

УДК 51-72:530.145

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ НА СОБСТВЕННЫЕ ЗНАЧЕНИЯ ДЛЯ ГАМИЛЬТониАНА АСИММЕТРИЧНОГО ВОЛЧКА

М.А. Амагов*, И.А. Клименко, Н.А. Чеканов**,

Белгородский государственный университет
308007, Белгород, ул. Студенческая, 14

В работе методом диагонализации найден спектр и собственные функции гамильтониана вращающегося твердого тела с тремя произвольными моментами инерции (асимметричный волчок) в системе базисных функций, реализующей все четыре неприводимые представления группы D_2 , относительно преобразований которой исходный гамильтониан не изменяется. Для вычисления собственных значений при небольших значениях вращательного момента $J = 1, 2, 3, 4$ были получены аналитические формулы, а для больших, произвольных значений разработана аналитически-численная программа в среде MAPLE. В качестве примера, для конкретных значений вращательного момента, приведены собственные значения и их зависимость от параметра асимметрии.

Постановка задачи

Требуется решить задачу на собственные значения для следующего оператора Шредингера:

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 \hat{M}_1^2}{2I_1} + \frac{\hbar^2 \hat{M}_2^2}{2I_2} + \frac{\hbar^2 \hat{M}_3^2}{2I_3}, \quad (1)$$

где \hbar – постоянная Планка, I_1, I_2, I_3 – главные моменты инерции относительно осей внутренней системы координат, а операторы $\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3$ определены как [1]

$$\begin{aligned} \hat{M}_1 &= i \left(\frac{\cos \theta_3}{\sin \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_1} - \sin \theta_3 \frac{\partial}{\partial \theta_2} - \frac{\cos \theta_3}{\operatorname{tg} \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_3} \right), \\ \hat{M}_2 &= i \left(-\frac{\sin \theta_3}{\sin \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_1} - \cos \theta_3 \frac{\partial}{\partial \theta_2} + \frac{\sin \theta_3}{\operatorname{tg} \theta_2} \cdot \frac{\partial}{\partial \theta_3} \right), \\ \hat{M}_3 &= -i \frac{\partial}{\partial \theta_3}, \end{aligned} \quad (2)$$

здесь $\theta_1, \theta_2, \theta_3$ – углы Эйлера ($0 \leq \theta_1 \leq 2\pi$, $0 \leq \theta_2 \leq \pi$, $0 \leq \theta_3 \leq 2\pi$), определяющие положение вращающегося твердого тела в пространстве в системе координат, жестко связанной с телом. Так как многие квантовые объекты, например молекулы и атомные ядра [1-5], имеют вращательные спектры, то они могут быть описаны собственными значениями и функциями гамильтониана (1).

Операторы $\hat{M}_1, \hat{M}_2, \hat{M}_3$ удовлетворяют следующим правилам коммутации:

* amatovm@bsu.edu.ru

** chekanov@bsu.edu.ru

где ε_{mkl} – полностью антисимметричный единичный тензор – и представляют собою проекции оператора полного момента импульса или, другими словами, полного вращательного момента асимметричного волчка \hat{J} , причем имеет место соотношение

$$\hat{J}^2 = \hat{M}_1^2 + \hat{M}_2^2 + \hat{M}_3^2. \quad (4)$$

Для краткости введем следующие обозначения:

$$A \equiv \frac{\hbar^2}{2I_1}, \quad B \equiv \frac{\hbar^2}{2I_2}, \quad C \equiv \frac{\hbar^2}{2I_3} \quad (5)$$

и без потери общности наложим условие

$$A \geq B \geq C, \quad (I_1 \leq I_2 \leq I_3). \quad (6)$$

Тогда гамильтониан (1а) примет выражение

$$\hat{H} = A\hat{M}_1^2 + B\hat{M}_2^2 + C\hat{M}_3^2, \quad (7)$$

которое перепишем в виде

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(A+C)\hat{J}^2 + \frac{1}{2}(A-C)(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2), \quad (8)$$

где

$$\chi = \frac{2B - A - C}{A - C} \quad (9)$$

есть параметр определяющий степень асимметрии произвольного твердого тела.

Сделаем гамильтониан (7) безразмерным. Для этого введем удобную для численных расчетов единицу измерения энергии:

$$\varepsilon_0 \equiv \frac{A+C}{2} = \frac{\hbar^2(I_1 + I_2)}{4I_1I_2}, \quad (10)$$

которая близка к величине первого вращательного уровня.

