

Символьно-численное решение уравнения Шредингера для вращающегося тела методом диагонализации

И. Н. Беляева*, Н. А. Чеканов*, Н. Н. Чеканова†

* *Белгородский государственный национальный исследовательский университет
Белгород, Россия*

† *Харьковский институт банковского дела Университета банковского дела НБУ
Харьков, Украина*

Методом диагонализации найден спектр и собственные функции гамильтониана вращающегося квантового волчка с тремя произвольными моментами инерции в системе базисных функций, реализующей все четыре неприводимые представления группы D_2 , относительно преобразований которой исходный гамильтониан не изменяется. Для собственных значений при небольших значениях вращательного момента $J = 1, 2, 3, 4$ были получены аналитические формулы, а в случае произвольных значений вращательного момента представлены системы уравнений, которые с использованием современных компьютерных пакетов прикладных программ позволяют достаточно просто вычислить спектр и волновые функции асимметричного волчка. В качестве примера для вращательного момента $J=50$ приведены вычисленные в среде MAPLE собственные значения и их зависимость от параметра асимметрии.

Ключевые слова: квантовое вращение произвольного твердого тела, гамильтониан, энергетический спектр, волновые функции, метод диагонализации, символьно-численные расчеты, математическое моделирование

Введение

Вращательное движение, с точки зрения квантовой механики, является уникальным коллективным возбуждением в атомных ядрах. Этот тип движения был теоретически предсказан [1–3], затем обнаружен на основе экспериментальных данных по кулоновскому возбуждению атомных ядер. В настоящее время этому вопросу посвящено много публикаций (см. например, [4–8]). Вращательное движение в квантовых, в частности ядерных, системах может реализоваться только в том случае, если форма ядра является не сферической, а имеет вид некоторого сфероида с различными моментами инерции.

В связи с этим возникает задача вычисления энергетических уровней и их волновых функций квантового асимметричного волчка. На первом этапе таких вычислений естественно не учитывать взаимодействие вращательных и колебательных движений, так как последние возникают при намного больших энергиях.

Первые численные расчеты энергетических вращательных спектров асимметричного волчка для небольших значений полного углового момента с использованием непрерывных дробей были выполнены в работах, которые приведены в классической монографии [6]. Задача вычисления спектра асимметричного волчка рассматривалась в книгах [9, 10], где получены аналитические выражения для энергетических уровней с полным угловым моментом $J = 1, 2, 3$, а также в работе [11]. Имеются замечательные теоретические работы [12, 13], в которых задача на собственные значения гамильтониана асимметричного волчка приводится к уравнению Ламе, хотя сложность решения которого не уступает первоначальной задаче.

В настоящей работе для гамильтониана вращающегося асимметричного квантового объекта для нахождения его энергетического спектра и соответствующих волновых функций с учетом инвариантности гамильтониана относительно дискретной D_2 группы получены уравнения, которые практически достаточно просто реализовать в современных математических пакетах символьно-численных вычислений, например, REDUCE, MAPLE.

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 [7]

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

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 волчка в пространстве в системе координат, жестко связанной с телом. Так как атомные ядра [7, 8] 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:

$$\hat{M}_m \cdot \hat{M}_k - \hat{M}_k \cdot \hat{M}_m = -i\hbar \sum_l \varepsilon_{mkl} \hat{M}_l, \quad m, k, l = 1, 2, 3; \quad i = \sqrt{-1}, \quad (3)$$

где ε_{mkl} — полностью антисимметричный единичный тензор — и представляют собой 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 (1) 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 волчка произвольной формы.

Сделаем гамильтониан (7) безразмерным. Для этого введем подходящую при численных расчетах 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 ($A + C = 2B$). Второй 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 :

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + V, \quad \hat{H}_0 = \hat{J}^2, \quad V = \eta(\hat{M}_1^2 + \chi\hat{M}_2^2 - \hat{M}_3^2). \quad (14)$$

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

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

с нормировкой

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

причем квантовое число K принимает только целые положительные значения $K = 0, 1, 2, \dots, J-1, J$ 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, [7, 10]), 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:

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

здесь \hat{M}_3' есть оператор третьей проекции оператора полного момента \hat{J} в неподвижной системе координат [7], 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 [10]:

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

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

Используя выражения (21) и (22), находим

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= J(J+1) \varphi_{JK}^{(j)}, \hat{M}_3 \varphi_{JK}^{(j)} = K \varphi_{JK}^{(j)}, \\ \hat{M}_1^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= \alpha(K) \varphi_{J,K+2}^{(j)} + \alpha(-K) \varphi_{J,K-2}^{(j)} + \frac{1}{2} (J^2 + J - K^2) \varphi_{JK}^{(j)}, \\ \hat{M}_2^2 \varphi_{JK}^{(j)} &= -\alpha(K) \varphi_{J,K+2}^{(j)} - \alpha(-K) \varphi_{J,K-2}^{(j)} + \frac{1}{2} (J^2 + J - K^2) \varphi_{JK}^{(j)}, \end{aligned} \quad (23)$$

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

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

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

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

где для простоты записи введены обозначения:

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

Уравнение (25) умножим слева на функцию $\varphi_{J'K'}^{(j)*}$ 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 :

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

которое представим следующим образом

$$\begin{aligned} (A(J, K) - \varepsilon)(1 + j\delta_{K,0})C_K^{(j)} + B(J, K-2)C_{K-2}^{(j)} + \\ + \tilde{B}(J, K+2)C_{K+2}^{(j)} + j\tilde{B}(J, 2-K)C_{2-K}^{(j)} = 0, \end{aligned} \quad (28)$$

где

$$\tilde{B}(J, K) \equiv B(J, -K) = \eta(1-\chi)\alpha(-K). \quad (29)$$

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 [10], [9], группа D_2 имеет четыре неприводимых представления, которые обозначаются как A, B_1, B_2, B_3 . Ниже из анализа уравнения (27) будет видно, что выбор базисных функций в виде (17) реализует указанные четыре неприводимые представления группы D_2 , в соответствии с которыми будут классифицированы собственные состояния асимметричного волчка.

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

$$\begin{aligned} (j = +1) : \quad (A(J, K) - \varepsilon)(1 + \delta_{K,0})C_K^{(+)} + B(J, K-2)C_{K-2}^{(+)} + \\ + \tilde{B}(J, K+2)C_{K+2}^{(+)} + \tilde{B}(J, 2-K)C_{2-K}^{(+)} = 0, \end{aligned} \quad (30)$$

$$\begin{aligned} (j = -1) : \quad (A(J, K) - \varepsilon)(1 - \delta_{K,0})C_K^{(+)} + B(J, K-2)C_{K-2}^{(+)} + \\ + \tilde{B}(J, K+2)C_{K+2}^{(+)} + \tilde{B}(J, 2-K)C_{2-K}^{(+)} = 0. \end{aligned} \quad (31)$$

$$\bar{B}_1 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_0 - \varepsilon & b_0 & 0 & 0 & 0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 \\ 0 & b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 \\ 0 & 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \tag{37}$$

$$\bar{B}_2 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_7 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|, \tag{38}$$

$$\bar{A} = \begin{matrix} (j = -1) \\ \left\| \begin{array}{ccccc} a_2 - \varepsilon & b_2 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & a_4 - \varepsilon & b_4 & 0 & 0 \\ 0 & b_4 & a_6 - \varepsilon & b_6 & 0 \\ 0 & 0 & b_6 & a_8 - \varepsilon & b_8 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-3} & a_{J-1} - \varepsilon \end{array} \right\|, \end{matrix} \tag{39}$$

$$\bar{B}_3 = \left\| \begin{array}{ccccc} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & 0 & 0 & 0 \\ b_1 & a_3 - \varepsilon & b_3 & 0 & 0 \\ 0 & b_3 & a_5 - \varepsilon & b_5 & 0 \\ 0 & 0 & b_5 & a_6 - \varepsilon & b_7 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & b_{J-2} & a_J - \varepsilon \end{array} \right\|. \tag{40}$$

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 (33)–(40) 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 (29).

Теперь запишем системы алгебраических уравнений, которые следуют из уравнений (30)–(31), в матричном виде, используя матрицы (33)–(40).

