Письма в ЖЭТФ, том 117, вып. 9, с. 712 – 716

Оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве

С. П. Ефимов[1)]

Московский государственный технический университет им. Н. Э. Баумана, 105005 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 марта 2023 г.
После переработки 26 марта 2023 г.
Принята к публикации 30 марта 2023 г.

Рассмотрена квантовая фундаментальная задача Кулона в импульсном пространстве. Вместо интегрального уравнения Фока найдено дифференциальное уравнение, связанное с группой SO(4). В координатном пространстве это сумма квадратов операторов углового момента и нормированного вектора Рунге–Ленца. В импульсном пространстве такой подход не известен и оператор Рунге–Ленца не используется. Найденная форма оператора Рунге–Ленца проще, чем в координатном пространстве, что позволяет эффективно рассматривать задачу Кулона в импульсном пространстве. Найдена связь с оператором инфинитезимального вращения трехмерной сферы Фока.

DOI: 10.31857/S1234567823090124, EDN: bpsomb

1. Введение. Квантовая задача Кулона, позволяющая рассчитывать спектр системы из двух противоположных зарядов, является до сих пор фундаментальной в квантовой теории [1–4]. С ней связаны имена основателей физики XX в. Н. Бора, А.Зоммерфельда, В.Паули, Э.Шредингера, В.Фока. С нее начинается введение в теорию атомных спектров, и она прекрасно изучена методами теории специальных функций. Благодаря своей простоте и заложенной в ней симметрии – группе вращений 4-х мерного пространства SO(4), задача Кулона является исключительно полезным и тонким инструментом теоретической физики для построения различных концепций [5–7].

Переход в импульсное пространство в теоретической физике, в частности, в квантовой электродинамике, исключительно эффективен, поскольку локальные дифференциальные операторы превращаются в полиномы и преобразования сводятся к алгебраическим. Задача Кулона здесь занимает отдельную нишу. При переходе в импульсное пространство уравнение Шредингера (УШ) становится интегральным. Фок применил к импульсному $3d$-пространству стереографическую проекцию, сворачивая его в $3d$-сферу [8–10].

Интегральное уравнение переходит в уравнение для сферических функций на сфере в $4d$-пространстве, которое условно интерпретируется как свободное движение квантовой частицы на $3d$-сфере.

Напомним предысторию достижения Фока. Два классических векторных интеграла – угловой момент и вектор Лапласа–Рунге–Ленца в квантовой механике соответствуют векторным операторам, которые коммутируют с оператором энергии. Анализ их коммутаторов, проведенный в [11], показывает, что они порождают алгебру Ли (линейное пространство с операцией коммутирования), совпадающую с алгеброй Ли малых (инфинитезимальных) операторов поворотов 4-х мерного пространства [1, 3].

Для физиков это соответствие означает, что существует преобразование переменных и операторов, которое переводит исходную квантовую задачу Кулона в некоторое состояние частицы на трехмерной $3d$-сфере, вложенной в четырехмерное $4d$-пространство. Оператор энергии при этом будет инвариантен при вращениях $3d$-сферы и возникает, естественно, векторный оператор рождения на трехмерной сфере, разработанный для сферы двумерной [13].

В работе [14] УШ трансформируется так, что все радиусы орбит сводятся к единице. Это означает, что задача сводится к квантованию величины заряда $Z = n$. УШ возводится в квадрат и возникающий оператор перестает быть эрмитовым, не теряя нужных свойств. После этого можно применить переход в импульсное пространство со свойством локальности. Возникает дифференциальное уравнение для собственных функций в импульсном пространстве. В этой работе найден физический смысл уравнения, его решения, и с помощью него дифференциальный оператор Рунге–Ленца простой формы в импульсном пространстве. Применение его в теоретической физике значительно упрощается. Показана

[1)]e-mail: serg.efimo2012@yandex.ru

связь с инфинетиземальным оператором на $3d$-сфере Фока.

Таким образом, квантовая задача Кулона занимает нужную позицию при переходе в импульсное пространство, что весьма полезно для теорий, рассматривающих кулоновское взаимодействие вместе с теорией возмущений.

