

P11-2000-316

Е.П.Жидков, А.В.Зорин*

ОПИСАНИЕ СПЕКТРА ВОДОРОДОПОДОБНОГО
АТОМА В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ
С ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНО ВЕРОЯТНОСТНОЙ
ИНТЕРПРЕТАЦИЕЙ

*Российский университет дружбы народов, Москва;
e-mail: lsevastianov@sci.pfu.edu.ru

1 Статистическая интерпретация квантовой механики

В 1937 г. Терлецкий Я.П. показал [1], что в предельном случае $\hbar \rightarrow 0$ квантовая механика переходит в классическую статистическую теорию. По ходу доказательства в квантовую механику им были введены две функции координат и импульсов, ставшие впоследствии известными квантовыми функциями распределения. Одна из этих функций была детально изучена в 1940 г. Блохинцевым Д.И. [2], вторая — лишь в 1961 г. Маргенау и Хиллом [3]. К концу 40-х годов в квантовой механике использовались несколько подобных функций, в том числе и наиболее употребляемая в приложениях функция, введенная еще в 1932 г. Вигнером Ю. [4].

Предельный переход квантовой механики в классическую статистическую теорию и возможность введения различных квантовых функций распределения, являющихся смешанным представлением матрицы плотности, привели к попыткам интерпретировать квантовую механику как статистическую теорию классического типа на основе одной из квантовых функций распределения, рассматриваемой как плотность вероятности в квантовом пространстве (см., например, [5]). Неудачи подобных попыток были связаны в основном со знакопеременностью или комплексностью значений известных в то время квантовых функций распределения.

В 1967 г. была сформулирована задача построения положительно определенной квантовой функции распределения и на основе выдвинутого и исследованного ранее обобщения [6] доказано [7], что в общепринятой квантовой механике искомой функции не существует.

Несколько позднее эта же задача была переформулирована [8] в ином направлении. Теперь ставился вопрос о том, можно ли видоизменить квантовую механику так, чтобы в ней существовала всюду неотрицательная квантовая функция распределения. Поставленная задача оказалась разрешимой [8, 9], после чего последовала серия работ по исследованию свойств квантовой механики с неотрицательной функцией распределения (см., например, обзорные работы [10, 11]).

Основным постулатом квантовой механики является утверждение о том, что все свойства физической системы полностью определяются заданием волновой функции $\psi(q, t)$ в том смысле, что экспериментально измеряемое среднее значение $\langle A \rangle$ любой физической величины A , характеризующей рассматриваемую систему, может быть вычислено по известной волновой функции согласно формуле

$$\langle A \rangle = (\psi / \hat{A} \psi) = \int \psi^*(q, t) \hat{A} \psi(q, t) dt. \quad (1)$$

Здесь \hat{A} — оператор, изображающий физическую величину A в квантовой теории, $q = (q_1, q_2, \dots, q_N)$ — координата системы, t — время. В некоторых случаях можно ввести в рассмотрение такую функцию фазового пространства и времени $F(q, p, t)$, что соотношение (1) переписывается в виде

$$\langle A \rangle = \int A(q, p, t) F(q, p, t) dq dp. \quad (2)$$

Здесь $A(q, p, t)$ — функция фазового пространства и времени, изображающая величину A в классической теории, $p = (p_1, p_2, \dots, p_N)$ — импульс системы.

Всякую функцию F , обладающую свойством (2), называют квантовой функцией распределения (КФР).

Сам факт существования КФР F и ее взаимосвязь с волновой функцией ψ зависят от множества M физических величин A , используемых в теории, и правила, по которому функции $A(q, p, t)$, изображающей величину $A \in M$ в классике, устанавливается в соответствие квантовый оператор \hat{A} . Так, в случае множества физических величин

$$A(q, p, t) = f(q, t) + g(p, t), \quad (3)$$

которое мы в дальнейшем именуем M_0 , в общепринятом соответствии

$$\hat{A} = \hat{f} + \hat{g} = f(q, t) + g(\hat{p}, t), \quad (4)$$

где

$$\hat{p} = (\hat{p}_1, \hat{p}_2, \dots, \hat{p}_N), \hat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_j},$$

роль КФР может выполнять любая из фазовых функций, введенных в работах [1–7, 12–15].

В том случае, когда совокупность используемых в теории физических величин A выходит за рамки множества M_0 , существование и явный вид КФР тесно связаны с правилом соответствия, т. е. с законом, по которому классической функции $A(q, p, t)$ устанавливается в соответствие квантовый оператор \hat{A} .

Рассмотрим, следуя [10], варианты изменения общепринятой квантовой механики, с тем чтобы в ней появилась возможность существования неотрицательной КФР. С точки зрения математического формализма такое изменение сводится к выбору нового правила построения квантовых операторов. При этом соответствие операторов (4) физическим величинам (3) может быть сохранено, т. е. указанное изменение может и не затрагивать физических величин множества M_0 . Тем не менее оно приводит к ряду дополнительных проблем, которые мы попытаемся обсудить ниже.

2 Исходные постулаты квантовой механики с неотрицательной КФР

Утверждение 1 (постулат интерпретации). Для всякой механической системы экспериментально измеряемое значение $\langle A \rangle$ любой физической величины A может быть вычислено по формуле

$$\langle A \rangle = \int A(q, p, t) F(q, p, t) dq dp, \quad (5)$$

где $A(q, p, t)$ — физическая величина A как классическая функция координат, импульсов и времени,

$$F(q, p, t) \geq 0 \quad (6)$$

— плотность вероятности нахождения системы в точке фазового пространства (q, p) в момент времени t .

Данный постулат представляет собой обычное утверждение классической статистической теории. Однако мы обобщаем его на все механические системы, в том числе и на те, которым присущи существенно квантовые свойства. Вводя совместную вероятность q и p , мы фактически принимаем точку зрения Эйнштейна и др. [17], рассматривавших координату и импульс системы как одновременно существующие физические реальности не только для классических, но и для квантовых систем.

