ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р2 - 9482

Г.Н.Афанасьев, В.Г.Ермилов

О СВОЙСТВАХ СИММЕТРИИ В КЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЙ ЗАДАЧАХ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦЫ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

1976

Р2 - 9482

Г.Н.Афанасьев, В.Г.Ермилов

О СВОЙСТВАХ СИММЕТРИИ В КЛАССИЧЕСКОЙ И КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЙ ЗАДАЧАХ ДВИЖЕНИЯ ЧАСТИЦЫ В ЦЕНТРАЛЬНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Направлено в ТМФ

Афанасьев Г.Н., Ермилов А.И.

P2 - 9482

О свойствах симметрии в классической и квантовомеханической задачах движения частицы в центральном потенциале

Дан анализ свойств симметрии возникающих в классической и квантовомеханической задачах движения частицы в центральном потенциале. Причины возникновения симметрий, более широких, чем сферическая, анализируются с физической и математической точек зрения.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований
Дубна 1976

Afanasiev G.N., Ermilov A.I.

P2 - 9482

On the Symmetry Properties in the Classical and Quantum-Mechanical Problems about Particle Motion with Central Potential

The symmetry properties arising in the classical and quantum-mechanical problems about motion of particles in the central potential are analysed. The reason of appearance of more wide symmetric than the spherical one are analysed from the physical and mathematical points of view.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research
Dubna 1976

Цель данной работы состоит в анализе свойств симметрии, возникающих в классической и квантовомеханической задачах движения частицы в центральном потенциале.

1. Рассмотрим сначала классическую задачу движения частицы в центральном потенциале $V(r)$. Энергия такой системы равна:

$$E = \frac{p^2}{2m} + V(r).$$

В силу сферической симметрии задачи интегралами движения являются компоненты углового момента. Сохраняющейся величиной в классической механике принято называть величину, полная производная от которой по времени равна нулю:

$$\frac{dA}{dt} = 0 . \qquad /1.1/$$

Если такая величина зависит от времени только неявным образом /т.е. посредством координат и импульсов/, то выражение /1.1/ сводится к следующему:

$$\{A, E\} = 0 , \qquad /1.2/$$

где фигурные скобки означают скобки Пуассона:

$$\{A, E\} = \Sigma \left(\frac{\partial A}{\partial q_i} \frac{\partial E}{\partial p_i} - \frac{\partial A}{\partial p_i} \frac{\partial E}{\partial q_i} \right).$$

Для частных видов потенциала $V(r)$ известны дополнительные интегралы движения. Для кулоновского потенциала вектор Рунге-Ленца /известный, впрочем, еще Лапласу/ имеет вид:

$$A_i^{C} = \frac{x_i}{r} - \frac{1}{m\gamma} \epsilon_{ijk} p_j L_k \qquad /1.3/$$

/с точностью до нормировочной функции, зависящей от E,L /. В работах /1-5/ было показано существование дополнительных интегралов движения /кроме энергии и углового момента/ для классической задачи движения частицы в поле произвольного центрального потенциала V(r). Ради полноты изложения и обсуждения возникающих вопросов получим этот результат заново.

2. По аналогии с выражением /1.3/ ищем A_i в виде

$$A_i = \chi(r)\frac{x_i}{r} + \psi(r)\epsilon_{ijk} p_j L_k . \qquad /2.1/$$

Функции χ, ψ определим из условия обращения в нуль скобок Пуассона:

$$\{ A_i , E \} = 0 . \qquad /2.2/$$

Условие /2.2/ приводит к следующей системе дифференциальных уравнений для функций:

$$\chi' + \frac{L^2}{r}\psi' = 0 \qquad /2.3/$$

$$\chi - Z\cdot\psi' + m r^2 V'\cdot\psi = 0$$

/штрих означает дифференцирование по r, а $Z = \sqrt{2mr^2(E-V)-L^2}$/. Удобно перейти к новым функциям f и g:

$$\chi = f - \frac{L}{Z}\cdot g ,$$

$$\psi = \frac{r}{Z}\cdot\frac{g}{L} . \qquad /2.4/$$

Функции f и g удовлетворяют следующей простой системе дифференциальных уравнений:

$$\frac{df}{dr} + \frac{L}{r}\cdot\frac{g}{Z} = 0 ,$$

$$\frac{dg}{dr} - \frac{L}{r}\cdot\frac{f}{Z} = 0 . \qquad /2.5/$$

Отсюда находим:

$$\frac{d}{dr}(f + ig) = \frac{iL}{rZ}(f + ig) .$$

Окончательно имеем:

$$f + ig = C\cdot\exp\{ iL\int_{r_0}^{r}\frac{dr}{r\cdot Z(r)} \} . \qquad /2.6/$$

Константа интегрирования может зависеть от интегралов E,L. Положим

$$\theta = L\int_{r_0}^{r}\frac{dr}{r\cdot Z(r)} . \qquad /2.7/$$

Выделяем в /2.7/ вещественную и мнимую части:

$$f = C\cdot\cos\theta$$

$$g = C\cdot\sin\theta . \qquad /2.8/$$

Убедимся, что для кулоновского потенциала мы получаем вектор Рунге-Ленца /1.3/. Подставляя $V(r) = -\frac{\gamma}{r}$ в /2.7/, получаем:

$$f_c(r) = C\frac{\frac{1}{r}\frac{L^2}{\gamma m} - 1}{\sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\gamma}}} ,$$

$$g_c(r) = C \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\gamma^2}}} \cdot \frac{L}{r\gamma m} \cdot Z(r).$$

