01

О квантовании вращения твердого тела

© В.А. Антонов,[1] Б.П. Кондратьев[2]

[1] Главная астрономическая обсерватория РАН,
196140 Санкт-Петербург, Россия
[2] Удмуртский государственый университет,
426034 Ижевск, Россия
e-mail: kond@uni.udm.ru

(Поступило в Редакцию 21 декабря 2005 г.)

Предложен общий метод решения задачи о квантовании волчка, позволяющий находить собственные функции гамильтониана в виде полиномов различной степени b относительно декартовых координат (для произвольного n). При этом используются фонкции Ламе. Все три кординаты x, y, z входят в расчеты равноправным образом, включая и их связь с эллипсоидальными координатами, что придает выкладкам симметричную форму.

PACS: 03.65.-w, 06.30.Gv

Введение

Задача о нахождении уровней энергии жесткого ротатора, как известно [1], сводится к определению собственных значений оператора Гамильтона

$$H = \frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{J_x^2}{I_A} + \frac{J_y^2}{I_B} + \frac{J_z^2}{I_C}\right), \tag{1}$$

где I_A, I_B, I_c — главные моменты инерции тела относительно трех осей, J_x, J_y, J_z — операторы компонент, углового момента (коммутационные соотношения для данных операторов отличаются знаком от тех, которые имеют место для момента, например, изолированной частицы, но здесь это роли не играет). Соответствующие собственные функции можно искать на единичной сфере, поскольку H действует независимо на концентрических сферах разного радиуса. Собственные же функции при этом получаются в виде полиномов различной степени n относительно декартовых координат.

В [1] вычисления для $n = 1, 2, 3$ даны последовательно и независимо друг от друга. Известен не упомянутый в [1] общий метод, дающий решение сразу для произвольного n, через эллипсоидальные функции Ламе, представленный в [2,3]. Однако в последних работах есть существенный недостаток: выкладки проведены в неудобных терминах угловых переменных, что нарушает симметрию декартовых координат и делает изложение уязвимым с точки зрения строгости.

Ниже мы представим выкладки, аналогичные [2,3], но в более симметричной форме, так как в данной работе координаты x, y, z входят во все расчеты равноправным образом, включая и их связь с эллипсоидальными координатами.

Постановка задачи

Собственные значения гамильтониана будем искать в общем виде через вариационный принцип [4]. Для этого рассморим функционал

$$L = \frac{\hbar^2}{2}\iiint\left[\frac{(J_x\varphi)^2}{I_A} + \frac{(J_y\varphi)^2}{I_B} + \frac{(J_z\varphi)^2}{I_C}\right]dxdydz \tag{2}$$

при дополнительном условии

$$\iiint \varphi^2 dxdydz = 1 \tag{3}$$

в классе дважды дифференцируемых функций $\varphi(x, y, z)$, причем интегрирование в (2) и (3) ведется по тонкому сферическому слою

$$1 - \varepsilon < x^2 + y^2 + z^2 < 1 \quad (\varepsilon \ll 1). \tag{4}$$

Действительно, стандартная процедура составления соответствующего дифференциального уравнения (4) с учетом антиэрмитовости операторов J_x, J_y, J_z приводит к линейному уравнению

$$\frac{\hbar^2}{2}\left(\frac{J_x^2\varphi}{I_A} + \frac{J_y^2\varphi}{I_B} + \frac{J_z^2\varphi}{I_C}\right) + \kappa\varphi = 0 \tag{5}$$

с лагранжевой постоянной κ, которая и оказывается искомым собственным значением функции L.

Свойства функций Ламе изложены в [5–8]. Далее следуем общепринятым обозначениям. Уравнение единичной сферы

$$x^2 + y^2 + z^2 = 1 \tag{6}$$

заменой переменных

$$x = \frac{x'}{a}, \quad y = \frac{y'}{b}, \quad z = \frac{z'}{c} \tag{7}$$

превращаем в уравнение эллипсоида

$$\frac{x'^2}{a^2} + \frac{y'^2}{b^2} + \frac{z'^2}{c^2} = 1 \tag{8}$$

в пространстве промежуточных переменных x', y', z'. Свяжем последние с эллипсоидальными координатами λ, μ, ν с помощью формул

$$x' = \sqrt{\frac{(\lambda + a^2)(\mu + a^2)(\nu + a^2)}{(b^2 - a^2)(c^2 - a^2)}},$$

$$y' = \sqrt{\frac{(\lambda + b^2)(\mu + b^2)(\nu + b^2)}{(a^2 - b^2)(c^2 - b^2)}},$$

$$z' = \sqrt{\frac{(\lambda + c^2)(\mu + c^2)(\nu + c^2)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}}. \quad (9)$$

