объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р2-87-453

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

СФЕРОИДАЛЬНЫЙ БАЗИС
ЧЕТЫРЕХМЕРНОГО ИЗОТРОПНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Направлено в журнал "Теоретическая и
математическая физика"

* Ереванский государственный университет

1987

Введение

Как известно/I/ квантовомеханическая задача об атоме водорода приводится к задаче о четырехмерном изотропном осцилляторе, если произвести небиективное квадратичное $\mathcal{KS}$ - преобразование/2/. В результате такого преобразования сферический, параболический и один из двух сфероидальных базисов атома водорода переходят в неканонический, двойной полярный и сфероидальный базисы четырехмерного осциллятора. Подробный анализ этого вопроса/3/ показал, что используемые во многих приложениях и описанные в монографии/4/ кулоновские сфероидальные функции дискретного оператора составляют специальный подкласс более общей полной системы сфероидальных функций четырехмерного изотропного осциллятора. Учитывая важность этих функций и то, что они до сих пор не изучены представляется целесообразным провести анализ решений уравнения Шредингера для четырехмерного изотропного осциллятора в сфероидальных координатах. В первом параграфе статьи вводятся четырехмерные сфероидальные координаты и приводятся касающиеся их основные факты. Во втором параграфе излагается метод разделения переменных, выводится выражение для дополнительного интеграла движения и выделяется полный набор операторов, однозначно фиксирующих сфероидальный базис четырехмерного осциллятора. Там же выводится формула, связывающая сфероидальный интеграл движения с интегралами движения, выделяющими неканонический и двойной полярный базисы. В третьем параграфе задача о сфероидальном базисе приводится к двум типам эквивалентных трехчленных рекуррентных соотношений, которым подчиняются коэффициенты, определяющие разложения сфероидального базиса по неканоническому и двойному полярному. В четвертом параграфе изложен итерационный метод вычисления сфероидальных поправок к неканоническому и двойному полярному базисам. В отличие от обычной теории возмущений, этот метод с самого начала базируется на исходных трехчленных рекуррентных соотношениях. Некоторая информация математического характера для полноты изложения включена в приложение.

§ I. Четырехмерные сфероидальные координаты

Используемые ниже сфероидальные координаты определены следующим образом:

$$u_1 = \frac{d}{2}\, sh\xi \sin\eta \sin\varphi_1 \qquad u_3 = \frac{d}{2}\, ch\xi \cos\eta \sin\varphi_2, \tag{I}$$

$$u_2 = \frac{d}{2}\, sh\xi \sin\eta \cos\varphi_1 \qquad u_4 = \frac{d}{2}\, ch\xi \cos\eta \cos\varphi_2 .$$

Здесь d - сфероидальный параметр ($0 \le d < \infty$), u_i - декартовы координаты, а четверка координат ξ , η , φ_1 и φ_2 изменяются в пределах

$$0 \le \xi < \infty,\ 0 \le \eta \le \frac{\pi}{2},\ 0 \le \varphi_1 \le 2\pi,\ 0 \le \varphi_2 < 2\pi.$$

Координаты ξ , η , φ_1 и φ_2 как функции от параметра d и координат u_i имеют вид

$$ch\, 2\xi = \frac{4u^2}{d^2} + \sqrt{\frac{16u^4}{d^4} + \frac{8(u_1^2+u_2^2-u_3^2-u_4^2)}{d^2} + 1}$$

$$\cos 2\eta = \frac{4u^2}{d^2} - \sqrt{\frac{16u^4}{d^4} + \frac{8(u_1^2+u_2^2-u_3^2-u_4^2)}{d^2} + 1} \tag{2}$$

$$tg\,\varphi_1 = \frac{u_1}{u_2}, \qquad tg\,\varphi_2 = \frac{u_3}{u_4}.$$

В качестве единственного параметра, различающего бесконечную совокупность сфероидальных координат, выступает параметр d .

Из формул (2) легко показать, что при малых d

$$ch\,\xi \to \frac{2u}{d}, \qquad sh\,\xi \to \frac{2u}{d} - \frac{d}{2u},$$

$$\cos 2\eta \to \frac{u_3^2+u_4^2}{u^2} - \frac{u_1^2+u_2^2}{u^2}, \quad \sin 2\eta \to \frac{4(u_1^2+u_2^2)(u_3^2+u_4^2)}{u^4}.$$