Функции χ, ψ равны в этом случае

$$\chi_c = - \frac{C}{\sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\gamma^2}}}, \quad \psi_c = \frac{C}{\gamma m} \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\gamma^2}}}.$$

Выбирая константу интегрирования C равной

$$-\sqrt{1 + \frac{2EL^2}{m\gamma^2}},$$

мы получаем искомый вектор /1.3/. Наконец, заметим, что вектор A может быть записан еще двумя способами, эквивалентными /2.1/:

$$\vec{A} = f(r) \cdot \frac{\vec{r}}{r} + g(r) \cdot \frac{(\vec{r} \times \vec{L})}{rL}, \qquad /2.9/$$

$$\vec{A} = \mu(r) \cdot \frac{\vec{r}}{r} + \nu(r) \cdot \vec{p}.$$

Функции χ и ψ, входящие в /2.1/, вычисляются через функции f и g с помощью соотношений /2.4/. Функции μ и ν равны:

$$\mu = \chi(r) + 2m(E - V) \cdot \psi(r) \cdot r,$$

$$\nu = -\sqrt{2m(E-V) \cdot r^2 - L^2} \cdot \psi(r).$$

3. Перейдем к обсуждению физического смысла вектора А.Из соотношения

$$(\vec{L} \cdot \vec{A}) = 0$$

следует, что этот вектор лежит в плоскости орбиты. Удобно выбрать систему координат таким образом, чтобы ось z была перпендикулярна плоскости орбиты. Возникает вопрос: куда направить ось x ? Если движение таково, что имеется одно или несколько выделенных направлений, то достаточно ось x направить по одному из этих направлений. Например, для случая движения в кулоновском потенциале достаточно направить ось x по направлению большой полуоси эллипса. В случае, если движение многократно периодическое, т.е. частица после нескольких оборотов возвращается в исходную точку, можно направить ось x в один из максимумов или минимумов траектории.

В любом случае, для того чтобы вектор A, определяемый соотношениями /2.1/, /2.2/, обрел физическое содержание, необходимо наличие в системе одного или нескольких выделенных направлений. Остановимся на этом утверждении более подробно. Пусть оси x, y направлены вдоль произвольных единичных векторов $\vec{\ell}_x$, $\vec{\ell}_y$, лежащих в плоскости орбиты. Тогда единичный вектор, направленный по радиусу-вектору, может быть разложен по направлениям $\vec{\ell}_x$, $\vec{\ell}_y$:

$$\frac{\vec{r}}{r} = \vec{\ell}_x \cdot \cos\phi - \vec{\ell}_y \cdot \sin\phi,$$

где радиус-вектор частицы $\vec{r}$ и полярный угол ϕ определяются уравнениями движения. Вектор $(\vec{L} \times \vec{r})$ также лежит в плоскости орбиты и перпендикулярен $\vec{r}$, поэтому

$$\frac{\vec{L} \times \vec{r}}{L \cdot r} = \vec{\ell}_y \cos\phi + \vec{\ell}_x \sin\phi.$$

Разрешая эти соотношения относительно $\vec{\ell}_x$, $\vec{\ell}_y$ получаем:

$$\vec{\ell}_x = \cos\phi \cdot \frac{\vec{r}}{r} + \sin\phi \cdot \frac{\vec{L} \times \vec{r}}{L \cdot r}, \qquad /3.1/$$

$$\vec{\ell}_y = \cos\phi \cdot \frac{\vec{L} \times \vec{r}}{L \cdot r} - \sin\phi \cdot \frac{\vec{r}}{r}.$$

Сравнивая /2.9/ с /2.10/, убеждаемся в полной идентичности $\vec{\ell}_x$ и $\vec{A}$ /угол ϕ удовлетворяет тому же соотношению /2.7/, что и θ /. Таким образом, сохранение $\vec{\ell}_x$, $\vec{\ell}_y$ /или, что то же самое, вектора $\vec{A}$ / означает, что выбранная нами система отсчета покоится. Сохранение векторов $\vec{\ell}$ приобретает физический смысл только при наличии в системе пространственно выделенных и независящих от времени направлений, вдоль которых можно было бы направить $\vec{A}$. Еще более явным становится это утверждение, если рассмотреть движение частицы в произвольном потенциале $V(r,\theta,\phi)$. Зафиксировав единичные векторы $\vec{\ell}_x$, $\vec{\ell}_y$, $\vec{\ell}_z$ можно, в силу уравнений движения, разложить $\vec{r}$, $\vec{L}$ и $(\vec{r}\times\vec{L})$ по этим ортам:

$$\begin{bmatrix} \dfrac{\vec{r}}{r} \\ \dfrac{\vec{L}}{L} \\ \dfrac{\vec{r}\times\vec{L}}{rL} \end{bmatrix} = R(\theta,\phi) \begin{bmatrix} \vec{\ell}_x \\ \vec{\ell}_y \\ \vec{\ell}_z \end{bmatrix} \qquad /3.2/$$

где $R(\theta,\phi)$ - трехмерная матрица вращений, зависящая от углов θ, ϕ, которые определяют ориентацию точки. Обратив соотношения /3.2/, получаем при сохраняющихся /в силу уравнений движения/ вектора для произвольного потенциала $V(r,\theta,\phi)$. Как было отмечено ранее, сохранение этих векторов не имеет физического смысла при отсутствии в системе физически выделенных направлений.

