Р11-2002-253

Е. П. Жидков, А. В. Зорин*, К. П. Ловецкий*,
Н. П. Третьяков*

МАТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ С НЕОТРИЦАТЕЛЬНОЙ **КФР** НА ПРИМЕРЕ ВОДОРОДОПОДОБНОГО АТОМА

*Российский университет дружбы народов, Москва;
E-mail address: ntretiakov@sci.pfu.edu.ru

1 Введение

В квантовой механике состояние физической системы описывается оператором «матрица плотности» $\hat{\rho}$, который задается представлением

$$< q|\hat{\rho}|q' >= \sum_a W_a(t)\Psi_a^*(q,t)\Psi_a(q',t), \qquad (1)$$

где $W_a(t) > 0$ означает статистический вклад волновой функции $\Psi_a(q,t)$ (t — время, $q = (q_1, \cdots, q_N)$— координаты системы).

Согласно основному постулату квантовой механики, матрица плотности полностью определяет все свойства физической системы. Другими словами, среднее $< A >$ любой физической величины A, которую можно измерить экспериментально, вычисляется с помощью матрицы плотности

$$< A >= \mathrm{Sp}\{\hat{\rho}\hat{A}\} = \sum_a W_a(t) < A >_a,$$

где

$$< A >_a= \int \Psi_a^*(q,t)\hat{A}\Psi_a(q,t)\mathrm{d}q,$$

$\hat{A}$ — оператор, соответствующий величине A в квантовой механике.

С другой стороны, статистическая интерпретация квантовой механики и существование предельного перехода ее в классическую статистическую механику (см. [1–4]) рождает надежду заменить матрицу плотности $\hat{\rho}$ такой функцией распределения плотности вероятности F в фазовом (координатно-импульсном) пространстве, что будет справедливо соотношение

$$< A >= \int A(q,p,t)F(q,p,t)\mathrm{d}q\mathrm{d}p.$$

Здесь $p = (p_1, \cdots, p_N)$ означает импульсы системы, а $A(q,p,t)$ — функция координат, импульса и времени, описывающая величину A в классической механике. Функцию F было предложено называть квантовой функцией распределения.

Согласно исследованиям многих авторов (см. [4–8]) , существование и общий вид квантовой функции распределения F зависит от правила соответствия между классической функцией $A(q,p,t)$ и соответствующим квантово–механическим оператором $\hat{A}$. Вместе с тем квантовые функции распределения (КФР), соответствующие всем известным правилам соответствия, оказываются либо знакопеременными, либо комплекснозначными. Единственная положительно определенная КФР [9] приводила к расхождению с экспериментальными данными. В конце концов была доказана

[1]Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант №01–01–00726.

невозможность введения неотрицательной КФР в общепринятой квантовой механике (см. [10–11]). Но из этого доказательства следовала возможность создания новой квантовой механики, допускающей неотрицательную КФР, и эта возможность была реализована в работах В. В. Курышкина [12–14].

2 Правило соответствия

Пусть $\varphi_k(q,t)$ — набор функций координат и времени, нормированных условием

$$\sum_k \int |\varphi_k(q,t)|^2 \mathrm{d}q = 1.$$

Из них и из их преобразований Фурье

$$\tilde{\varphi}_k(p,t) = (2\pi\hbar)^{-N/2} \int \varphi_k(q,t) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(q,p)} \mathrm{d}q,$$

где $(q,p) = \sum_{j=1}^{N} q_j p_j$ и $\hbar$ — постоянная Планка, конструируем вспомогательную функцию

$$\Phi(q,p,t) = (2\pi\hbar)^{-N/2} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(q,p)} \sum_k \varphi_k(q,t) \tilde{\varphi}_k^*(p,t). \tag{2}$$

С помощью этой функции поставим в соответствие каждой функции $A(q,p,t)$ (каждой наблюдаемой) физической системы оператор $O(A)$, действие которого на волновую функцию $\Psi(q,t)$ задается соотношением

$$\begin{aligned}(O(A)\Psi)(q,t) \stackrel{\text{def}}{=} (2\pi\hbar)^{-N} \int \Phi(\xi,\eta,t)\cdot \\ \cdot A(q+\xi,p+\eta,t) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}((q-q'),p)} \Psi(q',t) \mathrm{d}q' \mathrm{d}p \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta. \end{aligned} \tag{3}$$

Свойства интегральных операторов, определенных таким образом, подробно изучены в работах [14–16].

Квантово–механическое среднее значение физической величины A в чистом состоянии, описываемом волновой функцией $\Psi(q,t)$, дается выражением

$$<A>_\Psi = \int \Psi^*(q,t) O(A) \Psi(q,t) \mathrm{d}q.$$

Соответствующее статистическое среднее задается неотрицательной КФР Курышкина $F(q,p,t)$

$$<A>_\Psi = \int A(q,p,t) F_\Psi(q,p,t) \mathrm{d}q \mathrm{d}p,$$

где

$$F_\Psi(q,p,t) = (2\pi\hbar)^{-N} \sum_k \left| \int \varphi_k(q-\xi,t)\Psi^*(\xi,t) exp\{\frac{i}{\hbar}(\xi,p)\} \mathrm{d}\xi \right|^2 .$$

В смешанном состоянии, описываемом матрицей плотности $\hat{\rho}$, среднее квантово–механической наблюдаемой A равно

$$<A>_\rho = \mathrm{Sp}(\hat{\rho} O(A)) = \sum_a W_a(t) <A>_a .$$

Соответствующее статистическое среднее равно

$$<A>_\rho = \int A(q,p,t) F_\rho(q,p,t) \mathrm{d}q \mathrm{d}p,$$

где неотрицательная КФР Курышкина имеет вид

$$F_\rho(q,p,t) = (2\pi\hbar)^{-N} \int \Phi(q-\xi, p-\eta, t) \cdot \\ \cdot \exp\{\frac{i}{\hbar}((\xi-\zeta),\eta)\} <\xi|\hat{\rho}|\zeta> \mathrm{d}\zeta \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta. \quad (4)$$

Если воспользоваться выражением (1) и (2) для $< q|\hat{\rho}|q' >$ и $\Phi(q,p,t)$, то соотношение (4) перепишется в виде

$$F_\rho(q,p,t) = \\ = (2\pi\hbar)^{-N} \sum_{k,a} W_a(t) \left| \int \varphi_k(q-\xi,t)\Psi_a^*(\xi,t) exp\{\frac{i}{\hbar}(\xi,p)\} \mathrm{d}\xi \right|^2 .$$

Основное отличие правила соответствия в квантовой механике Курышкина (КМК) от правил соответствия в общепринятой квантовой механике (ОКМ) состоит в следующем: неймановские правила соответствия функции f от наблюдаемой A ставят в соответствие $f(\hat{A})$, что служит препятствием к существованию неотрицательной КФР. Правило Курышкина каждой неотрицательной $f(A) \geqslant 0$ ставит в соответствие $O(f(A))$ с неотрицательным средним. В частности, в ОКМ $(\hat{A}^2) = (\hat{A})^2$, а в КМК $O(A^2) = [O(A)]^2 + \hat{D}(A)$, где $\hat{D}(A)$ положительно полуопределенный оператор дисперсии, тождественно равный нулю в ОКМ.

3 Некоторые непосредственные следствия из определений

Как и в любой статистической теории, из распределения плотности вероятности $F(q,p,t)$ в фазовом пространстве интегрированием по координатам и по импульсам получаем распределения плотности вероятности в импульсном и координатном пространствах соответственно:

$$\alpha_\Psi(q,t) = \int F_\Psi(q,p,t)\mathrm{d}p,$$

$$\beta_\Psi(p,t) = \int F_\Psi(q,p,t)\mathrm{d}q.$$

С учетом (2) из этих соотношений получаем

$$\alpha_\Psi(q,t) = \int |\Psi(t)|^2 \sum_k |\varphi_k(q-\xi,t)|^2 \mathrm{d}\xi,$$

$$\beta_\Psi(p,t) = \int |\tilde{\Psi}(\eta,t)|^2 \sum_k |\tilde{\varphi}_k(p-\eta,t)|^2 \mathrm{d}\eta,$$

где $\tilde{\Psi}(p,t) = (2\pi\hbar)^{-N/2} \int \Psi(q,t) \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(q,p)} \mathrm{d}q$.