Тогда безразмерный гамильтониан асимметричного квантового тела вращения примет вид

$$\hat{H} = \hat{J}^2 + \frac{A-C}{A+C}(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2) \quad (11)$$

или, если ввести второй параметр,

$$\eta \equiv \frac{A-C}{A+C}, \quad (12)$$

характеризующий относительную разность между наибольшим и наименьшим моментами инерции, то безразмерный гамильтониан, с которым будем производить дальнейшие вычисления, запишется как

$$\hat{H} = \hat{J}^2 + \eta(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2). \quad (13)$$

При заданном соотношении между величинами A и C , т. е. для определенного значения параметра η , вращательный спектр и собственные функции гамильтониана (13) будут зависеть от единственного параметра χ асимметрии. Меняя величину B , которая заключена между A и C , можно получить всевозможные формы твердого эллипсоида: от вытянутой ($B=C$) при $\chi=-1$ до сплюснутой ($A=B$) при $\chi=1$. При $\chi=0$ получаем наиболее несимметричную форму вращающегося эллипсоида ($A+C=2B$). Вторым параметр η меняется в пределах от $\eta=0$, если выполняется равенство $A=C$ (при этом, конечно, имеют место равенства $A=B=C$, что соответствует твердому телу в виде шара), до $\eta=1$, если величина $A \rightarrow \infty$ ($I_1 \rightarrow 0$).

Самосопряженный дифференциальный оператор (13) можно представить в виде суммы невозмущенного оператора \hat{H}_0 и возмущения V :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V, \quad (14a)$$

$$\hat{H}_0 = J^2, \quad V = \eta(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2). \quad (146)$$

Основные уравнения

Таким образом, наша исходная задача сводится к нахождению безразмерных собственных значений ε и собственных функций ψ_J дифференциального оператора (14), то есть к решению уравнения Шредингера:

$$(\hat{H}_0 + V - E) \psi_J(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = 0. \quad (15)$$

Для заданного полного момента J решение уравнения (15) будем искать в виде разложения по следующему полному набору ортогональных функций:

$$\psi_J(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \sum_J \sum_K C_K^{(J)} \cdot \varphi_{JK}^{(J)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3), \quad (16)$$

где

$$\varphi_{JK}^{(J)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_{J,K}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) + j\varphi_{J,-K}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)], \quad j = \pm 1, \quad K \geq 0, \quad (17)$$

с нормировкой

$$\iiint \varphi_{JK}^{(J)*}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \varphi_{JK}^{(J)}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) \sin \theta_2 d\theta_1 d\theta_2 d\theta_3 = \delta_{JJ'} \delta_{KK'} \delta_{j j'} (1 + j\delta_{K,0}), \quad (18)$$

причем квантовое число K принимает только целые положительные значения $J = 0, 1, 2, \dots, J-1, J$ при данном целом положительном числе J .

Функции $\varphi_{JK}(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ являются ортонормированными собственными функциями оператора шарового волчка $\hat{H}_0 = \hat{J}^2$ и, как известно (см., например, [1,6]), определяются через обобщенные сферические функции или функции Вигнера $D_{MK}^J(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$ следующим образом:

$$\varphi_{JK}(\theta_1, \theta_2, \theta_3) = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} D_{MK}^J(\theta_1, \theta_2, \theta_3). \quad (19)$$

Для функций Вигнера имеют место следующие уравнения

$$\hat{J}^2 D_{MK}^J = J(J+1) D_{MK}^J, \quad \hat{M}_3 D_{MK}^J = K D_{MK}^J, \quad \hat{M}_3' D_{MK}^J = M D_{MK}^J, \quad (20)$$

здесь \hat{M}_3' есть оператор третьей проекции оператора полного момента \hat{J} в неподвижной системе координат [1], а квантовые числа K и M являются проекциями полного вращательного момента J на третьи оси внутренней и неподвижной систем координат, соответственно.

Вычисление левой части уравнения (15) с функциями (16) проще произвести с помощью операторов $\hat{M}_{(+)}$ и $\hat{M}_{(-)}$, для которых известны соотношения [6]:

$$\hat{M}_{(+)} D_{MK}^J = -\frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(J-K)(J+K+1)} D_{M,K+1}^J, \quad \hat{M}_{(-)} D_{MK}^J = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{(J+K)(J-K+1)} D_{M,K-1}^J \quad (21)$$

и

$$\hat{M}_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{M}_{(-)} - \hat{M}_{(+)}), \quad \hat{M}_2 = \frac{i}{\sqrt{2}} (\hat{M}_{(-)} + \hat{M}_{(+)}). \quad (22)$$

Используя выражения (21) и (22), находим

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= J(J+1) \varphi_{JK}^{(j)}, & \hat{M}_3 \varphi_{JK}^{(j)} &= K \varphi_{JK}^{(j)}, \\ \hat{M}_1^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= \alpha(K) \varphi_{J,K+2}^{(j)} + \alpha(-K) \varphi_{J,K-2}^{(j)} + \frac{1}{2} (J^2 + J - K^2) \varphi_{JK}^{(j)}, \end{aligned} \quad (23)$$

$$\hat{M}_2^2 \varphi_{JK}^{(j)} = -\alpha(K) \varphi_{J,K+2}^{(j)} - \alpha(-K) \varphi_{J,K-2}^{(j)} + \frac{1}{2} (J^2 + J - K^2) \varphi_{JK}^{(j)},$$

где

$$\alpha(K) \equiv \frac{1}{4} \sqrt{(J+K+1)(J+K+2)(J-K-1)(J-K)}, \quad (24)$$

$\alpha(K) = 0$, если $K = \pm J$ и $\alpha(-K) = 0$, если $K = J+1, K = J+2$.