Ситуация резко меняется, если мы следим за развитием системы во времени. В этом случае вектору $\vec{A}$ удается придать физический /но не всегда геометрический/ смысл. Более подробно этот вопрос, а также вопросы, связанные с неоднозначностью интегралов движения, обсуждаются в *Приложении*.

4. Посмотрим на эти вещи с несколько иной точки зрения. Пусть в начальный момент времени $t=t_0$ заданы три координаты положения частицы x_0, y_0, z_0 и три компоненты ее скорости $\dot{x}_0$, $\dot{y}_0$, $\dot{z}_0$. То, что в дальнейшем произойдет с частицей, полностью и однозначно определяется начальными условиями и уравнениями движения. Пусть x_i - координаты частицы в момент времени t

$$x_i = f_i\,(t;t_0,\, x_i^0,\, \dot{x}_i^0\,)$$

$$\dot{x}_i = \frac{\partial f_i(t,t_0,x_i^0,\ \dot{x}_i^0)}{\partial t}\,. \qquad /4.1/$$

Соотношения /4.1/ можно обратить, т.е. выразить начальные координаты точки через текущие. Согласно теореме, доказанной Якоби[6], это всегда можно сделать: функции x_i^0, $\dot{x}_i^0$ выражаются через x_i, $\dot{x}_i$ с помощью тех же функций f, но с обратным порядком следования t и t_0. Это также легко понять индуитивно: уравнения механики симметричны относительно изменения знака времени. Поэтому, задав в момент времени t в качестве начальных координат текущие координаты x_i, $\dot{x}_i$ и пользуясь уравнениями движения, мы получаем в более ранний момент времени t_0 координаты x_i^0, $\dot{x}_i^0$. Очевидно, что координаты x_i^0, $\dot{x}_i^0$, будучи выраженными через текущие координаты, являются интегралами движения. Поскольку число начальных координат равно 6, то максимальное число независимых интегралов также равно шести. Из этих интегралов можно образовать различные комбинации, которые также являются интегралами движения. Эти комбинации могут иметь больший физический смысл, чем исходные интегралы. В качестве таких интегралов обычно выбирают энергию системы и три компоненты углового момента. Остаются, таким образом, еще два интеграла движения. В упомянутых работах[1-5] в качестве интегралов выбраны три компоненты углового момента, три компоненты вектора $\vec{A}$ и энергия. Заметим, что полное число интегралов равно по-прежнему шести, поскольку L^2+A^2 выражается через энергию E.

Резюмируем: в классической задаче движения частицы в центральном потенциале возможны следующие интегралы движения: энергия, три компоненты углового момента и следующие две постоянные во времени комбинации:

$$I_1 = t - \int^{r(t)} \frac{dx}{\left[\frac{2E}{m} - \frac{2V(x)}{m} - \frac{L^2}{m^2 x^2}\right]^{1/2}} , \qquad /4.2/$$

$$I_2 = \phi(t) - L \int^{r(t)} \frac{dx}{x^2 \left\{ 2m[E - V(x)] - \frac{L^2}{m^2 x^2} \right\}^{1/2}} . \qquad /4.3/$$

Заметим, что инвариантность I_1 , I_2 является тривиальным следствием теории Гамильтона-Якоби /6/. Несмотря на то, что инварианты I_1 , I_2 зависят от динамики системы и формы центрального потенциала $V(r)$,только в частных случаях удается дать им наглядную геометрическую интерпретацию.

5. Обратимся теперь к квантовой механике. Как и в классической механике, весьма важным является отыскание новых интегралов движения, т.е. операторов A_i , коммутирующих с гамильтонианом H . Проблеме отыскания таких операторов посвящено много работ. Из них мы упомянем лишь несколько. В работах /7-9/ были найдены все потенциалы, обладавшие в двумерном случае группой динамической симметрии и показано, что во всех случаях группой симметрии является $SU(2)$. В работах /10,11/ было проведено подробное рассмотрение трехмерного случая.

Поскольку от квантовой механики к классической можно перейти, устремляя константу Планка h к нулю, то при наличии физической симметрии в классической механике /в указанном выше смысле/ подобную симметрию следует искать и в квантовом случае. Отсутствие подобной симметрии указывает на то, что имеет место сингулярность по константе h .Подобные изменения симметрии называются вигнеровским сокращением /12/.