Отсюда следует, что в пределе $d \to 0$ сфероидальные координаты переходят в неканонические гиперсферические координаты /5/

$$u_1 = u \sin\alpha \sin\varphi_1 \qquad u_3 = u \cos\alpha \sin\varphi_2 \tag{3}$$

$$u_2 = u \sin\alpha \cos\varphi_1 \qquad u_4 = u \cos\alpha \cos\varphi_2 .$$

Отметим, что

$$\lim_{d\to 0}\left[\frac{d}{2}\operatorname{ch}\xi\right] = u \quad , \quad \lim_{d\to 0}\cos 2\eta = \cos 2\alpha . \tag{4}$$

При произвольных d вместо (4) связь между сфероидальными (I) и неканоническими (3) координатами имеет более сложный вид:

$$\operatorname{ch} 2\xi = \frac{4u^2}{d^2} + \sqrt{\left(\frac{4u^2}{d^2} - \cos 2\alpha\right)^2 + \sin^2 2\alpha}$$

$$\cos 2\eta = \frac{4u^2}{d^2} - \sqrt{\left(\frac{4u^2}{d^2} - \cos 2\alpha\right)^2 + \sin^2 2\alpha} . \tag{5}$$

Формулы (2) позволяют исследовать сфероидальные координаты в пределе больших d . Легко показать, что при $d \to \infty$

$$\operatorname{sh}\xi \to \frac{2\sqrt{u_1^2+u_2^2}}{d} \quad , \quad \operatorname{ch}\xi \to 1 + \frac{2(u_1^2+u_2^2)}{d^2}$$

$$\cos\eta \to \frac{2\sqrt{u_3^2+u_4^2}}{d} \quad , \quad \sin\eta \to 1 + \frac{2(u_3^2+u_4^2)}{d^2} .$$

Отсюда следует, что при $d \to \infty$ сфероидальные координаты (I) переходят в двойные полярные:

$$\begin{aligned} u_1 &= \rho_1 \sin\varphi_1 \quad , \quad u_3 = \rho_2 \sin\varphi_2 , \\ u_2 &= \rho_1 \cos\varphi_1 \quad , \quad u_4 = \rho_2 \cos\varphi_2 , \end{aligned} \tag{6}$$

причем

$$\rho_1 = \sqrt{u_1^2+u_2^2} \quad , \quad \rho_2 = \sqrt{u_3^2+u_4^2} .$$

При $d \neq 0$, как это следует из (I), связь между сфероидальными и двойными полярными координатами имеет более сложный вид:

$$\operatorname{ch} 2\xi = \frac{4(\rho_1^2+\rho_2^2)}{d^2} + \sqrt{\left\{\frac{4(\rho_1^2+\rho_2^2)}{d^2} - \frac{\rho_1^2-\rho_2^2}{\rho_1^2+\rho_2^2}\right\}^2 + \frac{2\rho_1\rho_2}{\rho_1^2+\rho_2^2}} ,$$

$$\cos 2\eta = \frac{4(\rho_1^2+\rho_2^2)}{d^2} - \sqrt{\left\{\frac{4(\rho_1^2+\rho_2^2)}{d^2} - \frac{\rho_1^2-\rho_2^2}{\rho_1^2+\rho_2^2}\right\}^2 + \frac{2\rho_1\rho_2}{\rho_1^2+\rho_2^2}} \, . \tag{7}$$

Приведем еще вид лапласиана в координатах (I):

$$\Delta = \frac{8}{d^2(\operatorname{ch}2\xi - \cos 2\eta)}\left\{\frac{1}{\operatorname{sh}2\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(\operatorname{sh}2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right) + \frac{1}{\sin 2\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\sin 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right) + \right.$$

$$\left. + \left(\frac{1}{\cos^2\eta} - \frac{1}{\operatorname{ch}^2\xi}\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2} + \left(\frac{1}{\sin^2\eta} + \frac{1}{\operatorname{sh}^2\xi}\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}\right\}. \tag{8}$$

§ 2. Разделение переменных

Рассмотрим гамильтониан четырехмерного изотропного осциллятора в сфероидальных координатах. Учитывая, что, согласно определению (I),

$$u^2 = \frac{d^2}{8}(\cos 2\eta + \operatorname{ch}2\xi),$$

имеем

$$\hat{\mathcal{H}} = -\frac{\hbar^2}{2M}\Delta + \frac{M\omega^2}{2}\cdot\frac{d^2}{8}(\operatorname{ch}2\xi + \cos 2\eta), \tag{9}$$

где явный вид лапласиана задается формулой (8).