Напомним, что эти эллипсоидальные координаты суть корни уравнения

$$\frac{x'^2}{a^2 + w} + \frac{y'^2}{b^2 + w} + \frac{z'^2}{c^2 + w} = 1. \quad (10)$$

Для определенности полагаем $a > b > c$ и $\lambda > \mu > \nu$. При этом две последние координаты изменяются в пределах

$$-c^2 > \mu > -b^2, \quad -b^2 > \nu > -a^2. \quad (11)$$

Так как операторы вращения

$$J_x = y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y} = \frac{c}{b}y'\frac{\partial}{\partial z'} - \frac{b}{c}z'\frac{\partial}{\partial y'},$$

$$J_y = z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z} = \frac{a}{c}z'\frac{\partial}{\partial x'} - \frac{c}{a}x'\frac{\partial}{\partial z'},$$

$$J_z = x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x} = \frac{b}{a}x'\frac{\partial}{\partial y'} - \frac{a}{b}y'\frac{\partial}{\partial x'} \quad (12)$$

действуют в пределах сферы (6), то далее можно полагать $\lambda = 0$.

Задача заключается в нахождении собственных значений оператора Гамильтона (1), когда операторы вращения J_x, J_y, J_z имеют вид (12).

Оператор вращения

Очевидно, что

$$\frac{\partial\lambda}{\partial x'} = 2x'\frac{(b^2 + \lambda)(c^2 + \lambda)}{(\lambda - \mu)(\lambda - \nu)}. \quad (13)$$

Выражения для оператора вращения (12) в эллипсоидальных координатах имеют вид

$$J_z = \left(\frac{b}{a}x'\frac{\partial\lambda}{\partial y'} - \frac{a}{b}y'\frac{\partial\lambda}{\partial x'}\right)\frac{\partial}{\partial\lambda} + \left(\frac{b}{a}x'\frac{\partial\mu}{\partial y'} - \frac{a}{b}y'\frac{\partial\mu}{\partial x'}\right)\frac{\partial}{\partial\mu} + \left(\frac{b}{a}x'\frac{\partial\nu}{\partial y'} - \frac{a}{b}y'\frac{\partial\nu}{\partial x'}\right)\frac{\partial}{\partial\nu}, \quad (14)$$

но

$$\frac{b}{a}x'\frac{\partial\lambda}{\partial y'} - \frac{a}{b}y'\frac{\partial\lambda}{\partial x'} = 2x'y'\left[\frac{b}{a}\frac{(c^2+\lambda)(a^2+\lambda)}{(\lambda-\mu)(\lambda-\nu)} - \frac{a}{b}\frac{(b^2+\lambda)(c^2+\lambda)}{(\lambda-\mu)(\lambda-\nu)}\right] = \frac{2x'y'(b^2-a^2)(c^2+\lambda)\lambda}{ab(\lambda-\mu)(\lambda-\nu)}.$$

Тогда получим

$$J_z = \frac{2x'y'(b^2-a^2)}{ab}\left[\frac{\lambda(c^2+\lambda)}{(\lambda-\mu)(\lambda-\nu)}\frac{\partial}{\partial\lambda} + \frac{\mu(c^2+\mu)}{(\mu-\lambda)(\mu-\nu)}\frac{\partial}{\partial\mu} + \frac{\nu(c^2+\nu)}{(\nu-\lambda)(\nu-\mu)}\frac{\partial}{\partial\nu}\right] \quad (15)$$

и аналогичные выражения для J_x, J_y.