2. Теория Фока. УШ для собственных функций связанных состояний при использовании атомных единиц, когда единица энергии есть $\frac{Z^2me^2}{\hbar^2}$, а единица длины – радиус Бора $a_B = \frac{\hbar^2}{Zme^2}$, имеет вид

$$\left(-\frac{1}{2}\Delta - \frac{1}{2}\right)\Psi_{nl} = -\frac{1}{2n^2}\Psi_{nl}. \tag{1}$$

Удобно далее все орбиты радиусов na_B привести к одному радиусу [1], т.е. сделать замену радиуса вектора (для каждой собственной функции): $\mathbf{x}' = \frac{\mathbf{x}}{n}$. Уравнение (1) приобретает простую математическую форму:

$$(-\Delta + 1)\Psi_{nl} = \frac{2n}{r}\Psi_{nl}, \tag{2}$$

где опять применены обозначения: для вектора $\mathbf{x}$, а для его модуля r. Собственные функции в импульсном представлении будут тогда иметь "растянутый" аргумент: $\mathbf{p}' = n\mathbf{p}$.

УШ (2) при переходе к импульсному представлению ($\hbar = 1$):

$$\Psi_{nl}(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^3}\int a_{nl}(\mathbf{p})e^{i(\mathbf{px})}d^3\mathbf{p}, \tag{3}$$

содержит свертку по импульсам. Поскольку потенциал $1/r$ переходит в $4\pi/\mathbf{p}^2$, УШ в импульсном пространстве нелокально:

$$(\mathbf{p}^2 + 1)a_{nl}(\mathbf{p}) - \frac{2n}{2\pi^2}\int\frac{a_{nl}(\mathbf{p}')d^3\mathbf{p}'}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} = 0. \tag{4}$$

Фок применил к этому уравнению стереографическую проекцию [11], которая сгибает трехмерное плоское пространство в трехмерную сферу. Четыре координаты на сфере связаны с импульсами следующим образом[2]):

$$\boldsymbol{\xi} = \frac{2\mathbf{p}}{(1 + \mathbf{p}^2)}, \quad \xi_0 = \frac{(\mathbf{p}^2 - 1)}{(\mathbf{p}^2 + 1)}, \quad \boldsymbol{\xi}^2 + \xi_0^2 = 1. \tag{5}$$

В новых переменных, с учетом множителя, выбранным Фоком для функции $a_{nl}(\mathbf{p})$, собственная функция равна:

$$b_{nl}(\boldsymbol{\xi}, \xi_0) = (\mathbf{p}^2 + 1)^2 a_{nl}(\mathbf{p}). \tag{6}$$

Существенно, что проекция является конформным преобразованием. Углы между пересекающимися кривыми сохраняются. (По этой причине проекцию изобрели для морских карт.) Метрика на сфере в координатах пространства импульсов ($3d$-плоскости $\mathbf{p}$) равна:

$$\frac{4}{(\mathbf{p}^2 + 1)^2}(d\mathbf{p}^2). \tag{7}$$

Отсюда коэффициент сжатия элементов пространства $\mathbf{p}$ равен $(1 + \mathbf{p}^2)/2$. Элемент объема в формуле (10) заменяем через элемент трехмерной поверхности :

$$d^3\mathbf{p} = \frac{1}{8}(1 + \mathbf{p}^2)^3 dS_3. \tag{8}$$

Ядро интеграла удачно для физики (и не очевидно для математики) преобразуется следующим образом:

$$\frac{1}{|\mathbf{p} - \mathbf{p}'|^2} = \frac{2}{(\mathbf{p}^2 + 1)}\frac{1}{[(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^2 + (\xi_0 - \xi_0')^2]}\frac{2}{(\mathbf{p}'^2 + 1)}, \tag{9}$$

что не вытекает из конформности.

