USE OF NONUNITARY REPRESENTATIONS OF O(2,1) GROUP FOR CALCULATION OF BOUND STATES IN MODIFIED COULOMB POTENTIAL

A.V.Sergeev, A.I.Sherstyuk

Abstract

In connection with the elaboration and the application of various methods of generalized summation of divergent series in quantum mechanics and field theory, a great attention is given recently to the development of new techniques for calculating the higher orders of perturbation theory. These methods extend considerably the applicability of the theory in respect of the expansion parameter and make it possible to restore the analytical structure of the function to be found.

A great success was attained when perturbation theory corrections for modified Coulomb potential are calculated on the basis of an expansion over intermidiate states of purely discrete spectrum. In this case, the set of hydrogen-like Sturmian tipe functions is chosen as the basis of the Hilbert space. It forms the basis of an irreducible representation of the O(2,1) noncompact group.

When investigating the formal procedure for the determination of perturbation theory corrections for the potential with spherical symmetry of the tipe

$$-\frac{1}{r}+\sum_{i=1}^{\infty}\lambda^{i} f_i\, r^{i-1}$$

we established that computations would become much simpler if the quantum numbers n, ℓ regarded as the entry parameters of the procedure have "nonphysical" values $\ell = 1/2, 1, 3/2, \ldots$, $n = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$, $n \neq 0$. The states corresponding to "nonphysical" quantum numbers $|n| \leq \ell$ arise when the finite dimensional nonunitary representations of the O(2,1) group are considered. The O(2,1) group is the dynamical symmetry group for the unperturbed problem. In this case, the expansion over the functions relating to the basis in Rayleigh – Schrödinger perturbation theory formulas is interrupted on the

finite number of constituents $s = 2\ell + 1$. The equation for energy eigenvalues is reduced to the homogeneous sistem of linear algebraic equations for components of the s-dimensional vector. As the energy corrections are the polinomials in n, ℓ, we propose to use this circumstance for determination of the correction values in the "nonphysical" region of quantum numbers both for the testing of the formulas for expansion coefficients found by different techniques and for the subsequent extrapolation in the "physical" region. When we choose the polinomial coefficients independent of n, ℓ in order that the polinomial values coincide with the easily computable energy corrections for $|n| \leq \ell$, we may determine the dependence of the energy corrections from quantum numbers.

We apply the developed procedure to calculating the states of a hydrogen atom in homogeneous electric field and an anharmonic oscillator also.

In the last part of the paper we show that the states with "nonphysical" quantum numbers correspond to the solutions of the Schrödinger equation with a singularity at $r = 0$. This fact indicates the connection between the group theoretical formulation of the problem and the formulation in terms of differential equations for eigenfunctions.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕУНИТАРНЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ГРУППЫ O(2,I) ДЛЯ РАСЧЁТА СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В МОДИФИЦИРОВАННОМ КУЛОНОВСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

А.В.Сергеев, А.И.Шерстюк

Аннотация

В последнее время в связи с развитием и применением различных методов обобщённого суммирования расходящихся рядов в квантовой механике и теории поля большое внимание уделяется разработке новых методов расчёта высших порядков теории возмущений. Такие методы существенно расширяют возможности теории в отношении величины параметра разложения и позволяют воспроизвести аналитическую структуру искомого решения.

Значительный успех при расчёте поправок теории возмущений для модифицированного кулоновского потенциала достигнут на основе разложений по промежуточным состояниям чисто дискретного спектра. В качестве базиса гильбертова пространства при этом выбирают набор водородоподобных функций штурмовского типа, образующий базис неприводимого представления некомпактной группы O(2,I).

При исследовании формальной процедуры нахождения поправок теории возмущений для сферически-симметричного потенциала вида

$$-\frac{1}{r}+\sum_{i=1}^{\infty}\lambda^{i}f_{i}r^{i-1}$$

установлено, что вычисления значительно упрощаются, когда квантовые числа n, l, рассматриваемые как входные параметры процедуры, принимают "нефизические" значения l = I/2, I, 3/2, ..., $n = -l, -l+$ I, ..., l, $n \neq 0$. Состояния, соответствующие "нефизическим" квантовым числам $|n| \leq l$, возникают при рассмотрении конечномерных неунитарных представлений группы O(2,I), являющейся динамической группой симметрии невозмущённой задачи. В этом случае разложения по базисным функциям, входящие в формулы теории возмущений Релея – Шредингера, обрываются на конечном числе слагаемых $s = 2\ell + 1$, а уравнение на собственные значения энергии сводится к однородной системе линейных алгебраических уравнений для компонент s-мерного вектора. Это обстоятельство с учётом того, что поправки к энергии представляют собой многочлены от n, ℓ, предлагается использовать для нахождения значений поправок в "нефизической" области квантовых чисел как для проверки правильности формул для коэффициентов разложений, полученных другими методами, так и для последующей экстраполяции в "физическую" область. Подбирая не зависящие от n, ℓ коэффициенты многочленов так, чтобы значения многочленов совпадали с легко вычисляемыми поправками к энергии при $|n| \leq \ell$, можно определить зависимость от квантовых чисел поправок к энергии.

Развитая процедура применяется также к вычислению состояний атома водорода в однородном электрическом поле и ангармонического осциллятора.

В работе показано также, что "нефизическим" значениям квантовых чисел формально могут быть сопоставлены нерегулярные в нуле решения уравнения Шредингера, что указывает на связь теоретико-групповой формулировки задачи с формулировкой, основанной на решении дифференциальных уравнений для собственных функций.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ НЕУНИТАРНЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ГРУППЫ O(2,I) ДЛЯ РАСЧЁТА СВЯЗАННЫХ СОСТОЯНИЙ В МОДИФИЦИРОВАННОМ КУЛОНОВСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

А.В.Сергеев, А.И.Шерстюк (Ленинград)

I.Введение

В физической литературе большое внимание уделяется проблеме связанных состояний в квантовомеханических моделях со сферически-симметричным модифицированным кулоновским потенциалом

$$V(r) = -f(\lambda r)/r, \tag{I}$$

где функция $f(x)$ разлагается в ряд Тейлора по степеням x:

$$f(x) = \sum_{i=0}^{\infty} f_i x^i, \quad Z \equiv f_0 > 0. \tag{Ia}$$

В частном случае потенциала Дебая - Хюккеля имеем: $V(r) = -Ze^{-\lambda r}/r$, в случае потенциала чармония: $V(r) = -Z/r + \lambda r$.