Таким образом, в отличие от ОКМ, где плотности вероятности в координатном и импульсном представлении равны квадратам модулей волновых функций, в КМК соответствующие плотности вероятностей являются свертками этих квадратов с регуляризирующими ядрами

$$\alpha_0(q,t) = \sum_k |\varphi_k(q,t)|^2 = \int \Phi(q,p,t)\mathrm{d}p$$

и

$$\beta_0(p,t) = \sum_k |\tilde{\varphi}_k(p,t)|^2 = \int \Phi(q,p,t)\mathrm{d}q$$

соответственно.

Если возьмем наблюдаемую $A(q,p,t) = A(q,t)$, то из соотношения (3) получаем (см. Приложение 1а).

$$[O(A)\Psi](q,t) = \Psi(q,t) \int \alpha_0(\xi,t) A(q+\xi,t)\mathrm{d}\xi, \tag{5}$$

что оператор $O(A)$ является оператором умножения на функцию $V_A(q,t)$:

$$V_A(q,t) = \int \alpha_0(\xi,t) A(q+\xi,t)\mathrm{d}\xi.$$

Как следствие, можно записать

$$O(q_j) = q_j + <q_j>_0, \quad \text{где} \quad <q_j>_0 \overset{\text{not}}{=} \int q_j \alpha_0(q)\mathrm{d}q,$$

$$O(\vec{q}) = \vec{q} + <\vec{q}>_0, \quad \text{где} \quad \int \alpha_0(q)\vec{q}\mathrm{d}q \overset{\text{not}}{=} <\vec{q}>_0,$$

$$O\left(\prod_{j=1}^{N} q_j^{n_j}\right) = \prod_{j=1}^{N}\left\{\sum_{k_j=0}^{n_j} C_{n_j}^{k_j} < q_j^{k_j} >_0 q_j^{n_j-k_j}\right\},$$

где $< f(q) >_0 \overset{\text{not}}{=} \int f(q)\alpha_0(q)\mathrm{d}q$ и $C_{n_j}^{k_j}$—биномиальные коэффициенты.

Как показано в Приложении 1в, наблюдаемой $A(q,p,t) = p_j$ ставится в соответствие оператор $O(P_j) = < p_j >_0 - \mathrm{i}\hbar\nabla_j$, так что $O(\vec{p}) = < \vec{p} >_0 - \mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}$, а также

$$O\left(\prod_{j=1}^{N} p_j^{n_j}\right) = \prod_{j=1}^{n}\left\{\sum_{k_j=0}^{n_j} C_{n_j}^{k_j} < p_j^{k_j} >_0 (-\mathrm{i}\hbar\nabla_j)^{n_j-k_j}\right\}.$$

Следовательно,

$$O\left(\sum_{j=1}^{N} p_j^2\right) = \sum_{j=1}^{N}\left\{< p_j^2 >_0 + 2 < p_j >_0 (-\mathrm{i}\hbar\nabla_j) + (-\mathrm{i}\hbar\nabla_j)^2\right\}, \qquad (6)$$

где $< g(p) >_0 \overset{\text{not}}{=} \int g(p)\beta_0(p)\mathrm{d}p$.

Можно проверить, что $[O(q_j), O(p_k)] = i\hbar\delta_{jk}$, т.к. $O(q_j) = q_j + < q_j >_0$, $O(p_j) = < p_j >_0 - i\hbar\frac{\partial}{\partial q_j}$.

Если $A(\vec{q},\vec{p},\vec{t}) = A(\vec{p},t)$, то

$$[O(A)\Psi](q,t) =$$

$$(2\pi\hbar)^{-N}\int \Phi(\xi,\eta,t)A(p+\eta)\mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(qp)}\mathrm{e}^{-i(q'p)/\hbar}\Psi(q',t)\mathrm{d}q'\mathrm{d}p\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta =$$

$$= (2\pi\hbar)^{-N/2}\int \Phi(\xi,\eta,t)A(p+\eta)\mathrm{e}^{i(qp)/\hbar}\tilde{\Psi}(p)\mathrm{d}p\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta =$$

$$= (2\pi\hbar)^{-N/2}\int \beta_o(\eta)A(p+\eta)\mathrm{e}^{iqp/\hbar}\tilde{\Psi}(p)\mathrm{d}p\mathrm{d}\eta =$$

$$= \left[\int \beta_0(\vec{\eta})A\left(\vec{\eta} - i\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{q}}\right)\mathrm{d}\vec{\eta}\right]\Psi(\vec{q},t).$$

Другими словами,

$$O(A(\vec{p},t)) = \int \beta_0(\vec{\eta})A(\vec{\eta} - \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\vec{q}}, t)\mathrm{d}\vec{\eta}.$$

Согласно вычислениям из Приложения 1с, наблюдаемой, полиномиально зависящей от импульсов, т.е.

$$A(q,p,t) = \sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q,t)\prod_{j=1}^{N} p_j^{n_j},$$

сопоставляется оператор $O(A)$, который записывается в виде дифференциального оператора вида

$$O\left\{\sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q,t)\prod_{j=1}^{N} p_j^{n_j}\right\} =$$

$$= \Phi(\xi,\eta,t)\sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q+\xi,t)\left\{\prod_{j=1}^{N}\left[\sum_{k_j=0}^{n_j} C_{n_j}^{k_j}(\eta_j)^{k_j}\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta(-\mathrm{i}\hbar\nabla_j)^{n_j-k_j}\right]\right\}.$$

В частности, для момента импульса $L_i = \varepsilon_{ijk} r_j p_k$ оператор

$$O(L_i) = \varepsilon_{ijk}\int \Phi(\xi,\eta,t)(r_j+\xi_j)(\eta_k - \mathrm{i}\hbar\nabla_k)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta,$$

$$O(\vec{L}^2) = \sum_i \varepsilon_{ijk}\int \Phi(\xi,\eta,t)(r_j+\xi_j)^2(\eta_k - \mathrm{i}\hbar\nabla_k)^2\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta.$$

4 Оператор Гамильтона для водородоподобного атома

Полная энергия (функция Гамильтона) связанного электрона в водородоподобном атоме задается функцией Гамильтона $H(\vec{r},\vec{p})$ на шестимерном фазовом пространстве

$$H(\vec{r},\vec{p}) = \frac{\vec{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r}. \tag{7}$$

В качестве пробных функций $\varphi_k(\vec{r},t)$ выбираем скалярные кратные первых пяти волновых функций водородоподобного атома в ортодоксальной квантовой механике:

$$\varphi^{(1)}(\vec{r}) = a_1\psi_{100}(r,\theta,\varphi) = \frac{a_1}{\sqrt{\pi}r_0^{3/2}}\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}, \tag{8a}$$

$$\varphi^{(2)}(\vec{r}) = a_2\psi_{200}(r,\theta,\varphi) = \frac{a_2\sqrt{2}}{8r_0^{3/2}\sqrt{\pi}}\left(2-\frac{r}{r_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_0}}, \tag{8b}$$

$$\varphi^{(3)}(\vec{r}) = a_3\psi_{210}(r,\theta,\varphi) = \frac{a_3\sqrt{2}}{8r_0^{5/2}\sqrt{\pi}} r\cos\theta\mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_0}}, \tag{8c}$$

$$\varphi^{(4)}(\vec{r}) = a_4\psi_{211}(r,\theta,\varphi) = -\frac{a_4}{8r_0^{5/2}\sqrt{\pi}} r\sin\theta\mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_0}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}, \tag{8d}$$

$$\varphi^{(5)}(\vec{r}) = a_5\psi_{21-1}(r,\theta,\varphi) = -\frac{a_5}{8r_0^{5/2}\sqrt{\pi}} r\sin\theta\mathrm{e}^{-\frac{r}{2r_0}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}. \tag{8e}$$

Выбранные таким образом пробные функции определяют правило соответствия Курышкина, если выполняется нормировка:

$$\int \sum_{k=1}^{5} |\varphi^{(k)}(\vec{r})|^2 \mathrm{d}\vec{r} = \sum_{k=1}^{5} a_k^2 = 1, \tag{9}$$

т.к. $\int |\psi_{n\ell m}(\vec{r})|^2 \mathrm{d}\vec{r} = 1$ при любых $n = 1, 2, \ldots; \ell = 0, 1, \ldots, n-1; m = -\ell, -\ell+1, \ldots, \ell$. Здесь неопределенными остались пять параметров $\vec{a} = (a_1, a_2, a_3, a_4, a_5)^t$ и один параметр b; $r_0 \cdot b = a_0$ — радиус первой боровской орбиты. Из первых пяти независимы лишь четыре параметра, следовательно, мы работаем с моделью, обладающей пятью независимыми параметрами.

