01;02

Трансформационные свойства волновых функций двумерного гармонического осциллятора

© И.Е. Мазец

Физико-технический институт им. А.Ф. Иоффе РАН,
194021 Санкт-Петербург, Россия

(Поступило в Редакцию 16 мая 2000 г.)

Найдена формула преобразования при повороте декартовой системы координат (x_1, x_2) на произвольный угол волновых функций вида $\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$, где ψ_n — собственная функция гармонического осциллятора, соответствующая n-му уровню. В качестве приложения рассмотрено вычисление матричных элементов контактного взаимодействия пары частиц во внешнем гармоническом потенциале.

Постановка задачи

Дан двумерный изотропный гармонический осциллятор с масой m и фундаментальной частотой ω. Его гамильтониан может быть представлен в виде суммы одномерных гамильтонианов, описывающих колебания вдоль двух ортогональных осей x_1 и x_2:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2,$$

$$\hat{H}_j = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x_j^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x_j^2, \quad j = 1, 2. \tag{1}$$

Свойства собственных функций операторов $\hat{H}_j$ общеизвестны [1]. Нам будет удобно пользоваться следующим выражением для нормированной на единицу собственной функции, соответствующей n-му $(n = 0, 1, 2, \dots)$ энергетическому уровню:

$$\psi_n(x_j) = \frac{1}{\sqrt{n!}}(\hat{a}_j^\dagger)^n \psi_0(x_j). \tag{2}$$

Здесь

$$\psi_0(x_j) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \exp\left(-\frac{m\omega x_j^2}{2\hbar}\right) \tag{3}$$

есть волновая функция основного состояния. Оператор рождения кванта в явном виде записывается как

$$\hat{a}_j^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x_j - \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x_j}, \tag{4}$$

а сопряженный ему оператор уничтожения — как

$$\hat{a}_j = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}x_j + \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\frac{\partial}{\partial x_j}. \tag{5}$$

В данной работе мы исследуем вопрос, как преобразуются волновые функции вида $\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$ при повороте системы координат в плоскости (x_1, x_2) на угол χ, т. е. при переходе к новым (штрихованным) координатам, определяемым с помощью соотношений

$$x_1' = \cos\chi x_1 + \sin\chi x_2, \quad x_2' = -\sin\chi x_1 + \cos\chi x_2. \tag{6}$$

Как нам представляется, до сих пор подобное преобразование не было рассмотрено в литературе. Это связано в первую очередь с тем, что в случае аксиально-симметричного гармонического осциллятора волновую функцию естественно представлять в виде произведения радиальной части, зависящей только от полярного радиуса и, следовательно, инвариантой относительно поворотов на функцию вида $\exp(iM\varphi)$, где φ — угловая переменная, M — целое число. С другой стороны, в математической литературе, посвященной специальным функциям, также не освещен вопрос о теореме сложения для полиномов Эрмита, или, что эквивалентно, для собственных функций гармоничекого осциллятора (см., например, достаточно полную монографию [2]).

Прежде чем приступить к вычислению коэффициентов преобразования

$$\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) = \sum_{n_1', n_2'} K_{n_1 n_2}^{n_1' n_2'}(\chi)\psi_{n_1'}(x_1')\psi_{n_2'}(x_2'), \tag{7}$$

укажем некоторые очевидные свойства коэффициентов $K_{n_1 n_2}^{n_1' n_2'}(\chi)$. Во-первых, при повороте координатных осей могут перемешиваться лишь вырожденные состояния, относящиеся к одному и тому же собственному значению полного гамильтониана $\hat{H}$. Следовательно, необходимым условием отличия $K_{n_1 n_2}^{n_1' n_2'}(\chi)$ от нуля является выполнение равенства

$$n_1 + n_2 = n_1' + n_2'. \tag{8}$$

Во-вторых, поскольку базисные функции вещественны, то и коэффициенты преобразования вещественны и для них свойство унитарности переходит в свойство ортогональности. Таким образом, обратное преобразование (от новых координат к старым) имеет вид

$$\psi_{n_1'}(x_1')\psi_{n_2'}(x_2') = \sum_{n_1, n_2} K_{n_1 n_2}^{n_1' n_2'}(\chi)\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2). \tag{9}$$