В дальнейшем для удобства вычислений положим $Z = $ I. Общий случай $Z > 0$ сводится к случаю $Z = $ I путём масштабного преобразования $r \to Zr$.

Как правило, уравнение Шредингера с потенциалом $V(r)$ точно не интегрируется, поэтому для решения пользуются различными приближёнными методами.

Рассматривая λ как малый параметр, можно построить ряд теории возмущений (ТВ) для уровней энергии,

$$E(n,\ell;\lambda) = \sum_{N=0}^{\infty} E_N(n,\ell)\lambda^N, \tag{2}$$

и для волновых функций. Здесь $n = $ I,2,... - главное квантовое число, ℓ - азимутальное квантовое число, $0 \leq \ell \leq n - $ I, и N - порядок ТВ. В нулевом порядке $E_0(n,\ell) = -1/(2n^2)$ совпадает с кулоновской энергией.

Для многих практически важных случаев (2) является расходящимся асимптотическим рядом. Нахождение энергии в области больших параметров экранирования λ методом аппроксимант Паде и другими обобщёнными методами суммирования рядов требует наличия достаточно большого числа поправок ТВ /I - 7/. Этим объясняется интерес к различным процедурам разложения в ряд ТВ и исследованию его аналитических свойств.

Для нахождения поправок ТВ ранее использовались: гипервириальные соотношения и теорема Гельмана - Фейнмана /I, 2/, переход к уравнению Риккати для логарифма волновой функции /2 - 5/, разложение по собственным функциям оператора с чисто дискретным спектром /6 - 9/. Алгоритм вычисления поправок к энергии в этих случаях сводится к последовательному определению E_N для N = I,2,... с использованием рекуррентных соотношений между коэффициентами разложения энергии и волновой функции.

Поправки E_N были представлены в виде многочленов от переменных n^2, $\Lambda = \ell(\ell+1)$:

$$E_1(n,\ell) = -f_1, \tag{3а}$$

$$E_2(n,\ell) = -\frac{1}{2}(3n^2-\Lambda)f_2, \tag{3б}$$

$$E_3(n,\ell) = -\frac{n^2}{2}(5n^2+1-3\Lambda)f_3, \tag{3в}$$

$$E_4(n,\ell) = -\frac{n^2}{8}\big[(35n^4+25n^2-30n^2\Lambda+3\Lambda^2-6\Lambda)f_4 + (7n^4+5n^2-3\Lambda^2)f_2^2\big], \dots, \tag{3г}$$

$$E_N(n,\ell) = n^{2(N-M-1)}\sum_{\substack{p,q\geq 0\\ p+q\leq M}} C_{pq}^{(N)}\, n^{2p}\Lambda^q. \tag{3}$$

Формулы для шести поправок ТВ получены в /I/, а общая формула (3) приведена в /7/. Через M обозначена целая часть числа N/2. Коэффициенты $C_{pq}^{(N)}$ зависят только от f_1, f_2, ..., f_N.

В настоящей работе для вычисления поправок к энергии получены линейные соотношения между $C_{pq}^{(N)}$, вытекающие из симметрии задачи. Мы обращаем внимание на то, что при некоторых "нефизических" значениях n, ℓ задача определения $E_N(n,\ell)$ значительно упрощается. Мы покажем, например, что при $n = \ell -$ $-$ I/2 и при $n = \ell =$ I все многочлены (3) обращаются в нуль для $N > 1$ и для $N > 2$ соответственно, а при $n = 1 \pm 1/2$, $\ell = 3/2$ значения $E_N(n,\ell)$ для всех $N > 1$ укладываются в следующую общую формулу:

$$E_N\left(1 \pm \frac{1}{2}, \frac{3}{2}\right) = \pm \frac{8}{9} \sum_{\substack{i_2, i_3 \geq 0 \\ 2i_2 + 3i_3 = N}} \binom{1/2}{i_2+i_3} \binom{i_2}{i_2+i_3} \left(-\frac{27}{8} f_2\right)^{i_2} \left(-\frac{81}{32} f_3\right)^{i_3}. \qquad (4)$$

Имея значения $E_N(n,\ell)$ для достаточно большого набора (n,ℓ), можно подобрать $(M+1)(M+2)/2$ не зависящих от n, ℓ коэффициентов многочлена (3) и затем экстраполировать $E_N(n,\ell)$ в область "физических" значений $n > \ell$. Тем самым мы можем определить энергию в принципе с точностью до любого порядка по λ.

В ряде работ /8, 10 - 13/ было показано, что квантовомеханическая задача о движении частицы в кулоновском потенциале может быть сформулирована в терминах генераторов некомпактной группы Ли O(2,1), которая является динамической группой уравнения Шредингера для водородоподобных атомов.

Каждое неприводимое унитарное представление группы O(2,1) (или локально изоморфной ей $SU(1,1)$), относящееся к дискретной серии, может быть реализовано на базисе водородных штурмовских функций с определённым квантовым числом ℓ, являющихся собственными функциями оператора Казимира, отвечающими собственному значению $\ell(\ell+1)$.

Можно показать также /8, 9/, что радиальное уравнение Шредингера для частицы в поле модифицированного кулоновского потенциала (1) может быть представлено в виде алгебраического уравнения, содержащего только генераторы группы Ли O(2,1). В работах /6, 7/ это обстоятельство использовалось для вычисления в замкнутом виде поправок высшего порядка ТВ для экранированного кулоновского потенциала.