Теперь подставляем соотношения (6), (8) и (9) в интегральное уравнение (4). Получаем:

$$b_{nl}(\boldsymbol{\xi}, \xi_0) - \frac{n}{2\pi^2}\int\frac{b_{nl}(\boldsymbol{\xi}', \xi_0')dS_3'}{[(\boldsymbol{\xi} - \boldsymbol{\xi}')^2 + (\xi_0 - \xi_0')^2]} = 0. \tag{10}$$

Это уравнение, как заметил Фок, для сферических функций на трехмерной сфере [15].

Для физики необходимо рассматривать решения, которые пропорциональны (обычным) двумерным сферическим функциям:

$$Y_{n,l}(\theta, \phi)P_{n-1-l}^{l+1}(\boldsymbol{\xi}, \zeta), \tag{11}$$

где второй множитель есть полином Гегенбауэра [15]. Аргументы полинома Гегенбауэра есть координаты на сфере Фока, связанные с импульсами по формулам (5). Таким образом, Фок впервые нашел общую формулу для собственных функций в импульсном пространстве.

3. Дифференциальная форма УШ в импульсном пространстве.

3.1. Вывод уравнения. Следуя работе [13], исходим из уравнения (2), когда радиус орбиты (при умножении аргумента на n) сведен к единице. Умножим (2) на модуль r и возведем обе части в квадрат:

$$r(-\Delta + 1)r(-\Delta + 1)\Psi_{nl} = 4n^2\Psi_{nl}. \tag{12}$$

Переставляя операторы, имеем:

$$[r^2(\Delta - 1)^2 + 2(\hat{l}_{\mathbf{r}} + 1)(\Delta - 1)]\Psi_{nl} = 4n^2\Psi_{nl}, \tag{13}$$

[2])В монографии [3] измпенен знак ζ.

где оператор “степени” $\hat{l}_n = (\mathbf{r}\nabla)$. В соответствии с теоремой Эйлера, которая справедлива для всех однородных функций (не только для полиномов, например для множителя $1/r$ и его степеней), оператор умножает однородный полином на его степень.

Переходим к новой функции

$$\Phi_{nl} = (\Delta - 1)^2 \Psi_{nl},$$

что соответствует умножению спектра на $(p^2+1)^2$ (см. в методе Фока (6)). Для этого применим к уравнению (13) оператор $(\Delta-1)^2$ слева и переставим операторы $\hat{l}_{\mathbf{r}}$ и Δ местами. Получаем уравнение для функции $\Phi_{nl}(\mathbf{x})$:

$$[(\Delta-1)^2 r^2 + 2(\Delta-1)(\hat{l}_{\mathbf{r}}+3)]\Phi_{nl} = 4(n^2-1)\Phi_{nl}.$$

Теперь можно перейти к спектрам $a_{nl}(\mathbf{p})$ и $b_{nl}(\mathbf{p})$, заменяя $\nabla_{\mathbf{r}}$ на $i\mathbf{p}$ и $\mathbf{x}$ на $i\nabla_{\mathbf{p}}$:

$$\left[-\frac{(p^2+1)^4}{4}\Delta_{\mathbf{p}} + \frac{(p^2+1)}{2}\hat{l}_{\mathbf{p}}\right] b_{nl} = (n^2-1)b_{nl},$$

$$b_{nl}(\mathbf{p}) = (p^2+1)^2 a_{nl}(\mathbf{p}), \tag{14}$$

где $\hat{l}_{\mathbf{p}} = (\mathbf{p}\nabla_{\mathbf{p}})$ – импульсный оператор степени. Вместо интегрального уравнения Фока получаем задачу, не сложнее УШ в координатном пространстве, поскольку оно напоминает УШ с суммой двух потенциалов. Теперь необходимо выяснить его групповой смысл.