Вычисление коэффициентов преобразования

Вычисление величин $K_{n_1 n_2}^{n_1' n_2'}(\chi)$ напрямую предполагает введение операторов $\hat{a}_1^{'\dagger}$, $\hat{a}_2^{'\dagger}$ рождения квантов, определенных в новых координатах аналогично (4) при помощи замены x_j на x'_j. С учетом (6) находим

$$\hat{a}_1^\dagger = \cos\chi \hat{a}_1^{\prime\dagger} - \sin\chi \hat{a}_2^{\prime\dagger}, \quad \hat{a}_2^\dagger = \sin\chi \hat{a}_1^{\prime\dagger} + \cos\chi \hat{a}_2^{\prime\dagger}. \quad (10)$$

Эти выражения подставляем в определения $\psi_{n_1}(x_1)$ и $\psi_{n_2}(x_2)$, раскрываем скобки в произведении $\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$, приводим подобные и, учитывая, что $\psi_0(x_1)\psi_0(x_2) = \psi_0(x'_1)\psi_0(x'_2)$, находим (в виде некоторой конечной суммы) коэффициент при $\psi_{n'_1}(x'_1)\psi_{n'_2}(x'_2)$. После громоздких преобразований с использованием разнообразных тождеств, известных из теории углового момента [3], удается установить следующий основной результат:

$$K_{n_1 n_2}^{n'_1 n'_2}(\chi) = d^{\frac{1}{2}(n_1+n_2)}_{\frac{1}{2}(n'_2-n'_1)\frac{1}{2}(n_2-n_1)}(2\chi). \quad (11)$$

С учетом известного свойства [3]

$$d^J_{MM'}(\beta) = d^J_{-M'-M}(\beta)$$

формула (11) может быть переписана в виде

$$K_{n_1 n_2}^{n'_1 n'_2}(\chi) = d^{\frac{1}{2}(n_1+n_2)}_{\frac{1}{2}(n_1-n_2)\frac{1}{2}(n'_1-n'_2)}(2\chi). \quad (12)$$

Здесь $d^J_{MM'}$ — функция, через которую выражается D-функция Вигнера, соответствующая повороту на углы Эйлера (α, β, γ),

$$D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma) = \exp(-iM\alpha) d^J_{MM'}(\beta) \exp(-iM'\gamma).$$

При повороте системы координат волновые функции с определенными значениями полного углового момента J и его проекции M на ось z преобразуются согласно формуле

$$\Psi_{JM'}(\vartheta', \varphi', \sigma') = \sum_{M=-J}^{J} \Psi_{JM}(\vartheta, \varphi, \sigma) D^J_{MM'}(\alpha,\beta,\gamma). \quad (13)$$

В аргументе волновой функции стоят две угловые переменные ϑ и φ и спиновая переменная σ; штрихами отмечены их значения в новой (повернутой относительно исходной) системе координат. Соотношение (13) является по существу определением функций Вигнера.

Мы не приводим подробных выкладок при рассмотрении непосредственного вычисления трансформационных коэффициентов $K_{n_1 n_2}^{n'_1 n'_2}(\chi)$ ввиду их рутинного характера, тем более что результат (11), (12) может быть получен другим, менее тривиальным, но более коротким путем. Он основан на применении изоспинового формализма, широко используемого в теории ансамблей двухуровневых атомов [4]. Введем операторы проекций изоспина на три ортогональных оси во вспомогательном (изоспиновом) пространстве согласно соотношениям

$$\hat{I}_1 = \frac{1}{2}(\hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger + \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2), \quad \hat{I}_2 = \frac{i}{2}(\hat{a}_1 \hat{a}_2^\dagger - \hat{a}_1^\dagger \hat{a}_2),$$

$$\hat{I}_3 = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 - \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2). \quad (14)$$

Нетрудно показать, что эти операторы удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям для углового момента

$$[\hat{I}_1, \hat{I}_2] = i\hat{I}_3, \quad (15)$$

два других аналогичных соотношения получаются циклической перестановкой индексов $1, 2, 3$. Также каждый из операторов $\hat{I}_k (k = 1, 2, 3)$ коммутирует с оператором квадрата изоспина

$$\sum_{k=1}^{3} \hat{I}_k^2 = \hat{I}(\hat{I}+1), \quad (16)$$

где

$$\hat{I} = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2). \quad (17)$$

Таким образом, волновая функция $\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2)$ является собственной функцией операторов $\hat{I}$ и $\hat{I}_3$, а их собственные значения равны $1/2(n_1+n_2)$ и $1/2(n_1-n_2)$ соответственно.