Замечание. Выбор в качестве пробных функций, кратных собственным функциям оператора Гамильтона в ортодоксальной квантовой механике, объясняется следующими причинами:

A) В работах [8, 11, 12] рассматривается так называемая производящая функция A_G, связанная с оператором $O(A)$ соотношением

$$A_G(\vec{q}, \vec{p}, t) = exp\{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{q}, \vec{p})\} O(A) exp\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{q}, \vec{p})\}.$$

Указанная функция связана с наблюдаемой A классической механики с помощью свертки с некоторой функцией распределения на фазовом пространстве

$$A_G(q, p) = \int \Phi(q-\xi, p-\eta) A(\xi, \eta) \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta.$$

Функция Φ раскладывается по некоторому набору функций $\{\varphi^{(k)}(q)\}$ следующим образом

$$\Phi(q, p) = \sum_k \varphi^{(k)}(q) \tilde{\varphi}^{*(k)}(p).$$

При этом вопрос о необходимом количестве этих базисных функций остается открытым [8, 11, 12]. Функции же $\{\Psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi)\}$ образуют ортонормированный базис в $L_2(\mathbb{R}^3)$ на конфигурационном пространстве водородоподобного атома.

B) Интегродифференциальный оператор $O(A)$ строится по правилу (3) интегрированием с функциями $\varphi_k(\vec{r}, t)$ и с функциями $\tilde{\varphi}_k(\vec{p}, t)$. Интегрирование же функции Гамильтона (7) с пробными функциями вида (8a)–(8e) приводит к предельно простым аналитическим выражениям.

Для вычисления оператора $O\left(-\frac{Ze^2}{|\vec{r}|}\right)$ воспользуемся формулой

$$V_A(\vec{r},t)=\int \alpha_0(\vec{r},t)\frac{Ze^2}{|\vec{q}+\vec{r}|}\mathrm{d}\vec{q}.$$

Функция $\alpha_0(\vec{r},t)$ в нашем случае имеет вид

$$\alpha_0(\vec{r},t)=\sum_{k=1}^{5}|\varphi^{(k)}(\vec{r},t)|^2=a_1^2|\Psi_{100}|^2+a_2|\Psi_{200}|^2+$$
$$+a_3^2|\Psi_{210}|^2+a_4^2|\Psi_{211}|^2+a_5^2|\Psi_{21-1}|^2. \quad (10)$$

Заметим, что $|\Psi_{211}|^2=|\Psi_{21-1}|^2$. Функция

$$V_A(\vec{r})=\sum_{j=1}^{5}a_j^5\int|\Psi_j(\vec{r})|^2A(\vec{r}+\vec{q})\mathrm{d}\vec{q}=\sum_{j=1}^{5}a_j^2V_j(\vec{r}); \quad (11)$$

причем $V_4\equiv V_5$.

В результате интегрирования получаем следующие выражения для частичных вкладов в потенциальную энергию

$$V_1(\vec{r})=\int|\Psi_{100}(\vec{r})|^2\left(-\frac{Ze^2}{|\vec{r}+\vec{q}|}\right)\mathrm{d}\vec{q}=-\frac{Ze^2}{r}+ze^2\left(\frac{1}{r}+\frac{1}{r_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{2r}{r_0}}, \quad (12a)$$

$$V_2(\vec{r})=\int|\Psi_{200}(\vec{r})|^2\left(-\frac{Ze^2}{|\vec{r}+\vec{q}|}\right)\mathrm{d}\vec{q}=$$
$$=-\frac{Ze^2}{r}+Ze^2\left(\frac{1}{r}+\frac{3}{4r_0}+\frac{r}{4r_0^2}+\frac{r^2}{8r_0^3}\right)\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}, \quad (12b)$$

$$V_3(\vec{r})=\int|\Psi_{210}(\vec{r})|^2\left(-\frac{Ze^2}{|\vec{r}+\vec{q}|}\right)\mathrm{d}\vec{q}=$$
$$=\frac{1}{8}ze^2\left(\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r^5\cos^2\theta+6\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r^4\cos^2\theta\ r_0+\right.$$
$$+24\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}\cos^2\theta\ r_0^2r^3+72\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}\cos^2\theta\ r_0^3r^2+$$
$$+144\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r_0^4\cos^2\theta\ r+144\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r_0^5\cos^2\theta-$$
$$-16r^2\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r_0^3-48r\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r_0^4-48\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r_0^5-$$
$$\left.-144r_0^5\cos^2\theta+48r_0^5-8r_0^3r^2-2r^3\mathrm{e}^{-\frac{r}{r_0}}r_0^2\right)/(r_0^3r^3), \quad (12c)$$

$$V_4(\vec{r}) = V_4(r,\theta,\varphi) = \int |\Psi_{211}(r,\theta,\varphi)|^2 \left(-\frac{Ze^2}{|\vec{r}+\vec{q}|}\right) \mathrm{d}\vec{q} =$$

$$= -\frac{1}{16} ze^2 \Big(e^{-\frac{r}{r_0}} r^5 \cos^2\theta + 144 e^{-\frac{r}{r_0}} r_0^5 \cos^2\theta -$$
$$- 144 r_0^5 \cos^2\theta + 72 e^{-\frac{r}{r_0}} \cos^2\theta \; r_0^3 r^2 +$$
$$+ 144 e^{-\frac{r}{r_0}} r_0^4 \cos^2\theta \; r + 6 e^{-\frac{r}{r_0}} r^4 \cos^2\theta \; r_0 +$$
$$+ 24 e^{-\frac{r}{r_0}} \cos^2\theta \; r_0^2 r^3 + 16 r_0^3 r^2 - 40 r^2 e^{-\frac{r}{r_0}} r_0^3 -$$
$$- 48 e^{-\frac{r}{r_0}} r_0^5 - 20 r^3 e^{-\frac{r}{r_0}} r_0^2 - 48 r e^{-\frac{r}{r_0}} r_0^4 -$$
$$-6 r^4 e^{-\frac{r}{r_0}} r_0 + 48 r_0^5 - r^5 e^{-\frac{r}{r_0}} \Big) / (r_0^3 r^3), \quad (12d)$$

$$V_4(\vec{r}) = V_5(\vec{r}) = V_5(r,\cos\theta). \quad (12e)$$

Для вычисления оператора $O\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right)$ воспользуемся формулой (6)

$$O\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = \frac{1}{2\mu}\sum_{j=1}^{3}\{< p_j^2 >_0 + 2 < p_j >_0 (-\mathrm{i}\hbar\nabla_j) + (-\mathrm{i}\hbar\nabla_j)^2\}. \quad (13)$$

Здесь $< A(\vec{p}) >_0 = \int \beta_0(\vec{p}) A(\vec{p}) \mathrm{d}\vec{p}$, и в нашем случае

$$\beta_0(\vec{p}) = \sum_{k=1}^{5} a_k^2 |\tilde{\Psi}_k(\vec{p})|^2. \quad (14)$$

При этом

$$\tilde{\Psi}_{100}(\vec{p}) = \tilde{\Psi}_1(p,\theta_p,\varphi_p) = \frac{(2r_0/\hbar)^{3/2}}{\pi\left[1+\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2\right]^2}, \quad (15a)$$

$$\tilde{\Psi}_2(\vec{p}) = \frac{8\sqrt{2}\left(\frac{2r_0}{\hbar}\right)^{3/2}}{\pi} \frac{\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 - 1\right)}{\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)}, \quad (15b)$$

$$\tilde{\Psi}_3(\vec{p}) = \frac{8\sqrt{2}\left(\frac{2r_0}{\hbar}\right)^{5/2} p\cos\theta_p}{\pi\left(64\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^6 + 48\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^4 + 12\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)}, \quad (15c)$$

$$\tilde{\Psi}_4(\vec{p}) = -\frac{8\left(\frac{2r_0}{\hbar}\right)^{5/2} p\sin\theta_p}{\pi\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)^3} e^{\mathrm{i}\varphi_p}, \quad (15d)$$

$$\tilde{\Psi}_5(\vec{p}) = \frac{8\left(\frac{2r_0}{\hbar}\right)^{5/2} p\sin\theta_p}{\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)} e^{-\mathrm{i}\varphi_p}. \quad (15e)$$