Легко видеть, что переменные в уравнении Шредингера

$$\hat{\mathcal{H}}\psi = E\psi$$

в сфероидальных координатах разделяются. После очевидной факторизации

$$\psi = X(\xi;d)\,Y(\eta;d)\,\frac{e^{im_1\varphi_1 + im_2\varphi_2}}{2\pi}$$

и разделения переменных имеем

$$\frac{1}{\operatorname{sh}2\xi}\frac{d}{d\xi}\left(\operatorname{sh}2\xi\frac{dX}{d\xi}\right) + \left[\frac{MEd^2}{4\hbar^2}\operatorname{ch}2\xi - \frac{M^2\omega^2d^4}{64\hbar^2}\operatorname{ch}^2 2\xi + \right.$$

$$+\frac{m_2^2}{ch^2\xi}-\frac{m_1^2}{sh^2\xi}-Q(d)\Big]X=0$$

$$\frac{1}{\sin 2\eta}\frac{d}{d\eta}\left(\sin 2\eta\frac{dY}{d\eta}\right)+\Big[-\frac{MEd^2}{4\hbar^2}\cos 2\eta+\frac{M^2\omega^2d^4}{64\hbar^2}\cos^2 2\eta- \tag{10}$$

$$-\frac{m_2^2}{\cos^2\eta}-\frac{m_1^2}{\sin^2\eta}+Q(d)\Big]Y=0.$$

Здесь $Q(d)$ – сфероидальная константа разделения.

Исключая из этих уравнений энергию E, заключаем, что волновая функция ψ должна удовлетворять уравнению

$$\hat{Q}\psi=Q(d)\psi,$$

в котором оператор $\hat{Q}$ определен выражением

$$\hat{Q}=-\frac{1}{ch 2\xi-\cos 2\eta}\Big\{\frac{\cos 2\eta}{sh 2\xi}\frac{\partial}{\partial\xi}\left(sh 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}\right)+\frac{ch 2\xi}{\sin 2\eta}\frac{\partial}{\partial\eta}\left(\sin 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right)+$$
$$+\left(\frac{ch 2\xi}{\sin^2\eta}+\frac{\cos 2\eta}{sh^2\xi}\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi_1^2}+\left(\frac{ch 2\xi}{\cos^2\eta}-\frac{\cos 2\eta}{ch^2\xi}\right)\frac{\partial^2}{\partial\varphi_2^2}\Big\}+\frac{M^2\omega^2d^4}{64\hbar^2}ch 2\xi\cos 2\eta. \tag{11}$$

Как видно из приведенных формул, волновая функция ψ должна зависеть от четверки квантовых чисел: главного квантового числа n, определяющего спектр энергии

$$E_n=\hbar\omega(n+2)$$

двух азимутальных квантовых чисел m_1 и m_2 и специфического для сфероидальных координат квантового числа q, нумерующего дискретные значения сфероидальной константы разделения Q. Факт дискретности собственных значений константы разделения Q при фиксированном d не очевиден, но может быть установлен стандартными методами, используемыми с этой целью в теории кулоновских сфероидальных функций /4/ при анализе уравнений, аналогичных уравнениям /10/.

В отличие от гамильтониана $\hat{\mathcal{H}}$, в котором зависимость от параметра α фиктивна, т.е. исчезает при переходе к декартовым координатам, оператор $\hat{Q}$ реально зависит от α. В этом можно убедиться с помощью довольно трудоемких вычислений, переводящих оператор $\hat{Q}$ в декартовы координаты. Опуская эти расчеты, приведем окончательный ответ:

$$\hat{Q} = \hat{\vec{J}}^2 + \frac{M\omega}{\hbar}\frac{d^2}{4}\hat{\mathcal{P}} - \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^2\frac{d^4}{64}. \tag{I2}$$

Входящие в эту формулу безразмерные операторы $\hat{\vec{J}}^2$ и $\hat{\mathcal{P}}$ не зависят от параметра α и определены следующим образом:

$$\hat{\vec{J}}^2 = -\sum_{i<j}\left(u_i\frac{\partial}{\partial u_j} - u_j\frac{\partial}{\partial u_i}\right) = \sum_{i<j}(\hat{\mathcal{L}}_{ij})^2 \tag{I3}$$

$$\hat{\mathcal{P}} = \frac{\hbar}{2M\omega}\left(\frac{\partial^2}{\partial u_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial u_2^2} - \frac{\partial^2}{\partial u_3^2} - \frac{\partial^2}{\partial u_4^2}\right) + \frac{M\omega}{\hbar}(u_3^2+u_4^2-u_1^2-u_2^2). \tag{I4}$$

Из (I2), (I3) и (I4) следует, что оператор $\hat{Q}$ действительно зависит от параметра α.