Рассмотрим теперь поворот в плоскости (x_1, x_2) на угол χ. Очевидно,

$$\psi_{n'_1}(x'_1)\psi_{n'_2}(x'_2) = \exp\left(-\chi \frac{\partial}{\partial \phi}\right) \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2), \quad (18)$$

где переменная ϕ есть полярный угол, отсчитываемый от оси x_1 в направлении оси x_2. С другой стороны [1,3],

$$\frac{\partial}{\partial \phi} = x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}.$$

Теперь, используя определения (4), (14) можно показать, что

$$\psi_{n'_1}(x'_1)\psi_{n'_2}(x'_2) = \exp(-2i\chi \hat{I}_2) \psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2), \quad (19)$$

иными словами, поворот на угол χ в плоскости (x_1, x_2) сводится к повороту на 2χ вокруг оси 2 в изоспиновом пространстве. Отсюда с учетом (13) непосредственно следует формула (12) и эквивалентная ей (11).

Матричные элементы контактного взаимодействия

В качестве примера использования полученных соотношений рассмотрим задачу о вычислении матричных элементов контактного взаимодействия. Как известно [5], в ансамблях ультрахолодных атомов, когда в силу малости энергии столкновения доминирует рассеяние в s-волне (изотропное), характеризуемое длиной рассеяния a, межатомное взаимодействие может быть аппроксимировано контактным псевдопотенциалом

$$U(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = g\delta^{(3)}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (20)$$

где $\mathbf{r}$, $\mathbf{r}'$ — координаты сталкивающихся атомов (μ — их приведенная масса), $g = 2\pi\hbar^2\mu^{-1}a$ — эффективная константа взаимодействия, $\delta^{(3)}$ — трехмерная дельта-функция Дирака.

Для развития новых, дополнительных к существующим [5], подходов к теории вырожденного атомарного газа в магнитной ловушке представляется интересным вычислить матричные элементы контактного взаимодействия в базисе собственных функций гармонического осциллятора. Итак, рассмотрим два атома одинаковой массы m (соответственно $\mu = m/2$), которые до столкновения характеризовались квантовыми числами n_j^k, где нижний индекс $j = 1, 2$ нумерует атом, а верхний индекс $k = x, y, z$ — декартовы оси, совпадающие с главными осями магнитной ловушки. Соответствующие квантовые числа после столкновения будем отмечать штрихом. В общем случае все три фундаментальные частоты колебаний вдоль указанных осей различны, но, чтобы не перегружать наши обозначеняи, соответствующий индекс у величины ω мы явно выписывать не будем. Итак, искомый матричный элемент есть

$$\langle n_j^{k'}|U|n_j^k\rangle = g\prod_{k=x}^{z} T_{n_2^{k'}n_1^{k'}n_1^k n_2^k}, \tag{21}$$

где

$$T_{n_2'n_1'n_1n_2} = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_1 \int\limits_{-\infty}^{+\infty} dx_2 \psi_{n_2'}(x_2)\psi_{n_1'}(x_1) \times \delta(x_1 - x_2)\psi_{n_1}(x_1)\psi_{n_2}(x_2) \tag{22}$$

есть матричный элемент от одномерной дельта-функции. Сразу укажем два свойства $T_{n_2'n_1'n_1n_2}$, непосредственно следующих из определения (22). Во-первых, данный матричный элемент не меняется при любой перестановке его четырех индексов. Во-вторых, он отличен от 0 лишь в тех случаях, когда сумма $n_1 + n_2 + n_1' + n_2'$ является четной.