Используя формулы (14) и (15a)-(15e) в выражениях для оператора кинетической энергии

$$O\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = \sum_{k=1}^{5} a_k^2 O_k\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right), \tag{16}$$

получаем

$$O_1\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle + \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}, \tag{17a}$$

$$O_2\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle + \frac{\hbar^2}{8\mu r_0^2}, \tag{17b}$$

$$O_3\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = O_4\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = O_5\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = O_2\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right). \tag{17c}$$

Замечание. Если оставить традиционные выражения для нумерации пробных функций $\varphi_{n\ell m}(\vec{r}) = a_{n\ell m}\Psi_{n\ell m}(\vec{r})$, то выражение (17) можно переписать в общем виде

$$O_{n\ell m}\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\triangle + \frac{1}{n^2}\frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2}. \tag{18}$$

5 Матричное представление Гамильтона водородоподобного атома

Продолжая исследования, начатые в работах [20, 21, 22, 31, 32, 33, 34], будем рассматривать задачу на собственные значения и собственные векторы (в гильбертовом пространстве) оператора Гамильтона $O(H) = O(T) + O(V) = O\left(\frac{\vec{p}^2}{2\mu}\right) + O\left(-\frac{Ze^2}{|\vec{r}|}\right)$ в квантовой механике с неотрицательной КФР с последовательным использованием уже известных результатов о задаче на собственные значения и собственные векторы оператора Гамильтона $\hat{H} = \frac{\hat{\vec{p}}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{|\vec{r}|} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r}$ в ортодоксальной квантовой механике.

Дифференциальное выражение для оператора $O(H)$, получаемого с помощью пробных функций $\{\varphi_k = a_k\psi_{n\ell m} : n = 1, 2; \ell = 0, \ldots, n-1; m = -\ell, \ldots, \ell\}$, можно представить в виде

$$O_{\{n\ell m\}}(H) = \frac{\hbar^2}{2\mu}\sum_{k=1}^{5}\left(\frac{a_k^5}{n^2 r_0^2}\right) - \frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta - \frac{Ze^2}{r} + \\ + Ze^2\sum_{k=1}^{5} a_k^2 Q_{n\ell m}(r, \theta, \varphi; r_0)e^{-\frac{2r}{nr_0}}. \tag{19}$$

В качестве области определения оператора Гамильтона выбираем множество таких квадратично–интегрируемых функций $\psi(\vec{r}) \in L_2(\mathbb{R}^3)$, которые останутся квадратично–интегрируемыми после действия на них дифференциального выражения $O(H)\psi \in L_2(\mathbb{R}^3)$. Проводя рассуждения, аналогичные доказательствам Предложений 2 и 3 в работе [21] и соответствующим утверждениям в работе [22], можно доказать следующее утверждение.

Оператор H_1 с областью определения $D(\hat{H}_1) = \{\psi \in L^2(\mathbb{R}^3) | O(H)\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)\}$ и действием, заданным дифференциальным выражением (19): $\hat{H}_1\psi \equiv O(H)\psi$, является самосопряженным оператором в гильбертовом пространстве $H \equiv L^2(\mathbb{R}^3)$.

Рассуждая далее по аналогии с рассуждениями в работах [21, 22], можно доказать следующее

Предложение 2. Самосопряженный оператор $\hat{V}$, заданный на области определения $D(\hat{H}_1)$ по формуле $\hat{V}\psi \equiv \hat{H}_1\psi - \hat{H}\psi$, является оператором умножения на функцию

$$V(\vec{r}) = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \sum_{k=1}^{5} \frac{a_k^2}{n^2} + Ze^2 \sum_{k=1}^{5} a_k^2 Q_{n\ell m}(r, \theta, \varphi; r_0) e^{-\frac{2r}{n r_0}}. \qquad (20)$$

Потенциалы $V_1(\vec{r}) = V(\vec{r}) - \frac{Ze^2}{r}$ и $V_0(\vec{r}) = -\frac{Ze^2}{r}$ удовлетворяют условиям теоремы Като [23] о существенном спектре оператора, поэтому справедлива

Теорема 1 *Самосопряженные операторы* $\hat{H}_1 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V_1(\vec{r})$ *и* $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + V_0(\vec{r})$ *ограничены снизу гранями, не обязательно совпадающими с нижней гранью оператора* $\hat{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2\mu}\Delta + r^2$.

В силу условий $V_1(\vec{r}) \underset{|\vec{r}|\to\infty}{\longrightarrow} C_1$ и $V_0(\vec{r}) \underset{|\vec{r}|\to\infty}{\longrightarrow} 0$, существенные спектры операторов $\hat{H}_0$ и $\hat{H}$ совпадают между собой и с интервалом $[0, \infty)$, а существенный спектр оператора $\hat{H}_1$ совпадает с интервалом $[C_1, \infty)$, где

$$C_1 = \frac{\hbar^2}{2\mu r_0^2} \sum_{k=1}^{5} \frac{a_k^2}{n^2}. \qquad (21)$$

Следовательно [24], изолированные собственные значения оператора $\hat{H}_1$ (связанные энергетические уровни водородоподобного атома) конечной кратности лежат в интервале $(-\infty, C_1)$.

Рассмотрим задачу на собственные значения и собственные векторы оператора $\hat{H}_1 = O(H)$, а именно задачу отыскания таких $E \in (-\infty, C_1)$ и таких $\psi \in L^2(\mathbb{R}^3)$, что выполняются соотношения

$$\hat{H}_1 \psi_E = E \cdot \psi_E. \qquad (22)$$

Собственные функции $\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi)$ оператора $\hat{H}$ образуют ортонормированный базис гильбертова пространства H, следовательно, любой собственный вектор ψ_E оператора $\hat{H}_1$ можно представить в виде ряда Фурье по функциям $\psi_{n\ell m}$:

$$\psi_E(r,\theta,\varphi) = \sum_{n=1}^{\infty}\sum_{\ell=0}^{n-1}\sum_{m=-\ell}^{\ell} C^E_{n\ell m}\psi_{n\ell m}(r,\theta,\varphi), \tag{23}$$

так что

$$\hat{H}_1 \sum_{n,\ell,m} C^E_{n\ell m}\psi_{n\ell m} = E \sum_{n,\ell,m} C^E_{n\ell m}\psi_{n\ell m}. \tag{24}$$

Умножая соотношение (24) на каждую функцию ψ_{pqr} поочередно, получаем эквивалентную систему алгебраических уравнений для координат $C^E_{n\ell m}$.

Введем сокращенные обозначения для троек индексов: $J = (n,\ell,m)$, $I = (p,q,r)$, тогда координатная запись (24) примет вид

$$\sum_J < \psi_I|\hat{H}_1|\psi_J > C^E_J = \sum_J E\delta_{IJ}C^E_J, \qquad \forall I,$$

или в эквивалентной записи

$$\sum_J (H_{IJ} - E\delta_{IJ})C^E_J = O_I, \qquad \forall I. \tag{25}$$

Соотношение (25) хорошо знакомо как задача на собственные значения E и собственные векторы $\vec{C}^E = \{C^E_J\}$ для бесконечной матрицы

$$H_{IJ} =< \psi_I|\hat{H}_1|\psi_J > . \tag{26}$$

Будем рассматривать последовательность конечномерных матриц $H^N_{IJ} =< \psi_I|H_1|\psi_J >^N$ с размерностями $\dim(N) = \sum_{n=1}^N n^2$, так что $\dim(1) = 1$, $\dim(2) = 5$, $\dim(3) = 14$ и т.д. естественным образом вложенные друг в друга. Матричные элементы $H^N_{n\ell m,pqr} =< \psi_{n\ell m}|\hat{H}|\psi_{pqr} >^N$ вычисляются при $n \leqslant N; \ell = 0,\ldots,n-1; m = -\ell,-\ell+1,\ldots,\ell; p \leqslant N; q = 0,\ldots,n-1; r = -q,-q+1,\ldots,q$. Операторы $\hat{H}_1$ и $\hat{H}$ являются сходными, так что система функций $\psi_{n\ell m}$, являющаяся ортонормированной относительно скалярного произведения $< \psi_{n\ell m},\psi_{pqr} >_0 =< \psi_{n\ell m}|\hat{H}|\psi_{pqr} >= \delta_{np}\delta_{\ell q}\delta_{mr}$, является [25] почти ортонормированной относительно скалярного произведения $< \psi_{n\ell m},\psi_{pqr} >_1 =< \psi_{n\ell m}|\hat{H}_1|\psi_{pqr} >$. Следовательно [25, 26], матрицы H^N_{IJ} — хорошо обусловленные и их «числа обусловленности» $\rho(N) = \Lambda^{(N)}_{max}/\lambda^{(N)}_{min}$ ограничены независимо от N (здесь $\Lambda^{(N)}_{max}$ и $\lambda^{(N)}_{min}$ — максимальное и минимальное соответственно собственные числа матрицы H^N_{IJ}).

