92-47

объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

P2-92-47

Л.Г.Мардоян*, А.Н.Сисакян

АТОМ ВОДОРОДА В ИСКРИВЛЕННОМ ПРОСТРАНСТВЕ: ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ РАДИАЛЬНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ ПО ОРБИТАЛЬНОМУ МОМЕНТУ

Направлено в журнал "Ядерная физика"

*Ереванский государственный университет, г.Ереван

1992

Мардоян Л.Г., Сисакян А.Н. P2-92-47
Атом водорода в искривленном пространстве: ортогональность радиальных волновых функций по орбитальному моменту

В работе получено условие ортогональности по орбитальному моменту радиальных волновых функций атома водорода в искривленном пространстве постоянной положительной кривизны. Доказано, что это условие ортогональности является следствием случайного вырождения энергетического спектра задачи.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1992

Перевод Г.Г.Сандуковской

Mardoyan L.G., Sissakian A.N. P2-92-47
A Hydrogen Atom in the Curved Space: Orthogonality of Radial Wave Functions in the Orbital Momentum

We have obtained the condition of orthogonality in the orbital momentum of radial wave functions of a hydrogen atom in the curved space of constant positive curvature. This condition of orthogonality is proved to be a consequence of accidental degeneration of the energy spectrum.

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

1. Атом водорода в искривленном пространстве

Квантово-механическая задача атома водорода в искривленном пространстве постоянной положительной кривизны впервые была рассмотрена Шредингером [1]. Настоящее исследование этой задачи представляет интерес в связи с использованием моделей с гармоническими потенциалами для описания спектров двухчастичных кварковых систем [2].

Координаты сферической системы, использованной Шредингером в [1], связаны с координатами плоского четырехмерного пространства соотношениями

$$x_1 = Rsin\chi sin\theta cos\phi, x_2 = Rsin\chi sin\theta sin\phi, x_3 = Rsin\chi cos\theta, x_4 = Rcos\chi, \tag{1}$$

$$0 \le \chi, \theta \le \pi, 0 \le \phi \le 2\pi.$$

Радиальное уравнение задачи атома водорода в сферическом пространстве записывается в следующем виде [1]:

$$\Big\{\frac{\hbar^2}{2MR^2}\Big[-\frac{1}{sin^2\chi}\frac{d}{d\chi}(sin^2\chi\frac{d}{d\chi}) + \frac{l(l+1)}{sin^2\chi}\Big] - \frac{Ze^2}{R}ctg\chi - E\Big\}\psi(\chi) = 0, \tag{2}$$

где $V(\chi; R) = (-Ze^2/R)ctg\chi$ - гармонический потенциал в искривленном пространстве, т.е. решение уравнения Лапласа, а $sin\chi = r/R$. Этот потенциал при $R \rightarrow \infty$ (т.е.при переходе к плоскому пространству) переходит в потенциал Кулона. В сферическом пространстве эта задача имеет только дискретный спектр, и Шредингер пользуясь методом факторизации, нашел вырожденный энергетический спектр атома водорода в искривленном пространстве

$$E_n = \frac{\hbar^2}{2MR^2}(n^2-1) - \frac{MZ^2e^4}{2\hbar^2n^2}. \tag{3}$$

Здесь n=1,2,3,...- главное квантовое число.

В 1941г. Стивенсон [3] решил уравнение (2) и нашел радиальные волновые функции атома водорода в сферическом пространстве. В этой работе мы будем пользоваться радиальными волновыми функциями атома водорода в искривленном пространстве, приведенными в [4]:

$$\psi_{nl\sigma}(\chi) = C_{nl\sigma}(sin\chi)^l \exp[-i\chi(n-l-i\sigma-1)]F(-n+l+1, l+i\sigma+1; 2l+2; 1-e^{2i\chi}), \tag{4}$$

где

$$C_{nl\sigma} = \frac{2^{l+1}e^{\pi\sigma/2}|\Gamma(l-i\sigma+1)|}{R(2l+1)!}\sqrt{\frac{(n^2+\sigma^2)(n+l)!}{2\pi nR(n-l-1)!}}, \quad \sigma = \frac{MZe^2R}{n\hbar^2}. \tag{5}$$

Эти радиальные волновые функции нормированы следующим образом:

$$R^3\int_0^\pi (sin\chi)^2\psi_{nl\sigma}(\chi)\psi^*_{n'l\sigma'}(\chi)\,d\chi = \delta_{nn'} \tag{6}$$