В настоящей работе исследуются возможности использования неунитарных представлений группы O(2,1) для расчёта связанных состояний в потенциале типа (1). Каждому неприводимому унитарному представлению дискретной серии с целочисленным значением 2ℓ ставится в соответствие конечномерное неунитарное представление. Задача в этом случае легко решается, а из-за того, что формулы (3) сохраняют свой вид, полученная информация может быть использована для определения зависимости от квантовых чисел энергии связанных состояний.

2. Алгебраическое рассмотрение модели с модифицированным кулоновским потенциалом

Перейдём от радиального уравнения Шредингера с потенциалом $V(r)$,

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{2r^2}+V(r)-E\right)P(r)=0, \qquad (5)$$

посредством замены функции $P(r)\to y(r)=r^{-\frac{1}{2}}P(r)$ и независимой переменной $r\to x=2ar$ к эквивалентному уравнению

$$\left[a\left(-\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx}+\frac{s^2}{4x}\right)+\frac{x}{2a}\left(V\left(\frac{x}{2a}\right)-E\right)\right]y(x)=0, \qquad (6)$$

где $s=2l+1$, $a\neq 0$ – произвольный параметр.

Введём далее самосопряжённые операторы

$$\left.\begin{aligned} T_1&=-\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx}+\frac{s^2}{4x}-\frac{x}{4},\\ T_2&=\frac{i}{2}\left(x\frac{d}{dx}+\frac{d}{dx}x\right),\\ T_3&=-\frac{d}{dx}x\frac{d}{dx}+\frac{s^2}{4x}+\frac{x}{4},\end{aligned}\right\} \qquad (7)$$

удовлетворяющие коммутационным соотношениям[I)] /I2/:

I) Операторы T_1 и T_3, имеющие соответственно чисто сплошной и чисто дискретный спектры собственных значений, были рассмотрены В.А.Фоком в связи с задачей об атоме водорода /I4/. Они тесно связаны с так называемой "штурмовской" задачей на собственные значения заряда ядра Z /I5/:

$$S\varphi_m(r)=\frac{Z_m}{r}\varphi_m(r),$$

где

$$S=-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2}+\frac{l(l+1)}{2r^2}-E_0$$

$$[T_1, T_2] = iT_3, \ [T_2, T_3] = -iT_1, \ [T_3, T_1] = -iT_2. \quad (8)$$

Имеем также: $x = 2(T_3 - T_1)$.

Операторы T_i (i = I,2,3) являются образующими алгебры Ли некомпактной группы O(2,I) и при фиксированном s реализуют неприводимое представление алгебры o(2,I) с оператором Казимира

$$Q = -T_1^2 - T_2^2 + T_3^2 = \frac{s^2-1}{4}. \quad (9)$$

Собственные функции y_m ($m = \ell + 1, \ell + 2, \ldots$) оператора T_3 образуют базис гильбертова пространства такого представления[I)]. Матрицы операторов T_i (i = I,2,3) в этом базисе имеют простой вид, который даётся соотношениями:

$$\left.\begin{aligned} (T_1 \pm iT_2)\, y_m &= (c_{m\ell}^{\pm})^{1/2}\, y_{m\pm 1}, \\ T_3\, y_m &= m\, y_m, \end{aligned}\right\} \quad (10)$$

где $c_{m\ell}^{\pm} = (m - \ell - \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})(m + \ell + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2})$.

Для вывода (I0) достаточно знать только коммутационные соотношения (8) и формулу для оператора Казимира (9).

Записывая гамильтониан в уравнении (6) через операторы T_1, T_3, получим:

$$\left[\frac{a}{2}(T_3 + T_1) + \frac{T_3 - T_1}{a}\left(V\left(\frac{T_3 - T_1}{a}\right) - E\right)\right] y = 0. \quad (11)$$

Унитарное преобразование операторов T_1 и T_3,

– "штурмовский" оператор кулоновской задачи. Полагая $x = \sqrt{8|E_0|}\, r$, имеем:

$$(2|E_0|)^{-1/2} r^{\frac{1}{2}} S r^{\frac{1}{2}} = \begin{cases} T_1 & \text{при } E_0 > 0 \\ T_3 & \text{при } E_0 < 0. \end{cases}$$

I) Функции $y_m(x)$ связаны со "штурмовскими" функциями кулоновской задачи $\varphi_m(x)$ соотношениями $y_m(x) = N(m)\, r^{-1/2} \varphi_m(x)$, где $N(m)$ – нормировочный множитель.

$$\tilde{T}_1 = e^{-i\theta T_2} T_1 e^{i\theta T_2} = ch\theta\, T_1 + sh\theta\, T_3 ,$$
$$\tilde{T}_3 = e^{-i\theta T_2} T_3 e^{i\theta T_2} = sh\theta\, T_1 + ch\theta\, T_3 ,$$

осуществляющее гиперболическое вращение (тильт) в плоскости (I,3), соответствует переходу к уравнению (II) с новым параметром $\tilde{a} = e^{\theta} a$.

Выбирая значение $a = \sqrt{-2E_0} = 1/n$, получаем уравнение с возмущённым оператором T_3:

$$(T_3 - n) y = W y, \tag{I2}$$

где $W = n^2 (T_3 - T_1)[\delta E - \delta V(n(T_3 - T_1))]$,

$$\delta E = E - E_0 ,\ \delta V = V - V_0 ,\ V_0(r) = -1/r .$$

Для нахождения ешения (I2) методом ТВ обычно разлагают возмущение W и волновую функцию y в ряд по λ:

$$W = \sum_{N=1}^{\infty} W^{(N)} \lambda^N , \qquad y = \sum_{N=1}^{\infty} Y^{(N)} \lambda^{(N)} ,$$

подставляют эти разложения в (I2), приравнивают нулю коэффициенты при одинаковых степенях λ и получают в каждом порядке по λ неоднородное уравнение для определения $Y^{(N)}$:

$$(m - n) Y_m^{(N)} = \sum_{N'=1}^{N} \sum_{k=\ell+1}^{\infty} W_{mk}^{(N')} Y_k^{(N-N')} . \tag{I3}$$

Здесь $Y_m^{(N)}$ - компоненты разложения $Y^{(N)}$ по базисным функциям y_m, $\| W_{mk}^{(N')} \|$ - матрица оператора $W^{(N')}$ в базисе $\{ y_m \}$. Функции y обычно нормируют так, чтобы $Y_m^{(0)} = \delta_{mn}$, $Y_n^{(N)} = \delta_{N0}$.