Следует далее отметить, что собственные значения $\lambda_1 \leqslant \lambda_2 \leqslant \lambda_3 \leqslant \dots \leqslant \lambda_n \leqslant \dots \leqslant c_1$ аппроксимируются собтвенными значениями $\lambda_1^{(N)} \leqslant \lambda_2^{(N)} \leqslant \dots \lambda_n^{(N)} \leqslant \dots \leqslant \lambda_N^{(N)}$ таким образом, что

$$\begin{aligned}
\lambda_1^{(1)} \geqslant \lambda_1^{(2)} \geqslant \dots \geqslant \lambda_1^{(N)} \geqslant \lambda_1 &= \lim_{N\to\infty} \lambda_1^{(N)} \\
\lambda_2^{(2)} \geqslant \dots \geqslant \lambda_2^{(N)} \geqslant \lambda_2 &= \lim_{N\to\infty} \lambda_2^{(N)} \\
\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots\dots&\dots\dots\dots \\
\lambda_n^{(N)} \geqslant \lambda_n &= \lim_{N\to\infty} \lambda_n^{(N)}
\end{aligned}$$

Сами матричные элементы приведены в Приложении 3.

Замечание. Рассмотренные результаты обобщают результаты работ [27, 28, 29, 30]. Методы устойчивого вычисления собственных значений и собственных векторов (в случае близких собственных значений) приведены в работах [31, 32, 33, 34] .

6 Заключение

Ортодоксальная квантовая механика трактует волновые функции состояния с вероятностных позиций. Смешанные состояния описываются оператором « матрицы плотности». Д. И. Блохинцев и другие связывают с матрицей плотности в координатно–импульсном представлении плотность распределения вероятности в фазовом пространстве классической модели описываемого микрообъекта. Эта плотность, называемая квантовой функцией распределения, оказывается не всегда положительно определенной. Существуют такие правила соответствия классической наблюдаемой квантово–механического оператора, которые допускают положительно определенную КФР. Одна из них — КФР В. В. Курышкина и соответствующее правило соответствия, разработаны наиболее детально.

Пусть $A(q,p,t)$ — описание динамической переменной A на языке классической механики — функция на расширенном фазовом пространстве. Пусть $\hat{A}$ — описание той же переменной рассматриваемого микрообъекта на языке ортодоксальной (копенгагенской) квантовой механики. Пусть далее $O_{\{\varphi_k\}}(A)$ — оператор, описывающий ту же переменную A в квантовой механике Курышкина. Тогда оператор $O(A)$ является $\hat{A}$–мало возмущенным и, следовательно, полная система собственных функций $\psi_k : A\psi_k = \lambda_k\psi_k$, образует сильно минимальную систему для $O(A)$, т.е.

1) $< \psi_\ell|O(A)|\psi_k >_{\ell,k=1}^N$ — хорошо обусловленные матрицы,

2) бесконечная матрица $O_{jk}(A)_{j,k=1}^\infty$ приближается своими конечномерными «отрезками» устойчиво.

Эти результаты позволяют построить матричную реализацию квантовой механики Курышкина. Набор субквантовых функций $\{\varphi_k\}_{k=1}^N$ при этом не ограничивается принципиальными требованиями. Однако существуют конструктивные требования рекомендательного характера. При использовании в качестве пробных функций скалярных кратных собственных функций Гамильтониана атома водорода общепринятой квантовой механики $\{\varphi_k(r) = a_k\psi_k(br_0), \sum a_k^2 = 1\}$, интегрирование в правиле соответствия $A \mapsto O_{\{\varphi_k\}}(A)$ и интегрирование в вычислении матричных элементов $O_{\{\varphi_k\}}(A) \mapsto < \psi_j|O(A)|\psi_\ell >$ приобретают «максимально» простой и легко вычисляемый характер. Более того, для построения «репрезентативного» правила соответствия $\{\varphi_k\} : A \mapsto O_{\{\varphi_k\}}(A)$ можно обойтись меньшим количеством субквантовых функций. Здесь репрезентативность понимается в смысле полноты набора пробных функций $\{\varphi_k(r)\}$ в Замечании А и п.4.

Учитывая, что $O(A)$ является $\hat{A}$–мало возмущенным оператором, и что система $\{\psi_j^{(0)}\}_{j=1}^\infty$ образует базис подпространства дискретного спектра оператора $O(A)$ при любом наборе $\{\varphi_k\}$, задающем свое правило соответствия, мы можем решать задачу на собственные значения и собственные функции (векторы) в этом базисе.

Далее, решать задачу на собственные значения и собственные векторы для оператора $\sum_{k=1}^n a_k^2 O_k(A)$ с неопределенными коэффициентами можно исходя из дополнительных требований. Параметры $\{a_k^2\}$ определяются из условия, что собственные векторы ψ_j и собственные значения a_j, минимально отличатся от $\psi_j^{(0)}$ и $a_j^{(0)}$, или из условия, что собственные векторы ψ_j, являются собственными векторами операторов $O(L_z)$ и $O(\vec{L}^2)$ или минимально отличаются от них.

Приложение 1а

Проделаем формальные преобразования для некоторых конкретных наблюдаемых величин. А именно, рассмотрим $A(q,p,t) = A(q,t)$. Выражение (3) для этой функции можно частично проинтегрировать:

$$[O(A(q,t))\psi](q,t) = (2\pi\hbar)^{-N/2}\cdot$$
$$\cdot \int \Phi(\xi,\eta,t) * A(q+\xi,t) \mathrm{e}^{\frac{i}{\hbar}(q,p)} \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}(q',p)} \psi(q',t) \mathrm{d}q' \mathrm{d}p \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta =$$

(с учетом $(2\pi\hbar)^{N/2} \int \mathrm{e}^{-\frac{i}{\hbar}((q-q'),p)} \mathrm{d}p = \delta(q-q')$)

$$= (2\pi\hbar)^{-N/2} \int \Phi(\xi,\eta,t) A(q+\xi,t) \psi(q',t) \delta(q'-q) \mathrm{d}q' \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta =$$
$$= \int \Phi(\xi,\eta,t) A(q+\xi,t) \mathrm{d}\xi \mathrm{d}\eta \cdot \psi(q,t) =$$

(с учетом $\int \Phi(\xi,\eta,t)\mathrm{d}\eta = \alpha_0(\xi,t)$)

$$= \alpha_0(\xi,t)A(q+\xi,t)\mathrm{d}\xi \cdot \psi(q,t).$$

Приложение 1б

Рассмотрим наблюдаемую вида $A(q,p,t) = p_j$ и проделаем для нее некоторые вычисления в формуле (3). А именно,

$$[O(p_j)\psi](q,t) =$$
$$= (2\pi\hbar)^{-N} \int \Phi(\xi,\eta,t) * (p_j+\eta_j)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(p,q)}{\hbar}}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}(q',p)}{\hbar}}\psi(q',t)\mathrm{d}q'\mathrm{d}p\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta =$$
$$= (2\pi\hbar)^{-N/2} \int \Phi(\xi,\eta,t) * (p_j+\eta_j)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(p,q)}{\hbar}}\tilde{\psi}(p,t)\mathrm{d}p\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta =$$

(с учетом $\int p_j \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(q,p)} f(p)\mathrm{d}p = \int -\mathrm{i}\hbar\nabla_j \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(q,p)} f(p)\mathrm{d}p$)

$$= (2\pi\hbar)^{-N/2} \int \Phi(\xi,\eta,t)(\eta_j - \mathrm{i}\hbar\nabla_j)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(q,p)}\tilde{\psi}(p)\mathrm{d}p\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta =$$
$$= \int \Phi(\xi,\eta,t)(\eta_j - \mathrm{i}\hbar\nabla_j)\psi(q,t)\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta =$$