В пределе $R \rightarrow \infty$ энергетический спектр (3) для конечных n переходит в хорошо известную формулу $E_n = -MZ^2e^4/2\hbar^2n^2$. В работе [5] показано, что, пользуясь следующими предельными выражениями:

$$\lim_{R\rightarrow\infty} F(-n+l+1, l+i\sigma+1; 2l+2; 1-e^{2i\chi}) = F(-n+l+1; 2l+2; 2r/an),$$

$$\lim_{R\rightarrow\infty} exp[-i\chi(n-l-i\sigma-1)] = exp(-r/an),$$

$$\lim_{R\rightarrow\infty}(sin\chi)^l e^{\pi\sigma/2}|\Gamma(l-i\sigma+1)|\sqrt{\frac{(n^2+\sigma^2)}{R^3}} = (r/an)^l\sqrt{2\pi/a^3n^3},$$

можно из радиальной волновой функции (4) получить радиальную волновую функцию атома водорода в плоском пространстве [6], т.е.

$$\lim_{R\rightarrow\infty}\psi_{nl\sigma}(\chi) = R_{nl}(r), \tag{7}$$

где

$$R_{nl}(r) = \frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n+l)!}{a^3(n-l-1)!}}\frac{e^{-r/an}}{(2l+1)!}\Big(\frac{2r}{an}\Big)^l F(-n+l+1; 2l+2; 2r/an).$$

Здесь $a = \hbar^2/MZe^2$ - боровский радиус.

2. Ортогональность по орбитальному моменту

Докажем, что для радиальных волновых функций атома водорода в искривленном пространстве положительной кривизны наряду с (6) выполняется следующее "добавочное" условие ортогональности по l:

$$\int_0^\pi \psi_{nl\sigma}(\chi)\psi^*_{nl'\sigma}(\chi)\,d\chi = \frac{2(n^2+\sigma^2)}{nR^3}\frac{\delta_{ll'}}{2l+1}. \tag{8}$$

Подставим в (8) нормированную радиальную функцию атома водорода (4), запишем гипергеометрические функции в $\psi_{nl\sigma}(\chi)$ и $\psi^*_{nl'\sigma}(\chi)$ в виде многочленов, произведем интегрирование согласно формуле [7]

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

и учтем, что

$$F(a, b; c; 1) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)}. \tag{9}$$

Тогда, обозначая интеграл (8) через $J_{ll'}$, получим

$$J_{ll'} = \frac{2(n^2+\sigma^2)\exp[i\pi(l-l')/2]}{nR^3(2l+1)!}\times$$

$$\left\{\frac{(n+l)!\Gamma(l-i\sigma+1)\Gamma(l'+i\sigma+1)}{(n+l')!(n-l-1)!(n-l'-1)!\Gamma(l+i\sigma+1)\Gamma(l'-i\sigma+1)}\right\}^{1/2}\times$$

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

Применим к гамма-функциям, находящимся под знаком суммирования, формулу

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

Сумма по s, как легко убедиться, сворачивается в гипергеометрическую функцию типа (9), после чего для $J_{ll'}$ имеем

$$J_{ll'}=\frac{2(n^2+\sigma^2)\exp[i\pi(l-l')/2]}{nR^3(l+l'+1)}\frac{1}{\Gamma(l-l'+1)\Gamma(l'-l+1)}\times$$

$$\sqrt{\frac{(n+l)!(n-l-1)!\Gamma(l-i\sigma+1)\Gamma(l'+i\sigma+1)}{(n+l')!(n-l'+1)!\Gamma(l'-i\sigma+1)\Gamma(l+i\sigma+1)}}$$

Полученное выражение обращается в нуль при $l\neq l'$ (за счет произведения гамма-функций от $(l-l'+1)$ и $(l'-l+1)$), что и приводит к условию ортогональности (8).

