sqrt{\frac{\sigma n^2 + \sigma^2}{n}} \frac{1}{R^3} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!(2l+1)!}} \quad (16a)$$

Используя приведенные соотношения и

$$\lim_{b \rightarrow \infty} {}_2F_1(a, b, c, z/b) = {}_1F_1(a, c, z),$$

можно установить предельное соотношение при $R/r \rightarrow \infty$

$$\lim_{R/r \rightarrow \infty} \Psi_{nl\sigma}(\chi, R) = R_{nl}(r), \quad (21)$$

соответствующее при фиксированном n превращению спектра (8) в

$$\lim_{R \rightarrow \infty} E_n^\alpha(R) = -\frac{1}{2n^2} \frac{\mu\alpha^2}{\hbar^2}, \quad (22)$$

дискретный спектр атома водорода в плоском пространстве M_3 , а также получить явные выражения для функций (9а):

$$\Psi_{nn-1\sigma}(\chi, R) = D_{nn-1\sigma}(R)(2\sigma \sin \chi)^{n-1} \exp(-\sigma\chi) \Rightarrow \\ \xrightarrow{R/r \rightarrow \infty} D_{nn-1} \left(\frac{2r}{an} \right)^{n-1} \exp(-r/an), \quad (23)$$

$$\Psi_{nn-2\sigma}(\chi, R) = D_{nn-2\sigma}(R)(2\sigma \sin \chi)^{n-2} \exp(-\sigma\chi) \times \\ \times \left\{ \cos \chi - \frac{2\sigma}{2n-2} \sin \chi \right\} \Rightarrow$$

$$\xrightarrow{R/r \rightarrow \infty} D_{nn-2} \left(\frac{2r}{an} \right)^{n-2} \exp(-r/an) \left\{ 1 - \frac{1}{2n-2} \frac{2r}{an} \right\},$$

$$\Psi_{nn-3\sigma}(\chi, R) = D_{nn-3\sigma}(R)(2\sigma \sin \chi)^{n-3} \exp(-\sigma\chi) \times$$

$$\times \left\{ \left[1 - \frac{2(n-1)}{2n-3} \sin^2 \chi \right] - \frac{\cos \chi}{n-2} (2\sigma \sin \chi) + \frac{1}{(2n-4)(2n-3)} (2\sigma \sin \chi)^2 \right\} \Rightarrow$$

$$\xrightarrow{R/r \rightarrow \infty} D_{nn-3} \left(\frac{2r}{an} \right)^{n-3} \exp(-r/an) \left\{ 1 - \frac{1}{n-2} \frac{2r}{an} + \frac{1}{(2n-4)(2n-3)} \left(\frac{2r}{an} \right)^2 \right\}.$$

Соответствующие графики функций (23) при различных значениях n, R и $r = \chi R, \chi \in [0, \pi]$, позволяющие проследить предельный переход (21), представлены на рис. 1-4. Их следует сравнивать с соответствующими графиками /14/.

Для больших значений n , сравнимых с $R \rightarrow \infty$, так, что $n \sim kR$ (k — постоянная величина), имеем $\sigma = (ak)^{-1}$ и, пользуясь соотношениями, аналогичными приведенным выше, а также заменяя

$$\delta_{nn'} \Rightarrow \frac{1}{R} \delta(k - k'),$$

получим радиальные волновые функции $\Psi_c^\alpha(r)$

$$\lim_{\substack{R \rightarrow \infty \\ n/R \rightarrow k}} \sqrt{R} \Psi_{nl\sigma}(\chi, R) = R_{kl}(r), \quad (24)$$

соответствующие непрерывному спектру атома водорода в плоском трехмерном пространстве M_3 , при значении энергии

$$\lim_{R \rightarrow \infty} E_n^\alpha(R) = k^2 \frac{\hbar^2}{2\mu}. \quad (25)$$

Здесь $R_{kl}(r)$ имеет стандартный вид /14/

$$R_{kl}(r) = C_{kl} (2kr)^l e^{-ikr} \times \\ \times {}_1F_1\left(\frac{i}{ak} + l + 1, 2l + 2, 2ikr\right). \quad (26)$$