Для определения поправок к энергии E_N используется уравнение, вытекающее из (I3) при $m = n$:

$$\sum_{N'=1}^{N-1} \sum_{k=\ell+1}^{\infty} W_{nk}^{(N')} Y_k^{(N-N')} + W_{nn}^{(N)} = 0 . \tag{I4}$$

Уравнение (I4) является линейным относительно неизвестной E_N, входящей в последнее слагаемое:

$$W^{(N)}_{nn} = n^2 (T_3 - T_1)_{nn} E_N + n^{N+1} f_N \left[(T_3 - T_1)^N \right]_{nn},$$

где f_N - коэффициент разложения (Iа).

Таким образом, E_N может быть выражено через коэффициенты меньшего порядка и через матричные элементы от произведений нескольких операторов T_3 и T_1.

В частном случае потенциала $V(r) = -e^{-\lambda r}/r$ этим методом получены коэффициенты разложения энергии произвольного состояния по степеням λ вплоть до λ^{13} /7/.

3. Решение задачи для конечномерных неунитарных представлений

Опишем простую процедуру практического вычисления величин $E_N(n,\ell)$ для отдельных "нефизических" значений n, ℓ, основанную на рассмотрении конечномерных неунитарных представлений группы $SU(I,I)$.

Рассмотрим 3 оператора:

$$T_1' = i L_1, \quad T_2' = i L_2, \quad T_3' = L_3, \tag{I5}$$

где L_i ($i = I,2,3$) - самосопряжённые операторы, удовлетворяющие соотношениям:

$$[L_1, L_2] = -i L_3, \; [L_2, L_3] = -i L_1, \; [L_3, L_1] = -i L_2,$$

$$Q' = L_1^2 + L_2^2 + L_3^2 = (s^2 - 1)/4, \quad s = 1, 2, 3, \ldots$$

Следовательно, L_i, конкретный вид которых для нас не существенен, реализуют неприводимое s-мерное представление алгебры Ли группы $SU(2)$, изоморфной группе трёхмерных вращений. Совокупность таких представлений может рассматриваться как "ответвление" /I6/ дискретной серии неприводимых представлений некомпактной алгебры $su(I,I)$. Операторы T_i' в этом случае являются образующими некоторой подалгебры комплексного расширения алгебры $su(1,1)$ и удовлетворяют тем же коммутационным соотношениям (8), что и T_i, причём $Q = Q'$. Таким образом, T_i' представляют собой базисные элементы неприводимого конечномерного представления алгебры $su(1,1)$ несамосопряжёнными операторами.

Собственные векторы y_m оператора T_3', отвечающие собственным значениям $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$, где $\ell = (s-1)/2$, образуют базис этого представления, причём действие операторов T_i' на базисные элементы описывается по-прежнему формулами (10) (в этом случае под $(c^{\pm}_{m\ell})^{1/2}$ подразумевается $i\sqrt{-c^{\pm}_{m\ell}}$).

Рассмотрим теперь уравнение (11), в которое вместо T_3 и T_1 подставлены операторы T_3' и T_1'.

При выводе формул (3) для коэффициентов E_k использовались только соотношения (10), (12), (13), (14). Так как эти соотношения верны как в случае унитарного представления (7), так и в случае представления (15), то зависимость коэффициентов ряда (2) от n, ℓ также принимает один и тот же вид в обоих случаях. Однако теперь решение задачи значительно упрощается, так как уравнение (11) эквивалентно системе линейных алгебраических уравнений для компонент s-мерного вектора y в пространстве неприводимого представления алгебры $su(2)$:

$$R(E,\lambda)\, y = 0, \tag{16}$$

где

$$R(E,\lambda) = \frac{a}{2} L_+ - f\left(\frac{\lambda}{a} L_-\right) - \frac{E}{a} L_- \tag{16a}$$

- линейный оператор, который может быть задан s-мерной матрицей, $L_\pm = L_3 \pm i L_1$.

Поскольку для s-мерного неприводимого представления группы $SU(2)$ $L_-^k = 0$ при $k \geqslant s$, то

$$f(\lambda L_-) = \sum_{k=0}^{s-1} f_k \lambda^k L_-^k, \tag{17}$$

и $R(E,\lambda)$ зависит только от s первых коэффициентов разложения функции f.

В качестве базиса удобно выбрать набор ненормированных собственных векторов оператора L_2:

$$\tilde{y}_k = \left(\frac{L_-}{a}\right)^k \tilde{y}_0, \qquad k = 0, 1, \ldots, s-1, \tag{18}$$

где $\tilde{y}_0$ - собственный вектор, отвечающий минимальному собственному значению $-\ell$. В базисе (18) матрица $R(E,\lambda)$ имеет особенно простой вид. $E(\lambda)$ находятся из условия равенства нулю определителя матрицы $R(E,\lambda)$:

$$\begin{vmatrix} -1 & \frac{1\cdot(s-1)}{2} & 0 & \cdots & 0 \\ -\lambda f_1 - E & -1 & \frac{2\cdot(s-2)}{2} & \cdots & 0 \\ -\lambda^2 f_2 & -\lambda f_1 - E & -1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \cdot & \vdots \\ & & & & \frac{(s-1)\cdot 1}{2} \\ -\lambda^{s-1} f_{s-1} & -\lambda^{s-2} f_{s-2} & \cdots & -\lambda f_1 - E & -1 \end{vmatrix} = 0. \tag{19}$$

Определитель в левой части уравнения (19) является многочленом от E и λ. Решения (19) относительно E - это ветви многозначной алгебраической функции от λ. В частности, для чисто кулоновского потенциала E принимает значения $E_0(n,\ell) = -1/(2n^2)$, где $n = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell-1, \ell$; $n \neq 0$. Очевидно, что n здесь играет роль главного квантового числа.