Теперь, учитывая (7), легко показать, что условие ортогональности (8) при переходе к плоскому пространству переходит в соотношение ортогональности радиальных волновых функций атома водорода по орбитальному моменту

$$\int_0^\infty R_{nl}(r)R_{nl'}(r)\,dr=\frac{2\hbar^2}{a^2n^3}\frac{\delta_{ll'}}{2l+1} ,$$

полученное в работе [8]. В этой же работе [8] нами показано, что условие ортогональности радиальных волновых функций f-мерного ($f\geq 3$) атома водорода и изотропного осциллятора по глобальному моменту можно записать в едином виде, а именно

$$\int_0^\infty r^{f-3}R_{nl}(r)R_{nl'}(r)\,dr=\frac{2M}{\hbar^2}\left(\frac{\partial E_n}{\partial l}\right)_{n_r}\frac{\delta_{ll'}}{2l+f-2} ,$$

где производная по l берется при фиксированном радиальном квантовом числе n_r.

3. Природа ортогональности по орбитальному моменту

В этом разделе мы докажем, что условие ортогональности (8) является следствием случайной вырожденности энергетического спектра по орбитальному момету l.

Запишем уравнение Шредингера для потенциала $V(\chi;R)$ в следующем виде:

$$\hat{H}\psi_{nl\sigma}(\chi)=E\psi_{nl\sigma}(\chi), \tag{10}$$

где через $\hat{H}$ обозначен эрмитов оператор

$$\hat{H}=-\frac{\hbar^2}{2MR^2}\left[\frac{1}{sin^2\chi}\frac{d}{d\chi}(sin^2\chi\frac{d}{d\chi})-\frac{l(l+1)}{sin^2\chi}\right]+V(\chi;R). \tag{11}$$

Из (10) и (11) получаем

$$(E-E')\int_0^\pi sin^2\chi\psi_{nl\sigma}(\chi)\psi^*_{n'l'\sigma'}(\chi)\,d\chi$$

$$=\frac{\hbar^2}{2MR^2}(l-l')(l+l'+1)\int_0^\pi \psi_{nl\sigma}(\chi)\psi^*_{n'l'\sigma'}(\chi)\,d\chi .$$

Если спектр вырожден по l, то при $E=E'$ и $l\neq l'$ имеем

$$\int_0^\pi \psi_{nl\sigma}(\chi)\psi^*_{nl'\sigma}(\chi)\,d\chi=0 . \tag{12}$$

Далее, известно [6], что для эрмитового оператора $\hat{F}$, зависящего от некоторого параметра λ , имеет место тождество

$$\left(\frac{\partial\hat{F}}{\partial\lambda}\right)_{nn}=\frac{\partial F_n}{\partial\lambda} ,$$

где усреднение производится по собственным волновым функциям оператора $\hat{F}$. Применяя это тождество к оператору (11) и выбирая в качестве параметра λ орбитальный момент l, получаем

$$\int_0^\pi \psi_{nl\sigma}(\chi)\psi^*_{nl\sigma}(\chi)\,d\chi=\frac{2M}{R\hbar^2}\left(\frac{\partial E_n}{\partial l}\right)_{n_r}\frac{1}{2l+1} , \tag{13}$$

где производная по l берется при фиксированном радиальном квантовом числе $n_r = n-l-1$. Объединяя (12) с (13), окончательно получим

$$\int_0^\pi \psi_{nl\sigma}(\chi)\psi^*_{nl'\sigma}(\chi)\,d\chi=\frac{2M}{R\hbar^2}\left(\frac{\partial E_n}{\partial l}\right)_{n_r}\frac{\delta_{ll'}}{2l+1} . \tag{14}$$

Подставляя в правой части соотношения (14) выражение энергетического спектра (3), легко убедиться в справедливости условия ортогональности (8).

В заключение выражаем благодарность В.М.Тер-Антоняну, С.И.Виницкому и Г.С.Погосяну за полезные обсуждения.

Литература

[1] E.Schrodinger. Proc.R.Irish Acad. 1940, A46, 9; 1941, A46, 183; 1941, A47, 53.

[2] А.А.Изместьев. ЯФ, 1990, т. 52, с. 1697.

[3] A.F.Stevenson. Phys.Rev. 1941, 59, 842.

[4] А.А.Богуш, В.С.Отчик, В.М.Редьков. ВесцI АН БССР, 1983, 3, 56.

[5] A.O.Barut, R.Wilson. Phys.Lett. 1985, 110A, 351.

[6] Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика, Изд. Наука, М., 1974.

[7] Г.Бейтман, А.Эрдейи. Высшие трансцендентные функции, т.1, Изд. Наука, М., 1965.

[8] Л.Г.Мардоян, Г.С.Погосян, В.М.Тер-Антонян. Изв. АН Арм. ССР, Физика, 1984, т.19, 3.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 февраля 1992 года.