Нормировочный коэффициент определяется соотношением

$$C_{kl} = \sqrt{\frac{2}{\pi}} k \left| \Gamma\left(l + 1 - \frac{i}{ka}\right) \right| e^{\pi/(2ak)} \frac{1}{(2l+1)!} \quad (27)$$

и согласно (20):

$$C_{kl} = \frac{2\sqrt{k/a}}{\sqrt{1 - e^{-2\pi/(ak)}}} \prod_{s=1}^l \sqrt{s^2 + \left(\frac{1}{ak}\right)^2} \frac{1}{(2l+1)!}. \quad (27a)$$

Решения (9) и (11) с нормировочным коэффициентом (15) и последнем предельном случае (24) переходят в радиальные волновые функции $\Psi_c^\alpha(r)$ непрерывного спектра (25) обычного атома водорода в плоском трехмерном пространстве M_3 , поэтому их можно назвать квазирадialными

волновыми функциями атома водорода с гармоническим потенциалом V_S^α на $S_R^3 \hookrightarrow M_4$. Соответствующие графики при $l = 0$ представлены на рис.5.

Для дальнейшего изложения нам понадобится еще одно важное предельное соотношение

$$\Psi_{nl\sigma}(\chi, R)|_{\sigma=0} = S_{Jl}(\chi, R), \quad (28)$$

которое должно иметь место при выключении взаимодействия $V_S^\alpha = 0$, т.е. при $\alpha = 0$ или $\sigma = 0$. В этом случае мы имеем уравнение Шредингера для свободного движения на S_R^3 , решения которого определяются выражениями (3) и (4), т.е. квазирадиальные решения атома водорода $\Psi_{nl\sigma}$ должны переходить при $\sigma = 0$ в свободные квазирадиальные решения S_{Jl} при замене $n \rightarrow J + 1$. Этот переход проще проследить в волновых функциях (11) с нормировочным коэффициентом (15) при $\sigma = 0$:

$$\begin{aligned} \Psi_{nl\sigma}(\chi, R)|_{\sigma=0} &= \frac{2^{l+1}!}{R(2l+1)!} \sqrt{\frac{n(n+l)!}{2\pi R(n-l-1)!}} \times \\ &\times \frac{(2l+1)!}{(n+l)!} \frac{\Gamma(n)}{\Gamma(l+1)} (\sin \chi)^l \exp\{-i\chi(n-l-1)\} \times \\ &\times {}_2F_1(-n+l+1, l+1, 1-n, e^{2i\chi}), \end{aligned} \quad (29)$$

используя для полиномов Гегенбауэра в правой части (28) известное представление в виде многочлена^[12]

$$C_n^\nu(\cos \varphi) = [\Gamma(\nu)]^{-2} \sum_{m=0}^n \frac{\Gamma(m+\nu)\Gamma(n-m+\nu)}{m!(n-m)!} e^{-i(n-2m)\varphi}. \quad (30)$$

Выражая гипергеометрическую функцию в (29) также в виде многочлена с заменой $n \rightarrow J + 1$, получаем требуемое предельное соотношение (28).

4 Разложение волновых функций атома водорода по свободным решениям на трехмерной сфере

Поскольку волновые функции атома водорода (7) и свободного движения (3) на S_R^3 одинаковым образом зависят от углов ϑ и φ , искомое разложение достаточно записать для квазирадиальных решений

$$\Psi_{nl\sigma}(\chi, R) = \sum_{J=l}^{\infty} W_{Jl}^{n\sigma}(R) \cdot S_{Jl}(\chi, R). \quad (31)$$

Пользуясь ортонормируемостью (5) функций $S_{Jl}(\chi, R)$, получим

$$W_{Jl}^{n\sigma}(R) = R^3 \int_0^\pi \sin^2 \chi S_{Jl}(\chi, R) \Psi_{nl\sigma}(\chi, R) d\chi. \quad (32)$$