Подставляя выражения (23) в основное уравнение (15), получим

$$\sum_{j,K} C_K^{(j)} \left[(A(J,K) - \varepsilon) \varphi_{jK}^{(j)} + B(J,K) \varphi_{j,K+2}^{(j)} + B(J,-K) \varphi_{j,K-2}^{(j)} \right] = 0, \quad (25)$$

где для простоты записи введены обозначения:

$$A(J,K) \equiv J(J+1) \left(1 + \frac{\eta}{2} (1 + \chi) \right) - \frac{1}{2} \eta K^2 (3 + \chi), \quad B(J,K) \equiv \eta (1 - \chi) \alpha(K) \quad (26)$$

Уравнение (25) умножим слева на функцию $\varphi_{jK}^{(j)*}$ и проинтегрируем по всем переменным $(\theta_1, \theta_2, \theta_3)$. Учитывая условие ортогональности (18) базисных функций (17), получим следующее уравнение относительно неизвестных коэффициентов $C_K^{(j)}$ и собственных значений ε :

$$(A(J,K) - \varepsilon) (1 + j\delta_{K,0}) C_K^{(j)} + B(J,K-2) C_{K-2}^{(j)} + B(J,-K-2) C_{K+2}^{(j)} + j B(J,K-2) C_{2-K}^{(j)} = 0, \quad (27a)$$

которое представим следующим образом:

$$(A(J,K) - \varepsilon) (1 + j\delta_{K,0}) C_K^{(j)} + B(J,K-2) C_{K-2}^{(j)} + \tilde{B}(J,K+2) C_{K+2}^{(j)} + j \tilde{B}(J,2-K) C_{2-K}^{(j)} = 0, \quad (27b)$$

где

$$\tilde{B}(J,K) \equiv B(J,-K) = \eta (1 - \chi) \alpha(-K). \quad (28)$$

Таким образом, решение задачи на собственные значения (16) свелось к решению однородной системы линейных уравнений относительно неизвестных величин $C_K^{(j)}$. В силу однородности системы (27) она имеет нетривиальное решение только при определенных значениях ε , составляющих спектр исходного оператора (14).

Классификация состояний. Основные уравнения в матричном виде

Дифференциальный оператор (14) не изменяется при преобразованиях группы симметрии D_2 , кроме тождественного элемента, содержит три операции поворотов на угол π вокруг трех декартовых осей координат. Как известно [6,7], группа D_2 имеет четыре неприводимых представления, которые обозначаются как A, B_1, B_2, B_3 . Ниже из анализа уравнения (27) покажем, что выбор базисных функций в виде (17) реализует указанные четыре неприводимых представления группы D_2 , в соответствии с которыми будут классифицированы собственные состояния асимметричного волчка.

Действительно, видно, что основное уравнение (27) распадается на две независимые однородные линейные системы по отношению к неизвестным коэффициентам $\{C_K^{(+)}\}$ и $\{C_K^{(-)}\}$:

$$(j = +1)$$

$$(A(J,K) - \varepsilon) (1 + \delta_{K,0}) C_K^{(+)} + B(J,K-2) C_{K-2}^{(+)} + \tilde{B}(J,K+2) C_{K+2}^{(+)} + \tilde{B}(J,2-K) C_{2-K}^{(+)} = 0, \quad (29a)$$

$$(j = -1)$$

$$(A(J,K) - \varepsilon) (1 - \delta_{K,0}) C_K^{(+)} + B(J,K-2) C_{K-2}^{(+)} + \tilde{B}(J,K+2) C_{K+2}^{(+)} + \tilde{B}(J,2-K) C_{2-K}^{(+)} = 0, \quad (29b)$$

В свою очередь, каждая из систем (29) распадается еще на две в зависимости от четности проекции K углового момента J . Для краткости письма введем обозначения:

$$a_K \equiv A(J,K), \quad b_K \equiv B(J,K), \quad \tilde{b}_K \equiv \tilde{B}(J,K) \quad (30)$$

и представим получаемые системы из систем (29) в матричном виде. Вначале выпишем соответствующие матрицы в зависимости от четности полного вращательного момента J и типа симметрии состояний группы D_2 .

Если J – четное число, то имеем следующие матрицы:

$$\begin{aligned}
 & (j = +1) \\
 A = & \left\| \begin{array}{ccccc} a_0 - \varepsilon & b_0 & 0 & 0 & 0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|, B_3 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_7 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \\
 & (j = -1) \\
 B_1 = & \left\| \begin{array}{ccccc} a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 & 0 \\ 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 & 0 \\ 0 & 0 & b_6 & a_8 - \varepsilon & b_8 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|, B_2 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_7 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|
 \end{aligned} \tag{31}$$

Матрица A для состояний A -типа имеет размерность $J/2 + 1$, а матрицы B_1 -, B_2 - и B_3 для состояний B_1 -, B_2 -, B_3 -типов – $J/2$.