Обозначим через $E(n,\ell;\lambda)$ то решение уравнения (19), которое переходит в $E_0(n,\ell)$ при $\lambda \to 0$ [1]. Определённые таким образом функции $E(n,\ell;\lambda)$ представляют собой по существу уровни энергии для "нефизических" значений квантовых чисел, генерирующие коэффициенты разложения (2) для $|n| < \ell$.

---

[1] Для больших по модулю значений λ такая классификация решений может быть неоднозначной из-за наличия точек ветвления. Однако она всегда однозначна в любой односвязной области изменения λ на комплексной плоскости, содержащей начало координат и не содержащей точек ветвления.

Отметим, что из-за наличия у функции $E(n,\ell;\lambda)$ лишь конечного числа особенностей (точек ветвления) ряд ТВ (2) имеет всегда отличный от нуля радиус сходимости (равный расстоянию от начала координат до ближайшей особенности), в то время как для физических значений $n>\ell$ ряд ТВ, как правило, расходится при любом λ.

Выпишем для примера выражения для $E(n,\ell;\lambda)$ при $s = 2, 3, 4, 5$:

$$E\left(\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2};\lambda\right) = -2 - f_1\lambda,$$

$$E(1,1;\lambda) = -\tfrac{1}{2} - f_1\lambda - \tfrac{1}{2}f_2\lambda^2,$$

$$E\left(1\pm\tfrac{1}{2},\tfrac{3}{2};\lambda\right) = \tfrac{2}{9}\left(-5\pm\sqrt{16-54f_2\lambda^2-\tfrac{81}{2}f_3\lambda^3}\right) - f_1\lambda,$$

$$E\left(\tfrac{3}{2}\pm\tfrac{1}{2},2;\lambda\right) = \Big(-5-12f_2\lambda^2\pm$$

$$\pm 3\sqrt{1-24f_2\lambda^2-64f_3\lambda^3+16f_2^2\lambda^4-64f_4\lambda^4}\Big)/16 - f_1\lambda.$$

Путём разложения приведённых выше функций в ряд по степеням λ можно получить общие формулы для $E_N(n,\ell)$ типа (4).

Решения (19) при произвольном s можно отыскать в виде разложений по степеням λ с точностью до любого числа членов. Задача в этом случае более простая, чем нахождение $E(n,\ell;\lambda)$ методом ТВ в общем случае, так как требуется использовать только конечное число базисных функций.

Опишем возможный алгоритм получения решений (19) в виде степенного ряда.

Вычисляя определитель, найдём сначала многочлен

$$P(\delta E,\lambda) = \det R(E_0+\delta E,\lambda).$$

Многочлен P удобно представить в следующей форме:

$$P(\delta E,\lambda) = P_0(\lambda) + P_1(\lambda)\,\delta E + P_2(\lambda)(\delta E)^2 + \ldots + P_t(\delta E)^t. \quad (20)$$

Здесь t - степень многочлена $P(\delta E,\lambda)$ по переменной δE, совпадающая с числом решений (I9); $P_i(\lambda)$ ($i = 0,1,\ldots,t-1$) - многочлены от λ, $P_t \neq 0$ - некоторая константа.

Исходя из (I9), можно показать, что t равно целой части числа $s/2$, а степень многочлена $P_i(\lambda)$ равна $s - 2i - 1$.

Мы будем искать в виде степенного ряда по λ то решение уравнения

$$P(\delta E,\lambda)=0 \qquad (21)$$

относительно δE, которое обращается в нуль при $\lambda \to 0$, т.е. в нулевом порядке по λ полагаем $\delta E^{(0)} = 0$. Чтобы отыскать следующие поправки по степеням λ, воспользуемся формулой, вытекающей из (2I) с учётом (20):

$$\delta E = -\left[P_0(\lambda) + P_2(\lambda)(\delta E)^2 + P_3(\lambda)(\delta E)^3 + \ldots + P_t(\delta E)^t\right]/P_1(\lambda). \qquad (22)$$

Если известно k членов разложения δE по степеням λ, то в силу $\delta E \sim \lambda$ величину $(\delta E)^p$ при $p \geq 2$ можно вычислить по крайней мере с точностью до $k+1$ членов по λ. Следовательно, уравнение (22) можно решать методом итераций, выполняя операции над степенными рядами с точностью до λ^k на k-ом шаге.

4. Решение задачи при $|m| < \ell$ в координатном представлении

В предыдущем разделе мы рассмотрели модельное уравнение в конечномерном векторном пространстве, собственные значения которого имеют ту же зависимость от m, ℓ, что и решения исходного уравнения (5). Покажем теперь, что такой же набор новых собственных значений можно получить, решая непосредственно дифференциальное уравнение (5) в координатном представлении, но с другим граничным условием при $r = 0$.

При исследовании уравнения (5) для радиальной функции $P(r) = r R(r)$ решение при малых r, как известно /I4/, ищется в виде

$$R(r) = r^{\alpha} + C r^{\alpha+1} + \ldots \qquad (23)$$

Подставляя (23) в (5) и приравнивая нулю коэффициент при наинизшей степени r, находят: $\alpha = \ell$ или $\alpha = -\ell - 1$. Чтобы получить решение, которое остаётся конечным при $r = 0$, выбирают $\alpha = l$. Решение уравнения (6) при этом ищется среди функций $y(x)$, для которых $y(x) = O(x^{1/2})$ при $x \to 0$ и $\int |y^2(x)|/x \, dx$ сходится. Множество таких функций со скалярным произведением

$$(y_1, y_2) = \int_0^\infty \frac{y_1^*(x)\, y_2(x)}{x^2}\, dx$$

образует гильбертово пространство, в котором действуют самосопряжённые дифференциальные операторы T_i $(i = 1,2,3)$, реализующие представление алгебры $o(2,1)$. Для таких операторов решения уравнения (II) соответствуют "физическим" значениям $n = l + 1,\ l + 2, \ldots$

Рассмотрим теперь нерегулярные решения (5), отвечающие $\alpha = -l - 1$, для которых $y(x) = O(x^{-s/2})$ при $x \to 0$.

