ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА
JOURNAL OF NUCLEAR PHYSICS
т. 55, вып. 9, 1992

© 1992 г. МАРДОЯН Л.Г., СИСАКЯН А.Н.

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

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ, ДУБНА

(Поступила в редакцию 27 февраля 1992 г.)

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.

1. Атом водорода в искривленном пространстве

Квантовомеханическая 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

$$x_1 = R \sin\chi \sin\theta \cos\phi, \quad x_2 = R \sin\chi \sin\theta \sin\phi, \quad x_3 = R \sin\chi \cos\theta,$$
$$x_4 = R \cos\chi, \tag{1}$$
$$0 \leqslant \chi, \quad \theta \leqslant \pi, \quad 0 \leqslant \phi \leqslant 2\pi.$$

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

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

где $V(\chi;\ R) = (-Ze_2/R) \operatorname{ctg}\chi$ – гармонический потенциал в искривленном пространстве, т.е. решение уравнения Лапласа, а $\sin\chi = r/R$. Этот потенциал при $R \to \infty$ (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:

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

Здесь $n = 1, 2, 3, \ldots$ – главное квантовое число.

В 1941 г. 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, приведенные в [4]:

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

где

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

Эти радиальные волновые функции нормированы следующим образом:

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

В пределе $R\to\infty$ 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:

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

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

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

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

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

где

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

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:

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

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]:

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

и учтем, что

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

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

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

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

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

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

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

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

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 ($f\geqslant 3$) 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 моменту l.

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

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

где через $\hat H$ обозначен эрмитов оператор:

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

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. *Schrodinger E.* // Proc. Roy. Irish Acad. 1940. V. A46. P. 9; 1940. V. A46. P. 183; 1941. V. A47. P. 53.
2. *Изместьев А.А.* // ЯФ. 1990. Т. 52. С. 1697.
3. *Stevenson A.F.* // Phys. Rev. 1941. V. 59. P. 842.
4. *Богуш А.А., Отчик В.С., Редьков В.М.* // Весці АН БССР. 1983. Т. 3. С. 56.
5. *Barut A.O., Wilson R.* // Phys. Lett. 1985. V. 11A. P. 351.
6. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
7. *Бейтман Г., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Т. 1. М.: Наука, 1965.
8. *Мардоян Л.Г., Погосян Г.С., Тер-Антонян В.М.* // Изв. АН АрмССР. Физика. 1984. Т. 19. С. 3.

Mardoyan L.G., Sissakian A.N.

HYDROGEN ATOM IN CURVED SPACE: ORTHOGONALITY OF RADIAL WAVE FUNCTIONS IN 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.