Если же J – нечетное число, то

$$\begin{aligned}
 & (j = +1) \\
 \bar{B}_1 = & \left\| \begin{array}{ccccc} a_0 - \varepsilon & b_0 & 0 & 0 & 0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_4 - \varepsilon & b_6 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \bar{B}_2 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_7 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|, \\
 & (j = -1) \\
 \bar{A} = & \left\| \begin{array}{ccccc} a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 & 0 \\ 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 & 0 \\ 0 & 0 & b_6 & a_8 - \varepsilon & b_8 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \bar{B}_3 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_7 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|
 \end{aligned} \tag{32}$$

Матрица \bar{A} для состояний A -типа имеет размерность $(J-1)/2$, а матрицы \bar{B}_1 -, \bar{B}_2 - и \bar{B}_3 для состояний B_1 -, B_2 -, B_3 -типов – $(J+1)/2$.

При получении матриц (31-32) приняты во внимание соотношения $b_K = \tilde{b}_{K+2}$, $b_{2k+1} = \tilde{b}_{2k+3}$ и $b_0 = \tilde{b}_0$, которые следуют из определения (28).

Теперь запишем системы алгебраических уравнений, которые следуют из уравнений (29), в матричном виде, используя матрицы (31)-(32).

Если полный вращательный момент четный: $J = 0, 2, 4, \dots$, то имеем следующие четыре независимые однородные системы уравнений относительно неизвестных коэффициентов $C_K^{(j)}$:

$$A C_A^{(+)} = 0, \quad B_1 C_{B_1}^{(-)} = 0, \quad B_2 C_{B_2}^{(-)} = 0, \quad B_2 C_{B_2}^{(+)} = 0, \quad (33)$$

где

$$C_A^{(+)} = (C_0^{(+)}, C_2^{(+)}, C_4^{(+)}, \dots, C_{J-2}^{(+)}, C_J^{(+)})^T, \quad C_{B_1}^{(-)} = (C_2^{(-)}, C_4^{(-)}, \dots, C_{J-2}^{(-)}, C_J^{(-)})^T, \\ C_{B_2}^{(-)} = (C_1^{(-)}, C_3^{(-)}, C_5^{(-)}, \dots, C_{J-3}^{(-)}, C_{J-1}^{(-)})^T, \quad C_{B_3}^{(+)} = (C_1^{(+)}, C_3^{(+)}, C_5^{(+)}, \dots, C_{J-3}^{(+)}, C_{J-1}^{(+)})^T \quad (34)$$

есть многомерные векторы, а знак « T » обозначает операцию транспонирования.

Если полный вращательный момент нечетный: $J = 1, 3, 5, \dots$, то получаем системы:

$$\bar{A} C_A^{(-)} = 0, \quad \bar{B}_1 C_{B_1}^{(+)} = 0, \quad \bar{B}_2 C_{B_2}^{(+)} = 0, \quad \bar{B}_3 C_{B_3}^{(-)} = 0, \quad (35)$$

где

$$C_A^{(-)} = (C_2^{(-)}, C_4^{(-)}, C_6^{(-)}, \dots, C_{J-3}^{(-)}, C_{J-1}^{(-)})^T, \quad C_{B_1}^{(+)} = (C_0^{(+)}, C_2^{(+)}, C_4^{(+)}, \dots, C_{J-3}^{(+)}, C_{J-1}^{(+)})^T, \\ C_{B_2}^{(+)} = (C_1^{(+)}, C_3^{(+)}, C_5^{(+)}, \dots, C_{J-2}^{(+)}, C_J^{(+)})^T, \quad C_{B_3}^{(-)} = (C_1^{(-)}, C_3^{(-)}, C_5^{(-)}, \dots, C_{J-2}^{(-)}, C_J^{(-)})^T. \quad (36)$$

Матричные элементы матриц A, B_1, B_2, B_3 (четные J) и $\bar{A}, \bar{B}_1, \bar{B}_2, \bar{B}_3$ (нечетные J) содержат величину ε как параметр.

Частные случаи: $J = 1, 2, 3, 4$.

I. Пусть $J = 1$. Состояний A -типа в этом случае нет, так как получается матрица нулевого размера, а для состояний B_1 -, B_2 -, B_3 -типов, соответственно, имеем уравнения:

$$(a_0 - \varepsilon) C_0^{(+)}, \quad (a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon) C_1^{(+)} = 0, \quad (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon) C_1^{(-)} = 0, \quad (37)$$

из которых с учетом определений (24), (26), (28) и (30) находим безразмерные собственные значения ε :

$$\varepsilon(B_1) = 2 \left(1 + \frac{\eta(1+\chi)}{2} \right), \quad \varepsilon(B_2) = 2, \quad \varepsilon(B_3) = (2 - \eta + \eta\chi). \quad (38)$$

Вспоминая единицу измерения энергии (10), которая равна $\varepsilon_0 = \frac{A+C}{2}$, находим размерные собственные значения E асимметричного волчка для момента $J = 1$:

$$E(B_1) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_1) = A + B, \quad E(B_2) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_2) = A + C, \quad E(B_3) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_3) = B + C. \quad (39)$$

II. Пусть $J = 2$. Из системы алгебраических уравнений для состояний A -типа

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon) C_0^{(+)} + b_0 C_2^{(+)} = 0 \\ 2b_0 C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon) C_2^{(+)} = 0 \end{cases} \quad (40a)$$