Прямая проверка показывает, что операторы $\hat{\mathcal{L}}_{ij}$, $\hat{\vec{J}}^2$ и $\hat{\mathcal{P}}$ коммутируют с гамильтонианом $\hat{\mathcal{H}}$, а операторы $\hat{\vec{J}}^2$ и $\hat{\mathcal{P}}$ между собой не коммутируют. В работе /6/ нами было показано, что неканонический и двойной полярный базисы четырехмерного осциллятора определяются полными наборами операторов $\{\hat{\mathcal{H}}, \hat{\vec{J}}^2, \hat{\mathcal{L}}_{12}, \hat{\mathcal{L}}_{34}\}$ и $\{\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathcal{P}}, \hat{\mathcal{L}}_{12}, \hat{\mathcal{L}}_{34}\}$. В этом же смысле полный набор операторов $\{\hat{\mathcal{H}}, \hat{Q}, \hat{\mathcal{L}}_{12}, \hat{\mathcal{L}}_{34}\}$ фиксирует сфероидальный базис, из которого, как это подсказывает формула (I2), отмеченные выше два базиса получаются в пределах малых и больших значений параметра α. Сказанное приводит к следующей классификации состояний по квантовым числам. Обозначим через N_1 и N_2 главные квантовые числа, соответствующие двумерным осцилляторам, отнесенным к координатам (u_1, u_2) и (u_3, u_4), так что $n = N_1 + N_2$. Согласно /6/, числа n и $|m_1| + |m_2|$ обязаны иметь одинаковую четность, а собственные значения операторов $\hat{\mathcal{P}}$ и $\hat{\vec{J}}^2$ равны $N_2 - N_1$ и $j(j+2)$, причем при данных n, m_1 и m_2 квантовые числа j и N_2 пробегают значения:

$$j = |m_1| + |m_2|, |m_1| + |m_2| + 2, \dots, n$$
$$N_2 = |m_2|, |m_2| + 2, \dots \quad , n - |m_1| . \tag{15}$$

§ 3. Алгебраизация сфероидального базиса

Покажем, что вопрос о решении уравнения

$$\hat{Q}\psi = Q\psi \tag{16}$$

может быть сведен к вопросу о решении конечной системы алгебраических уравнений, точнее некоторого трехчленного рекуррентного соотношения. Введем для удобства вместо оператора $\hat{Q}$ оператор

$$\hat{\Lambda} = \hat{\vec{J}}^2 + \frac{M\omega}{\hbar}\frac{d^2}{4}\hat{\mathcal{P}} \tag{17}$$

и обозначим соответствующие ему собственные значения через λ_q. Наша задача заключается в исследовании уравнения

$$\hat{\Lambda}\psi_q = \lambda_q \psi_q . \tag{18}$$

Будем действовать двумя параллельными путями. Разложим сфероидальный базис ψ_q по неканоническому и по двойному полярному базисам φ_j и χ_{N_2} :

$$\begin{aligned} \psi_q &= \sum_j W_q^j \varphi_j \\ \psi_q &= \sum_{N_2} U_q^{N_2} \chi_{N_2} . \end{aligned} \tag{19}$$

Здесь индексы, по которым ведется суммирование, пробегают значения, диктуемые формулами (15), а неизвестными являются коэффициенты W_q^j и $U_q^{N_2}$. Явный вид базисов φ_j и χ_{N_2} приведен в приложении. Подставляя (19) в (18) и используя (17), приходим к алгебраическим уравнениям:

$$\begin{aligned} [\lambda_q - j(j+2)]W_q^j &= \frac{M\omega}{\hbar}\frac{d^2}{4}\sum_{j'} W_q^{j'} \int \varphi_j^* \hat{\mathcal{P}} \varphi_{j'} dV \\ [\lambda_q - \frac{M\omega}{\hbar}\frac{d^2}{4}(N_2 - N_1)]U_q^{N_2} &= \sum_{N_2'} U_q^{N_2'} \int \chi_{N_2}^* \hat{\vec{J}}^2 \chi_{N_2'} dV . \end{aligned} \tag{20}$$

Теперь основная задача сводится к вычислению матричных элементов, стоящих в правых частях уравнений (20). Воспользуемся известным из[6] разложением неканонического базиса по двойному полярному

$$\varphi_j = \sum_{N_2} E_j^{N_2} \chi_{N_2} . \tag{21}$$

Матрицы $E_j^{N_2}$ суть коэффициенты Клебша-Гордана с довольно сложной явной зависимостью от квантовых чисел j, N_2, n, m_1 и m_2. Явный вид этой матрицы приведен в приложении. После подстановки (21) в (20) интегралы берутся элементарно и остается вычислить суммы, в которые входят произведение коэффициентов $E_j^{N_2} E_{j'}^{N_2}$ на факторы $(N_2 - N_1)$ и $j(j+1)$ соответственно. Эта вспомогательная задача решается с помощью известных[7] рекуррентных соотношений для коэффициентов Клебша-Гордана:

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

$$+ \left\{ \frac{(c+\gamma)(c-\gamma)(b+c-a)(a-b+c)(a+b-c+1)(a+b+c+1)}{c^2(2c-1)(2c+1)} \right\}^{1/2} C^{c,\gamma}_{a\alpha;b\beta} +$$

$$+ \left\{ \frac{(c+\gamma+1)(c-\gamma-1)(c+b-a-1)(c+a-b-1)(a+b-c+2)(a+b+c)}{(c-1)^2(2c-3)(2c-1)} \right\}^{1/2} C^{c-2,\gamma}_{a\alpha;b\beta},$$

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

$$= \sqrt{(a-\alpha+1)(b-\beta)}\, C^{c\gamma}_{a+1/2,\alpha-1/2;b-1/2,\beta+1/2} +$$

$$+\sqrt{(a+\alpha+1)(b+\beta)}\; C^{c\gamma}_{a+1/2,\alpha+1/2;\,b-1/2,\beta-1/2}$$

и условий нормировки

$$\sum_{\alpha+\beta=\gamma} C^{c\gamma}_{a\alpha;b\beta}\, C^{c'\gamma}_{a\alpha;b\beta} = \delta_{cc'}$$

$$\sum_{c\gamma}^{|a+b|} C^{c\gamma}_{a\alpha;b\beta}\, C^{c\gamma}_{a\alpha';b\beta'} = \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\beta\beta'}.$$

На этом пути легко доказать, что

$$\int \Phi_j^{*}\hat{\mathcal{P}}\Phi_{j'}\,dV = A_j\,\delta_{j',j+2} + A_{j-2}\,\delta_{j',j-2} + B_{j'}\,\delta_{j',j}$$

$$\int \chi^{*}_{N_2}\,\hat{J}^2\chi_{N_2'}\,dV = C_{N_2}\,\delta_{N_2',N_2+2} + D_{N_2}\delta_{N_2',N_2} + C_{N_2-2}\,\delta_{N_2',N_2-2},$$

где коэффициенты A, B, C и D определяются выражениями

$$A_j = -\sqrt{\frac{(j+|m_1|+|m_2|+2)(j-|m_1|-|m_2|+2)(j+|m_1|-|m_2|+2)(j-|m_1|+|m_2|+2)(n-j)(n+j+4)}{4(j+2)^2(j+1)(j+3)}}$$

$$B_j = -\frac{(|m_1|+|m_2|)(|m_1|-|m_2|)(n+2)}{j(j+2)}$$

$$C_{N_2} = -\sqrt{(N_2-|m_2|+2)(N_2+|m_2|+2)(n-N_2-|m_1|)(n-N_2+|m_1|)}$$

$$D_{N_2} = 2(N_2+1)(n-N_2+1) + m_1^2 + m_2^2 - 2.$$

Возвращаясь к полученным выше двум алгебраическим уравнениям (20), приходим к трехчленным рекуррентным соотношениям:

$$\begin{cases} A_j W_q^{j+2} + \left\{B_j + \frac{4\hbar}{M\omega d^2}\left[j(j+2)-\lambda_q\right]\right\}W_q^j + A_{j-2}W_q^{j-2} = 0 \\ \sum_j |W_q^j|^2 = 1 \end{cases} \qquad (22)$$

$$
\begin{cases} C_{N_2} U_q^{N_2+2} + \left[D_{N_2} + \frac{M\omega d^2}{4\hbar}(2N_2-n) - \lambda_q \right] U_q^{N_2} + C_{N_2-2} U_q^{N_2-2} = 0 \\ \sum\limits_{N_2} |U_q^{N_2}|^2 = 1 . \end{cases} \tag{23}
$$

Каждое из этих рекуррентных соотношений вместе с приложенным к нему условием нормировки служит основой для чисто алгебраической схемы точного, либо приближенного решения задачи о сфероидальном базисе четырехмерного осциллятора.