Будем искать решения уравнения (6) в линейном пространстве $\mathcal{L}$ формальных степенных рядов вида

$$x^{-s/2} \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i . \tag{24}$$

Обозначим также соответственно через $\mathcal{L}^{(o)}$ и $\mathcal{L}^{(+)}$ пространства рядов вида

$$x^{-s/2} \sum_{i=0}^{s-1} c_i x^i \qquad \text{и} \qquad x^{s/2} \sum_{i=0}^{\infty} c_i x^i .$$

Очевидно, что $\mathcal{L}$ является прямой суммой $\mathcal{L}^{(o)}$ и $\mathcal{L}^{(+)}$. Пространства $\mathcal{L}$ и $\mathcal{L}^{(+)}$ замкнуты относительно действия операторов T_i $(i = 1,2,3)$, но $\mathcal{L}^{(o)}$ – не замкнуто относительно действия T_1 и T_3.

Введём в пространстве $\mathcal{L}$ скалярное произведение по формуле:

$$(y_1, y_2) = \sum_{i=0}^{s-1} \frac{2^{2i}\, i!}{(s-i-1)!}\, c_{1i}^*\, c_{2i} , \tag{25}$$

где $y_{1(2)} = x^{-s/2} \sum_{i=0}^{\infty} c_{1(2)i}\, x^i$ – два произвольных элемента из $\mathcal{L}$.

Выберем в качестве ортонормированного базиса $\mathcal{L}^{(o)}$ набор одночленов

$$y_m^{(0)} = 2^{-\ell-m}\sqrt{\frac{(\ell-m)!}{(\ell+m)!}}\; x^{m-\frac{1}{2}}, \qquad (26)$$

являющихся собственными функциями оператора T_2/i, отвечающими различным собственным значениям $m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$. В базисе (26) матрица оператора T_2 является диагональной и чисто мнимой, а матрицы операторов T_3 и T_1 являются вещественными и соответственно симметричной и антисимметричной.

Следовательно, в заданном по-новому гильбертовом пространстве[1)] дифференциальные операторы T_1 и T_2 антиэрмитовы, а оператор T_3 остаётся эрмитовым. Операторы $L_1 = T_1/i$, $L_2 = T_2/i$ и $L_3 = T_3$, действующие в этом пространстве, реализуют представление алгебры o(3) самосопряжёнными операторами. Как показано в предыдущем разделе, в этом случае решения (II) соответствуют "нефизическим" значениям $|m| \leq \ell$.

Отметим также, что оператор рождения $L_- = L_3 - iL_1$ совпадает с $x/2$, а ненормированный базис (I8) является множеством одночленов вида $(x/2a)^{m-1/2}$.

5. Заключение

В настоящей работе предложен возможный метод расчёта в рамках ТВ энергии связанных состояний для широкого класса сферически-симметричных потенциалов.

В общем случае получение поправок ТВ сводится к рекуррентной процедуре, причём для нахождения $E_N(n,\ell)$ требуется выполнить конечное число арифметических операций над исходными величинами: $f_1, f_2, \ldots, f_N, n, \ell$ (от операции извлечения квадратного корня, встречающейся в формуле (I0),

---

1) Пространство $\mathcal{L}$ со скалярным произведением (25) не удовлетворяет одной из аксиом гильбертова пространства, согласно которой $(y,y) = 0$ влечёт $y = 0$, поскольку $(y, y^{(+)}) = 0$ для любого y из $\mathcal{L}$ и любого $y^{(+)}$ из $\mathcal{L}^{(+)}$. Объект с такими свойствами становится конечномерным гильбертовым пространством, изоморфным $\mathcal{L}^{(0)}$, после факторизации по подпространству $\mathcal{L}^{(+)}$. Произвольный элемент $\mathcal{L}/\mathcal{L}^{(+)}$ представляет собой класс элементов из $\mathcal{L}$, различающихся между собой на элементы из $\mathcal{L}^{(+)}$.

можно избавиться подходящей нормировкой базисных функций). Определение $E_N(n,\ell)$ можно таким образом обобщить в принципе на произвольные комплексные значения n, ℓ.

Мы заметили, что для n, ℓ, удовлетворяющих условиям: $2\ell = 1, 2, 3, \ldots$, $n = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$, $n \neq 0$, процедура вычисления $E_N(n,\ell)$ значительно упрощается, поскольку в этом случае разложение по базисным функциям обрывается на конечном числе слагаемых, не зависящем от N. Это обстоятельство с учётом того, что $E_N(n,\ell)$ представляет собой многочлен от n, ℓ, предлагается использовать для нахождения значений многочленов $E_N(n,\ell)$ в "нефизической" области квантовых чисел и последующей экстраполяции в "физическую" область. Таким образом, на практике рассмотренные в работе решения могут быть применены для определения зависимости от квантовых чисел поправок к энергии.

С математической точки зрения состояния, соответствующие решениям задачи ТВ при $|n| \leq \ell$, возникают при рассмотрении конечномерных неунитарных представлений группы O(2,1), являющейся динамической группой симметрии невозмущённой задачи. Такие состояния не могут быть интерпретированы физически, так как для них волновая функция неограниченно возрастает при $r = 0$.

Подход, использованный в настоящей работе, может быть обобщён на другие гамильтонианы, динамической группой которых является некоторая некомпактная группа, с возмущением, которое полиномиально зависит от генераторов группы. Случаи эффекта Штарка в атоме водорода и сферически-симметричного ангармонического осциллятора кратко рассмотрены в приложении.

Приложение.