Выше отмечалось, что на самой единичной сфере $\lambda = 0$ и производная по λ исчезает, остается только дифференцирование по μ и ν, поэтому

$$x = \sqrt{\frac{(\mu + a^2)(\nu + a^2)}{(b^2 - a^2)(c^2 - a^2)}}, \quad y = \sqrt{\frac{(\mu + b^2)(\nu + b^2)}{(a^2 - b^2)(c^2 - b^2)}},$$

$$z = \sqrt{\frac{(\mu + c^2)(\nu + c^2)}{(a^2 - c^2)(b^2 - c^2)}}. \quad (16)$$

Таким образом, находим компоненты оператора вращения

$$J_x = \frac{2yz(c^2-b^2)}{\mu-\nu}\left[(a^2+\mu)\frac{\partial}{\partial\mu} - (a^2+\nu)\frac{\partial}{\partial\nu}\right];$$

$$J_y = \frac{2zx(a^2-c^2)}{\mu-\nu}\left[(b^2+\mu)\frac{\partial}{\partial\mu} - (b^2+\nu)\frac{\partial}{\partial\nu}\right];$$

$$J_z = \frac{2xy(b^2-a^2)}{\mu-\nu}\left[(c^2+\mu)\frac{\partial}{\partial\mu} - (c^2+\nu)\frac{\partial}{\partial\nu}\right]. \quad (17)$$

При возведении $J_x\varphi$, $J_y\varphi$, $J_z\varphi$ в квадрат, согласно (17), получаются, в частности, члены с участием общих производных

$$\frac{(J_x\varphi)^2}{I_A} + \frac{(J_y\varphi)^2}{I_B} + \frac{(J_z\varphi)^2}{I_C} = Q\left[\frac{(b^2-c^2)\frac{\partial\varphi}{\partial\mu}\frac{\partial\varphi}{\partial\nu}}{I_A} + \ldots\right], \quad (18)$$

где не выписанные члены отличаются от данного круговой перестановкой индексов a, b, c, а Q — одно и то же:

$$Q = \frac{4(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}{(a^2-b^2)(a^2-c^2)(b^2-c^2)(\mu-\nu)^2}. \quad (19)$$

Таким образом, если выполнены соотношения

$$\frac{\hbar^2}{2I_A} = sa^2 + S, \quad \frac{\hbar^2}{2I_B} = sb^2 + S, \quad \frac{\hbar^2}{2I_C} = sc^2 + S \quad (20)$$

с какими-либо постоянными s и S, то указанные смешанные члены взаимно уничтожаются. Остаются члены с квадратами производных. Коэффициентом при $(\frac{\partial\varphi}{\partial\mu})^2$ является

$$-\frac{2\hbar^2(\mu+b^2)(\nu+b^2)(\mu+c^2)(\mu+a^2)^2}{I_A(a^2-b^2)(a^2-c^2)(\mu-\nu)^2}+\ldots$$

$$=-Q\left[\frac{(sa^2+S)(\mu+a^2)(b^2-c^2)}{\nu+a^2}+\ldots\right]$$

$$=-Q\left\{\left[sa^2+S+s\mu+\frac{(\mu-\nu)(S-s\nu)}{\nu+a^2}\right](b^2-c^2)+\ldots\right\}$$

$$=-Q(\mu-\nu)(S-s\nu)\left(\frac{b^2-c^2}{\nu+a^2}+\frac{c^2-a^2}{\nu+b^2}+\frac{a^2-b^2}{\nu+c^2}\right)$$

$$=-\frac{Q(\mu-\nu)(S-s\nu)(a^2-b^2)(a^2-c^2)(b^2-c^2)}{(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}. \quad (21)$$

Вместе с аналогичными членами, содержащими квадрат другой производной, это дает

$$\frac{(J_x\varphi)^2}{I_A}+\frac{(J_y\varphi)^2}{I_B}+\frac{(J_z\varphi)^2}{I_C}$$

$$=\frac{4}{(\mu-\nu)}\left[(S-s\upsilon)(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\mu}\right)^2\right.$$

$$\left.-(S-s\mu)(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\nu}\right)^2\right]. \quad (22)$$

С другой стороны, из выражения для квадрата линейного элемента [5–8]

$$dx'^2+dy'^2+dz'^2=g_1d\lambda^2+g_2d\mu^2+g_3d\nu^2, \quad (23)$$

где коэффициенты мы выписываем в интересующем нас случае $\lambda=0$, т. е.