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

$$AC_A^{(+)} = 0, B_1C_{B_1}^{(-)} = 0, B_2C_{B_2}^{(-)} = 0, B_3C_{B_3}^{(+)} = 0, \tag{41}$$

где

$$\begin{aligned}
 C_A^{(+)} &= (C_0^{(+)}, C_2^{(+)}, C_4^{(+)}, \dots, C_{J-2}^{(+)}, C_J^{(+)})^T, \\
 C_{B_1}^{(-)} &= (C_2^{(-)}, C_4^{(-)}, \dots, C_{J-2}^{(-)}, C_J^{(-)})^T, \\
 C_{B_2}^{(-)} &= (C_1^{(-)}, C_3^{(-)}, C_5^{(-)}, \dots, C_{J-3}^{(-)}, C_{J-1}^{(-)})^T, \\
 C_{B_3}^{(+)} &= (C_1^{(+)}, C_3^{(+)}, C_5^{(+)}, \dots, C_{J-3}^{(+)}, C_{J-1}^{(+)})^T
 \end{aligned} \tag{42}$$

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

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

$$\bar{A}C_A^{(-)} = 0, \bar{B}_1C_{B_1}^{(+)} = 0, \bar{B}_2C_{B_2}^{(+)} = 0, \bar{B}_3C_{B_3}^{(-)} = 0, \tag{43}$$

где

$$\begin{aligned}
 C_A^{(-)} &= (C_2^{(-)}, C_4^{(-)}, C_6^{(-)}, \dots, C_{J-3}^{(-)}, C_{J-1}^{(-)})^T, \\
 C_{B_1}^{(+)} &= (C_0^{(+)}, C_2^{(+)}, C_4^{(+)}, \dots, C_{J-3}^{(+)}, C_{J-1}^{(+)})^T, \\
 C_{B_2}^{(+)} &= (C_1^{(+)}, C_3^{(+)}, C_5^{(+)}, \dots, C_{J-2}^{(+)}, C_J^{(+)})^T, \\
 C_{B_3}^{(-)} &= (C_1^{(-)}, C_3^{(-)}, C_5^{(-)}, \dots, C_{J-2}^{(-)}, C_J^{(-)})^T.
 \end{aligned} \tag{44}$$

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:

$$(a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} = 0, \quad (a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(+)} = 0, \quad (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} = 0, \tag{45}$$

из которых с учетом определений (24), (26), (29) и (32) находим безразмерные собственные значения ε :

$$\varepsilon(B_1) = 2\left(1 + \frac{\eta(1 + \chi)}{2}\right), \quad \varepsilon(B_2) = 2, \quad \varepsilon(B_3) = (2 - \eta + \eta\chi). \tag{46}$$

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

$$\begin{aligned}
 E(B_1) &= \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_1) = A + B, \\
 E(B_2) &= \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_2) = A + C, \quad E(B_3) = \varepsilon_0 \cdot \varepsilon(B_3) = B + C.
 \end{aligned} \tag{47}$$

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

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0C_2^{(+)} = 0, \\ 2b_0C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} = 0 \end{cases} \tag{48}$$

находим два собственных значения состояний из равенства нулю определителя

$$\left\| \begin{array}{cc} a_0 - \varepsilon & b_0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon \end{array} \right\| = 0, \tag{49}$$

что приводит к квадратному уравнению

$$(6 + 3\eta + 3\eta\chi - \varepsilon)(6 - 3\eta + 3\eta\chi - \varepsilon) - 3\eta^2(1 - \chi)^2 = 0, \tag{50}$$

из которого находим

$$\varepsilon_{1,2}(A) = 3(2 + \eta\chi) \pm \eta\sqrt{3(4\eta - \chi)}. \tag{51}$$

Для состояний B_{1-} , B_{2-} , B_{3-} -типов, соответственно, имеем уравнения:

$$(a_2 - \varepsilon)C_2^{(-)} = 0, \quad (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} = 0, \quad (a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(+)} = 0, \tag{52}$$

из которых находим три собственных значения:

$$\varepsilon(B_1) = 6 - 3\eta + \eta\chi, \quad \varepsilon(B_2) = 6 + 4\eta\chi, \quad \varepsilon(B_3) = 6 + 3\eta + 4\eta\chi. \tag{53}$$

Размерные собственные значения для состояний A -типа определяются из уравнения

$$E^2 - 4(A + B + C)E + 12(AB + AC + BC) = 0, \tag{54}$$

откуда получаем

$$E_{\pm}(A) = 2(A + B + C) \pm 2\sqrt{(A + B + C)^2 - 3(AB + AC + BC)} = 0, \tag{55}$$

а для B_{1-} , B_{2-} , B_{3-} -типов состояний:

$$E(B_1) = A + B + 4C, \quad E(B_2) = A + 4B + C, \quad E(B_3) = 4A + B + C. \tag{56}$$

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

$$(a_2 - \varepsilon)C_2^{(-)} = 0, \tag{57}$$

а состояния B_{1-} , B_{2-} , B_{3-} -типов, соответственно, следующими системами уравнений:

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0C_2^{(+)} = 0, \\ 2b_0C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} = 0, \end{cases} \tag{58}$$

$$\begin{cases} (a_1 + \tilde{b} - \varepsilon_1)C_1^{(+)} + b_1C_3^{(+)} = 0, \\ b_1C_1^{(+)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(+)} = 0, \end{cases} \quad \begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} + b_1C_3^{(-)} = 0, \\ b_1C_1^{(-)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(-)} = 0. \end{cases}$$

Собственные значения A -, B_{1-} , B_{2-} , B_{3-} -типов находятся из уравнений:

$$a_2 - \varepsilon = 0, \quad \begin{vmatrix} a_0 - \varepsilon & b_0 \\ 2b_0 & a_2 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0, \tag{59}$$

$$\begin{vmatrix} b_1 & a_3 - \varepsilon & a_1 + \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 \end{vmatrix} = 0, \quad \begin{vmatrix} a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon & b_1 & b_1 & a_3 - \varepsilon \end{vmatrix} = 0,$$

из которых, принимая во внимание определения (24), (26), (29), (32) коэффициентов a_K и b_K , находим безразмерные собственные значения:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon(A) &= 12 + 4\eta\chi, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_1) &= (12 + 5\eta\chi + 3\eta) \pm 2\eta\sqrt{4\chi^2 - 6\chi + 6}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_2) &= (12 + 2\eta\chi) \pm 2\eta\sqrt{\chi^2 + 15}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_3) &= (12 - 3\eta + 5\eta\chi) \pm 2\eta\sqrt{4\chi^2 + 6\chi + 6}.
 \end{aligned} \tag{60}$$

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

$$\begin{aligned}
 E(A) &= 4(A + B + C), \\
 E_{1,2}(B_1) &= (5(A + B) + 2C) \pm 2\sqrt{4(A - B)^2 + C^2 + AB - AC - BC}, \\
 E_{1,2}(B_2) &= (5(A + C) + 2B) \pm 2\sqrt{4(A - C)^2 + B^2 + AC - AB - BC}, \\
 E_{1,2}(B_3) &= (5(B + C) + 2A) \pm 2\sqrt{4(B - C)^2 + A^2 + BC - AC - AB}.
 \end{aligned} \tag{61}$$

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 [9, 10].

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

$$\begin{cases} (a_0 - \varepsilon)C_0^{(+)} + b_0C_2^{(+)} = 0, \\ 2b_0C_0^{(+)} + (a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} + b_2C_4^{(+)} = 0, \\ b_2(a_2 - \varepsilon)C_2^{(+)} + (a_4 - \varepsilon)C_4^{(+)} = 0, \end{cases} \begin{cases} (a_2 - \varepsilon_1)C_2^{(-)} + b_2C_4^{(-)} = 0, \\ b_2C_2^{(-)} + (a_4 - \varepsilon)C_4^{(-)} = 0, \end{cases} \tag{62}$$

$$\begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(-)} + b_1C_3^{(-)} = 0, \\ b_1C_1^{(-)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(-)} = 0, \end{cases} \begin{cases} (a_1 - \tilde{b}_1 - \varepsilon)C_1^{(+)} + b_1C_3^{(+)} = 0, \\ b_1C_1^{(+)} + (a_3 - \varepsilon)C_3^{(+)} = 0. \end{cases}$$

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

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

Решения квадратных уравнений (57) последовательно равны:

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_{1,2}(B_1) &= 5(\eta\chi - \eta + 4) \pm 2\sqrt{2\eta\sqrt{2\chi^2 + 5\chi + 11}}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_2) &= 10(\eta\chi + 2) \pm 2\eta\sqrt{9\chi^2 + 7}, \\
 \varepsilon_{1,2}(B_3) &= 5(\eta\chi + \eta + 4) \pm 2\sqrt{2\eta\sqrt{2\chi^2 - 5\chi + 11}}.
 \end{aligned} \tag{64}$$

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

$$E_{1,2}(B_1) = 5(A + B + 2C) \pm 2\sqrt{4(A - B)^2 + 9(C^2 + AB - AC - BC)}, \tag{65}$$

а размерные собственные значения B_2 -, B_3 -типов получаются из выражения (59) 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. 1–3 представлены результаты численных расчетов энергетических уровней всех четырех типов для состояний с вращательным моментом $J = 50$.