находим два собственных значения состояний из равенства нулю определителя

$$\begin{vmatrix} a_0 - \varepsilon & b_0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad (40b)$$

что приводит к квадратному уравнению

$$(6 + 3\eta + 3\eta\chi - \varepsilon)(6 - 3\eta + 3\eta\chi - \varepsilon) - 3 \cdot \eta^2 (1 - \chi)^2 = 0, \quad (41)$$

из которого находим

$$\varepsilon_{1,2}(A) = 3(2 + \eta\chi) \pm \eta\sqrt{3(4\eta - \chi)}. \quad (42)$$

Для состояний B_1 -, B_2 -, B_3 - типов, соответственно, имеем уравнения:

$$(a_2 - \varepsilon)C_2^{(-)} = 0, \quad (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} = 0, \quad (a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(+)} = 0, \quad (43)$$

из которых находим три собственных значения:

$$\varepsilon(B_1) = 6 - 3\eta + \eta\chi, \quad \varepsilon(B_2) = 6 + 4\eta\chi, \quad \varepsilon(B_3) = 6 + 3\eta + 4\eta\chi. \quad (44)$$

Размерные собственные значения для состояний A - типа определяются из уравнения

$$E^2 - 4(A + B + C)E + 12(AB + AC + BC) = 0, \quad (45)$$

откуда получаем

$$E_{\pm}(A) = 2(A + B + C) \pm 2\sqrt{(A + B + C)^2 - 3(AB + AC + BC)}, \quad (46)$$

а для B_1 -, B_2 -, B_3 - типов состояний:

$$E(B_1) = A + B + 4C, \quad E(B_2) = A + 4B + C, \quad E(B_3) = 4A + B + C. \quad (47)$$

III. Пусть $J = 3$. Состояние A - типа описывается уравнением

$$(a_2 - \varepsilon)C_2^{(-)} = 0, \quad (48a)$$

а состояния B_1 -, B_2 -, B_3 - типов, соответственно, следующими системами уравнений:

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0 C_2^{(+)} = 0 \\ 2b_0 C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} (a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon) C_1^{(+)} + b_1 C_3^{(+)} = 0 \\ b_1 C_1^{(+)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(+)} = 0 \end{cases}, \\ \begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon) C_1^{(-)} + b_1 C_3^{(-)} = 0 \\ b_1 C_1^{(-)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(-)} = 0 \end{cases} \quad (48b)$$

Собственные значения A -, B_1 -, B_2 -, B_3 - типов находятся из уравнений:

$$a_2 - \varepsilon = 0, \quad \begin{vmatrix} a_0 - \varepsilon & b_0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad \begin{vmatrix} a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad \begin{vmatrix} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \quad (49)$$

из которых, принимая во внимание определения (24), (26), (28), (30) коэффициентов a_k и b_k , находим безразмерные собственные значения:

$$\begin{aligned} \varepsilon(A) &= 12 + 4\eta\chi, & \varepsilon_{1,2}(B_1) &= (12 + 5\eta\chi + 3\eta) \pm 2\eta\sqrt{4\chi^2 - 6\chi + 6}, \\ \varepsilon_{1,2}(B_2) &= (12 + 2\eta\chi) \pm 2\eta\sqrt{\chi^2 + 15}, & \varepsilon_{1,2}(B_3) &= (12 - 3\eta + 5\eta\chi) \pm 2\eta\sqrt{4\chi^2 + 6\chi + 6}. \end{aligned} \quad (50)$$

Для размерных собственных значений (50) можно получить следующие выражения:

$$\begin{aligned} E(A) &= 4(A + B + C), \\ E_{1,2}(B_1) &= (5(A + B) + 2C) \pm 2\sqrt{4(A - B)^2 + C^2 + AB - AC - BC}, \\ E_{1,2}(B_2) &= (5(A + C) + 2B) \pm 2\sqrt{4(A - C)^2 + B^2 + AC - AB - BC}, \\ E_{1,2}(B_3) &= (5(B + C) + 2A) \pm 2\sqrt{4(B - C)^2 + A^2 + BC - AC - AB}. \end{aligned} \quad (51)$$

Если переписать полученные результаты (51) через моменты инерции согласно определениям (4), то выражения (51) для собственных значений при $J = 1, 2, 3$ совпадают с формулами, приведенными в книгах [6,7].