Чтобы вычислить матричный элемент (22), произведем преобразование координат, отделяющее движение центра масс пары частиц от их относительного движения,

$$x_1' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_1 + x_2), \quad x_2' = \frac{1}{\sqrt{2}}(x_2 - x_1). \tag{23}$$

Формально оно сводится к повороту на угол $\pi/4$ в "плоскости" (x_1, x_2). Используя разложение (7), находим

$$T_{n_2'n_1'n_1n_2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{\nu_1,\nu_2,\nu_1',\nu_2'} K_{n_1n_2}^{\nu_1\nu_2}(\pi/2) K_{n_1'n_2'}^{\nu_1'\nu_2'}(\pi/2) \times \delta_{\nu_1\nu_1'}\psi_{\nu_2'}(0)\psi_{\nu_2'}(0) \tag{24}$$

($\delta_{\nu_1\nu_1'}$ — символ Кронекера). Подставляя собственные функции гармонического осициллятора в явном виде (т.е. выражая их через полином Эрмита) [1] и пользуясь основным результатом (11) данной работы, приводим (24) к виду

$$T_{n_2'n_1'n_1n_2} = (-1)^{J'-J}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}} \times \sum_s d^J_{M2s-J}(\pi/2) d^J_{M'+2s+J'-2J}(\pi/2) \times \frac{\sqrt{(2s)!(2s+2J'-2J)!}}{s!(s+J'-J)!2^{2s+J'-J}}, \tag{25}$$

где индекс суммирования s пробегает все целочисленные значения, для которых аргументы факториалов в (25) неотрицательны. Здесь и далее фиксируем обозначения

$$J = \frac{1}{2}(n_1 + n_2), \qquad J' = \frac{1}{2}(n_1' + n_2'),$$

$$M = \frac{1}{2}(n_2 - n_1), \qquad M' = \frac{1}{2}(n_2' - n_1').$$

После достаточно долгих, хотя и рутинных, преобразований, основанных на формулах из теории углового момента [3], удается свести (25) к виду, не содержащему функций Вигнера, но выражающемуся через коэффициенты Клебша–Гордана $C^{jm}_{j_1m_1j_2m_2}$ (такая форма удобна для численных расчетов с использованием прикладного пакета Mathematica 3.0, в котором коэффициенты Клебша–Гордана присутствуют в качестве стандартных функций),

$$T_{n_2'n_1'n_2} = \zeta_{2(J+J')}\sqrt{\frac{m\omega}{2\pi\hbar}} \sum_{l=|J-J'|}^{J+J'} \sum_{J_3=|J-J'|}^{J+J'} \sum_{J_4=\max(|J_3-l|,|M-M'|)}^{J_3+l} \times (-1)^{(J_4+M'-M+J+J'-l)/2}\zeta_{l-J'+J} \times \zeta_{J_4-M+M'} C^{J_3M-M'}_{JMJ'-M'} C^{J_4M-M'}_{J_3M-M'l0} C^{J_3J-J'}_{Jl-J'J'J-l} C^{J_40}_{J_3J-J'lJ'-J} \times \frac{\sqrt{(J_4-M+M')!(J_4+M-M')!}}{2^{J_4}[(J_4-M+M')/2]![J_4+M-M')/2]!}. \tag{26}$$

Здесь введено обозначение $\zeta_s = \frac{1}{2}[(-1)^s + 1]$ (т.е. ζ_s равно 1, если s четно, и равно 0 в противном случае). Вычисление матричных элементов от степеней разности координат двух атомов и, следовательно, от энергии их взаимодействия, имеющей вид степенного ряда, отличие от псевдопотенциала (20), может быть произведено аналогичным образом.

Данная работа поддержана грантами РФФИ (№ 99-02-17076) и "Университеты России" (015.01.01.04).

Автор благодарит Д.А. Варшаловича за неоднократные полезные обсуждения.

Список литературы

[1] *Давыдов А.С.* Квантовая механика. М.: Наука, 1973. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М.: Наука, 1989.
[2] *Ерофеенко В.Т.* Теория сложения. Минск: Наука и техника, 1989.
[3] *Варшалович Д.А., Москалев А.Н., Херсонский В.К.* Квантовая теория углового момента. Л.: Наука, 1975.
[4] *Андреев А.В., Емельянов В.И., Ильинский Ю.А.* Коперативные явления в оптике. М.: Наука, 1988. Альперин М.М., Клубис Я.Д., Хижняк А.И. Введение в физику двухуровневых атомов. Киев: Наукова думка, 1987.
[5] *Питаевский Л.П.* // УФН. 1998. Т. 168. № 6. С. 641–653.