Использование неунитарных представлений группы O(2,1) в случаях эффекта Штарка и ангармонического осциллятора

В случае эффекта Штарка в атоме водорода уравнение Шредингера с потенциалом $-1/r + \mathcal{E} z$ после разделения переменных в параболических координатах сводится к системе двух уравнений для функций F, G /17/:

$$\left\{\begin{aligned} &\left[T_3 - \frac{\mathcal{E}}{\varkappa^3}(T_3 - T_1)^2 - \lambda_1\right]F = 0, \\ &\left[T_3 + \frac{\mathcal{E}}{\varkappa^3}(T_3 - T_1)^2 - \lambda_2\right]G = 0. \end{aligned}\right. \tag{П1}$$

Переменные λ_1, λ_2, $\varkappa$ связаны с энергией E соотношениями:

$$\lambda_1 + \lambda_2 = 1/\varkappa, \qquad E = -\varkappa^2/2. \tag{П2}$$

Операторы T_1, T_3 определяются по формулам (7) с $s = |m|$, где m - магнитное квантовое число.

Ряд ТВ для энергии имеет вид:

$$E(n_1, n_2, m; \mathcal{E}) = -\frac{1}{2(n_1+n_2)^2} + \sum_{N=1}^{\infty} E_N(n_1, n_2, m)\,\mathcal{E}^N.$$

Здесь n_1, n_2 - собственные значения оператора T_3, в которые переходят параметры λ_1, λ_2 при $\mathcal{E} \to 0$; $n_{1,2} = (|m| + 1)/2 + p_{1,2}$, где $p_{1,2} = 0, 1, 2, \ldots$ - параболические квантовые числа. Поправки к энергии E_N представляют собой многочлены от переменных n_1, n_2, m^2 /17/:

$$E_1(n_1, n_2, m) = \frac{3}{2}(n_1^2 - n_2^2), \tag{П3а}$$

$$E_2(n_1, n_2, m) = \frac{(n_1+n_2)^4}{16}\left[-14(n_1^2+n_2^2) - 40n_1n_2 + 9m^2 - 19\right], \tag{П3б}$$

$$E_3(n_1, n_2, m) = \frac{3}{32}(n_1+n_2)^6(n_1^2 - n_2^2)\cdot$$
$$\cdot\left[22(n_1^2+n_2^2) + 48n_1n_2 + 11m^2 + 39\right], \ldots \tag{П3в}$$

Формулы для E_N типа (П3) при всех $N \leq 9$ приведены в работе /18/.

При замене в (П1) операторов T_1 и T_3 на T_1' и T_3' получаем систему уравнений для s-мерных векторов F, G:

$$\left\{\begin{aligned} &\left(L_3 - \frac{\mathcal{E}}{\varkappa^3}L_-^2 - \lambda_1\right)F = 0, \\ &\left(L_3 + \frac{\mathcal{E}}{\varkappa^3}L_-^2 - \lambda_2\right)G = 0. \end{aligned}\right. \tag{П4}$$

Уравнения (П4) совместно с (П2) позволяют вычислить функции $E(n_1, n_2, m; \mathcal{E})$, которые генерируют при разложении по λ поправки к энергии (П3) при "нефизических" значениях $n_{1,2} = -(S - 1)/2 + p_{1,2}$, $(n_1 + n_2) \neq 0$, $m = S$, где $p_{1,2} = 0, 1, \ldots, S - 1$.

Для $S = 2$ получаем: $E(\pm 1/2, \pm 1/2, 2; \mathcal{E}) = -1/2$,

откуда следует, что для всех N

$$E_N(1/2, 1/2, 2) = 0. \qquad (П5)$$

Соотношение (П5) удобно использовать для проверки формул типа (П3) при чётных N (для нечётных N равенство (П5) вытекает из тривиального соотношения $E(n_1, n_2, m; -\mathcal{E}) = E(n_2, n_1, m; \mathcal{E})$). Например, вычисляя E_N при указанных в (П5) значениях квантовых чисел по формуле из работы /19/ (приведённой также в /17/), получаем $E_4 = -13455/32 \neq 0$, откуда можно заключить, что эта формула ошибочна (источник ошибки найден в /17/).

Для $S = 3$ значения $E(\pm 1, 0, 3; \mathcal{E})$, $E(0, \pm 1, 3; \mathcal{E})$ и $E(\pm 1, \pm 1, 3, \mathcal{E})$ находятся путём решения кубического уравнения

$$E^3 + \frac{9}{8} E^2 + \frac{3}{8} E + \frac{1 + 27\mathcal{E}^2}{32} = 0.$$

Для произвольного целого $S > 1$ уравнение для определения всевозможных значений E при "нефизических" n_1, n_2, m сводится к алгебраическому уравнению степени $S(S - 1)/2$.

Уравнение Шредингера для D-мерного сферически-симметричного ангармонического осциллятора после отделения угловых переменных сводится к радиальному уравнению /10/

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{dr^2} + \frac{r^2}{2} + \frac{K}{2r^2} + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i f_i r^{2i+2} - E\right) P(r) = 0, \qquad (П6)$$

где $K = S^2 - 1/4$, $S = (D' - 2)/2$, $D' = D + 2\ell$, $\ell = 0, 1, 2, \ldots$ – степень сферической гармоники.

Введём самосопряжённые операторы:

$$J_1 = \frac{1}{4}\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{K}{r^2} - r^2\right),$$

$$J_2 = \frac{i}{4}\left(r\frac{d}{dr} + \frac{d}{dr}r\right),$$

$$J_3 = \frac{1}{4}\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{K}{r^2} + r^2\right),$$

связанные с определёнными по формулам (7) операторами T_i соотношениями:

$$J_i(r) = r^{\frac{1}{2}}\, T_i(r^2)\, r^{-\frac{1}{2}}, \qquad i = 1,2,3,$$

где под $T_i(r^2)$ понимаются операторы (7) с заменой $x \to r^2$, $d/dx \to (2r)^{-1} d/dr$.