IV. Пусть $J = 4$. В этом случае состояния A -, B_1 -, B_2 -, B_3 - типов описываются, соответственно, следующими системами алгебраических уравнений:

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0 C_2^{(+)} = 0 \\ 2b_0 C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} + b_2 C_4^{(+)} = 0, \\ b_2 (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} + (a_4 - \varepsilon)C_4^{(+)} = 0 \end{cases} \quad \begin{cases} (a_2 - \varepsilon_1) C_2^{(-)} + b_2 C_4^{(-)} = 0 \\ b_2 C_2^{(-)} + (a_4 - \varepsilon)C_4^{(-)} = 0 \end{cases} \\ \begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon) C_1^{(-)} + b_1 C_3^{(-)} = 0 \\ b_1 C_1^{(-)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(-)} = 0 \end{cases}, \quad \begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon) C_1^{(+)} + b_1 C_3^{(+)} = 0 \\ b_1 C_1^{(+)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(+)} = 0 \end{cases} \quad (52)$$

Безразмерные три собственные значения A - типа находятся из уравнения $\varepsilon^3 - 20\varepsilon^2(\eta\chi + 3) - 16\varepsilon(4\eta^2\chi^2 - 13\eta^2 + 50\eta\chi + 75) - 320(9\eta^3\chi - 4\eta^2\chi^2 + 13\eta^2 - 25\eta\chi - 25) = 0$, а собственные значения B_1 -, B_2 -, B_3 - типов – из уравнений

$$\begin{aligned} \varepsilon^2 - 10(\eta\chi - \eta + 4)\varepsilon - 200\eta + 200\eta\chi + 9\eta^2\chi^2 - 63\eta^2 - 90\eta^2\chi + 400 &= 0, \\ \varepsilon^2 - 20(\eta\chi + 2)\varepsilon + 4(100\eta\chi + 16\eta^2\chi^2 - 7\eta^2 + 100) &= 0, \\ \varepsilon^2 - 10(\eta\chi + \eta + 4)\varepsilon + 200\eta + 200\eta\chi + 9\eta^2\chi^2 - 63\eta^2 - 9\eta^2\chi + 400 &= 0. \end{aligned} \quad (53)$$

Решения квадратных уравнений (53) последовательно равны:

$$\begin{aligned} \varepsilon_{1,2}(B_1) &= 5(\eta\chi - \eta + 4) \pm 2\sqrt{2}\eta\sqrt{2\chi^2 + 5\chi + 11}, \\ \varepsilon_{1,2}(B_2) &= 10(\eta\chi + 2) \pm 2\eta\sqrt{9\chi^2 + 7}, \\ \varepsilon_{1,2}(B_3) &= 5(\eta\chi + \eta + 4) \pm 2\sqrt{2}\eta\sqrt{2\chi^2 - 5\chi + 11}. \end{aligned} \quad (54)$$

Таким образом, при полном вращательном моменте $J = 4$ имеется девять состояний. Собственные значения в исходных единицах измерения, например для B_1 - типа, имеют вид

$$E_{1,2}(B_1) = 5(A + B + 2C) \pm 2\sqrt{4(A - B)^2 + 9(C^2 + AB - AC - BC)}, \quad (55)$$

а размерные собственные значения B_2 -, B_3 - типов получаются из выражения (55) циклической подстановкой $A \rightarrow B$, $B \rightarrow C$ и $C \rightarrow B$.

Результаты численных расчетов

Для больших значений полного момента J и произвольных моментов инерции вычисление собственных значений в аналитическом виде невозможно, поэтому приходится прибегать к численным расчетам.

В настоящей работе была составлена программа ASYMMMA в среде MAPLE, с помощью которой можно вычислить собственные значения (энергетический спектр) и собственные функции для произвольных величин J .

Ниже, на рис. 1–4 представлены результаты численных расчетов энергетических уровней всех четырех типов для состояний с вращательным моментом $J = 50$.

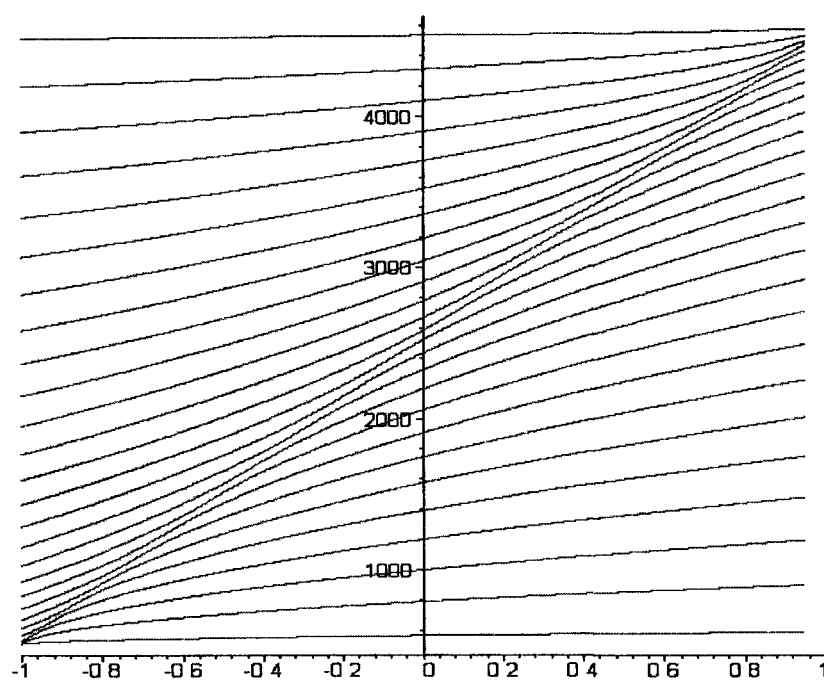


Рис. 1. Зависимость энергетических уровней A -типа A -типа от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