Подставляя в (31) выражения (4) и (9) и записывая гипергеометрическую функцию в виде многочлена, а для полиномов Гегенбауэра используя представление (30), после интегрирования с помощью формулы (12) получаем

$$W_{Jl}^{n\sigma}(R) = A_{Jl}^{n\sigma} \sum_{s=0}^{J-l} B_{Jls}^{n\sigma} {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -n+l+1, l+i\sigma+1, 2l+3 \\ 2l+2, 2l+s - \frac{J+n-i\sigma-3}{2} \end{matrix} \middle| 1 \right\}, \quad (33)$$

где

$$\begin{aligned} A_{Jl}^{n\sigma} &= (-1)^l e^{-i\frac{\pi}{2}(J+n-1)} (l+1)! \Gamma(l-i\sigma+1) \times \\ &\times \left\{ \frac{(J+1)(n^2+\sigma^2)(J-l)!(n+l)!}{n(J+l+1)(n-l-1)!} \right\}^{1/2} \end{aligned} \quad (34)$$

$$B_{Jls}^{n\sigma} = \frac{(l+1)_s (J-s)!}{s!(J-l-s)!} \frac{(-1)^s}{\Gamma\left(\frac{J+n-i\sigma+3}{2}-s\right) \Gamma\left(2l+3-\frac{J+n-i\sigma-5}{2}\right)}$$

Теперь, пользуясь формулой (14), легко заметить, что

$$\begin{aligned} {}_3F_2 \left\{ \begin{matrix} -n+l+1, & l+i\sigma+1, & 2l+3 \\ 2l+2, & 2l+s - \frac{J+n-i\sigma-5}{2} \end{matrix} \middle| 1 \right\} = \\ = \frac{\left(\frac{J-n+i\sigma+1}{2}-s\right)_{n-l-1}}{\left(\frac{J-n-i\sigma-1}{2}-l-s\right)_{n-l-1}} \times \\ \times \left\{ 1 - \frac{(n-l-1)(l+i\sigma+1)}{(2l+2)\left(s - \frac{J-n+i\sigma+1}{2}\right)} \right\}. \end{aligned}$$

Далее применяя соотношение (13) для гамма-функций, мы получим следующее выражение

$$W_{Jl}^{n\sigma}(R) = \frac{J!}{(J-l)!} \frac{A_{Jl}^{n\sigma}}{\Gamma\left(\frac{J+n-i\sigma+3}{2}\right)} D_{Jl}^{n\sigma},$$

где

$$D_{Jl}^{n\sigma} = \sum_{s=0}^{J-l} \frac{(-J+l)_s (l+1)_s}{s! (-J)_s} \times$$

$$\times \frac{\left(-\frac{J+n-i\sigma+1}{2}\right)_s \Gamma\left(s - \frac{J-n+i\sigma-1}{2}\right)}{\Gamma\left(l+s - \frac{J+n+i\sigma-3}{2}\right) \Gamma\left(l+s - \frac{J-n-i\sigma-3}{2}\right)} \times$$

$$\times \left\{ 1 - \frac{(n-l-1)(l+i\sigma+1)}{(2l+2)\left(s - \frac{J-n+i\sigma+1}{2}\right)} \right\}.$$

Последнее, как нетрудно убедиться, можно записать в виде суммы двух обобщенных гипергеометрических функций ${}_4F_3$ или одной функции ${}_5F_4$ от единичных аргументов, а именно,

$$W_{Jl}^{n\sigma}(R) = (-1)^{n-l-1} A_{Jl}^{n\sigma} \frac{J!}{(J-l)!} \times$$

$$\frac{\Gamma\left(\frac{J+n+i\sigma-1}{2} - l\right)}{\Gamma\left(\frac{J+n-i\sigma+3}{2}\right) \Gamma\left(l - \frac{J-n-i\sigma-3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{J-n+i\sigma+3}{2}\right)} \times$$

$$\times \left\{ \frac{J-n+i\sigma+1}{2} {}_4F_3 \left[-N, a, b, c; e, f, g \mid 1 \right] + \right.$$

$$\left. + \frac{(n-l-1)(l+i\sigma+1)}{2l+2} {}_4F_3 \left[-N, a, b, c-1; e, f, g \mid 1 \right] \right\}, \quad (35)$$