Как и в теории кулоновских сфероидальных функций /4/, в нашем случае квантовое число q, нумерующее собственные значения константы разделения λ_q, равно числу нулей угловой функции $Y(\eta; d)$ внутри интервала $0 \leq \eta \leq \pi/2$, причем это число нулей не меняется с варьированием параметра d. Выше уже отмечалось, что при $d \to 0$ и $d \to \infty$ сфероидальный базис вырождается в неканонический и двойной полярный. Возникает вопрос: чему равны квантовые числа j_0 и N_{20}, характеризующие предельную конкретную неканоническую и двойную полярную волновую функцию, получающуюся из сфероидальной волновой функции с наперед заданным значением квантового числа q? Пользуясь независимостью числа нулей q от параметра d и приведенными в приложении выражениями для функций Φ_j и X_{N_2}, легко показать, что эти предельные значения j_0 и N_{20} равны

$$
\begin{aligned} j_0 &= 2q + |m_1| + |m_2| \\ N_{20} &= 2q + |m_2| . \end{aligned} \tag{24}
$$

Из рекуррентных соотношений (22) и (23) также следует, что

$$
\lim_{d \to 0} \lambda_q(d) = j_0(j_0+2)
$$

$$
\lim_{d \to \infty} \lambda_q(d)/d = \frac{M\omega}{\hbar} \frac{2N_{20}-n}{4} .
$$

§ 4. Область больших и малых d

Согласно (24), коэффициенты W_q^j и $U_q^{N_2}$ вместо q можно нумеровать индексами j_0 и N_{20}. Введем обозначения

$$W_q^{\,j}(d) = \widetilde{W}_{j_0}^{\,j}(R) \quad , \quad U_q^{N_2}(d) = \widetilde{U}_{N_{20}}^{N_2}(R),$$

где безразмерный параметр R выражается через параметр d простой формулой

$$R = \frac{M\omega}{\hbar}\,\frac{d^2}{4}\,.$$

Такое обозначение удобно для расчетов сфероидального базиса ψ_q и константы λ_q в области больших и малых d. В частности,

$$\lim_{d\to 0} \psi_q(d) = \lim_{R\to 0} \widetilde{\psi}_{j_0}(R) = \Phi_{j_0}$$

$$\lim_{d\to\infty} \psi_q(d) = \lim_{R\to\infty} \widetilde{\psi}_{N_{20}}(R) = X_{N_{20}}\,.$$

При $R \ll 1$ справедливы разложения

$$\widetilde{W}_{j_0}^{\,j}(R) = \delta_{jj_0} + \sum_{s=1}^{\infty} \widetilde{W}_{jj_0}^{(s)} R^s$$

$$\widetilde{\lambda}_{j_0}(R) = j_0(j_0+2) + \sum_{s=1}^{\infty} \widetilde{\lambda}_{j_0}^{(s)} R^s\,.$$

Подставляя эти разложения в трехчленное рекуррентное соотношение (22), после некоторых преобразований приходим к уравнению

$$(j-j_0)(j+j_0+2)\,\widetilde{W}_{jj_0}^{(s)} + A_j\,\widetilde{W}_{j+2,j_0}^{(s-1)} + A_{j-2}\,\widetilde{W}_{j-2,j_0}^{(s-1)} +$$

$$B_j\,\widetilde{W}_{jj_0}^{(s-1)} - \sum_{t=0}^{s-1} \widetilde{\lambda}_{j_0}^{(s-t)}\,\widetilde{W}_{jj_0}^{(t)} = 0.$$

Далее, пользуясь условиями

$$W_{jj_0}^{(0)} = \delta_{jj_0} \quad , \quad W_{j,j}^{(s)} = \delta_{s0}\,,$$

аналогичными тем, которые встречаются в теории возмущений, легко доказать формулу, выражающую $\tilde{\lambda}^{(s)}_{j_0}$ через $\tilde{W}^{(s-1)}_{j_0 j_0}$ и $\tilde{W}^{(s-1)}_{j_0, j_0\pm 2}$:

$$\tilde{\lambda}^{(s)}_{j_0} = A_{j_0}\tilde{W}^{(s-1)}_{j_0, j_0+2} + A_{j_0-2}\tilde{W}^{(s-1)}_{j_0, j_0-2} + B_{j_0}\tilde{W}^{(s-1)}_{j_0 j_0},$$

из которой после стандартных вычислений следует, что при $R \ll 1$

$$\lambda_{j_0} = j_0(j_0+2) + \frac{M\omega}{\hbar}\frac{d^2}{4}\frac{(|m_1|+|m_2|)(|m_2|-|m_1|)}{j_0(j_0+2)} +$$

$$+ \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^2 \frac{d^4}{64}\left\{\frac{(A_{j_0-2})^2}{j_0} - \frac{(A_{j_0})^2}{j_0+2}\right\}$$

$$\Psi_q = \tilde{\Psi}_{j_0} = \varphi_{j_0} + \frac{M\omega}{\hbar}\frac{d^2}{4}\left\{\left(\frac{A_{j_0-2}}{j_0}\right)\varphi_{j_0-2} - \left(\frac{A_{j_0}}{j_0+2}\right)\varphi_{j_0+2}\right\}.$$