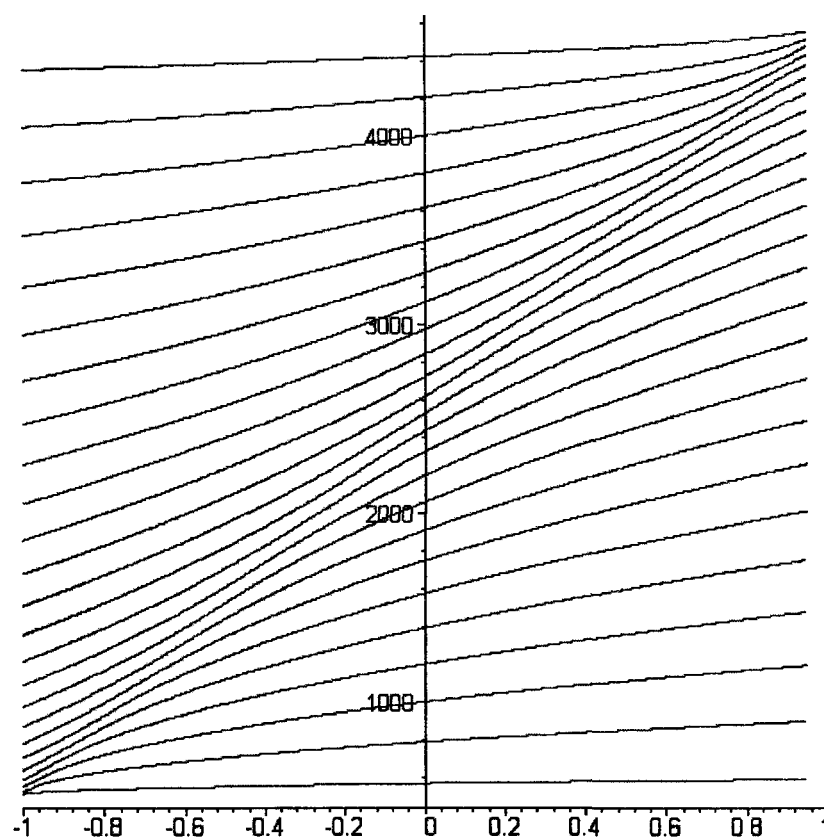


Рис. 2. Зависимость энергетических уровней B_1 -типа от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

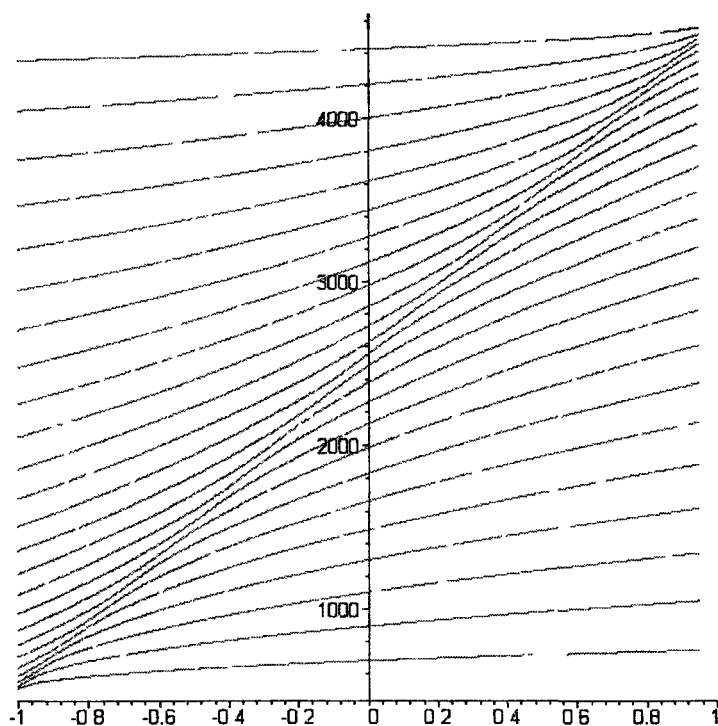


Рис. 3. Зависимость энергетических уровней B_2 – типа от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