Утверждение 2 (постулат математического формализма). Для всякой механической системы экспериментально измеряемое значение $\langle A \rangle$ любой физической величины A может быть вычислено по формуле

$$\langle A \rangle = \psi^*(q, t) O(A) \psi(q, t) dq, \quad (7)$$

где $\psi(q, t)$ — функция распределения конфигурационного пространства и времени (функция состояния, или волновая функция), нормированная условием

$$\int |\psi(q, t)|^2 dq = 1, \quad (8)$$

$O(A)$ — оператор, установленный по некоторому правилу в соответствие классической функции $A(q, p, t)$.

Фактически второй постулат является несколько перефразированным основным постулатом квантовой механики с тем, однако, отличием, что операторы $O(A)$ никак не фиксированы.

Авторы [10] отмечают, что второй постулат накладывает ограничения на пространство функций F первого постулата. В принципе, первый постулат может быть применен как к вероятностному описанию эволюции системы, в том случае $\langle A \rangle$ есть среднее значение, так и к детерминированному, в этом случае $\langle A \rangle$ — точное значение и, очевидно, F может быть записана с использованием δ -функции Дирака:

$$F(q, p, t) = \delta(q - q(t)) \delta(p - p(t)). \quad (9)$$

Совокупность же двух постулатов исключает возможность распределения (9) и близких к нему (подробнее об этом см. п. 5), т. е. в этом случае $\langle A \rangle$ всегда имеет смысл среднего значения.

3 Совместность исходных постулатов

Следуя [10], покажем, что утверждения, сформулированные в предыдущем параграфе, не противоречат друг другу. Для этого введем в рассмотрение следующее фазовое

представление волновой функции:

$$f(q, p, t) = (2\pi\hbar)^{-N} e^{\frac{i}{\hbar}(qp)} \psi^*(q, t) \int e^{\frac{i}{\hbar}(\zeta p)} \psi(\zeta, t) d\zeta, \quad (10)$$

где (qp) — скалярное произведение векторов q и p , \hbar — произвольная константа размерности действия. В этом представлении формула (7) примет вид

$$\langle A \rangle = \int A_G(q, p, t) f(q, p, t) dq dt, \quad (11)$$

где A_G — соответствующее представление оператора $O(A)$ [2, 15], или производящая функция [16] оператора $O(A)$, определяемая равенством

$$A_G(q, p, t) = e^{\frac{i}{\hbar}(qp)} O(A) e^{-\frac{i}{\hbar}(qp)}. \quad (12)$$

Плотность вероятности в фазовом пространстве $F(q, p, t)$, если она существует, и функцию (10) в общем случае можно связать соотношением

$$F(q, p, t) = \int \varphi(q - \zeta, p - \eta, t) d\zeta d\eta, \quad (13)$$

где ядро φ интегрируемо и допускает фурье-преобразование [16]. Теперь нетрудно показать, что трактовка F как плотности вероятности и нормировка (8) функции ψ ограничивают множество φ условием нормировки:

$$\int \varphi(q, p, t) dq dp = 1. \quad (14)$$

Для выполнения (6) следует положить (подробнее см. [8])

$$\varphi(q, p, t) = (2\pi\hbar)^{-N} e^{\frac{i}{\hbar}(qp)} \sum_k \varphi_k(q, t) \int e^{\frac{i}{\hbar}(\zeta p)} \varphi_k^*(\zeta, t) d\zeta, \quad (15)$$

где N — размерность фазового пространства, $\varphi_k(q, t)$ — произвольный набор квадратично-интегрируемых по q функций пространства координат и времени. Наконец, для одновременного выполнения требований (5) и (7) исходных постулатов оператор $O(A)$ и классическая функция $A(q, p, t)$ должны быть связаны равенством

$$O(A) e^{\frac{i}{\hbar}(qp)} = e^{\frac{i}{\hbar}(qp)} \int \varphi(q - \zeta, \eta - p, t) A(\zeta, \eta, t) d\zeta d\eta. \quad (16)$$

Последнее вытекает непосредственно из соотношений (5), (7), (10) - (13) и может рассматриваться как некоторое правило построения операторов. Требование совместности исходных постулатов приводит к необходимости ввести в теорию некоторый набор квадратично-интегрируемых функций $\varphi_k(q, t)$. В свою очередь, всякий набор функций координат и времени $\varphi_k(q, t)$, нормированный условием (14), приводит к некоторой статистической теории [8, 9], в которой средние значения физических величин могут быть вычислены как по правилу классической вероятной теории (5), так и по правилу квантовой механики (7). Подобную статистическую теорию, по вполне понятной аргументации, предложено называть «квантовой механикой с неотрицательной КФР» [9].

4 Математический формализм квантовой механики с неотрицательной КФР

Операторы квантовой механики с неотрицательной КФР определяются с точностью до произвольного набора квадратично-интегрируемых по q функций конфигурационного пространства и времени $\varphi_k(q, t)$, нормированного условием

$$\sum_k \int |\varphi_k(q, t)|^2 dq = 1. \quad (17)$$

В силу квадратичной интегрируемости функции φ_k допускают преобразование Фурье:

$$\tilde{\varphi}_k(q, t) = (2\pi\hbar)^{\frac{-N}{2}} \int e^{\frac{-i}{\hbar}(qp)} \varphi_k(q, t) dq, \quad (18)$$

где в качестве параметра \hbar может быть взята любая константа размерности действия. В дальнейшем удобно ввести функцию фазового пространства и времени φ , построенную на базисном наборе φ_k следующим образом:

$$\varphi(q, p, t) = (2\pi\hbar)^{\frac{-N}{2}} e^{\frac{-i}{\hbar}(qp)} \sum_k \varphi_k(q, t) \tilde{\varphi}_k^*(q, t). \quad (19)$$