$$g_1=\frac{\mu\nu}{4a^2b^2c^2}, \qquad g_2=\frac{\mu(\mu-\nu)}{4(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)},$$

$$g_3=\frac{\nu(\nu-\mu)}{4(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)}, \quad (24)$$

получается

$$\frac{d(x,y,z)}{d(\lambda,\mu,\nu)}$$

$$=\frac{\mu\nu(\mu-\nu)}{8abc\sqrt{-(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}}. \quad (25)$$

Кроме того, известно [5–8], что

$$\frac{x'^2}{a^2}+\frac{y'^2}{b^2}+\frac{z'^2}{c^2}-1=\frac{\lambda\mu\nu}{d^2b^2c^2}, \quad (26)$$

а левая часть равна $x^2+y^2+z^2-1$. Сообразуясь с (4), видим, что интегрирование по λ можно сразу заменить умножением на величину интервала

$$\Delta\lambda=\frac{a^2b^2c^2}{\mu\nu}\,\varepsilon. \quad (27)$$

Решение вариационной задачи

С учетом формулы для якобиана и последнего замечания выражаем функционал (2) как

$$L=-\frac{abc\varepsilon}{2}$$

$$\times\iiint\left[(S-s\nu)\sqrt{-\frac{(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)}{(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\mu}\right)^2\right.$$

$$\left.+(S-s\nu)\sqrt{-\frac{(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}{(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)}}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial\nu}\right)^2\right]d\lambda\mu, \quad (28)$$

равенство (3) принимает вид

$$\frac{abc\varepsilon}{8}$$

$$\times\iint\frac{(\mu-\nu)\varphi^2}{\sqrt{-(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}}\,d\lambda d\mu=1. \quad (29)$$

Отсюда обычным образом получаем уравнение экстремали, но уже в терминах λ и μ:

$$4\left[(S-s\nu)\sqrt{-(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)}\right.$$

$$\times\frac{\partial}{\partial\mu}\left(\sqrt{-(\mu+a^2)(\mu+b^2)(\mu+c^2)}\,\frac{\partial\varphi}{\partial\mu}\right)$$

$$+(S-s\nu)\sqrt{(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}$$

$$\left.\times\frac{\partial}{\partial\nu}\left(\sqrt{(\nu+a^2)(\nu+b^2)(\nu+c^2)}\,\frac{\partial\varphi}{\partial\nu}\right)\right]$$

$$+(\mu-\nu)\varphi=0. \quad (30)$$

Далее применяем метод разделения переменных $\psi=\psi_1(\mu)\psi_2(\nu)$

$$-\frac{4}{\mu-\nu}(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)[H-h\nu]\psi_1''(\mu)\psi_2(\nu)$$

$$+\frac{4}{\mu-\nu}(a^2+\nu)(b^2+\nu)(c^2+\nu)[H-h\mu]\psi_1(\mu)\psi_2''(\nu)$$

$$-\frac{1}{\mu-\nu}(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)$$

$$\times\left(\frac{1}{a^2+\mu}+\frac{1}{b^2+\mu}+\frac{1}{c^2+\mu}\right)[H-h\nu]\psi_1'(\mu)\psi_2(\nu)$$

$$+\frac{1}{\mu-\nu}(a^2+\nu)(b^2+\nu)(c^2+\nu)$$

$$\times\left(\frac{1}{a^2+\nu}+\frac{1}{b^2+\nu}+\frac{1}{c^2+\nu}\right)[H-h\mu]\psi_1(\mu)\psi_2'(\nu)$$

$$=C\psi_1(\mu)\psi_2(\nu). \quad (31)$$

Умножаем на $(\mu - \nu)$ и делим на $(H - h\nu)(H - h\mu) \times \times \psi_1(\mu)\psi_2(\nu)$:

$$-\frac{4(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)}{H-h\mu}\,\frac{\psi_1''(\mu)}{\psi_1\mu}$$
$$+\frac{4(a^2+\nu)(b^2+\nu)(c^2+\nu)}{H-h\nu}\,\frac{\psi_2''(\nu)}{\psi_2\nu}$$
$$-\frac{(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)}{H-h\mu}$$
$$\times\left(\frac{1}{a^2+\mu}+\frac{1}{b^2+\mu}+\frac{1}{c^2+\mu}\right)\frac{\psi_1'(\mu)}{\psi_1\mu}$$
$$+\frac{(a^2+\nu)(b^2+\nu)(c^2+\nu)}{H-h\nu}$$
$$\times\left(\frac{1}{a^2+\nu}+\frac{1}{b^2+\nu}+\frac{1}{c^2+\nu}\right)\frac{\psi_2'(\nu)}{\psi_2\nu}$$
$$=\frac{C(\mu-\nu)}{(H-h\mu)(H-h\nu)}. \qquad (32)$$