(с учетом $\int \Phi(\xi,\eta,t)\mathrm{d}\xi = \beta_0(\eta,t)$)

$$= \int \beta_0(\eta,t)\eta_j \mathrm{d}\eta\psi(q,t) - \mathrm{i}\hbar\nabla_j\psi(q,t) \overset{not}{=} (< p_j >_0 - \mathrm{i}\hbar\nabla_j)\psi(q).$$

Приложение 1в

Теперь можно рассмотреть класс наблюдаемых величин, полиномиально зависящих от импульса, т.е.

$$A(q,p,t) = \sum_{\vec{n}=(n_1,\ldots,n_N)} A_{\vec{n}}(q,t)\prod_{j=1}^{N} p_j^{n_j}.$$

В этом случае

$$[O(A(q,p,t))\psi](q,t) = (2\pi\hbar)^{-N}\int \Phi(\xi,\eta,t)\left\{\sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q+\xi,t)\prod_{j=1}^{N}(p_j+\eta_j)^{n_j}\right\} *$$
$$* \exp\left\{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}((q-q'),p)\right\}\psi(q',t)\mathrm{d}q'\mathrm{d}p\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta = \int \Phi(\xi,\eta,t)\sum_{\vec{n}} A_{\vec{n}}(q+\xi,t)\cdot$$

$$\cdot\left[\prod_{j=1}^{n}\left\{\sum_{k_j=0}^{n} C_{n_j}^{k_j}(\eta_j)^{k_j}(-\mathrm{i}\hbar\nabla_j)^{(n_j-k_j)}\right\}\right]\mathrm{d}\xi\mathrm{d}\eta\psi(q,t),$$

т.е. операторы для наблюдаемых, полиномиально зависящих от импульсов, являются дифференциальными операторами.

Приложение 2

В качестве «пробных функций» $\varphi(\vec{r})$ берем нормированные собственные функции оператора Гамильтона для электрона в атоме водорода:

$$\begin{aligned}
\varphi^{(1)}(\vec{r}) &\equiv \psi_{100} = \frac{1}{r_0^{3/2}\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-r/r_0},\\
\varphi^{(2)}(\vec{r}) &\equiv \psi_{200} = \frac{\sqrt{2}}{8r_0^{3/2}\sqrt{\pi}}\left(2-\frac{r}{r_0}\right)\mathrm{e}^{-r/2r_0},\\
\varphi^{(3)}(\vec{r}) &\equiv \psi_{210} = \frac{\sqrt{2}}{8r_0^{5/2}\sqrt{\pi}} r\cos\theta\mathrm{e}^{-r/2r_0},\\
\varphi^{(4)}(\vec{r}) &\equiv \psi_{211} = -\frac{1}{8r_0^{5/2}\sqrt{\pi}} r\sin\theta\mathrm{e}^{-r/2r_0}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi},\\
\varphi^{(5)}(\vec{r}) &\equiv \psi_{21,-1} = -\frac{1}{8r_0^{5/2}\sqrt{\pi}} r\sin\theta\mathrm{e}^{-r/2r_0}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi},
\end{aligned} \tag{27}$$

где r_0 — свободный параметр, не совпадающий, вообще говоря, с боровским радиусом.

Фурье–образы этих функций вычисляются по формуле

$$\tilde{\varphi}^{(j)}(\vec{p}) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{(3/2)}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\vec{r})}\varphi^{(j)}(\vec{r})\mathrm{d}\vec{r}. \tag{28}$$

Для вычисления таких интегралов произведем разложение входящей в них экспоненты по сферическим гармоникам $Y_{nm}(\theta,\varphi)$:

$$\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}(\vec{p}\vec{r})}{\hbar}} = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{pr}}\sum_{n=0}^{\infty} i^n(n+\frac{1}{2})J_{n+\frac{1}{2}}\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\cdot$$
$$\cdot\frac{4\pi}{(2n+1)}\sum_{m=-n}^{n} Y_{nm}(\theta_p,\varphi_p)Y^*_{nm}(\theta_r,\varphi_r), \tag{29}$$

где сферические координаты векторов $\vec{p}$ и $\vec{r}$ обозначены соответственно (p,θ_p,φ_p) и (r,θ_r,φ_r), а $J_{n+\frac{1}{2}}$ есть функции Бесселя полуцелого порядка.

Идея вычисления интегралов вида (28) состоит в том, что функция $\varphi^{(j)}(\vec{r})$ представляется в виде произведения сферически–симметричной функции $f^{(j)}(r)$ и функции, зависящей только от углов. Если последнюю удается выразить через какую–либо комбинацию сферических гармоник, то свойство отрогональности последних

$$\int Y_{nm}(\theta,\varphi)Y^*_{n'm'}(\theta,\varphi)\mathrm{d}\Omega = \delta_{nn'}\delta_{mm'},$$

позволяет вычислить угловую часть интеграла (28). Вычисления для функции $f(r)Y_{\ell q}(\theta,\varphi)$ дают

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\vec{p}\cdot\vec{r})}f(r)Y_{\ell q}(\theta_r,\varphi_r)\mathrm{d}\vec{r} = \frac{i^\ell}{\hbar}Y_{\ell q}(\theta_p,\varphi_p)\int_0^\infty \frac{f(r)J_{\ell+\frac{1}{2}}\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{\sqrt{pr}}r^2\mathrm{d}r. \tag{30}$$

Приведем несколько первых сферических гармоник:

$$\begin{aligned}
Y_{00} &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}}, & Y_{10} &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta,\\
Y_{1,\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}, & Y_{20} &= \sqrt{\frac{5}{16\pi}}(3\cos^2\theta-1),\\
Y_{2,\pm1} &= \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\sin\theta\cos\theta\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}, & Y_{2,\pm2} &= \sqrt{\frac{15}{32\pi}}\sin^2\theta\mathrm{e}^{\pm2\mathrm{i}\varphi}.
\end{aligned} \tag{31}$$

Угловые зависимости функций (27) просто пропорциональны соответствующей сферической гармонике, поскольку $\psi_{n\ell m} = R_{n\ell}(r)Y_{\ell m}(\theta,\varphi)$. Для дальнейших вычислений, однако, необходимо иметь также фурье–образы функций вида $\sin\theta\sin\varphi$, $\sin\theta\cos\varphi$ и т.п. Они также могут быть выражены через сферические гармоники:

$$\begin{aligned}
\sin\theta\cos\varphi &= -\frac{\sqrt{\frac{8\pi}{3}}}{2}(Y_{1,1}-Y_{1,-1}),\\
\sin\theta\sin\varphi &= -\frac{\sqrt{\frac{8\pi}{3}}}{2\mathrm{i}}(Y_{1,1}+Y_{1,-1}).
\end{aligned} \tag{32}$$

Используя рекуррентную формулу

$$\cos\theta Y_{\ell m}(\theta,\varphi) = \sqrt{\frac{(\ell+1)^2-m^2}{4(\ell+1)^2-1}}Y_{\ell+1,m}(\theta,\varphi) + \sqrt{\frac{\ell^2-m^2}{4\ell^2-1}}Y_{\ell-1,m}(\theta,\varphi), \tag{33}$$

можно аналогичным образом получить

$$
\begin{aligned}
\sin\theta\cos\theta\cos\varphi &= -\frac{\sqrt{8\pi}}{2\sqrt{15}}(Y_{21} - Y_{2,-1}),\\
\sin\theta\cos\theta\sin\varphi &= -\frac{\sqrt{8\pi}}{2\mathrm{i}\sqrt{15}}(Y_{21} + Y_{2,-1}).
\end{aligned}
\tag{34}
$$

