К СООТНОШЕНИЮ МЕЖДУ ПАРАБОЛИЧЕСКИМИ И СФЕРИЧЕСКИМИ ВОЛНОВЫМИ ФУНКЦИЯМИ АТОМА ВОДОРОДА

М. Г. АРУТЮНЯН, Г. С. ПОГОСЯН, В. М. ТЕР-АНТОНЯН

В настоящей заметке предложен простой метод вычисления коэффициентов унитарного преобразования, связывающего между собой параболические и сферические волновые функции атома водорода. Впервые такое преобразование было получено в работе Парка [1] из теоретико-групповых соображений, существенно опирающихся на доказанную ранее Фокком [2] инвариантность гамильтониана атома водорода относительно группы вращений $O(4)$. В дальнейшем Тартер [3] без обращения к каким-либо симметричным аргументам показал, что эти коэффициенты лишь с точностью до фазового множителя совпадают с коэффициентами, полученными в работе Парка. Как выяснилось позже [4], возникновение дополнительно множителя обусловлено фазовым отличием парковских векторов состояния от общепринятых волновых функций атома водорода [5].

Здесь мы хотим заметить, что метод Тартера излишне громоздок, и собираемся показать, как соответствующие коэффициенты преобразования могут быть получены из простых асимптотических соображений [6].

Запишем интересующее нас унитарное преобразование в виде

$$\psi_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \varphi) = \sum_{l'=0}^{n-1} W_{n_1 n_2 m}^{l'} \psi_{n l' m}(r, \theta, \varphi), \quad (1)$$

где $n = n_1 + n_2 + |m| + 1$, а нормированные волновые функции $\psi_{n_1 n_2 m}$ и $\psi_{n l m}$ соответствуют одному и тому же уровню энергии и выбраны следующим образом [5]:

$$\psi_{n_1 n_2 m}(\xi, \eta, \varphi) = \frac{2}{n^{|m|+2} (|m|!)^2} \sqrt{\frac{(n_1 + |m|)! (n_2 + |m|)!}{4\pi (n_1)! (n_2)!}} \exp\left(-\frac{\xi + \eta}{2n}\right) \exp(im\varphi) \times \\ \times (\xi\eta)^{\frac{|m|}{2}} F\left(-n_1, |m| + 1, \frac{\xi}{n}\right) F\left(-n_2, |m| + 1, \frac{\eta}{n}\right),$$

$$\psi_{n l m}(r, \theta, \varphi) = \frac{2}{(2l+1)!(n)^{l+2}} \sqrt{\frac{(n+l)!}{(n-l-1)!}} (2r)^l \exp\left(-\frac{r}{n}\right) \times \\ \times F\left(-n+l+1, 2l+2, \frac{2r}{n}\right) Y_{lm}(\theta, \varphi).$$

Задачу можно существенно упростить, если перейти в (1) к пределу больших r . Действительно, учитывая, что при этом ξ и η стремятся к бесконечности, и пользуясь асимптотическим видом вырожденной гипергеометрической функции

$$F(-N, k, x) \xrightarrow{x \rightarrow \infty} (-1)^N \frac{(k-1)!}{(N+k-1)!} (x)^N,$$

легко показать, что зависимость от r в (1) выпадает. Поэтому умножая обе части получающегося таким образом асимптотического равенства на $Y_{lm}^*(\theta, \varphi)$ и интегрируя по телесному углу, получим:

$$W_{n_1, n_2, m}^l = \frac{(-1)^{|m|}}{2^{n+l} (l)!} \sqrt{\frac{(l+m)! (n+l)! (n-l-1)! (2l+1)}{(l-m)! (n_1)! (n_1+|m|)! (n_2)! (n_2+|m|)!}} \times \int_{-1}^1 (1-x)^{n_1} (1+x)^{n_2} \frac{d^{l-m}}{dx^{l-m}} \{(1-x)^l (1+x)^l\} dx. \quad (2)$$

Сравнивая (2) с известным интегральным представлением [7] для коэффициентов Клебша—Гордона

$$C_{a\alpha, b\beta}^{c\gamma} = \frac{(-1)^{a+\beta-\gamma}}{2^{a+b+c+1}} \times \sqrt{\frac{(c+\gamma)! (a+b-c)! (a+b+c+1)! (2c+1)}{(a+\alpha)! (a-\alpha)! (b+\beta)! (b-\beta)! (c-\gamma)! (b+c-\alpha)! (a+c-b)!}} \times \int_{-1}^1 (1-x)^{a-\alpha} (1+x)^{b-\beta} \frac{d^{c-\gamma}}{dx^{c-\gamma}} \{(1-x)^{b+c-\alpha} (1+x)^{a+c-b}\} dx,$$

сразу приходим к искомому результату

$$W_{n_1, n_2, m}^l = (-1)^{n_1-l} \left(\frac{m+n_1-n_2}{2}, \frac{m+n_2-n_1}{2} \middle| l, m \right).$$

Заметим, что при переходе от соотношения (1) к (2) в области интегрирования по телесному углу имеются направления, вдоль которых либо ξ , либо η обращаются в нуль. Строго говоря, эти точки при интегрировании преобразования (1) должны быть выделены с некоторыми малыми окрестностями. В оставшейся области интегрирования левую часть (1) можно заменить соответствующими асимптотиками. Так как вырожденные гипергеометрические функции в левой части (1) особенностей не имеют, то при дальнейшем сужении «опасных» областей их вклады исчезают.

Ереванский государственный
университет

Поступила 15.VI.1977

ЛИТЕРАТУРА

1. D. Park. *Zs. f. Phys.*, 159, 155 (1960).
2. V. A. Fock. *Zs. f. Phys.*, 98, 145 (1935).
3. C. V. Tarter. *J. Math. Phys.*, 11, 3192 (1970).
4. Г. Я. Коренман. Вестник МГУ, Физика, Астрономия, 3, 375 (1976).
5. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. *Квантовая механика*, М., 1974.
6. Г. С. Погосян, В. М. Тер-Антонян, Г. Т. Торосян. Препринт ПЛРФ—77—04, Ереван, 1977.

7. Д. А. Варшалович, А. Н. Москалев, В. К. Херсонский. Квантовая теория углового момента, Л., 1975.

ՋՐԱՄԵՆԻ ԱՏՈՄԻ ՊԱՐԱԲՈՂԻԿ ԵՎ ՍՖԵՐԻԿ ԱՂԻՔԱՅԻՆ
ՖՈՒՆԿՑԻՆՆԵՐԻ ՄԻՋԵՎ ԵՂԱՄ ԱՌՆՉՈՒԹՅԱՆ ՄԱՍԻՆ

Մ. Հ. ՀԱՐՈՒԹՅՈՒՆՅԱՆ, Գ. Ս. ՊՈԳՈՍՅԱՆ, Վ. Մ. ՏԵՐ-ԱՆՏՈՆՅԱՆ

Առաջարկված է չրածնի ատոմի միևնույն էներգետիկ մակարդակին համապատասխանող պարաբոլիկ և սֆերիկ ալիքային ֆունկցիաները իրար հետ կապող սնիտար ձևափոխության գործակիցների հաշվման պարզ մեթոդը:

TO THE CONNECTION BETWEEN PARABOLIC AND POLAR
WAVE FUNCTIONS OF THE HYDROGEN ATOM

M. H. ARUTYUNYAN, G. S. POGOSYAN, V. M. TER-ANTONYAN

The simple method is proposed for the estimation of unitary transformation coefficients connecting parabolic and polar wave functions, corresponding to the same energy level of the hydrogen atom.