Исследуем теперь область больших R . При $R \gg 1$, пользуясь разложениями

$$\tilde{U}^{N_2}_{N_{20}}(R) = \sum_{s=0}^{\infty} \tilde{U}^{(s)}_{N_2 N_{20}} R^s$$

$$\frac{\tilde{\lambda}_{N_{20}}(R)}{R} = (2N_{20}-n) + \sum_{s=1}^{\infty} \tilde{\lambda}^{(s)}_{N_{20}} R^s$$

и рекуррентным соотношением (23), приходим к уравнению

$$2(N_2-N_{20})\tilde{U}^{(s)}_{N_2 N_{20}} = -C_{N_2}\tilde{U}^{(s-1)}_{N_2+2, N_{20}} - C_{N_2-2}\tilde{U}^{(s-1)}_{N_2-2, N_{20}} +$$

$$\mathcal{D}_{N_2}\tilde{U}^{(s-1)}_{N_2, N_{20}} + \sum_{t=0}^{s-1}\tilde{\lambda}^{(s-1-t)}_{N_2}\tilde{U}^{(t)}_{N_2, N_{20}},$$

из которого с помощью условий

$$\tilde{U}^{(0)}_{N_2, N_{20}} = \delta_{N_2, N_{20}}, \quad \tilde{U}^{(s)}_{N_2, N_{20}} = \delta_{s0}$$

получаем при $R \gg 1$ формулы

$$\frac{\tilde{\lambda}_{N_{20}}(d)}{d^2} = \frac{M\omega}{\hbar}\,\frac{2N_{20}-n}{4} - \frac{\mathcal{D}_{N_{20}}}{d^2}$$

$$\psi_q^{\Gamma} = \tilde{\psi}^{\Gamma}_{N_{20}} = \chi_{N_{20}} + \frac{\hbar}{M\omega}\,\frac{1}{d^2}\left[C_{N_{20}-2}\,\chi_{N_{20}-2} - C_{N_{20}}\,\chi_{N_{20}+2}\right].$$

Поправки более высокого порядка по $R^s\,(R \ll 1)$ и R^{-s} $(R \gg 1)$ вычисляются аналогичным образом.

Заключение

Во введении уже говорилось о том, что сфероидальный базис атома водорода образует специальный подкласс сфероидального базиса четырехмерного изотропного осциллятора. Это связано с тем, что KS-преобразование небиективно. Правила отбора, позволяющие выделить из осцилляторного базиса базис атома водорода, получены в работе /3/. Пользуясь этими правилами, легко показать, что вычисленные в работе /8/ сфероидальные поправки к сферическому и параболическому базисам атома водорода получаются из формул последнего параграфа как частные случаи.

Мы благодарны И.В.Луценко, Л.И.Пономареву и С.И.Виницкому за полезные обсуждения.

Приложение

Для цельности и полноты изложения приведем использованную в тексте статьи информацию о неканоническом и двойном полярном базисах /6/:

а) неканонический базис

$$\Phi_j \equiv \Phi_{n_j}^{m_1, m_2}(u,\alpha,\varphi_1,\varphi_2) = R_{nj}(u)\,Y_{j m_1 m_2}(\alpha,\varphi_1,\varphi_2),$$

$$R_{nj}(u) = \left\{\frac{2\Omega^4\left(\frac{n+j}{2}+1\right)!}{\left(\frac{n-j}{2}\right)!}\right\}^{1/2}\frac{(\Omega u)^j}{(j+1)!}\,e^{-\Omega^2u^2/2}\,F\left(-\frac{n-j}{2};\,j+2;\,\Omega^2u^2\right)$$

$$\Omega = \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$$

$$Y_{j m_1 m_2}(\alpha,\varphi_1,\varphi_2) = \frac{1}{\pi}\left\{\frac{(j+1)\left(\frac{j+|m_1|+|m_2|}{2}\right)!\left(\frac{j-|m_1|-|m_2|}{2}\right)!}{2\left(\frac{j+|m_1|-|m_2|}{2}\right)!\left(\frac{j-|m_1|+|m_2|}{2}\right)!}\right\}^{1/2} \cdot$$

$$\cdot(\sin\alpha)^{|m_1|}(\cos\alpha)^{|m_2|}\, P^{|m_1|,|m_2|}_{\frac{j-|m_1|-|m_2|}{2}}(\cos 2\alpha)\, e^{im_1\varphi_1+im_2\varphi_2},$$

где ${}_1F_1$ – вырожденная гипергеометрическая функция, $P_n^{\alpha,\beta}$ – полином Якоби.