Мы хотим здесь рассмотреть двумерный квантовый аналог случая, рассмотренного в п. 3, т.е. движение в потенциале

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} + \frac{h^2}{2mr^2}\lambda^2 .$$

Волновые функции уравнения Шредингера с таким потенциалом равны:

$$\psi_{n\ell} = R_{n\ell}(r) \cdot e^{\pm i\ell\phi} , \qquad /5.1/$$

где

$$R_{n\ell}(r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\alpha} \sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(n+2L+1)} \cdot \frac{1}{2n+2L+1}}\, e^{-\frac{\rho}{2}} \cdot \rho^{\ell} L_n^{2L}(\rho) ,$$

$$\rho = \frac{r}{\alpha} , \quad \alpha = \frac{h}{\sqrt{-8E \cdot m}} , \quad L = \sqrt{\ell^2 + \lambda^2} .$$

Уровни энергии:

$$E = -\frac{m\gamma^2}{2h^2} \frac{1}{(n + L + \frac{1}{2})^2} . \qquad /5.2/$$

При целочисленном значении углового момента ℓ и произвольной константе взаимодействия λ волновые функции /5.1/ являются невырожденными, что следует из выражения для уровней энергии /5.2/. Легко видеть, однако, что всегда возможно отыскать такую дискретную совокупность ℓ /вообще говоря, нецелых/, что волновые функции /5.1/, отвечающие данному уровню энергии E , оказываются вырожденными. Если через N обозначить главное квантовое число ($E = -\frac{m\gamma^2}{2h^2 (N + \frac{1}{2})^2}$), то допустимые значения ℓ определяются соотношением:

$$\ell = \pm \sqrt{(N - n)^2 - \lambda^2} . \qquad /5.3/$$

Существование вырождения становится более очевидным, если волновые функции записать, используя индексы N и n :

$$\psi_{N,n} = R_{N,n}(r)\cdot \exp[\pm i\sqrt{(N-n)^2-\lambda^2}\,],$$

/5.4/

$$R_{N,n} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\frac{1}{a}\sqrt{\frac{\Gamma(n+1)}{\Gamma(2N-n+1)}\,\frac{1}{2N+1}}\; e^{-\frac{\rho}{2}}\rho^{N-n}L_n^{2(N-n)}(\rho).$$

Волновые функции /5.4/ при данном значении N и различных n принадлежат одному и тому же уровню энергии. Отметим также и аналогию с классическим случаем, где орбиты становятся замкнутыми для нецелых дискретных значений углового момента. Волновые функции /5.4/ удовлетворяют следующему условию орторитрованности:

$$\int_0^{\infty} r\,dr \int_{-\infty}^{\infty} d\phi\; \bar{\psi}_{N',n'}\,\psi_{N,n} = \delta(n-n')\,\delta(N-N').$$

6. Нашей ближайшей задачей является построение операторов, коммутирующих с гамильтонианом и переводящих волновую функцию /5.4/, принадлежащую уровню энергии E в линейную комбинацию функций, отвечающих той же энергии. Воспользуемся средством, примененным Дираком при линеаризации уравнения Клейна-Гордона - в уравнении Шредингера

$$-\frac{h^2}{2m}\left(\frac{d^2\psi}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{d\psi}{dr}\right)+\frac{h^2}{2mr^2}(\hat{L}^2+\lambda^2)\psi-\frac{\gamma}{r}\psi = E\psi$$

разделяем переменные: $\psi(r,\phi) = R(r)\cdot\Phi(\phi)$

$$-\frac{h^2}{2m}\,\frac{1}{R}\left(\frac{d^2R}{dr^2}+\frac{1}{r}\frac{dR}{dr}\right)+\frac{h^2}{2mr^2}\,\frac{1}{\Phi}\,(\hat{L}^2+\lambda^2)\,\Phi-\frac{\gamma}{r} = E.$$

Представим оператор $\hat{L}^2+\lambda^2$ в виде полного квадрата:

$$\hat{L}^2+\lambda^2 = (a\hat{L}+\beta\lambda)^2,$$

где a и β - две паулиевские матрицы, удовлетворяющие соотношениям:

$$a^2 = 1,\quad \beta^2 = 1,\quad a\beta+\beta a = 0.$$

Удобно выбрать a и β следующим образом:

$$a = \begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\qquad \beta = \begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix},$$

Функция Φ в данном случае является спинором:

$$\Phi = \begin{pmatrix}f\\ g\end{pmatrix}.$$

Функции f, g удовлетворяют следующей системе уравнений:

$$\frac{1}{i}\frac{df}{d\phi}+\lambda g = \tilde{\lambda}\,f,$$

$$-\frac{1}{i}\frac{dg}{d\phi}+\lambda f = \tilde{\lambda}\,g,$$

где $\tilde{\lambda}$ - собственно значение оператора.

$$\tilde{L} = a\hat{L}+\beta\lambda.$$

Функции f и g равны:

$$f_\lambda = A\cdot e^{i\sqrt{\tilde{\lambda}^2-\lambda^2}\,\phi}+B\,e^{-i\sqrt{\tilde{\lambda}^2-\lambda^2}\,\phi},$$

$$g_\lambda = A\,\frac{\lambda}{\tilde{\lambda}+\sqrt{\tilde{\lambda}^2-\lambda^2}}\,e^{+i\sqrt{\tilde{\lambda}^2-\lambda^2}\,\phi}+$$

$$+B\,\frac{\lambda}{\tilde{\lambda}-\sqrt{\tilde{\lambda}^2-\lambda^2}}\,e^{-i\sqrt{\tilde{\lambda}^2-\lambda^2}\,\phi},$$

где A и B - пока произвольные константы. Полная волновая функция очевидно равна произведению прежней радиальной функции $R_{N,n}$ и спинорной функции $\begin{bmatrix}f_{N-n}\\ g_{N-n}\end{bmatrix}$.