Тогда правило построения операторов механики с неотрицательной КФР можно сформулировать следующим образом: классической функции $A(q, p, t)$ соответствует линейный квантовый оператор $O(A)$, действие которого на произвольную, допускающую фурье-преобразование функцию $U(q, t)$ определяется равенством

$$O(A)U(q, t) = (2\pi\hbar)^{-N} \int \varphi(\zeta - q, \eta - p, t) A(\zeta, \eta, t) e^{\frac{i}{\hbar}((q-q')p)} U(q', t) d\zeta d\eta dq' dp. \quad (20)$$

Соотношения (17), (19) и (20) являются простыми следствиями достаточных условий (14) - (16) совместимости исходных постулатов. Можно показать [10], что при правиле соответствия (20) формулы вычисления средних (5) и (7) на самом деле эквивалентны, причем соотношение

$$F(q, p, t) = (2\pi\hbar)^{-N} \sum_k \left| \int \varphi_k^*(q - \zeta, t) \psi(\zeta, t) e^{-\frac{i}{\hbar}(\zeta p)} d\zeta \right|^2 \quad (21)$$

определяет связь между волновой функцией ψ и плотностью вероятности F в фазовом пространстве. Соотношения (17) - (21) в совокупности с определением средних (5) или (7) определяют математический формализм квантовой механики с неотрицательной КФР. Однако теория остается недоопределенной. Во-первых, не устранен произвол в выборе базисного набора функций φ_k . Во-вторых, не определена константа \hbar , фигурирующая в соотношениях (18) - (21). В-третьих, остается открытым вопрос об уравнении, которому удовлетворяет волновая функция ψ (или

плотность вероятности F). Проще всего решается вопрос определения константы \hbar , поскольку непосредственно из правила (20) следует

$$[O(q_j), O(p'_j)] = i\hbar\delta_{ij}, \quad (22)$$

независимо от явного вида функций φ_k . Коммутатор (22) вынуждает нас приравнять \hbar постоянной Планка, так как в противном случае теория окажется заведомо неверной. Что касается произвола в выборе φ_k и проблемы уравнения для функции состояния, то эти вопросы намного сложнее [10].

5 Интерпретация математического формализма в приложении к обсуждаемой модели

Вероятностная интерпретация квантовой механики с неотрицательной КФР фактически заключена в ее первом постулате: $F(q, p, t) dq dp$ есть вероятность нахождения системы в интервале фазового пространства $[q, p; q + dq, p + dp]$ в момент времени t . Интегрируя соотношение (21) по импульсам (по координатам), в силу физического смысла $F(q, p, t)$ получаем связь плотности вероятности координаты $\alpha(q, t)$ (плотности вероятности импульса $\beta(p, t)$) с волновой функцией

$$\begin{aligned} \alpha(q, t) &= \int F(q, p, t) dp = \int \alpha_0(q - \zeta, t) |\psi(\zeta, t)|^2 d\zeta, \\ \beta(p, t) &= \int F(q, p, t) dq = \int \beta_0(p - \eta, t) |\tilde{\psi}(\eta, t)|^2 d\eta. \end{aligned} \quad (23)$$

Введенные здесь функции α_0 и β_0 имеют четкий физический смысл и связаны с базисным набором функций φ_k соотношениями

$$\begin{aligned} \alpha_0(q, t) &= \int \varphi(q, p, t) dp = \sum_k |\varphi_k(q, t)|^2, \\ \beta_0(q, t) &= \int \varphi(q, p, t) dq = \sum_k |\tilde{\varphi}_k(p, t)|^2. \end{aligned}$$

Из (23) следует, что квадрат модуля волновой функции определяет плотность вероятности координаты, однако в отличие от общепринятой квантовой механики не совпадает с ней. Произвольный набор функций φ_k приводит [10] к неоднородности времени и анизотропности пространства. Легко видеть, что выбор базисного набора в виде

$$\varphi_k(\vec{r}, t) = \varphi_k(r), \quad (24)$$

где $r = |\vec{r}|$, приводит к равноценности всех направлений пространства, а входящие в них величины не зависят от времени. Следовательно, наборы функций (24) соответствуют стационарному изотропному случаю.

При выборе базисного набора функций φ_k в виде (24) для оператора потенциальной энергии имеем

$$O(V) = O(V(\vec{r})) = \int \alpha_0(\zeta) V(\vec{r} + \vec{\zeta}) d\vec{\zeta}. \quad (25)$$

Сравнение (25) с соответствующим оператором общепринятой квантовой механики $\hat{V} = V(\vec{r})$ показывает, что в квантовой механике с неотрицательной КФР мы всегда имеем дело с некоторым усреднением потенциала в каждой точке пространства по некоторому элементарному объему, определяемому носителем функции α_0 .

В силу линейности правила соответствия (20) для оператора полной энергии в случае потенциальных внешних полей имеем $O(E) = O(T) + O(V)$. Оценка [17] спектров собственных значений, выполненная для простейшего вида функций $\varphi_k(r)$ для оператора $O(E)$ в случае гармонического осциллятора с массой μ и частотой ω и водородоподобного атома с зарядом ядра Z и приведенной массой μ соответственно, дает спектры собственных значений:

$$E_{nlm} = E_n = \hbar\omega(n+1) + T_0 + \frac{3\mu\omega^2}{2}(\delta r)^2, \quad (26)$$

$$E_{nlm} = E_{nl} = -\frac{Z^2 e^2}{2n^2 a^2} + T_0 + \epsilon(Z, n, l) \frac{e^2}{a} \left(\frac{\delta r}{a}\right)^{2l+2}, \quad (27)$$

где $n = 1, 2, \dots$; $l = 0, 1, \dots, n-1$; $m = -l, \dots, 0, \dots, l$; $a = \frac{\hbar^2}{\mu e^2}$; $\epsilon(z, n, l)$ — числовые коэффициенты [18], а δr — среднеквадратичное отклонение координаты, являющееся следствием введения функций φ_k .