б) двойной полярный базис

$$\chi_{N_2} \equiv \chi^{m_1 m_2}_{N_1 N_2}(\rho_1,\varphi_1;\rho_2,\varphi_2) =$$

$$= \frac{M\omega}{\pi\hbar} f_{N_1 m_1}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\rho_1^2\right) f_{N_2 m_2}\left(\frac{M\omega}{\hbar}\rho_2^2\right) e^{im_1\varphi_1+im_2\varphi_2}$$

$$f_{Nm}(x) = \left\{\frac{\left(\frac{N+|m|}{2}\right)!}{\left(\frac{N-|m|}{2}\right)!}\right\}^{1/2}\frac{e^{-x^2/2}}{|m|!}\, x^{|m|/2}\, {}_1F_1\left(-\frac{N-|m|}{2};|m|+1;x\right);$$

в) связь неканонического базиса с двойным полярным

$$\Phi_j = \sum_{N_2} E_j^{N_2}\chi_{N_2}$$

$$E_j^{N_2} = (-1)^{\frac{n-j+N_2-|m_2|}{2}}\, C^{c,\gamma}_{a,\alpha;b,\beta}$$

$$c = j/2 \quad , \quad \gamma = \frac{|m_1|+|m_2|}{2}$$

$$a = \frac{n-|m_1|+|m_2|}{4} \quad , \quad \alpha = \frac{N_2}{2} - \frac{n-|m_1|-|m_2|}{4}$$

$$b = \frac{n+|m_1|-|m_2|}{4} \quad , \quad \beta = -\frac{N_2}{2} + \frac{n+|m_1|+|m_2|}{4}.$$

Здесь через $C^{c\gamma}_{a\alpha,b\beta}$ обозначены коэффициенты Клебша-Гордана, определенные в согласии с монографией /7/. Ввиду отмеченной выше одинаковой четности чисел n и $|m_1|+|m_2|$ все параметры в $C^{c\gamma}_{a\alpha,b\beta}$ являются целыми, либо полуцелыми числами. Наконец, отметим, что оба приведенных выше базиса ортонормированы по всем квантовым числам.

Литература

1. Kibler U. Negadi T. Croatica Cemica Acta,CCACAA,57(6)1509, 1984.
2. Kustaanheimo P., Steidel E., J.Reine angew.Math. 218, 204, 1965.
3. Давтян Л.С., Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Препринт ОИЯИ Р2-87- 323 , Дубна, 1987.
4. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
5. Погосян Г.С., Смородинский Я.А., Тер-Антонян В.М. Сообщения ОИЯИ, Р2-82-118, Дубна, 1982.
6. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. Сообщения ОИЯИ, Р2-86-329, 1986.
7. Варшалович Д.А., Москалёв А.Н., Херсонский В.К. Квантовая теория углового момента. "Наука", Л., 1975.
8. Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Сисакян А.Н., Тер-Антонян В.М. ТМФ, 64, № 1, с. 171-175, 1985.

Рукопись поступила в издательский отдел
22 июня 1987 года.

Давтян Л.С. и др. Р2-87-453

Сфероидальный базис четырехмерного изотропного осциллятора

Введены четырехмерные сфероидальные координаты. Изучена полная система сфероидальных волновых функций четырехмерного изотропного осциллятора, обобщающая сфероидальный базис атома водорода. Выведен специфический для сфероидального анализа интеграл движения, на основе которого проведена алгебраизация решаемой задачи. Предложен итерационный метод вычисления сфероидальных поправок к неканоническому и двойному полярному базисам четырехмерного изотропного осциллятора.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1987

Перевод О.С.Виноградовой

Davtyan L.S. et al. P2-87-453

Spheroidal Basis of the Four-Dimensional Isotropic Oscillator

Four-dimensional spheroidal coordinates are introduced. Complete set of spheroidal wave functions of a four-dimensional isotropic oscillator generalising a spheroidal basis of a hydrogen atom is studied. The constant of motion specific for the spheroidal analysis and making the basis of algebraization of the problem in question is introduced. The iteration method is proposed for calculating spheroidal corrections to the noncanonic and double-polar bases of the four-dimensional isotropic oscillator.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1987

20 коп.

Редактор Б.Б.Колесова. Макет Р.Д.Фоминой.

Подписано в печать 14.07.87.
Формат 60x90/16. Офсетная печать. Уч.-изд.листов 1,35.
Тираж 490. Заказ 39355.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований.
Дубна Московской области.