Операторы, переводящую волновую функцию $\psi_{N,n}$ в $\psi_{N,n\pm1}$, имеют вид

$$A_+ = \frac{1}{\sqrt{2}} f_+(\phi)[\gamma + \frac{h^2}{m}(\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\tilde{L})(\tilde{L} + \frac{1}{2})] \quad ,$$

$$A_- = \frac{1}{\sqrt{2}} f_-(\phi)[\gamma + \frac{h^2}{m}(-\frac{\partial}{\partial r} - \frac{1}{r}\tilde{L})(\tilde{L} - \frac{1}{2})] \ .$$

Здесь $f_+(\phi)$ и $f_-(\phi)$ удовлетворяют соотношению:

$$[\tilde{L}, f_\pm(\phi)] = \pm f_\pm(\phi) \ .$$

Операторы f_+ и f_- имеют достаточно сложный вид и мы их не приводим. A_+, A_-, $\tilde{L}$ удовлетворяют соотношениям

$$[\tilde{L}, A_\pm] = \pm A_\pm \ ,$$

$$[A_+, A_-] = -\frac{4h^2}{m} H \tilde{L} \ .$$

Чтобы привести коммутационные соотношения к стандартному виду, перенормируем операторы A_+, A_-

$$\tilde{A}_\pm = \frac{A_\pm}{\sqrt{-\frac{4h^2}{m} H}} \ .$$

Тогда имеем:

$$[\tilde{L}, \tilde{A}_\pm] = \pm \tilde{A}_\pm$$

$$[\tilde{A}_+, \tilde{A}_-] = \tilde{L} \ .$$

Отсюда следует, что операторы $\tilde{L}$, $\tilde{A}_+$, $\tilde{A}_-$ являются генераторами алгебры $SU(2)$. Таким образом, констатируем совпадение групп симметрий в классическом и квантовом случаях для потенциала:

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} + \frac{h^2}{2m}\frac{\lambda^2}{r^2} \ .$$

Разумеется, реализация операторов $A_\pm$ с помощью матриц Паули не является обязательной. Гораздо более предпочтительной является реализация на исходном классе функций /20/, которую можно получить с помощью метода, предложенного в /13/. При этом, однако, операторы A будут содержать производные сколь угодно высокого порядка. Наконец, укажем две работы /15,14/, близко примыкающие к настоящей при рассмотрении классической задачи движения частицы в центральном потенциале.

7. В предыдущем пункте мы имели дело с нецелыми значениями угловых моментов. Аналогичный вопрос можно поставить и в отношении радиальных квантовых чисел n_r: что приводит к квантованию уровней энергии? Стандартный ответ, данный уже Э.Шредингером, заключается в требовании конечности волновой функции при $r=0$ и $r=\infty$. Мы знаем, однако, что этим требованиям не всегда возможно удовлетворить /в качестве примера укажем, что волновая функция связанного состояния для уравнения Дирака с кулоновским потенциалом имеет сингулярность в начале координат/. Физическим условием является условие конечности нормы волновой функции. Попытаемся поэтому вычислить скалярное произведение и норму волновых функций трехмерного осциллятора для произвольных нецелочисленных значений энергии, не прибегая к требованию конечности волновых функций. Радиальное уравнение имеет вид в этом случае:

$$-\frac{h^2}{2m}[\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r}\frac{dR}{dr} - \frac{\ell(\ell+1)}{r^2}R] + \alpha^2 r^2 R = E \cdot R \ .$$

Полагая $\epsilon = \frac{E}{\sqrt{\frac{\alpha^2 h^2}{2m}}}$, $\rho = \sqrt{\frac{2m\alpha^2}{h^2}}\, r^2$, получаем

$$\frac{d^2R}{d\rho^2} + \frac{2}{\rho}\frac{dR}{d\rho} - \frac{\ell(\ell+1)}{\rho^2}R - \rho^2 R + \epsilon R = 0 \ .$$

Заменой $x = \rho^2$, $R = e^{-\frac{x}{2}} x^{\frac{\ell}{2}} \cdot \psi$, находим следующее уравнение для ψ:

$$x\psi'' + \psi'(\ell + \frac{3}{2} - x) + \psi\,\frac{\epsilon - 2\ell - 3}{4} = 0 .$$

Сравнивая это уравнение с уравнением для вырожденной гипергеометрической функции:

$$zF'' + (c - z)F' - aF = 0,$$

находим:

$$R = e^{-\frac{\rho^2}{2}} \rho^{\ell}\, {}_1F_1(-\frac{\epsilon - 2\ell - 3}{4}, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2) . \qquad /7.1/$$

При $r \to 0$ функция $R(r)$ остается конечной при $\ell = 0$ и обращается в нуль при $\ell \neq 0$. При $r \to \infty$ имеем:

$${}_1F_1(a, c, z) \to e^{-i\pi a} \cdot \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(c-a)} z^{-a} + \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(a)} e^{z} \cdot z^{a-c}$$

т.е.:

$$R \to e^{i\pi\frac{\epsilon - 2\ell - 3}{4}} \frac{\Gamma(\ell + \frac{3}{2})}{\Gamma(\frac{\epsilon + 2\ell + 3}{4})} \rho^{\frac{\epsilon - 3}{4}} \cdot e^{-\frac{\rho^2}{2}} +$$

$$+ \frac{\Gamma(\ell + \frac{3}{2})}{\Gamma(-\frac{\epsilon - 2\ell - 3}{4})} e^{\frac{\rho^2}{2}} \cdot \rho^{\frac{\epsilon + 3}{2}} \qquad /7.2/$$