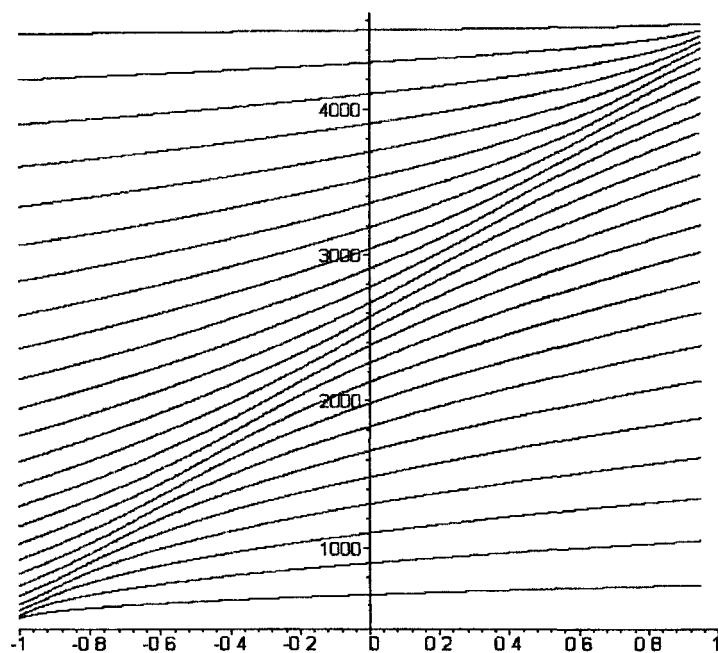


Рис. 4. Зависимость энергетических уровней B_3 – типа B_3 -типа от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

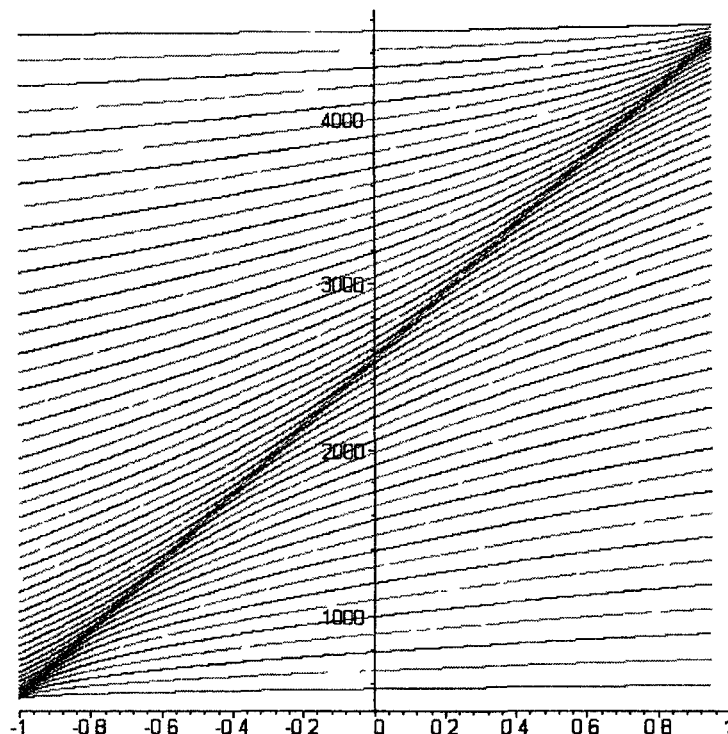


Рис. 5. Зависимость энергетических уровней A -, B_1 -, B_2 - и B_3 - типов от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

Заключение

В работе рассмотрена задача на собственные значения для дифференциального оператора, описывающего вращение несимметричного твердого тела. Учитывая свойства симметрии этого оператора, найдены подходящие базисные функции, которые реализуют все четыре его неприводимых представления, и на их основе проведена классификация собственных значений и функций.

Получены соответствующие системы уравнений, описывающие вращение твердого тела с произвольным значением углового момента. Для малых значений углового момента $J \leq 4$ получены формулы для вычисления собственных значений, а для больших значений углового момента была составлена программа ASYMMMA в среде MAPLE, с помощью которой можно вычислить собственные значения (энергетический спектр) и собственные функции асимметричного квантового волчка.

Литература

1. Айзенберг, А.И. Модели ядер. Коллективные и одночастичные явления / А.И. Айзенберг, В. Грайнер. – М.: Атомиздат, 1975. – 456 с.
2. Герцберг, Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул / Г. Герцберг. – М.: ИЛ, 1949.
3. Ельяшевич, М.А. Атомная и молекулярная спектроскопия / М.А. Ельяшевич. – М.: Физматгиз, 1962.
4. Бор, О. Структура атомного ядра / О Бор, Б. Моттelson. – М.: Мир, 1977. – Т.2. – 664 с.
5. Давыдов, А.С. Возбужденные состояния атомных ядер / А.С. Давыдов. – М.: Атомиздат, 1967. – 264 с.

6. Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М. : Физматгиз, 1963. – 748 с.

7. Ландау, Л.Д., Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М Лифшиц. – М. : ГИФМЛ, 1963. – 704 с.

Solving the eigenvalue problem for the asymmetric top Hamiltonian

M.A. Amatov, I.A. Klimenko, N.A. Chekanov

Belgorod State University
308007, Belgorod, Studencheskaj Str., 14

In the paper, by the diagonalization method, the spectrum and eigenfunctions of Hamiltonian for rotating solid body with three arbitrary inertia moments (asymmetric top) are found in the basis function system that realizes all four irreducible representations of D_2 group with respect to its transformations where the Hamiltonian does not change.

For lower values of rotating moments $J = 1, 2, 3, 4$ the analytical formulae for calculating eigenvalues was obtained and for its higher values, arbitrary in general, the analytic-numeric MAPLE program was constructed. As examples, the eigenvalues and their dependency on asymmetry parameter for concrete magnitudes of rotating moments are presented.