В обоих случаях значения оказываются сдвинутыми по сравнению с результатами общепринятой квантовой механики в сторону увеличения энергии. Предполагая, что спектр собственных значений оператора $O(E)$ определяет возможные энергетические переходы, нетрудно показать: сдвиг энергии осциллятора (26) экспериментально не обнаружим, сдвиг энергии электрона в водородоподобном атоме (27) приводит к смещению спектральных линий, аналогично смещению Лэмба. Отсюда можно получить оценки минимальной неопределенности координаты: приравнивание полученных смещений сдвигу Лэмба дает $\delta r \approx 4,2 \cdot 10^{-12}$ см; предположение о том, что полученные смещения отражают более тонкий эффект, чем сдвиг Лэмба, приводит к неравенству $\delta r \leq 10^{-14}$. Эти оценки совместно с условием нормировки (17) и требованием стационарности и изотропности (24) существенно ограничивают множество наборов функций φ_k .

Вопросы дисперсии полной энергии в состояниях с собственной функцией оператора $O(E)$, так же как и уравнение минимальной неопределенности полной энергии, пока остаются нерешенными даже в простейших случаях.

6 Описание спектра водородоподобного атома в квантовой механике с неотрицательной КФР

В квантовой механике с неотрицательной квантовой функцией распределения (КФР) уравнение Шредингера для водородоподобного атома имеет вид [9, 19, 20]

$$H^1 \psi_{nlm}(\vec{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - Ze^2 \int \frac{\alpha_0(|\vec{\zeta}|)}{|\vec{r} + \vec{\zeta}|} d\vec{\zeta} \right\} \psi_{nlm}^1(\vec{r}) = E_{nl}^1 \psi_{nlm}^1(\vec{r}), \quad (28)$$

отличающийся от уравнения Шредингера для водородоподобного атома в общепринятой квантовой механике:

$$H^0 \psi_{nlm}(\vec{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \right\} \psi_{nlm}^0(\vec{r}) = E_{nl}^0 \psi_{nlm}^0(\vec{r}). \quad (29)$$

В уравнении (28) потенциальная энергия

$$u_1(\vec{r}) = -Ze^2 \int \frac{\alpha_0(|\vec{\zeta}|)}{|\vec{r} + \vec{\zeta}|} d\vec{\zeta}$$

в окрестности нуля ($\vec{r} = \vec{0}$) имеет предел

$$\lim_{|\vec{r}| \rightarrow 0} u(\vec{r}) = -4\pi Ze^2 \int_0^\infty \zeta^2 \alpha_0(\zeta) d\zeta > -\infty,$$

ограниченный снизу в силу нормировки [20] подынтегральной функции

$$\int \alpha_0(|\vec{\zeta}|) d\vec{\zeta} = 4\pi \int_0^\infty \zeta^2 \alpha_0(\zeta) d\zeta = 1.$$

Если рассматривать оператор H^1 как возмущение оператора H^0 , то можно поставить вопрос об исследовании расщепления n^2 -кратных уровней энергии (29) под действием возмущения $V = H^1 - H^0$.

Возмущение оператора Гамильтона

$$V = H^1 - H^0 = \frac{Ze^2}{r} - u_1(r)$$

зависит лишь от длины r радиуса-вектора \vec{r} . Следовательно, вся информация о расщеплении энергетических уровней оператора H^1 содержится в смещениях уровней энергии однократного спектра оператора радиальной части уравнения Шредингера.

Радиальные уравнения Шредингера для операторов H^1 и H^0 для $f_{nl}(r) = rR_{nl}$, где $\psi_{nlm}(\vec{r}) = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \zeta)$ — представление волновой функции ψ_{nlm} в сферических координатах $\vec{r} = (r, \theta, \zeta)$, принимают в кулоновских единицах длины [20] следующий вид:

$$T_l^0 f^0 \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{d^2 f^0}{dr^2} + \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} \right\} f^0 = -2\epsilon^0 f^0 \quad (30)$$

и

$$T_l^1 f^1 \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{d^2 f^1}{dr^2} + \left\{ \frac{l(l+1)}{r^2} - 2v_1 \right\} f^1 = -2\varepsilon^1 f^1. \quad (31)$$

При этом

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow \infty} u_1(r)r &= 1; \\ \lim_{r \rightarrow \infty} u_1(r) &= u_{\min} > -\infty. \end{aligned} \quad (32)$$

Задача Штурма - Лиувилля (30) на полуоси $(0, \infty)$ при $l \geq 1$ в особых точках $r = 0$ и $r = +\infty$ имеет тип предельной точки [21]. При $l = 0$ задача имеет в особой точке $r = +\infty$ тип предельной точки, а в особой точке $r = 0$ — тип предельной окружности, поэтому мы не будем рассматривать случай $l = 0$, допускающий однопараметрическое семейство самосопряженных операторов с различными собственными значениями [22]:

$$-\frac{1}{2(n-1)^2} < -\varepsilon_n^0 \leq \frac{1}{2n^2}.$$

Для $l \geq 1$ определим самосопряженные операторы A_l^0 следующим образом:

$$\begin{aligned} D(A_l^0) &= \{f \in L_2(0, \infty) \mid T_0 f \in L_2(0, \infty)\}; \\ A_l^0 f &\stackrel{\text{def}}{=} T_0 f, \end{aligned}$$

где $D(A)$ — область определения оператора A , плотная в гильбертовом пространстве $H = L_2(0, \infty)$.

Теорема(см. [21]):

- собственными значениями λ_{nl} операторов A_l^0 являются числа Бальмера:

$$\lambda_{nl} = -2\varepsilon_n^0 = -\frac{1}{n^2}, \quad n = l + 1, l + 2, \dots;$$

- на полуоси $\lambda < 0$ нет непрерывных частей спектра;
- неотрицательная вещественная полуось $\lambda \geq 0$ составляет непрерывный спектр;
- спектр оператора A_l^0 простой (однократный).