или

$$W_{Jl}^{n\sigma}(R) = (-1)^l \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}(J+n-1)}}{2l+2} \times$$

$$\frac{[(J-l)(l+1) + i\sigma] J! \Gamma\left(\frac{J+n+i\sigma-1}{2} - e\right) A_{Jl}^{n\sigma}}{2\Gamma\left(l - \frac{J-n-i\sigma-3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{J+n-i\sigma+3}{2}\right) \Gamma\left(\frac{J-n+i\sigma-3}{2}\right)} \times$$

$$\times {}_5F_4 \left[\begin{matrix} -N, & a, & b, & c, & d \\ e, & f, & g, & d-1 \end{matrix} \right], \quad (36)$$

где

$$N = J-l, \quad a = l+1, \quad b = -\frac{J+n-i\sigma+1}{2}, \quad c = \frac{n-J-i\sigma-1}{2},$$

$$d = 1 - \frac{J-l}{2} - \frac{i\sigma}{2l+2}, \quad e = -J, \quad f = l + \frac{n-J+i\sigma+3}{2},$$

$$g = l - \frac{J-n+i\sigma-3}{2}. \quad (37)$$

Пользуясь условиями нормировки волновых функций свободного движения (5) и атома водорода (10) на S_R^3 и разложением (31), можно получить следующее условие ортонормировки для коэффициентов

$$\sum_{J=l}^{\infty} W_{Jl}^{n'\sigma'}(R) W_{Jl}^{n\sigma}(R) = \delta_{nn'}. \quad (38)$$

Исследуем теперь предельные случаи. При $R \rightarrow \infty$, как это уже отмечалось выше, искривленное пространство S_R^3 переходит в плоское M_3 . Предельный переход произведем в интегральном выражении (32).

а) Рассмотрим случай $R \rightarrow \infty$ и $J/R \rightarrow k_0$. Тогда согласно формулам (6) и (21) имеем

$$\lim_{R \rightarrow \infty} \sqrt{R} W_{k_0 l}^{n\sigma}(R) = W_{k_0 l}^n(\infty) = \sqrt{2\pi k_0} \int_0^{\infty} r^{3/2} J_{l+1/2}(k_0 r) R_{nl}(r) dr.$$

Подставляя в это выражение радиальную функцию (18) и пользуясь интегралами, приведенными в математическом дополнении ^{/11/}, получим

$$W_{k_0 l}^n(\infty) = (-1)^{n-l-1} \frac{2\sqrt{a}(4ank_0)^{l+1} n!}{\sqrt{(n-l-1)!(n+l)!}} \frac{(1-ik_0an)^{n-2l-3}}{(1+ik_0an)^{n+1}} \times$$

$$\times F \left[-n+l+1, l+1, 1-n, \left(\frac{1+ik_0an}{1-ik_0an} \right)^2 \right].$$

б) При $R \rightarrow \infty$ и при больших n и J , сравнимых с R , поступая аналогичным образом, получим

$$W_{k_0 l}^k(\infty) = \frac{2}{a} e^{\pi/(2ak)} \frac{l! |\Gamma(l - i/(ak) + 1)|}{(2l+1)!} \times$$

$$\times (4kk_0)^{l+1} \frac{(k+k_0)^{i/(ak)-1}}{(k_0-k)^{2l+i/(ak)+3}} \times$$

$$\times F \left[l + \frac{i}{ak} + 1, l+1, 2l+2, -\frac{4kk_0}{(k-k_0)^2} \right],$$

которое совпадает с результатом ^{/15/}.