3.2. Решение уравнения. Решение уравнения ищем в виде произведения

$$b_{nl}(\mathbf{p}) = Y_l(\mathbf{p})\frac{1}{(p^2+1)^l} P_k\left(\frac{1}{(p^2+1)}\right), \tag{15}$$

где $Y_l(\mathbf{p})$ – шаровая функция (т.е. однородный полином), множитель $P_k(u)$ – полином степени k. Используем при подстановке полезные соотношения для шаровых функций:

$$\Delta Y_l(\mathbf{p}) = 0, \quad Y_l(c\mathbf{p}) = c^l Y_l(\mathbf{p}), \quad (\mathbf{p}\nabla)Y_l(\mathbf{p}) = lY_l(\mathbf{p}). \tag{16}$$

Для полинома $P_k(u)$ уравнение (16) дает функцию Гаусса[3)]:

$$F(\alpha,\beta,\gamma,u) = 1 + \frac{\alpha\beta}{\gamma}\frac{u}{1!} + \frac{\alpha(\alpha+1)\beta(\beta+1)}{\gamma(\gamma+1)}\frac{u}{2!} + ...,$$

где параметры следующие:

$$\alpha = -k, \quad \beta = 2l+k+2, \quad \gamma = l + \frac{3}{2},$$

$$k = n-l-1, \quad u = \frac{1}{(p^2+1)}. \tag{17}$$

Напомним, что переход к реальному спектру требует умножение аргумента $\mathbf{p}$ на n.

Найденная система решений (15) в точности соответствует образам Фурье решений УШ. Это следует хотя бы из того, что угловые зависимости их совпадают (l в координатном пространстве переходит в l в импульсном пространстве, как и сам оператор углового момента). Кроме того, как следует из теории специальных функций [15], функция Гаусса при замене координат (5) переходит в точности в полином Гегенбауера, т.е. в решение (11), найденное Фоком.

Примеры.

a) $n=2$, $l=0$, $k=1$ (изотропное состояние). Импульс удвоим, возвращаясь к радиусу 2.

$$a_{20}(\mathbf{p}) = (\mathrm{const})\frac{1}{(1+4p^2)^2}\left(1 - \frac{2}{(1+4p^2)}\right).$$

Вывод этой формулы с помощью преобразования Ханкеля уже достаточно громоздок.

b) $n=l+1$, $k=0$ (l максимально).

$$\Psi_{n(n-1)}(\mathbf{x}) = Y_{(n-1)}(\mathbf{x})e^{-r},$$

$$a_{nl}(\mathbf{p}) = \frac{Y_l(\mathbf{p})}{(1+p^2)^{(2+l)}}.$$

Возвращаясь к физическому аргументу $n\mathbf{p}$ и используя однородность полинома $Y_l(\mathbf{p})$, получаем:

$$a_{nl}(\mathbf{p}) = (\mathrm{const})\frac{Y_{(n-1)}(\mathbf{p})}{(1+n^2p^2)^{(n+1)}}.$$

4. Оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве. В безразмерных координатах оператор Рунге–Ленца $\hat{R}_x$ есть [1]:

$$\hat{R}_{\mathbf{r}} = \frac{\mathbf{r}}{r} - \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{p}}\hat{L}] - [\hat{L}\hat{\mathbf{p}}]). \tag{18}$$

При переходе к радиусу, равному единице, следует умножить оператор (18) на n, чтобы правила коммутации соответствовали группе SO(4) [1, 11]. После раскрытия скобок векторных произведений, получаем нормированный оператор,

$$\hat{A}_{\mathbf{r}} = \frac{n\mathbf{r}}{r} - \frac{1}{2}([\hat{\mathbf{p}}l] - [l\hat{\mathbf{p}}]) = \frac{n\mathbf{r}}{r} + \mathbf{r}\Delta - (\hat{l}_{\mathbf{r}}+1)\nabla, \tag{19}$$

где $\hat{l}_{\mathbf{r}} = (\mathbf{r}\nabla)$.

Переход в импульсное пространство дает интегральный оператор, поскольку входит потенциал $1/r$. По этой причине оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве исторически не фигурирует [1, 3].

[3)] Гипергеометрическая функция ${}_2F_1$.