Подставляя в формулу (30) вместо $Y_{\ell q}$ различные гармоники или их комбинации, получаем,

$$
\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} f(r)\mathrm{d}\vec{r} = \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\frac{1}{p}\int_0^\infty f(r) r\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\mathrm{d}r,
$$

$$
\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} f(r)\cos\theta\mathrm{d}\vec{r} =
$$

$$
= \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\frac{\cos\theta_p}{p}\int f(r)\left(\frac{\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{pr/\hbar} - \cos\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\right) r\mathrm{d}r,
$$

$$
\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} f(r)\sin\theta \mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}\mathrm{d}\vec{r} =
$$

$$
= \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\frac{\sin\theta_p}{p}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi_p}\int f(r)\left(\frac{\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{pr/\hbar} - \cos\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\right) r\mathrm{d}r,
$$

$$
\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} f(r)\sin\theta\cos\varphi\mathrm{d}\vec{r} =
$$

$$
= \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\frac{\sin\theta_p\cos\varphi_p}{p}\int f(r)\left(\frac{\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{pr/\hbar} - \cos\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\right) r\mathrm{d}r,
$$

$$
\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} f(r)\sin\theta\sin\varphi\mathrm{d}\vec{r} =
$$

$$
= \mathrm{i}\sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}}\frac{\sin\theta_p\sin\varphi_p}{p}\int f(r)\left(\frac{\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{pr/\hbar} - \cos\left(\frac{pr}{\hbar}\right)\right) r\mathrm{d}r,
$$

$$
\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} f(r)\sin\theta\cos\theta\cos\varphi\mathrm{d}\vec{r} =
$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{\sin\theta_p \cos\theta_p \cos\varphi_p}{p} \int f(r) \left(\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) + \frac{3\cos\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{pr/\hbar} - \frac{3\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{(pr/\hbar)^2} \right) r\mathrm{d}r,$$

$$\frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\vec{p}\cdot\vec{r})} f(r) \sin\theta\cos\theta\sin\varphi \mathrm{d}\vec{r} =$$

$$= \sqrt{\frac{2}{\pi\hbar}} \frac{\sin\theta_p \cos\theta_p \sin\varphi_p}{p} \int f(r) \left(\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right) + \frac{3\cos\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{pr/\hbar} - \frac{3\sin\left(\frac{pr}{\hbar}\right)}{(pr/\hbar)^2} \right) r\mathrm{d}r. \tag{35}$$

Подстановка функций (27) в (28) и использование интегралов (35) приводит к следующим выражениям для фурье–образов:

$$\tilde{\varphi}^{(1)}(\vec{p}) = -\frac{(2r_0/\hbar)^{3/2}}{\pi\left(1 + \left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2\right)^2},$$

$$\tilde{\varphi}^{(2)}(\vec{p}) = \frac{4\sqrt{2}(2r_0/\hbar)^{3/2}}{\pi} \frac{\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 - 1\right)}{\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)^3},$$

$$\tilde{\varphi}^{(3)}(\vec{p}) = \frac{8\sqrt{2}(2r_0/\hbar)^{5/2} \cdot p \cdot \cos\theta_p}{\pi\left(64\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^6 + 48\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^4 + 12\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)}, \tag{36}$$

$$\tilde{\varphi}^{(4)}(\vec{p}) = -\frac{8(2r_0/\hbar)^{5/2} \cdot p\sin\theta_p \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi_p}}{\pi\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)^3},$$

$$\tilde{\varphi}^{(5)}(\vec{p}) = \frac{8(2r_0/\hbar)^{5/2} \cdot p\sin\theta_p \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi_p}}{\pi\left(4\left(\frac{pr_0}{\hbar}\right)^2 + 1\right)^3}.$$

Приложение 3

Для вычисления оператора, соответствующего потенциальной энергии $V(r) = -Z\mathrm{e}^2/r$, необходимо вычислить интеграл

$$O^{(j)}(V(\vec{r})) = -Z\mathrm{e}^2 \int \frac{|\varphi^{(j)}(\vec{q})|^2}{|\vec{r} + \vec{q}|} \mathrm{d}\vec{q}. \tag{37}$$

Подобно тому, как интеграл (28) вычислялся путем разложения входящей в него экспоненты по сферическим гармоникам, аналогичное разложение можно произвести для ядра интеграла (37). Воспользуемся формулой

$$\frac{1}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} = 4\pi \sum_{\ell=0}^{\infty} \left[\frac{1}{2\ell+1} \frac{r_<^\ell}{r_>^{\ell+1}} \sum_{m=-\ell}^{\ell} Y_{\ell m}(\theta_1, \varphi_1) Y_{\ell m}^*(\theta_2, \varphi_2) \right], \tag{38}$$

где $r_< = min(|\vec{r}_1|, |\vec{r}_2|), r_> = max(|\vec{r}_1|, |\vec{r}_2|)$. В случае сферически–симметричных пробных функций $\varphi^{(1)}$ и $\varphi^{(2)}$ подстановка их в интеграл (36) вместе с разложением (38) приводит, ввиду ортогональности сферических гармоник, к выражению

$$O^{(j=1,2)}(V(r)) = -4\pi Z e^2 \int_0^\infty \frac{|\varphi^{(j)}(q)|^2 \cdot q\mathrm{d}q}{max(r,q)}. \tag{39}$$

Для вычисления $O^{(3)}(V(\vec{r}))$ выразим входящий в $|\varphi^{(3)}(\vec{q})|^2$ квадрат косинуса через сферические гармоники (31) (используя формулу (33)):

$$\cos^2\theta = \frac{2}{3}\sqrt{\pi}\left(\frac{2}{\sqrt{5}}Y_{20}(\theta,\varphi) + Y_{00}(\theta,\varphi)\right). \tag{40}$$

Подстановка $\varphi^{(3)}(\vec{q})$ и разложения (38)[1] в интеграл (37) , при учете (40), дает

$$O^{(3)}(V(\vec{r})) = -\frac{4\pi}{3}Ze^2\left\{\int_0^r \varphi_s^{(3)}(q)\left[\frac{q^2}{5r^3}(3\cos^2\theta_r - 1) + \frac{1}{r}\right]q^2\mathrm{d}q + \right.$$
$$\left. + \int_r^\infty \varphi_s^{(3)}(q)\left[\frac{r^2}{5q^3}(3\cos^2\theta_r - 1) + \frac{1}{q}\right]q^2\mathrm{d}q\right\}, \tag{41}$$

где $\varphi_s^{(3)}(q) \equiv \varphi^{(3)}(\vec{q})/\cos\theta$ — есть сферически–симметричная (зависящая только от модуля) часть $\varphi^{(3)}$. Совершенно аналогично проводятся вычисления для $\varphi^{(4)}$ и $\varphi^{(5)}$: квадрат синуса выражается через сферические гармоники:

$$\sin^2\theta = \frac{4}{3}\sqrt{\pi}\left(-\frac{1}{\sqrt{5}}Y_{20}(\theta,\varphi) + Y_{00}(\theta,\varphi)\right), \tag{42}$$

а интеграл (37) принимает вид

$$O^{(j=4,5)}(V(\vec{r})) = -\frac{8\pi}{3}Ze^2\left\{\int_0^r \varphi_s^{(3,4)}(q)\left[\frac{1}{q} - \frac{q^2}{10r^3}(3\cos^2\theta_r - 1)\right]q^2\mathrm{d}q + \right.$$
$$\left. + \int_r^\infty \varphi_s^{(3,4)}(q)\left[\frac{1}{q} - \frac{r^2}{10q^3}(3\cos^2\theta_r - 1)\right]q^2\mathrm{d}q\right\}. \tag{43}$$

Подставляя в (39),(41) и (43) конкретные функции (27) и интегрируя по q, получаем выражения (12а)-(12е).

---

[1]Разложение (38) записано для разности векторов, в формулу же (37) входит их сумма:$1/|\vec{q} + \vec{r}|$. Следовательно, при использовании этой формулы в конечном выражении необходимо заменить $\vec{r}$ на $-\vec{r}$. В сферических координатах такая замена означает $r \to r; \theta \to \pi - \theta; \varphi \to \pi + \varphi$.