В качестве примера укажем некоторые простейшие выражения для коэффициентов $W_{l0}^{1\sigma}(R)$ при значениях орбитального момента $l = 0, 1$:

а) $l=0, n=1$

$$W_{00}^{1\sigma} = \frac{|\Gamma(2-i\sigma)|}{\left|\Gamma\left(2-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2},$$

$$W_{10}^{1\sigma} = \frac{\sigma |\Gamma(2-i\sigma)|}{\left|\Gamma\left(\frac{5}{2}-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2},$$

$$W_{20}^{1\sigma} = \frac{\sigma^2 |\Gamma(2-i\sigma)|}{2 \left|\Gamma\left(3-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2};$$

б) $l=0, n=2$

$$W_{00}^{2\sigma} = -\frac{\sigma |\Gamma(1-i\sigma)| \sqrt{4+\sigma^2}}{\left|\Gamma\left(\frac{5}{2}-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2},$$

$$W_{10}^{2\sigma} = -\frac{|\Gamma(1-i\sigma)| (2-\sigma^2) \sqrt{4+\sigma^2}}{\left|\Gamma\left(3-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2},$$

$$W_{20}^{2\sigma} = -\frac{\sigma |\Gamma(1-i\sigma)| (31-3\sigma^2) \sqrt{4+\sigma^2}}{4 \left|\Gamma\left(\frac{7}{2}-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2};$$

в) $l=1, n=2$

$$W_{11}^{2\sigma} = \frac{2 |\Gamma(3-i\sigma)|}{\left|\Gamma\left(3-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2},$$

$$W_{21}^{2\sigma} = \frac{\sigma \sqrt{6} |\Gamma(3-i\sigma)|}{\left|\Gamma\left(\frac{7}{2}-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2},$$

$$W_{31}^{2\sigma} = \frac{7 \sigma^2 |\Gamma(3-i\sigma)|}{\sqrt{5} \left|\Gamma\left(4-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2};$$

г) $l=1, n=3$

$$W_{11}^{3\sigma} = -\frac{\sigma |\Gamma(2-i\sigma)|}{\left|\Gamma\left(\frac{7}{2}-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2} \sqrt{6(9+\sigma^2)},$$

$$W_{21}^{3\sigma} = \frac{3 |\Gamma(2-i\sigma)|}{\left|\Gamma\left(4-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2} (4-\sigma^2) \sqrt{9+\sigma^2},$$

$$W_{31}^{3\sigma} = \frac{\sigma |\Gamma(2-i\sigma)|}{2 \left|\Gamma\left(\frac{9}{2}-\frac{i\sigma}{2}\right)\right|^2} (62-\sigma^2) \sqrt{\frac{6}{5}(9+\sigma^2)}.$$

5 Заключение

В данной работе рассмотрены основные свойства волновых функций атома водорода с гармоническим потенциалом V_S^σ на трехмерной сфере S_R^3 , необходимые для их использования в практических расчетах. Расчеты волновых функций по формулам (9а, 16-16а, 23) и их графическое изображение (рис.1-4) выполнены в системе PAW^{16/}, адаптированной на РС/АТ-386 в рамках проекта КОНТРАСТ/СИНС^{17/}.

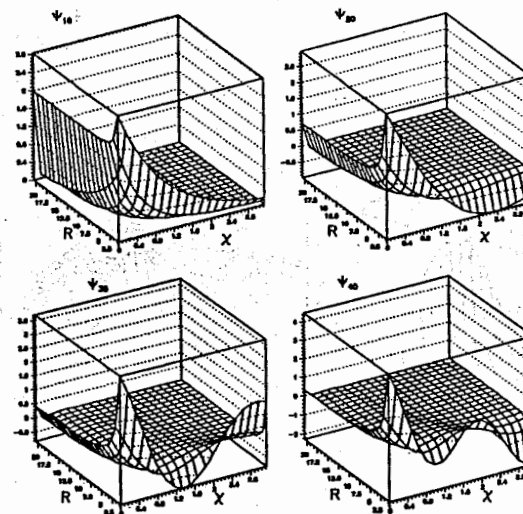


Рис. 1. Квазирадialные волновые функции атома водорода (9а) при $l=0$, соответствующие при $R \rightarrow \infty$ волновым функциям дискретного спектра (21).