Используем прием, который позволил в [13] получить дифференциальное уравнение. Подставим в (19) значение $\frac{n\mathbf{r}}{r}$ из уравнения (2). Получаем выражение

$$\hat{A}_{\mathbf{r}} = \mathbf{r}\frac{(\Delta+1)}{2} - (\hat{l}_{\mathbf{r}}+1)\nabla, \qquad (20)$$

к которому можно применить преобразование Фурье. Заменяя операторы:

$$\mathbf{r} \to i\nabla_{\mathbf{p}}, \quad \nabla_{\mathbf{r}} \to i\mathbf{p}, \quad \hat{l}_{\mathbf{x}} \to -(\hat{l}_{\mathbf{p}}+3), \qquad (21)$$

переходим к (модифицированному) оператору Рунге–Ленца в импульсном пространстве:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = i(\hat{l}_{\mathbf{p}}+1)\mathbf{p} - \frac{(\mathbf{p}^2-1)}{2}i\nabla_{\mathbf{p}}, \qquad (22)$$

действующий на функции $a_{nl}(\mathbf{p})$. Для сравнения с теорией Фока, необходимо перейти к пространству функций $b_{nl}(\mathbf{p})$:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = (p^2+1)^2 i\left[(\hat{l}_{\mathbf{p}}+1)\mathbf{p} - \frac{(\mathbf{p}^2-1)}{2}\right]\frac{1}{(p^2+1)} =$$

$$= i\mathbf{p}\hat{l}_{\mathbf{p}} - \frac{(p^2-1)}{2}i\nabla_{\mathbf{p}}. \qquad (23)$$

5. Свойства оператора Рунге–Ленца. Оператор Рунге–Ленца оказался проще, чем в координатном пространстве:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}} = i\mathbf{p}\hat{l}_{\mathbf{p}} - \frac{(p^2-1)}{2}i\nabla_{\mathbf{p}}. \qquad (24)$$

Его свойства в импульсном пространстве сохраняются. Свойства коммутации:

$$\{L_i, \hat{A}_{\mathbf{p}k}\} = ie_{ikl}\hat{A}_{\mathbf{p}l}, \quad \{\hat{A}_{\mathbf{p}i}, \hat{A}_{\mathbf{p}k}\} = ie_{ikl}L_l. \qquad (25)$$

Свойства ортогональности:

$$\hat{A}_{\mathbf{p}}\hat{L} = \hat{L}\hat{A}_{\mathbf{p}} = 0.$$

Наконец, наиболее важное для группы SO(4) (сумма квадратов):

$$\hat{L}^2 + \hat{A}_{\mathbf{p}}^2 = -\frac{(p^2+1)^4}{4}\Delta_{\mathbf{p}} + \frac{(p^2+1)}{2}\hat{l}_{\mathbf{p}}. \qquad (26)$$

Сравнивая с оператором из уравнения (14), можно сделать вывод, что собственное значение суммы квадратов операторов равно (n^2-1), также как и в координатном пространстве [1].

Проверим, какому оператору на сфере Фока соответствует найденный оператор. В соответствии с (5), на сфере Фока произвольная функция $f(\boldsymbol{\xi},\zeta)$ при переходе в плоское импульсное пространство превращается в функцию

$$f\left(\frac{2\mathbf{p}}{(p^2+1)}, \frac{(p^2-1)}{(p^2+1)}\right), \qquad (27)$$

у которой сумма квадратов аргументов равна единице. Применим к ней оператор Рунге–Ленца (24).

Последовательное дифференцирование аргументов дает:

$$\left(\hat{l}_{\mathbf{p}}\frac{2\mathbf{p}}{(p^2+1)}\right)\nabla_{\boldsymbol{\xi}} = \frac{2\mathbf{p}(1-p^2)}{(p^2+1)^2}\nabla_{\boldsymbol{\xi}} = (-\zeta)(\boldsymbol{\xi}\nabla_{\boldsymbol{\xi}}),$$

$$\left(\hat{l}_{\mathbf{p}}\frac{(p^2-1)}{(p^2+1)}\right)\frac{\partial}{\partial\zeta} = \frac{4p^2}{(p^2+1)^2}\frac{\partial}{\partial\zeta} = \frac{2}{(p^2+1)}(1+\zeta)\frac{\partial}{\partial\zeta},$$

$$\nabla_{\mathbf{p}}\left(\frac{2\mathbf{p}}{(p^2+1)}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\xi}}\right) = \frac{2}{(p^2+1)}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\xi}} - \frac{4\mathbf{p}}{(p^2+1)^2}\left(\mathbf{p}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\xi}}\right),$$

$$\left(\nabla_{\mathbf{p}}\frac{(p^2-1)}{(p^2+1)}\right)\frac{\partial}{\partial\zeta} = \frac{4\mathbf{p}}{(p^2+1)^2}\frac{\partial}{\partial\zeta}.$$