Нормированные собственные функции для собственных значений из дискретного спектра

$$A_l^0 \psi_{nl} = \lambda_{nl} \psi_{nl}$$

имеют вид

$$\psi_{nl}(r) = \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{(n-l-1)!}{\{(n+l)!\}^3}} e^{-\frac{r}{n}} \times \left(\frac{2r}{n}\right)^l L_{n+l}^{2l+1}\left(\frac{2r}{n}\right). \quad (33)$$

Пусть H^- — подпространство чисто точечного спектра в смысле Гильберта [21] для оператора A_l^0 . Тогда H^- — это замыкание в исходной норме линейной оболочки функций $\psi_{nl}(n)$, т.е. множества конечных линейных комбинаций этих функций. Набор

$$\{\psi_{nl}\}, \quad l = 1, 2, \dots; \quad n = l + 1, l + 2, \dots$$

образует базис в гильбертовом пространстве H^- (в исходном пространстве H функции (33) базиса не образуют). Подпространство H^- инвариантно относительно A_l^0 , ограничение которого на H^- обладает чисто дискретным спектром.

Для задания самосопряженного спектра, соответствующего дифференциальному уравнению (31), проведем предварительно необходимые оценки и проверки.

Любой $\psi \in H^-$ имеет вид

$$\psi(r) = \sum C_{nl} \psi_{nl}(r),$$

где

$$C_{nl} = \int_0^\infty \psi(r) \bar{\psi}_{nl}(r) dr,$$

причем

$$\int_0^\infty |\psi(r)|^2 dr = \sum_{n=l+1}^\infty \sum_{l=1}^\infty |C_{nl}|^2.$$

Если $\psi \in D(A_l^0)$, то

$$\int_0^\infty \left| \frac{d^2 \psi}{dr^2}(r) \right|^2 dr = \sum_{n,l} |C_{nl}|^2 |\lambda_{nl}| = C_\psi < \infty.$$

Предложение 1. $T_l^0 \psi \in D(A_l^0)$, тогда и только тогда, когда $T_l^1 \psi \in D(A_l^0)$.

Доказательство. Для принадлежности к H^- функций $T_l^1 \psi$ и $T_l^0 \psi$ дифференциальные свойства функции $\psi \in H^-$ должны быть одинаковыми, т.к. одинаковы дифференциальные части выражений T_l^1 и T_l^0 . Значит, для доказательства предложения нужно показать одновременную квадратичную интегрируемость функций $T_l^1 \psi$ и $T_l^0 \psi$

$$\|T_l^0 \psi\|^2 = \int_0^\infty \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r} \right) |\psi(r)|^2 dr + C_\psi, \quad (34)$$

$$\|T_l^1 \psi\|^2 = \int_0^\infty \left(\frac{l(l+1)}{r^2} - 2v_1(r) \right) |\psi(r)|^2 dr + C_\psi. \quad (34a)$$

Интегралы в (34) и (34a) можно разбить на три слагаемых:

$$\int_0^{r_0} + \int_{r_0}^{R_0} + \int_{R_0}^\infty = \int_0^\infty,$$

где $r_0 \rightarrow 0$, $R_0 \rightarrow +\infty$.

В первом интеграле, вблизи нуля, подынтегральные выражения в (34) и (34a) имеют одинаковый полюс $\sim 1/(r^2)$. Следовательно, одновременно конечны или бесконечны результаты интегрирования. Вторые интегралы в (34) и (34a) конечны при любых $r_0 < R_0$. Подынтегральные выражения (34) и (34a) имеют одинаковый характер стремления к нулю на бесконечности (32), следовательно, одновременно конечны или бесконечны третьи интегралы в (34) и (34a). Следовательно,

$$\|T_l^0 \psi\|^2 < \infty \iff \|T_l^1 \psi\|^2 < \infty.$$

Симметричный оператор A_l^1 определим формулами

$$D(A_l^1) = D(A_l^0); \quad A_l^1 f \stackrel{\text{def}}{=} T_l^1 f. \quad (35)$$

Предложение 2. Оператор A_l^1 самосопряжен в существенном (т.е. самосопряжен $(A_l^1)^{**}$).

Доказательство. Теорема Сирса [23] утверждает, что симметричный оператор, задаваемый дифференциальным выражением

$$-(d^2/dx^2) + v(x),$$

является самосопряженным в существенном, если существует положительная неубывающая функция $Q(x)$, для которой

$$\begin{aligned} 1) \quad & v(x) \geq -Q(x), \\ 2) \quad & \int_0^\infty \frac{dx}{\sqrt{Q(2x)}} = +\infty. \end{aligned}$$

Проверим эти условия для выражения $l(l+1)/x^2 - v(x)$.

Потенциал $V_l(r) = l(l+1)/r^2 - v_1$ удовлетворяет оценкам

$$2v_1(r) - \frac{l(l+1)}{r^2} \leq 2v_1(r) \leq 2 \max_r v_1(r) \stackrel{\text{not}}{=} 2v_{\max}^1,$$

так что для $Q(x) = v_{\max}^1$ справедлива оценка

$$\int_0^\infty \frac{dr}{\sqrt{2v_{\max}^1}} = +\infty.$$

Таким образом, оператор A_l^1 , заданный формулами (35), является самосопряженным в существенном, т.е. $(A_l^1)^{**}$ является самосопряженным.

С учетом того факта, что области определения $D(A_l^0)$ и $D((A_l^1)^{**})$ совпадают (т.е. оба условия в определении $D(A_l^0)$ необходимы), получаем совпадение $D(A_l^1) = D((A_l^1)^{**})$. Отсюда следует

Предложение 3. Оператор A_l^1 самосопряжен.