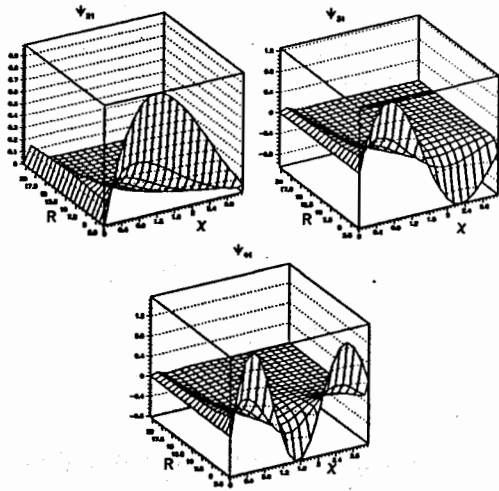


Рис. 2. Квазирадиальные волновые функции атома водорода (9а) при $l=1$, соответствующие при $R \rightarrow \infty$ волновым функциям дискретного спектра (21).

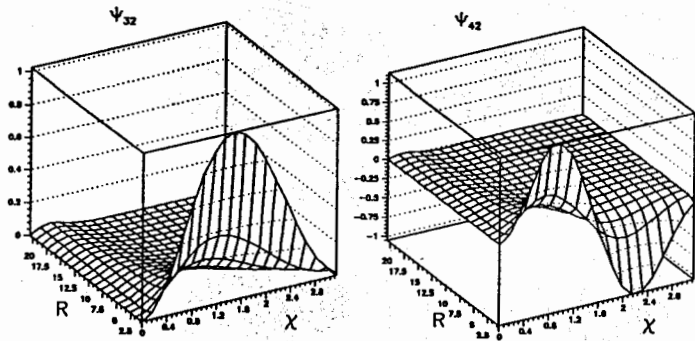


Рис. 3. Квазирадиальные волновые функции атома водорода (9а) при $l=2$, соответствующие при $R \rightarrow \infty$ волновым функциям дискретного спектра (21).

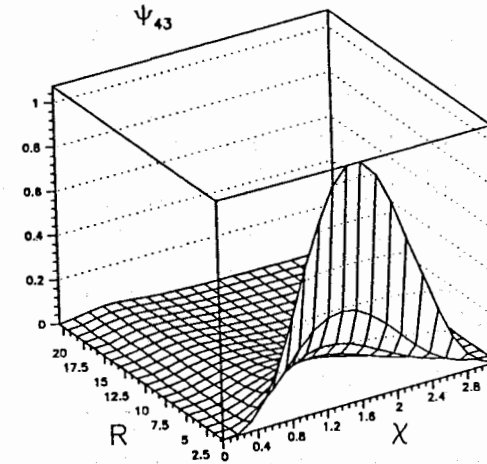


Рис. 4. Квазирадиальные волновые функции атома водорода (9а) при $l=3$, соответствующие при $R \rightarrow \infty$ волновым функциям дискретного спектра (21).

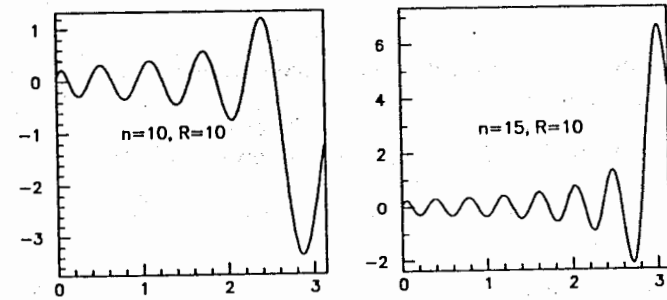


Рис. 5. Квазирадиальные волновые функции атома водорода (9а) при $l=0$, соответствующие при $n \sim R \rightarrow \infty$ волновым функциям непрерывного спектра (26).

Вопросы, связанные с геометрической интерпретацией полученных разложений в терминах группы голономии \mathcal{G} гильбертового расслоения $\mathcal{H}(\mathcal{F}_R, \pi, B)$, $\mathcal{F}_R \sim L^2(\widehat{M}_4, d\widehat{M}_4)$, ассоциированного со спектральной задачей (2), (10), а также вопросы построения оператора связности A : $dW = WA$, $W(0) = 1$ и исследование асимптотик его матричных элементов составляют предмет дальнейших исследований.