Наличие второго члена в /7.2/ приводит к тому, что функция R при больших значениях r неограниченно возрастает. При этом неограниченность волновой функции обычно связывается с ненормируемостью /16/. Переходим теперь к вычислению нормы функции R. Предварительно, однако, выпишем скалярное произведение волновых функций:

$$N = \int \rho^2 d\rho\, R_{n\ell}(\rho) R_{n'\ell'}(\rho) = \int \rho^{\ell + \ell' + 2} d\rho\, e^{-\frac{\rho^2}{2}} \times \qquad /7.3/$$

$$\times {}_1F_1(-\frac{\epsilon - 2\ell - 3}{4}, \ell + \frac{3}{2}, \rho^2)\, {}_1F_1(-\frac{\epsilon' - 2\ell' - 3}{4}, \ell' + \frac{3}{2}, \rho^2)$$

$$= \frac{1}{2} \int_0^\infty x^{\frac{\ell + \ell'}{2} + \frac{1}{2}} \cdot dx \cdot e^{-x}\, {}_1F_1(-\frac{\epsilon - 2\ell - 3}{4}, \ell + \frac{3}{2}, x) \times$$

$$\times {}_1F_1(-\frac{\epsilon' - 2\ell' - 3}{4}, \ell' + \frac{3}{2}, x) .$$

Интегралы вида /7.3/ встречаются в различных руководствах по конфлюэнтной гипергеометрической функции /см., например, /17–20/ /. Интеграл

$$I = \int_0^\infty e^{-Kt} \cdot t^{b-1} \cdot {}_1F_1(a, b, Kt) \cdot {}_1F_1(a', b', Kt)\, dt \qquad /7.4/$$

при $\mathrm{Re}\, b > 0$, $\mathrm{Re}\, K > 0$, $\mathrm{Re}(1 + a' - a) > 0$ существует и равен

$$I = K^{-b} \frac{\Gamma(b) \cdot \Gamma(b') \cdot \Gamma(b' - a' - b) \cdot \Gamma(1 + a' + b - b') \cdot \Gamma(a' - a)}{\Gamma(b' - a') \cdot \Gamma(b' - b) \cdot \Gamma(1 + a' - a + b - b') \cdot \Gamma(a')} . \qquad /7.5/$$

Интеграл /7.4/ имеет много общего с искомым интегралом /7.3/. В частности, подынтегральная функция неограниченно возрастает при $t \to \infty$, хотя сам интеграл остается при этом конечным. Сравнение /7.3/ и /7.4/ приводит к следующим выводам: интеграл /7.3/ равен нулю при $\ell = \ell'$ и $E \neq E'$/из-за наличия в знаменателе функции $\Gamma(\ell' - \ell)$/. При $\ell = \ell'$ и $E = E'$ получаем неопределенность вида ∞/∞. Вместо a' и b' удобно ввести новые переменные ϵ_a и ϵ_b:

$$a' = a + \epsilon_a , \quad b' = b + \epsilon_b .$$

Чтобы разрешить упомянутую выше неопределенность, необходимо ϵ_a, ϵ_b устремить к нулю. Подставляя в /7.5/ a' и b' и полагая ϵ_a и ϵ_b равными нулю в сомножителях, не вносящих вклада в упомянутую неопределенность, имеем:

$$\int_0^\infty e^{-Kt} \cdot t^{b-1} \cdot {}_1F_1(a, b, K \cdot t) \cdot {}_1F_1(a + \epsilon_a, b + \epsilon_b, Kt)\, dt =$$

$$= \frac{1}{K^b} \frac{[\Gamma(b)]^2}{\Gamma(b - a)} \frac{\Gamma(-a)\,\Gamma(1 + a)}{\Gamma(a)} \frac{\Gamma(\epsilon_a)}{\Gamma(\epsilon_b)} .$$

Заметим, что в зависимости от относительной степени стремления ϵ_a и ϵ_b к нулю мы можем получить для нормы любой результат. Поскольку при a целом отрицательном вырожденная геометрическая функция совпадает с многочленами Лаггера, то естественно так устремить ϵ_a и ϵ_b к нулю, чтобы получить правильную нормировку для этих многочленов. Это дает $\epsilon_a = -\epsilon_b$ и следующее выражение для нормы:

$$\frac{3}{2}\,\frac{[\Gamma(\ell+\frac{3}{2})]^2}{\Gamma(\frac{\epsilon+2\ell+3}{4})}\cdot\Gamma\left(\frac{\epsilon-2\ell+1}{4}\right). \qquad /7.6/$$

Единственное, что вызывает сомнение при получении нормы /7.6/ - это неоднозначность предельного перехода. К тому же, конечное выражение для нормы противоречит известной теореме /21/, согласно которой спектр оператора $\left[-\frac{d^2}{dx^2}+q^2(x)\right]$ чисто точечный, если норма конечна, а $q^2(x)$ стремится к ∞ при $x\to\infty$. Однако из прямых вычислений это не очевидно. Тем не менее, любопытен сам факт существования связанных состояний с произвольной энергией ортогональных друг к другу при $E\neq E'$.