Предложение 4. Самосопряженный оператор \hat{V}_l , заданный формулами

$$D(\hat{V}_l) = D(A_l^0), \quad \hat{V}_l f \stackrel{\text{def}}{=} A_l^1 f - A_l^0 f,$$

является оператором умножения на вещественную функцию

$$V_l(r) = \frac{2}{r} - 2v_1(r).$$

Потенциалы

$$V_l^1(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} - 2v_1(r)$$

и

$$V_l^0(r) = \frac{l(l+1)}{r^2} - \frac{2}{r}$$

удовлетворяют условиям теоремы Като [21] о существенном спектре оператора, поэтому справедлива

Теорема 1. Самосопряженные операторы

$$A_l^1 = -\frac{d^2}{dr^2} + \hat{V}_l^1$$

и

$$A_l^0 = -\frac{d^2}{dr^2} + \hat{V}_l^0$$

ограничены снизу гранями, возможно, отличающимися от нижней грани оператора A_0 , заданного соотношениями

$$D(A_0) = D(A_l^0), \quad A_0 f = -\frac{d^2 f}{dr^2} + r^2.$$

В силу условий

$$V_l^1(r) \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0, \quad V_l^0 \xrightarrow{r \rightarrow \infty} 0$$

существенные спектры операторов A_0, A_l^0, A_l^1 совпадают между собой и с интервалом $[0, \infty)$. Следовательно, изолированные собственные значения (связанные энергетические уровни) конечной кратности лежат в интервале $(-\infty, 0)$.

Подпространство H^- инвариантно относительно операторов A_l^0 , ограничения последних на H^- являются операторами с чисто дискретным спектром:

$$\lambda_n^0 = -\frac{1}{n^2}; \quad n = 1, 2, \dots$$

Операторы $(A_l^0 + I)$ являются строго положительными операторами с чисто дискретным спектром:

$$\lambda_n = 1 - \frac{1}{n^2}; \quad n = 1, 2, \dots$$

с компактными резольвентами

$$G_l = (A_l^0 + I)^{-1}.$$

Оператор $(A_l^1 + I)$ является родственным с оператором $(A_l^0 + I)$, т.к. ограниченными являются операторы $(A_l^1 + I)G_l$ и $G_l(A_l^1 + I)$. Базис ψ_{nl} , ортонормированный относительно скалярного произведения

$$((A_l^0 + I)\psi_{nl}, \psi_{mp}) = \delta_{nm}\delta_{lp},$$

является почти ортонормированным относительно скалярного произведения

$$\lambda_0 \leq (\psi_{mp}, (A_l^1 + I)\psi_{nl}) \leq \Lambda_0. \quad (36)$$

Кроме того, существуют такие константы C_1 и C_2 , что

$$C_1 \| (A_l^0 + I)\psi \| \leq \| (A_l^1 + I)\psi \| \leq C_2 \| (A_l^0 + I)\psi \|, \quad \forall \psi \in H^-.$$

Введем лексикографическое упорядочение среди индексов $(n, l) = j$ базисных функций $\psi_{nl} = \psi_j$ и операторы ортогонального проектирования:

$$P^- : H \rightarrow H^-,$$

$$P_k : H^- \rightarrow P_k H^- : \psi \mapsto (\psi, \psi_{k+l,l})\psi_{k+l,l},$$

$$k = 1, 2, \dots$$

$$P^k = \bigoplus_{j \leq k} P_j, \quad \psi^k = P_k(\psi), \quad \psi^k = P^k(\psi).$$

Согласно принципу минимума-максимума Рэлея собственные значения λ_{nl} оператора $(A_l^0 + I)$ задаются формулами

$$\lambda_{n+l,l} = \sup_{[\psi_1, \dots, \psi_{n-1}]} \left\{ \inf_{\substack{\psi \in D, \|\psi\| = 1, \\ \psi \in [\psi_1, \dots, \psi_{n-1}]^\perp}} (\psi, (A_l^0 + I)\psi) \right\}, \quad (37)$$

где

$$D = D(A_l^0) = D(A_l^1) = D(A_l^0 + I),$$

$$[\psi_1, \dots, \psi_m]^\perp = \{\psi \in H \mid (\psi, \psi_{l+j,l}) = 0; \quad j = 1, \dots, m\}.$$

Согласно тому же принципу числа

$$\mu_{n+l,l} = \sup_{[\psi_1, \dots, \psi_{n-1}]} \left\{ \inf_{\substack{\psi \in D, \|\psi\| = 1, \\ \psi \in [\psi_1, \dots, \psi_{n-1}]^\perp}} (\psi, (A_l^1 + I)\psi) \right\} \quad (38)$$

либо являются собственными числами операторов $(A_l^0 + I)$, либо задают нижний край существенного спектра $\sigma_{\text{ess}}(A_l^1 + I)$.

По определению подпространства H^- и оператора P^- справедливы соотношения

$$\lambda_{n+l,l} = \lambda_{n+l,l}^- = \sup_{[\psi_1^-, \dots, \psi_{n-1}^-]} \left\{ \inf_{\substack{\psi \in D^-, \|\psi\| = 1, \\ \psi \in P^-([\psi_1^-, \dots, \psi_{n-1}^-]^\perp)}} (\psi, (A_l^0 + I)\psi) \right\}, \quad (39)$$

где $\psi^- = P^-(\psi)$, $D^- = D \cap H^-$, и

$$\mu_{n+l,l} \leq \mu_{n+l,l}^- = \sup_{[\psi_1^-, \dots, \psi_{n-1}^-]} \left\{ \begin{array}{l} \inf \\ \psi \in D^-, \|\psi\| = 1, \\ \psi \in P^-([\psi_1^-, \dots, \psi_{n-1}^-]^\perp) \end{array} \right. (\psi, (A_l^1 + I)\psi) \right\}. \quad (40)$$

Числа $\lambda_{n+l,l}^-$ и $\mu_{n+l,l}^-$ можно вычислять приближенно методом Ритца:

$$\lambda_{n+l,l}^- = \lambda_{n+l,l}^m = \max_{[\psi_1^m, \dots, \psi_{n-1}^m]} \left\{ \begin{array}{l} \min \\ \psi \in D^m, \|\psi\| = 1, \\ \psi \in P^m([\psi_1^m, \dots, \psi_{n-1}^m]^\perp) \end{array} \right. (\psi, (A_l^0 + I)\psi) \right\} \quad (41)$$

и

$$\mu_{n+l,l}^- \leq \lambda_{n+l,l}^m = \max_{[\psi_1^m, \dots, \psi_{n-1}^m]} \left\{ \begin{array}{l} \min \\ \psi \in D^m, \|\psi\| = 1, \\ \psi \in P^m([\psi_1^m, \dots, \psi_{n-1}^m]^\perp) \end{array} \right. (\psi, (A_l^1 + I)\psi) \right\}, \quad (42)$$

где $D^n = D \cap P^n(H^-)$.