В заключение выражаем благодарность А.А.Измествьеву, Ю.Л. Калининскому, В.Н.Первушину, И.В.Пузырину и В.М.Тер-Антоняну за полезные обсуждения.

Литература

- [1] E.Shrödinger.Proc.Irish.Acad.1940,v.A46,9;1941,v.A46,183;v.A47,53.
- [2] L.Infeld.Phys.Rev.,1941,v.59,737.
- [3] A.F.Stivenson.Phys.Rev.1941,v.59,842.
- [4] А.А.Измествьев.ЯФ 1990,т.52,1697;1991,т.53,1402.
- [5] А.А.Богуш,В.С.Отчик,В.М.Редьков.Вестник АН БССР,1983,т.3,56.
- [6] А.О.Barut and R.Wilson.Phys.Lett.A,1985,v.110,351.
А.О.Barut,А.Inomata and G.Junker.Phys.Lett.A,1987,v.20,6271.
- [7] Л.Г.Мардоян, А.Н.Сисакян. Препринт ОИЯИ Р2-92-47, Дубна, 1992, ЯФ, 10, 1992.
- [8] С.И.Виницкий,Б.Л.Марковский,А.А.Сузько.ЯФ,1992,т.55,669.
С.И.Виницкий,М.Б.Кадоццев,А.А.Сузько.ЯФ,1990,т.51,952.
- [9] А.Г.Абрашкевич, С.И.Виницкий, М.С.Касчиев, И.В.Пузынин. ЯФ, 1987, т.48, 945.
- [10] Т.Бейтмен, А.Эрдей. Высшие трансцендентные функции. Т.2, "Наука", М.,1966.
- [11] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. "Наука", М., 1963.
- [12] Т.Бейтмен, А.Эрдей. Высшие трансцендентные функции. Т.1, "Наука", М.,1965.
- [13] М.Абрамович, И.Сиган. Справочник по специальным функциям, "Наука", М., 1979.
- [14] Г.Бете, Э.Солпитер. Квантовая механика атома с одним и двумя электронами. ГИФМЛ,М.,1960.
- [15] М.Pauli,К.Alder.J.Phys.A,1976,v.9,905.
- [16] R.Brun,О.Couet,N.Cremel-Somon,P.Zanarini. PAW users guide, CERN program library Q121.
- [17] V.E.Fine, S.G.Kadantsev, Porting PAW on PC's under MSDOS, II International Workshop on Software Engineering, Art. Intel. and Exp. System in НЕР, France, 1992.

Рукопись поступила в издательский отдел

13 июля 1992 года.

Виницкий С.И. и др.

P2-92-302

Атом водорода в искривленном пространстве.
Разложение по свободным решениям
на трехмерной сфере

Рассмотрены шредингеровские функции атома водорода с гармоническим потенциалом — решением уравнения Лапласа на трехмерной сфере радиуса R , которые в пределе больших R соответствуют кулоновским функциям обычного атома водорода в плоском трехмерном пространстве. Построены разложения этих функций по свободным решениям на трехмерной сфере и установлены правила их соответствия известным разложениям кулоновских функций по свободным в плоском трехмерном пространстве.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод Г.Г.Сандуковской.

Vinitsky S.I. et al.

P2-92-302

A Hydrogen Atom in the Curved Space.
Expansion Over Free Solutions
on the Three-Dimensional Sphere

The Schrödinger wave functions of the hydrogen atom with the harmonic potential are considered. The harmonic potential is the solution of the Laplace equation on the 3-sphere of radius R . For large R the wave functions correspond to the Coulomb wave functions of the hydrogen atom in the flat three-dimensional space. The decompositions of the Schrödinger wave functions in free solutions are constructed and their correspondence with the known expansions of the Coulomb functions over free ones in the three-dimensional space is established.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1992