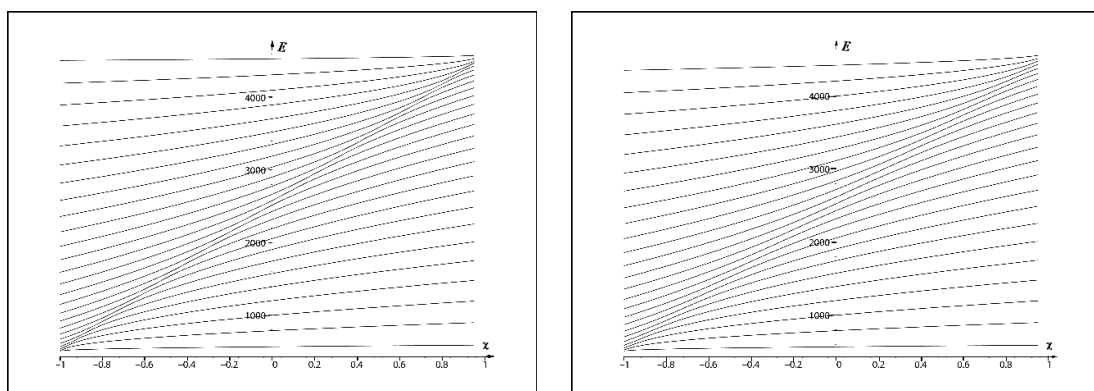


Рис. 1. Зависимость энергетических уровней (слева направо) A -типа, B_1 -типа от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

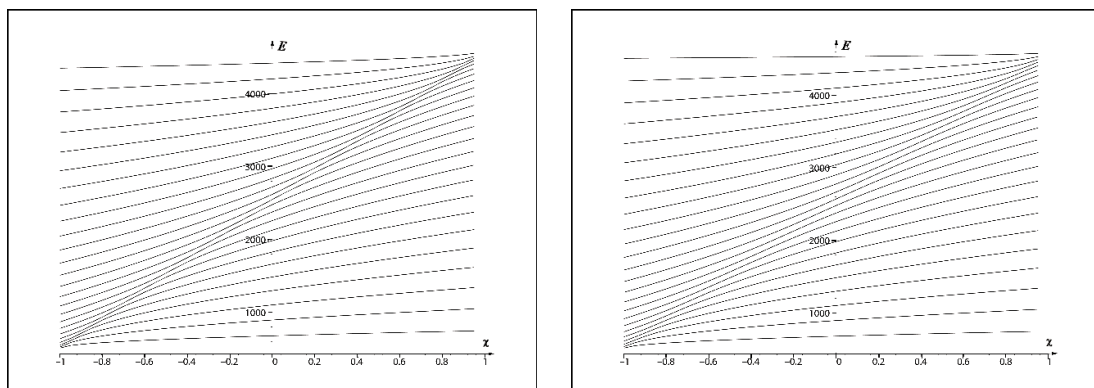


Рис. 2. Зависимость энергетических уровней (слева направо) B_2 -типа и B_3 -типа от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

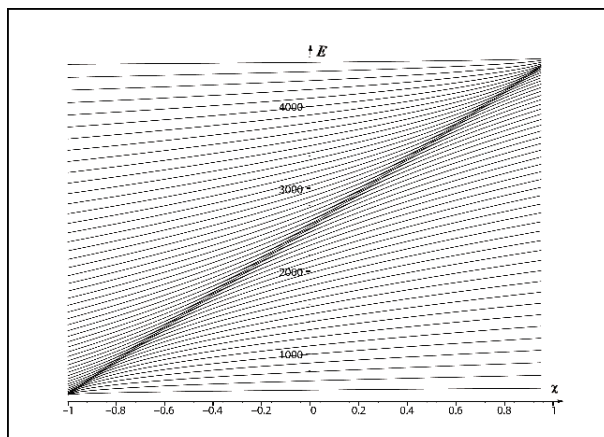


Рис. 3. Зависимость энергетических уровней A -, B_1 -, B_2 -, B_3 - типа от величины параметра асимметрии χ при полном угловом моменте $J = 50$