В силу почти ортонормированности базиса $\{\psi_{nl}\}$ относительно скалярного произведения (36) процесс вычисления по Ритцу собственных значений $\mu_{n+l,l}^m$ устойчив, так же как устойчив процесс сходимости:

$$\mu_{n+l,l}^m \xrightarrow{m \rightarrow \infty} \mu_{n+l,l}^-.$$

С учетом равенств

$$\hat{V}_l = A_l^1 - A_l^0 = (A_l^1 + I) - (A_l^0 + I)$$

и

$$-\hat{V}_l = A_l^0 - A_l^1 = (A_l^0 + I) - (A_l^1 + I)$$

для операторов \hat{V}_l и $(-\hat{V}_l)$ по аналогии с формулами (37)-(42) получим оценки

$$\lambda_{n+l,l}^1 - \lambda_{n+l,l}^0 \leq V_{n+l,l}^- \leq V_{n+l,l}^m \quad (43)$$

$$\lambda_{n+l,l}^0 - \lambda_{n+l,l}^1 \leq (-V)_{n+l,l}^- \leq (-V)_{n+l,l}^m. \quad (44)$$

Оценки (43) и (44) можно объединить:

$$\lambda_{n+l,l}^0 - (-\hat{V}_l)_{n+l,l}^m \leq \lambda_{n+l,l}^1 \leq \lambda_{n+l,l}^0 + V_{n+l,l}^m.$$

7 Заключение

Оператор D_l^0 , заданный дифференциальным выражением в (30), и оператор D_l^1 , заданный дифференциальным выражением в (31), являются самосопряженными. Оператор D_l^0 является родственным [24] оператору D_l^1 с самосопряженным возмущением

$$V = D_l^1 - D_l^0 = -2 \left(U_1(\rho) - \frac{1}{\rho} \right).$$

Дискретный спектр оператора D_l^0 лежит в интервале $[-1, 0]$. Можно показать, что оператор V является D_l^0 — ограниченным и D_l^0 — малым на бесконечности [25], так что дискретный спектр оператора D_l^1 отрицателен. Поэтому процесс Ритца для приближенного вычисления собственных значений в $2\varepsilon_{nl}^1$ и оператора D_l^1 по принципу минимума-максимума Рэлея [26] можно реализовать с помощью системы координатных функций v_{nl} , почти ортонормированной относительно скалярного произведения

$$\langle v_{nl}, v_{pq} \rangle = (D_l^1 v_{nl}, v_{pq}),$$

что обеспечивает устойчивость как самого процесса Ритца, так и приближенного решения на компьютере системы Ритца

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} (v_{pq}, (D_l^0 + V) v_{nl}) a_{nl} - 2\varepsilon_{nl}^1 (v_{nl}, v_{pq}) = 0,$$

эквивалентной системе

$$\sum_{n=1}^{\infty} \sum_{l=0}^{n-1} \left(v_{pq}, \left(U_1(\rho) - \frac{1}{\rho} \right) v_{nl} \right) a_{nl} + (\varepsilon_{nl}^1 - \varepsilon_{nl}^0) (v_{nl}, v_{pq}) = 0. \quad (45)$$

Оператор V , рассматриваемый как возмущение оператора D_l^0 , приводит к расщеплению кулоновских уровней энергии, каждому из которых ε_{nl}^0 соответствует n радиальных функций $v_{nl} : l = 0, 1, \dots, (n-1)$. Так что в системе (45) суммирование по l ведется от нуля до $(n-1)$ для каждого фиксированного n . Если возмущение $V = D^1 - D^0$ формируется за счет неізотропной “затравочной” функции $\alpha_0(\vec{\xi})$, то аналогичное рассуждение в отсутствие сферической симметрии приводит к необходимости решать систему Ритца

$$\sum_{l=0}^{n-1} \sum_{m=-1}^l \left[\left(\varphi_{nlm}, \left(U_2(\vec{\rho}) - \frac{1}{\rho} \right) \varphi_{nl'm'} \right) a_{nlm} + (\varepsilon_{nlm}^1 - \varepsilon_n^0) \delta_{ll'} \delta_{mm'} \right] = 0. \quad (46)$$

размерности $n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$.

Решение системы (45) или (46) есть задача отыскания собственных значений и собственных функций матрицы

$$\Lambda_l^m(n) = \int_0^{\infty} v_{nl}(\rho) \left(U_1(\rho) - \frac{1}{\rho} \right) v_{nm}(\rho) \rho^2 d\rho$$

или матрицы

$$V_{lm}^{js}(n) = \int \varphi_{nlm}(\rho, \theta, \varphi) \left(U_1(\vec{\rho}) - \frac{1}{\rho} \right) \tilde{\varphi}_{njs}(\rho, \theta, \varphi) \rho^2 \sin^2 \theta \, d\rho \, d\theta \, d\varphi. \quad (47)$$

В соотношениях (46) и (47) использованы собственные функции $\varphi_{nlm}(\vec{\rho})$ оператора (29).

Изложенное выше приводит к следующей постановке задач численного исследования спектров водородоподобных атомов, т. е. численного исследования задач Штурма-Лиувилля (28), (31):

- А. Задается модель водородоподобного атома $\alpha_0(\vec{\xi})$, так что задается матрица $\Lambda_l^m(n)$ (или матрица $V_{lm}^{js}(n)$), собственные значения и собственные векторы которой требуется вычислить. Собственные значения оператора возрастают до нуля и группируются сериями близко расположенных корней уравнения

$$\det(\Lambda(n) - \epsilon I) = 0 \quad (\det(V(n) - \epsilon I) = 0).$$

Требуется построить устойчивый алгоритм решения этой численно некорректной задачи. Такой алгоритм предложен в работе [27].