Подводя итоги, констатируем совпадение симметрий в классическом и квантовом случаях. Отличие симметрий, обсуждавшееся в упомянутых выше работах, исчезает, если отказаться в квантовом случае /как это всегда имеет место в классике/ от требования целочисленности углового момента.

Один из авторов /А.Г.Н./ глубоко благодарен проф. Я.А.Смородинскому, без внимания и дружеской поддержки которого данная работа не могла бы быть доведена до конца.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Здесь мы рассмотрим вопрос об однозначности полученных в п. 3,4 интегралов движения. Будем использовать для $\vec{A}$ первое из выражений /2.9/. В этом случае функции f и g являются направляющими косинусами, определяющими направление неизменного вектора $\vec{A}$ относительно вращающихся единичных векторов $\frac{\vec{r}}{r}$ и $\frac{\vec{L}\times\vec{r}}{L\cdot r}$:

$$f = C\cdot\cos\theta, \qquad g = C\cdot\sin\theta .$$

Угол θ в соответствии с /2.7/ равен:

$$\theta(r) = L\int_{r_0}^{r}\frac{dx}{x\cdot Z(x)} . \qquad /П.1/$$

Здесь r_0 - радиус-вектор частицы в начальный момент t_0. Если мы не интересуемся развитием системы во времени, то функция $\theta(r)$ является многозначной функцией r. В самом деле, траектория частицы в общем случае заключена в кольце с внутренним радиусом $r_{мин}$ и внешним радиусом $r_{макс}$. Отправляясь от точки r_0, частица проходит через заданное значение $r\ (>r_0)$ как в первом цикле, так и в каждом из последующих. Если частица достигает значения r после прохождения n циклов, то $\theta(r)$ равно

$$\theta(r) = n\cdot L\cdot\oint\frac{dx}{x\cdot Z(x)} + L\int_{r_0}^{r}\frac{dx}{x\cdot Z(x)} . \qquad /П.2/$$

Если опустить первое слагаемое, т.е. наивно брать интеграл от r_0 до r, то $\vec{A}$, будучи постоянным в пределах одного цикла, скачком изменит направление /на угол $\Delta\theta = L\oint\frac{dx}{x\cdot Z(x)}$ / при переходе к следующему циклу.

Если же рассматривать задачу не статически, то неоднозначность исчезает. В самом деле, пусть мы измерили θ в момент времени t_0 и интересуемся значением θ в более поздний момент времени t. Так как период одного цикла равен

$$\tau = m\oint\frac{dr}{\sqrt{2m(E-V)-\frac{L^2}{r^2}}} , \qquad /П.3/$$

то легко вычислить число полных циклов n. Наконец, подставляя n в /П.2/, мы восстановим $\theta(r)$.

Проиллюстрируем сказанное выше на примере потенциала:

$$V(r) = -\frac{\gamma}{r} + \frac{\lambda^2}{2mr^2} \qquad /П.4/$$

Из уравнений Гамильтона-Якоби имеем:

$$t - t_0 = m \int_{r_0}^{r} \frac{dr}{\sqrt{2m(E-V) - \frac{L^2}{r^2}}} = -\sqrt{\frac{m}{2\epsilon}} \cdot \sqrt{\frac{\gamma^2}{4\epsilon^2} - \frac{L^2+\lambda^2}{2m\epsilon}} \times \qquad /П.5/$$

$$\times \sin\xi + \sqrt{\frac{m}{2\epsilon}}\,\frac{\gamma}{2\epsilon}\cdot\xi ,$$

где $\epsilon = |E|$, а ξ следующим образом связано с

$$r = \frac{\gamma}{2\epsilon} - \sqrt{\frac{\gamma^2}{2\epsilon^2} - \frac{L^2+\lambda^2}{2m\epsilon}} \cdot \cos\xi \qquad /П.6/$$

Из /П.5/, /П.6/ следует, что в начальный момент t_0 частица находится на минимальном удалении от притягивающего центра. Угол $\theta(r)$ равен:

$$\theta(r) = L \int_{r_0}^{r(t)} \frac{dx}{x^2\sqrt{2m(E-V) - \frac{L^2}{x^2}}} = \theta_T \cdot n + \qquad /П.7/$$

$$+ \frac{L}{\sqrt{L^2+\lambda^2}} \arccos \frac{\frac{1}{r} - \frac{m\gamma}{L^2+\lambda^2}}{\left[\left(\frac{m\gamma}{L^2+\lambda^2}\right)^2 + \frac{2mE}{L^2+\lambda^2}\right]^{1/2}} ,$$

где θ_T есть угловое расстояние между двумя соседними минимумами:

$$\theta_T = \frac{2L\pi}{\sqrt{L^2+\lambda^2}} .$$

Время одного цикла равно:

$$\tau = 2\pi\sqrt{\frac{m}{2\epsilon}} \cdot \frac{\gamma}{2\epsilon} .$$

Мы видим, что, если в /П.7/ не учитывать предысторию движения, т.е. оставить только второй член, то при переходе из одного сектора в соседний вектор $\vec{A}$ поворачивается скачком на угол θ_T, т.е. как бы следит за векторами $\frac{\vec{r}}{r}$ и $\frac{\vec{L}\times\vec{r}}{L\cdot r}$. Кулоновский случай выделяется тем, что упомянутый скачок оказывается равным 2π, т.е. вектор $\vec{A}$ совмещается с самим собой. Поэтому в случае атома водорода симметрия приобретает действительно геометрическое содержание и не зависит от поведения системы в прошлом.