Операторы J_i удовлетворяют тем же соотношениям (8), (9), что и T_i, и являются образующими алгебры $o(2,1)$. Собственные функции оператора J_3, отвечающие собственным значениям $(s + 1)/2 + p$, $p = 0,1,2,\ldots$, являются решениями невозмущённого уравнения Шредингера (П6) и образуют базис неприводимого представления алгебры $o(2,1)$ [1)] /10/.

Запишем (П6) через операторы J_i:

$$\left[2J_3 + 2\sum_{i=1}^{\infty}(2\lambda)^i f_i\,(J_3 - J_1)^{i+1} - E\right]P = 0. \qquad \text{(П7)}$$

Ряд ТВ для энергии имеет вид:

$$E(n, D'; \lambda) = 2n + \sum_{N=1}^{\infty} E_N(n, D')\,\lambda^N .$$

Здесь n - то собственное значение J_3, в которое переходит величина $E/2$ при $\lambda \to 0$. E_N представляют собой многочлены от переменных n и s^2. В частности, для основного состояния ($\ell = p = 0$, $n = D/4$) и возмущения λr^4 поправки к энергии как функции от D были получены вплоть до $N = 15$ /20/:

$$E_1(D/4, D) = \frac{1}{4} D(D+2),$$

---

1) В одномерном случае ($D = 1$) базис другого неприводимого представления образуют нечётные решения невозмущённого уравнения (П6), отвечающие собственным значениям $(-s + 1)/2 + p$ оператора J_3.

$$E_2(\mathcal{D}/4,\mathcal{D}) = -\frac{1}{8}\mathcal{D}(\mathcal{D}+2)(2\mathcal{D}+5),$$

$$E_3(\mathcal{D}/4,\mathcal{D}) = \frac{1}{16}\mathcal{D}(\mathcal{D}+2)(8\mathcal{D}^2+43\mathcal{D}+60),\ldots \qquad (\text{П8})$$

При замене $J_i \to T_i'$ в уравнении (П7) получаем линейное алгебраическое уравнение для s-мерного вектора P (в данном случае s = I,2,3,...):

$$\left(2L_3 + 2\sum_{i=1}^{\infty}(2\lambda)^i f_i L_-^{i+1} - E\right)P = 0. \qquad (\text{П9})$$

Собственные числа E уравнения (П9) генерируют при разложении по λ значения многочленов $E_N(n,\mathcal{D}')$ при "нефизических" числах $\mathcal{D}' = 2 \pm 2s$, $n = -(s+\text{I})/2 + p$, где $p = 0,\text{I},\ldots,s-\text{I}$.

Для s = I и s = 2 получаем:

$$E(0,0;\lambda) = E(0,4;\lambda) = 0,$$

$$E(\pm 1/2,-2;\lambda) = E(\pm 1/2,6;\lambda) = \pm 1,$$

откуда, в частности, следует, что для основного состояния все поправки к энергии обращаются в нуль при $\mathcal{D} = 0$ и $\mathcal{D} = -2$. Таким образом, мы доказали, что все многочлены (П8) делятся на $\mathcal{D}(\mathcal{D}+2)$. Ранее /20/ это свойство многочленов (П8) принималось на основании вычислений, но без доказательства.

Для $s = 3$ ($\mathcal{D}' = -4$ или $\mathcal{D}' = 8$) значения $E(n,\mathcal{D}';\lambda)$ при $n = 0, \pm\text{I}$ находятся путём решения кубического уравнения:

$$E^3 - 4E - 16\lambda f_1 = 0.$$

В общем случае "нефизические" значения E находятся из условия равенства нулю определителя:

$$\begin{vmatrix} -E & 1\cdot(s-1) & 0 & \cdots & 0 \\ 1 & -E & 2\cdot(s-2) & \cdots & 0 \\ 2^2\lambda f_1 & 1 & -E & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & (s-1)\cdot 1 \\ 2^{s-1}\lambda^{s-1} f_{s-2} & 2^{s-2}\lambda^{s-3} f_{s-3} & \cdots & 1 & -E \end{vmatrix} = 0.$$

Литература

1. M.Grant, C.S.Lai. Phys. Rev., A, 20, 718 (1979).
2. C.S.Lai. Phys. Rev., A, 23, 455 (1981).
3. В.М.Вайнберг, В.Л.Елецкий, В.С.Попов. ЖЭТФ, 81, 1567 (1981).
4. С.П.Аллилуев, В.М.Вайнберг, В.С.Попов. ДАН СССР, 265, 567 (1982).
5. V.Privman. Phys. Lett., A, 81, 326 (1981).
6. А.И.Шерстюк, А.М.Школьник. Изв. АН СССР, сер.физ., 41, 2648 (1977).
7. А.В.Сергеев, А.И.Шерстюк. ЖЭТФ, 82, 1070 (1982).
8. M.Bednar. Ann. Phys., 75, 305 (1973).
9. A.Bechler. Ann. Phys., 108, 49 (1977).
10. H.Bacry, J.L.Richard. J. Math. Phys., 8, 2230 (1967).
11. J.Lanik. Czechoslovak Journal of Physics, B,19,1540(1969).
12. П.П.Павинский, А.И.Шерстюк. Вестник ЛГУ, № 22, 11 (1968).
13. В.Ф.Дмитриев, Ю.Б.Румер. ТМФ, 5, 276 (1970).
14. В.А.Фок. Начала квантовой механики. "Наука", М., 1976, гл. 4 - 5.
15. M.Rotenberg. Advances in atomic and molecular physics, 6 (1970).
16. А.Барут, Р.Рончка. Теория представлений групп и её приложения. "Мир", М., 1980, т.1, с.438.
17. С.П.Аллилуев, А.И.Малкин. ЖЭТФ, 66, 1283 (1974).
18. N.Hoe, B.D'Etat, G.Coulaud. Phys. Lett., A, 85, 327(1981).
19. K.Basu. Bulletin of the Calcutta Mathematical Society, 26, 78 (1934).
20. A.D.Dolgov, V.S.Popov. Phys. Lett., B, 86, 185 (1979).