Нахождение оператора, соответствующего оператору кинетической энергии $\frac{\hat{p}^2}{2m}$, сводится к вычислению интеграла

$$O^{(j)}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right) = \frac{1}{2m}\int \tilde{\varphi}^{(j)}(\vec{\eta})(\vec{\eta} - \mathrm{i}\hbar\nabla)^2 \mathrm{d}\vec{\eta}, \tag{44}$$

где ∇ — оператор дифференцирования по той же переменной, в отношении которой действует оператор $\hat{\vec{p}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla$; $\tilde{\varphi}^{(j)}$ — фурье–образы (36) пробных функций (27). Такие интегралы легко вычисляются путем раскрытия квадрата в (44) и перехода к сферическим координатам:

$$O^{(j)}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right) = \frac{1}{2m}\int \tilde{\varphi}^{(j)}(\vec{\eta})[\eta^2 + \hbar^2\Delta - 2\mathrm{i}\hbar\eta(\sin\theta\cos\varphi\nabla_x + \sin\theta\sin\varphi\nabla_y + \cos\theta\nabla_z)]\eta^2\sin\theta \mathrm{d}\eta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\varphi. \tag{45}$$

Подставляя в (45) функции (36) и интегрируя, получаем:

$$\begin{aligned} O^{(1)}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\hbar^2}{2mr_0^2}, \\ O^{(2,3,4,5)}\left(\frac{\hat{p}^2}{2m}\right) &= -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \frac{\hbar^2}{8r_0^2}. \end{aligned} \tag{46}$$

Список литературы

[1] *E. Wigner.* Phys. Rev., v. 40, 1932, p. 749.

[2] *Я. П. Терлецкий.* ЖЭТФ, т. 7, 1937, с. 1290.

[3] *D. I. Blokhintsev.* Jorn. of Phys., v. 2, 1940, p. 71.

[4] *I. E. Moyel* Proc. Cambr. Phil. Soc., v. 45, 1949, p. 99.

[5] *C. L. Mehta.* J. Math. Phys., v. 5, 1964, p. 677.

[6] *L. Coheu.* J. Math. Phys., v. 7, 1966, p. 781.

[7] *t. S. Shaukara.* Progr. Theor. Phys., v. 37, 1967, p. 1335.

[8] *В. В. Курышкин.* Сборн. науч. трудов аспирантов. — М. Изд УДН, 1968, вып. 1, с. 243.

[9] *F. Bopp.* Ann. Inst. H. Poincare, t. XV, 1956, p. 81.

[10] *L. Cohen.* Philos. Sci., v. 33, 1966, p. 317.

[11] *В. В. Курышкин.* Изв. вузов. Физика, вып. 4, 1969, с. 111.

[12] *В. В. Курышкин.* Квантовая функция распределения. Канд. дисс. УДН., М., 1969.

[13] *В. В. Курышкин.* Сборник научн. трудов аспирантов. –М. Изд. УДН, 1969, вып. 7, с. 206,211.

[14] *В. В. Курышкин.* Изв. вузов. Физ. вып. 11, 1971, с. 102.

[15] *V. V. Kuryshkin.* Compt. Rend. Acad. Sc., Paris. t. 274, 1972, Serie B, p. 1107.

[16] *V. V. Kuryshkin.* Int. J. Theor. Phys. v. 7, 1973, №6, p. 451.

[17] *V. V. Kuryshkin.* Compt. Rend. Acad. Sc. Paris, 1972, t. 274, Serie B, p. 1163.

[18] *V. V. Kuryshkin, Yu. I. Zaparovanay.* Compt. Rend. Acad. Sc., Paris, 1974, t. 279, p. 17.

[19] *Ю. И. Запарованный.* В кн. Анализ современных задач в точных науках. —М. Изд УДН, 1973, с. 75.

[20] *Ю. И. Запарованный, Л. А. Севастьянов* Численное исследование водородоподобных атомов.// Вестник РУДН, сер. Физика. 1993, т. 1, №1, с. 35–39.

[21] *А. В. Зорин, В. В. Курышкин, Л. А Севастьянов.*Описание спектра водородоподобного атома.// Вестник РУДН, сер. Физика. 1998., т. 6, №1. с. 62–66.

[22] *Е. П. Жидков, А. В. Зорин.* Описание спектра водородоподобного атома в квантовой механике с последовательно вероятностной интерпритацией. —ОИЯИ, Дубна. Р11–2000-316, 2000. 18 с.

[23] *Р. Рихтмайер.* Принципы современной математической физики. —М.: Мир, 1982.

[24] *К. Йоргенс, И. Вайдман.* Спектральные свойства гамильтоновых операторов. —М.: Мир, 1976.

[25] *С. Г. Михлин.* Численная реализация вариационных методов. —М.: Наука, 1966, 432 с.

[26] *С. Г. Михлин* Проблема минимума квадратичного функционала. —М.–Л.: Гостехиздат, 1952.

[27] *Л. А. Севастьянов, В. А. Сорокин, М. Б. Фомин.*Исследование спектра возмущений оператора Гамильтона для водородоподобного атома// Тезисы докл. XXXV Конф. ФМ&ЕН, 1999 –Изд. РУДН; М. с. 47

[28] *А. В. Зорин, Л.А. Севастьянов.* Исследование связи возмущения спектральных данных дифференциального оператора Гамильтона с возмущением потенциала прямым вариационным методом.// Тез. докл. VIII Белорусск. мат. конф, ч. 3, 2000 –Изд. ИМ НАНБ, Минск, 2000. с. 64-65

[29] *К. П. Ловецкий, Л. А. Севастьянов, К. К. Крюков.* Численное исследование собственных значений и собственных функций оператора Гамильтона в квантовой механике с неотрицательной КФР.// Тез. докл. XXXVIII конф. ФМ& ЕН, 2001 –М.: Изд. РУДН, 2001, с. 12–13.

[30] *Л. В. Зорин, Л. А. Севастьянов, Н. П. Третьяков.* Численное исследование состояний с минимальной дисперсией в кв. механике с неотрицательной КФР.// Тез. докл. XXXVIII конф. ФМ& ЕН, 2001 –М.: Изд. РУДН, 2001, с. 13–14.

[31] *К. П. Ловецкий.* Регуляризованный метод решения задачи о собственных значениях. –Депонент ВИНИТИ №142-81 Деп., 1981, 29 с.

[32] *К. П. Ловецкий.* Регуляризованный метод решения задачи о собственных значениях.// Сиб. мат. журн. 1981. т. 22, №6, с. 215–216.

[33] *К. П. Ловецкий, Л. А. Севастьянов.* Метод точной штафной функции решения задачи на собственные значения.// В сб. Вычислительная математика и информатика. — М.: УДН, 1983, с. 33–36.

[34] *К. П. Ловецкий, Л. А. Севастьянов.*Модифицированный метод точной штрафной функции решения задачи на собств. значения.// В сб. Системы массового обслуживания и информатика. —М.: Изд. УДН, 1987, с. 141–145.

Получено 4 ноября 2002 г.

Жидков Е. П. и др. P11-2002-253
Матричное представление в квантовой механике
с неотрицательной КФР на примере водородоподобного атома

Правила соответствия $A(q, p) \mapsto \hat{A}$ ортодоксальной квантовой механики не позволяют ввести в теорию неотрицательную квантовую функцию распределения $F(q, p)$. Правила соответствия $A(q, p) \mapsto \hat{O}(A)$ квантовой механики Курышкина (КМК) позволяют это сделать. При этом операторы $\hat{O}(A)$ оказываются $\hat{A}$-ограниченными и $\hat{A}$-малыми на бесконечности при любом наборе вспомогательных функций $\{\varphi_k\}$. Это позволяет реализовать каноническое матричное представление КМК и исследовать ее зависимость от системы функций $\{\varphi_k\}$.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ и в Российском университете дружбы народов.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2002

Перевод авторов

Zhidkov E. P. et al. P11-2002-253
Matrix Representation in Quantum Mechanics
with Non-Negative QDF in the Case of a Hydrogen-Like Atom

The correspondence rules $A(q, p) \mapsto \hat{A}$ of the orthodoxal quantum mechanics do not allow one to introduce into the theory the non-negative quantum distribution function $F(q, p)$. The correspondence rules $A(q, p) \mapsto \hat{O}(A)$ of Kuryshkin's quantum mechanics (QMK) do allow one to do it. Besides, the operators $\hat{O}(A)$ turn out to be $\hat{A}$ bounded and $\hat{A}$ small at infinity for all systems of auxiliary functions $\{\varphi_k\}$. This allows one to realise canonical matrix representation of QMK to investigate its dependence on the systems of functions $\{\varphi_k\}$.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR, and at the Russian People's Friendship University.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2002

Редактор *М. И. Зарубина*
Макет *Н. А. Киселевой*

Подписано в печать 18.12.2002.
Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 1,44. Уч.-изд. л. 1,63. Тираж 310 экз. Заказ № 53669.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@pds.jinr.ru
www.jinr.ru/publish/