Умножим первые два соотношения на множитель $i\mathbf{p}$, два следующих за ними на величину $-\frac{i(p^2-1)}{2}$. В результате получаем :

$$\hat{\mathbf{A}}_{\mathbf{p}}f(\boldsymbol{\xi},\zeta) = i\left(\boldsymbol{\xi}\frac{\partial}{\partial\zeta} - \zeta\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{\xi}}\right)f(\boldsymbol{\xi},\zeta). \qquad (28)$$

Это означает, что векторный оператор Рунге–Ленца в импульсном пространстве переходит в предсказанные ранее теоретиками три оператора инфинитиземальных вращений трехмерной сферы Фока. Отметим, что свойства коммутации на сфере Фока очевидны. Сумма квадратов (26) переходит в угловую часть четырехмерного оператора Лапласа с собственным значением (n^2-1).

6. Заключение. Найденное дифференциальное уравнение и оператор Рунге–Ленца возвращают квантовую задачу Кулона в группу методов, использующих импульсное пространство. Кроме того, оператор можно применять для формулировок различных взаимодействий, где фигурирует группа SO(4). Метод Фока также упрощается, поскольку можно отказаться от интегрального уравнения и "остаться" в импульсном пространстве. Собственные функции не сложнее, чем в координатном пространстве и хорошо интегрируются для простых возмущений.

1. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц, *Квантовая механика: нерелятивисткая теория*, Наука, М. (1974) [L. D. Landau and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics: Nonrelativistic Theory*, Pergamon, Oxford (1958)].
2. H. A. Bethe and E. E. Salpeter, *Quantum mechanics of one and two-electron atoms*, Springer, Berlin (1957).

3. А. И. Базь, Я. Б. Зельдович, А. М. Переломов, *Рассеяние, реакции и распады в нерелятивисткой квантовой механике*, Наука, М. (1971) [A. I. Baz, Ya. B. Zel'dovich, and A. M. Perelomov, *Scattering, reactions and decays in nonrelativistic quantum mechanics, Israel program for scientific translations*, Jerusalem (1969)].
4. J. L. Basdevant and J. Dalibard, *The Quantum Mechanics Solver*, Springer-Verlag, Berlin, N.Y., Heidelberg (2000).
5. С. П. Аллилуев, ЖЭТФ **33**, 200 (1957).
6. А. М. Переломов, В. С. Попов, ЖЭТФ **50**, 179 (1966).
7. M. Bander, C. Itzykson, Rev. Mod. Phys. **38**, 330 (1966).
8. В. А. Фок, *Начала квантовой механики*, Кубуч, Л. (1932); 2-изд., Наука, М. (1976).
9. V. A. Fock, Zs. f. Phys. **98**, 145 (1935); doi.org/10.1007/BF01336904.
10. V. A. Fock, *Selected Works: Quantum Mechanics and Quantum Field Theory*, Taylor & Francis, CRC Press, Boca Raton, London, N.Y. (2004).
11. L. Hulthen, Zs. f. Phys. **86**, 21 (1933); doi.org/10.1007/BF013401795.
12. B. Casselman, *Stereographic Projection*, AMS: Feature column (2014); www.ams.org/publiccourreach/...-2014-02-2015.
13. S. P. Efimov, Theor. Math. Phys. **39**, 425 (1979).
14. С. П. Ефимов, УФН **192**(9), 1019; https://Doi.org/10.3367/UFNr.2021.04.038966.
15. A. U. Klimuk and N. Y. Vilenkin, *Representation of Lie Groups and Special Functions*, Springer, Berlin, Heidelberg (1995).