Для потенциала /П.4/ для значений углового момента, удовлетворяющих соотношению

$$\frac{L}{\sqrt{L^2+\lambda^2}} = \frac{m}{n} ,$$

где m, n - целые неотрицательные числа, классические орбиты становятся замкнутыми. В этом случае симметрия приобретает геометрический смысл и можно получить интегралы движения, не зависящие от поведения системы в прошлом.

Рассмотрим теперь случай рассеяния, т.е. $E > 0$. Для простоты возьмем тот же потенциал /П.4/. Тогда имеем одну точку поворота:

$$r_{min} = -\frac{\gamma}{2E} + \sqrt{\frac{\gamma^2}{4E^2} + \frac{L^2+\lambda^2}{2mE}}$$

и следующие уравнения, аналогичные уравнениям для связанных состояний:

$$t - t_0 = \sqrt{\frac{m}{2E}} \cdot \sqrt{\frac{\gamma^2}{4E^2} + \frac{L^2+\lambda^2}{2mE}} \cdot \left[\mathrm{Sh}\,\chi - \frac{\chi}{\sqrt{1 + \frac{2E}{m\gamma^2}(L^2+\lambda^2)}} \right],$$

$$\mathrm{ch}\,\chi = \frac{r + \frac{\gamma}{2E}}{\sqrt{\frac{\gamma^2}{4E} + \frac{L^2+\lambda^2}{2mE}}},$$

$$\theta = \frac{L}{\sqrt{L^2+\lambda^2}} \arccos \frac{\frac{1}{r} - \frac{m\gamma}{L^2+\lambda^2}}{\left[\frac{2mE}{L^2+\lambda^2} + \left(\frac{m\gamma}{L^2+\lambda^2} \right)^2 \right]^{1/2}} .$$

В отличие от случая связанного состояния, $\theta(r)$ есть однозначная функция r. Поэтому интегралы движения полностью определяются радиальной координатой r, не зависят от предыстории системы и имеют геометрический смысл. Однозначность исчезает для тех потенциалов, для которых возможно орбитирование/22/. В этом случае следует поступать, как для связанных состояний.

Отметим, наконец, что результаты, полученные в данной работе, становятся почти тривиальными на языке симплектических многообразий /см., напр., добавление в/23/ /.

Литература

1. D.M.Fradkin. Progr. Theor. Phys., 37, 798 (1967).
2. P.Chand, C.L.Mehta, N.Mukunda, E.C.G.Sudarshan. J.Math.Phys., 8, 2048 /1967/.
3. N.Mukunda. Phys.Rev., 155, 1383 /1967/.
4. H.Bacry, H.Ruegg, J.M.Souriau. Commun. Math. Phys., 3, 323 /1966/.
5. K.C.Tripathy, J.D.Anand. Nuovo Cim., 17B, 71 /1973/.
6. К.Якоби. Лекции по динамике. М.-Л., ОГИЗ, 1936.

7. I.Fris, V.Mandrosov, J.A.Smorodinski, M.Uhlirz, P.Winternitz. Phys.Lett., 16, 354 (1965).
8. П.Винтерниц, Я.А.Смородинский, М.Углирж, И.Фриш, ЯФ, 4, 625 /1966/.
9. A.Cisneros, H.V.McIntosh. J. Math. Phys., 11, 870 /1970/.
10. C.P.Boyer. Helv. Phys.Acta., 47, 589 /1972/.
11. U.Niederer. Helv. Phys. Acta, 47, 167 /1972/.
12. E.P.Wigner, E.Inonu. Proc. Nath. Acad. Sci., U.S., 39, 510 /1953/.
13. R.L.Anderson, S.Kumei, C.E.Wulfman. J.Math.Phys., 14, 1527 /1973/.
14. В.Б.Серебренников, А.Е.Шабад. ТМФ, 8, 23 /1971/.
15. V.B.Serenrennikov, A.E.Shabad. Int. J.Theor.Phys., 7, 339 /1973/.
16. З.Флюгге. Задачи по квантовой механике, т. 1, М., Мир, 1974.
17. L.J.Slater. Confluent Hypergeometric Functions. Cambridge, Cambridge Univ. Press, 1960.
18. H.Buchholz. Die Konfluente Hypergeometrische Funktion. Berlin (Gottingen)-Heidelberg, Springer, 1953.
19. F.G.Tricomi. Funzioni Ipergeometriche. Rome, Edizioni, Cremonese /1954/.
20. W.Magnus, F.Oberhettinger, R.P.Soni. Formulas and Theorems for the Special Functions of Mathematical Physics, Springer-Verlag. Berlin -(Heidelberg)- New York, 1966.
21. Э.Ч.Титчмарш. Разложения по собственным функциям, связанные с дифференциальными уравнениями второго порядка, ч. 1, М., ИЛ, 1960.
22. И.Лукач, Я.А.Смородинский. ЖЭТФ, 55, 1296 /1968/.
23. В.И.Арнольд. Математические методы классической механики. М., Наука, 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел 26 января 1976 года.