Преобразуем правую часть

$$\frac{C}{h}\left(\frac{1}{H-h\nu}-\frac{1}{H-h\mu}\right)=\frac{C}{h}\,\frac{h(\mu-\nu)}{(h-h\mu)(h-h\nu)}, \qquad (33)$$

в результате

$$-\frac{2(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)}{H-h\mu}\,\frac{\psi_1''(\mu)}{\psi_1\mu}$$
$$-\frac{(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)}{H-h\mu}$$
$$\times\left(\frac{1}{a^2+\mu}+\frac{1}{b^2+\mu}+\frac{1}{c^2+\mu}\right)\frac{\psi_1'(\mu)}{\psi_1\mu}+\frac{C}{h(H-h\mu)}$$
$$=\frac{2(a^2+\nu)(b^2+\nu)(c^2+\nu)}{H-h\nu}\,\frac{\psi_2''(\nu)}{\psi_2\nu}$$
$$-\frac{(a^2+\nu)(b^2+\nu)(c^2+\nu)}{H-h\nu}$$
$$\times\left(\frac{1}{a^2+\nu}+\frac{1}{b^2+\nu}+\frac{1}{c^2+\nu}\right)\frac{\psi_2'(\nu)}{\psi_2\nu}$$
$$+\frac{C}{h(H-h\nu)}=\gamma, \quad (\gamma=\mathrm{const}). \qquad (34)$$

В итоге получим дифференциальное уравнение Ламе

$$-2(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)\psi_1''(\mu)$$
$$-(a^2+\mu)(b^2+\mu)(c^2+\mu)$$
$$\times\left(\frac{1}{a^2+\mu}+\frac{1}{b^2+\mu}+\frac{1}{c^2+\mu}\right)\psi_1'(\mu)+\frac{C}{h}\,\psi_1(\mu)$$
$$=\gamma(H-h\mu)\psi_1(\mu), \qquad (35)$$

которое и представляет собой решение поставленной задачи.

Заключение

Задача о квантовании жесткого ротатора сводится к анализу собственных значений дифференциального уравнения Ламе. Это позволяет находить возможные значения энергии ротатора систематическим путем, в отличие от подхода Ландау и Лифшица для каждого конкретного случая в отдельности. В частности, можно без особого труда получить асимптоту этих значений энергий на основе соответствующей теории для дифференциальных уравнений. В процитированных работах Крамерса и Клейна подобный подход уже был развит, хотя и в менее симметричной форме, однако он на данный момент незаслуженно забыт.

Список литературы

[1] *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика. Нерелятивистская теория. М.: Физматгиз, 1963. 702 с.

[2] *Kramers H.A., Ittman G.P.* // Zeitschrift für Physik. 1929. Vol. 53. N 7–8. S. 553–565.

[3] *Klein O.* // Zeitschrift für Physik. 1929. Vol. 58. N 11–12. S. 730–734.

[4] *Гельфанд И.М., Фомин С.В.* Вариационное исчисление. М.: Физматгиз, 1961. 228 с.

[5] *Бейтмен С., Эрдейи А.* Высшие трансцендентные функции. Эллиптические и автоморфные функции Ламе и Матье. М.: Физматгиз, 1967. 299 с.

[6] *Гобсон Е.В.* Теория сферических и эллипсоидальных функций. М.: ИЛ. 1952.

[7] *Литтлтон Г.А.* Устойчивость вращающихся масс жидкости. М. Ижевск, 2001. 239 с.

[8] *Антонов В.А., Тимошкова Е.А., Холшевников К.В.* Введение в теорию ньютоновского потенциала. М.: Наука, 1988. 299 с.