Полученные собственные значения ϵ_{nlm}^1 следует сравнить с экспериментальными данными $\tilde{\epsilon}_{nlm}^1$ и на основании результатов сравнения сделать вывод об адекватности модели и о путях ее возможной модификации в случае неадекватности.

- В. По измеренным спектральным линиям $\tilde{\epsilon}_{nlm}^1$ водородоподобного атома требуется восстановить параметры $a_0(\vec{\xi})$ модели. Корректная постановка задачи достигается путем учета в алгоритме ее решения феноменологических представлений о поведении потенциала $u_1(\vec{r})$, а также предположения о близости $\varphi_{nlm}^0(\vec{r})$ и $\varphi_{nlm}^1(\vec{r})$ (которое представляется резонным, т. к. уравнение (30) во многих аспектах хорошо описывает реальный объект).

Список литературы

- [1] Терлецкий Я.П. // ЖЭТФ, 1937, т.7, с.1290.
- [2] Blokhintsev D.I. // Journ. of Phys., 1940, v.2, p.71.
- [3] Margenau H., Hill R.N. // Progr. Theor. Phys., 1961, v.26, p.722.
- [4] Wigner E.R. // Phys. Rev., 1932, v.40, p.749.
- [5] Moyal I.E. // Proc. Cambr. Philos. Soc., 1949, v.45, p.99.
- [6] Cohen L. // J. Math. Phys., 1966, v.7, p.781.
- [7] Cohen L. // Philos. of Sciences, 1966, v.33, p.317.

- [8] *Курьшикин В.В.* // Изв. вузов. Физика, 1971, №11, с.103.
- [9] *Kuryshkin V.V.* // Ann. Inst. H. Poincaré, 1972, v.XVII, p.81.
- [10] *Курьшикин В.В., Терлецкий Я.П.* // Проблемы статистической физики и теория поля. — М.: Изд. УДН, 1976, с. 70.
- [11] *Kuryshkin V.V.* // The Uncertainty Principle and Foundation of Quantum Mechanics — London: Press, 1977, p.61.
- [12] *Mehta C.L.* // J. Math. Phys., 1964, v.5, p.677.
- [13] *Shankara T.S.* // Prog. Theor. Phys., 1967, v.37, p.1335.
- [14] *Курьшикин В.В.* // Сборник научных трудов аспирантов. Вып. 1, М.: Изд. УДН, 1968, с.243.
- [15] *Курьшикин В.В.* // Изв. вузов. Физика, 1969, т.4, с.111.
- [16] *Курьшикин В.В.* // Теоретическая физика, М.: Изд. УДН, 1974, с.78-85.
- [17] *Kuryshkine V.V.* // Compt. Rend. Acad. Sc. Paris., Serie B, 1972, v.274, p.1163-1165.
- [18] *Kuryshkin V.V., Zaporovanny Yu.I.* // Compt. Rend. Acad. Sc. Paris., Serie B, 1974, v.279, p.17-20.
- [19] *Entralgo E.E., Kuryshkin V.V., Zaporovanny Yu.I.* // Microphysical Reality and Quantum Formalism. — Kluwer Academic Publisher, 1988, p.115.
- [20] *Запарованный Ю.И., Севастьянов Л.А.* Численное исследование спектров водородоподобных атомов. // Вестник РУДН, сер. физика, 1993, т.1, №1, с.35-39.
- [21] *Рихтмайер Р.* Принципы современной математической физики. М.: Мир, 1982.
- [22] *Jorgens K., Rellich F.* Eigenwertheorie gewöhnlicher Differentialoperatoren. — Springer, 1976.
- [23] *Березин Ф.А., Шубин М.А.* Уравнение Шредингера. — М.: Изд. МГУ, 1977.
- [24] *Мизлин С.Г.* Численная реализация вариационных методов. — М.: Наука, 1966.
- [25] *Йоргенс К., Вайдман И.* Спектральные свойства гамильтоновых операторов. — М.: Мир, 1976.
- [26] *Рид М., Саймон Б.* Методы современной математической физики. IV. Анализ операторов. — М.: Мир, 1982.
- [27] *Ловецкий К.П., Севастьянов Л.А.* Системы массового обслуживания и информатика. — М.: Изд. УДН, 1987, с.141-145.

Рукопись поступила в издательский отдел
27 декабря 2000 года.

Жидков Е.П., Зорин А.В.

P11-2000-316

Описание спектра водородоподобного атома в квантовой механике с последовательно вероятностной интерпретацией

В работе проведено исследование спектра оператора энергии водородоподобного атома в квантовой механике с неотрицательной квантовой функцией распределения (КФР). В качестве основного спектрального свойства гамильтониана определен его существенный спектр. Вопросы оценки числа и величин собственных значений, не принадлежащих существенному спектру, не получили теоретического ответа. Предложен подход численного поиска ответов на эти вопросы.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2000

Перевод авторов

Zhidkov E.P., Zorin A.V.

P11-2000-316

Hydrogen-Like Atom Description in the Framework of Quantum Mechanics with Consequently Probabilistic Interpretation

In the paper a research of spectrum of the energy operator of the hydrogen-like atom in quantum mechanics with non-negative quantum function of distribution (QFD) is carried out. As a principle spectral property of the Hamiltonian its essential spectrum has been established. We have not got the theoretical response on questions of the evaluation of numbers and quantities of eigenvalues, which do not belong the essential spectrum. A method of numerical searching to answer these questions has been proposed.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2000

Редактор Е.Ю.Шаталова. Макет Н.А.Киселевой

Подписано в печать 18.05.2001

Формат 60 × 90/16. Офсетная печать. Уч.-изд. листов 1,61

Тираж 320. Заказ 52656. Цена 1 р. 93 к.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
Дубна Московской области