Заключение

В работе рассмотрена задача на собственные значения для дифференциального оператора, описывающего вращение асимметричного квантового волчка. 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. *Rainwater J.* Background for the Spheroidal Nuclear Model Proposal // Nobel Lecture, Stockholm, December 11. — 1975.
2. *Bohr A.* Rotational Motion in Nuclei // Nobel Lecture, Stockholm, December 11. — 1975.
3. *Mottelson B.* Elementary Modes of Excitation in the Nucleus // Nobel Lecture, Stockholm, December 11. — 1975.
4. *Слив Л. А.* Рубежи ядерной физики // УФН. — 1981. — Т. 133, № 2. — С. 337–350.
5. *Павличенков И. М.* Аномалии вращательных спектров деформированных атомных ядер // УФН. — 1983. — Т. 133, № 2. — С. 193–222.
6. *Bohr A., Mottelson B.* Nuclear structure. — New York, Amsterdam: W. A. Benjamin, 1974. — Vol. 2, Nuclear deformations.
7. *Eisenberg J., Greiner W.* Nuclear Theory. — Amsterdam–London: North-Holland Publishing Company, 1970. — Vol. 1, Nuclear models, Collective and Single-Particle Phenomena.
8. *Давыдов А. С.* Возбужденные состояния атомных ядер. — М.: Атомиздат, 1967.
9. *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика (нерелятивистская теория). — М.: ГИФМЛ, 1963.
10. *Давыдов А. С.* Квантовая механика. — М.: Физматгиз, 1963.

11. Лукач И., Смородинский Я. А. Волновые функции асимметричного волчка // ЖЭТФ. — 1969. — Т. 57. — С. 13–42.
12. Uzer T. Exact Quantization of Certain Rotational Hamiltonians and the Quantum Eilerbproblem // Phys. Lett. A. — 1993. — Vol. 183, No 1. — Pp. 51–55.
13. Антонов В. А., Кондратьев Б. П. О квантовании вращения твердого тела // Журнал технической физики. — 2006. — Т. 76, № 8. — С. 9–12.

UDC 519.711.3; 517.958

Symbolic-Numeric Solution the Shroedinger Equation for Rotating Solid Body by Diagonalisation Method

I. N. Belyaeva*, N. A. Chekanov*, N. N. Chekanova†

* *Belgorod National Research University, Belgorod, Russia*

† *Kharkov Institute of Banking of National University of Bankin, Kharkov, Ukraine*

The eigenvalues and wave functions of the rotational quantum top Hamiltonian with a different three moment of inertia by the diagonalisation method in the basis function system that realized the all four irreducible representation of the discrete D2 group are obtained. For the low rotational moment value $J = 1, 2, 3, 4$ the analytical formulae are calculated. But in the case of any rotational moment values the systems of equation are obtained that with the mean of the modern computer program packages allow very easy to calculate the spectrum and eigenfunctions of asymmetric quantum top. As example, for the rotational moment value $J=50$ by the help of Maple system eigenvalues are performed and its dependence versus of the parameter asymmetry are presented.

Key words and phrases: quantum rotation of solid body, Hamiltonian, energy spectrum, wave functions, diagonalisation method, symbolic-numeric calculations, mathematical modelling

References

1. J. Rainwater, Background for the spheroidal nuclear model proposal, Nobel Lecture, Stockholm, December 11.
2. A. Bohr, Rotational motion in nuclei, Nobel Lecture, Stockholm, December 11.
3. B. Mottelson, Elementary modes of excitation in the nucleus, Nobel Lecture, Stockholm, December 11.
4. L. A. Sliv, Boundaries of nuclear physics, UFN 133 (2) (1981) 337–350, in Russian.
5. I. M. Pavlichenkov, Anomalies rotating spectra of deformed nuclei, UFN 133 (2) (1983) 193–222, in Russian.
6. A. Bohr, B. Mottelson, Nuclear structure, Vol. 2, Nuclear deformations, W. A. Benjamin, New York, Amsterdam, 1974.
7. J. Eisenberg, W. Greiner, Nuclear Theory, Vol. 1, Nuclear models, Collective and Single-Particle Phenomena, North-Holland-Publishing Company, Amsterdam–London, 1970.
8. A. S. Davydov, Exited states of atomic nuclei, Atomizdat, Moscow, 1967, in Russian.
9. L. D. Landau, E. M. Lifshits, Quantum mechanics. Nonrelativistic theory., GIFML, Moscow, 1963, in Russian.
10. A. S. Davydov, Quantum mechanics, Fizmatgiz, Moscow, 1963, in Russian.
11. I. Lukach, Y. A. Smorodinskiy, Wave functions of asimmetric top, JETF 57 (1969) 13–42, in Russian.
12. T. Uzer, Exact quantization of certain rotational hamiltonians and the quantum eilerbproblem, Phys. Lett. A. 183 (1) (1993) 51–55.
13. V. A. Antonov, B. P. Kondratyev, Quantization rotation of solid body, Journal of technical physics 76 (8) (2006) 9–12, in Russian.