Полиномы Лежандра не целого порядка

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

Уравнение Шредингера при рассеянии элементарных частиц на произвольном потенциале надо описывать с орбитальным моментом не обязательно целым. Но полином Лежандра, описывающий атом водорода имеет шаровую функцию с целым индексом. Но для сложного атома возможен не целый орбитальный момент. Шаровая функция с не целым модулем момента построена в данной статье.

Уравнение Шредингера имеет вид

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta \psi + U\psi$$

Подставим решение

$$\psi(t,r,\theta) = \exp\{-i[Et/\hbar - \int_0^r k(u)du]\} f(\theta)/r \qquad (1)$$

в дифференциальное уравнение, получим

$$E\psi = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - i\frac{dk}{dr})\psi + U\psi + \frac{\hbar^2}{2mr^2 \sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta \frac{\partial \psi}{\partial \theta}\}.$$

Переменные разделились, представим волновую функцию в зависимости от радиуса и угла, получим

$$E = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - i\frac{dk}{dr}) + U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}$$
$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta \frac{\partial f(\theta)}{\partial\theta}\} = \lambda f(\theta), \lambda = l(l+1).$$

Для решения задачи рассеяния надо знать решение задачи движения в кулоновском потенциале.

Проверим формулу (1), подставив в уравнение волновую функцию основного состояния атома водорода. Задача сводится к уравнению $2\exp(-r) = \exp[i\int k(u)du]/r, ik(r) = -1 + 1/r$. Подставляем в приведенную к безразмерному виду формулу (2), получим $2\varepsilon = -1 + 2/r - 1/r^2 + 1/r^2 - 2/r = -1$, т.е. получаем энергию основного состояния атома водорода.

Если взять волновую функцию в виде

$$\psi(t,r,\theta) = \exp[i\int_0^r k(u,t)du]\, f(\theta),$$

то получим дифференциальное уравнение

$$i\hbar\frac{\partial \ln\psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2 - i\frac{dk}{dr} - \frac{2ik}{r}) + U - \frac{\hbar^2}{2\psi mr^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\}.$$

Воспользуемся тождеством

$$\frac{1}{\psi\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\{\sin\theta\frac{\partial\ln\psi}{\partial\theta}\} + (\frac{\partial\ln\psi}{\partial\theta})^2$$

Продифференцируем это уравнение по радиусу, получим

$$\frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r\frac{\partial V_r}{\partial r} - i\frac{\hbar}{2m}(\frac{\partial^2 V_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2V_r}{r^2}) -$$
$$-\frac{\partial}{\partial r}(\frac{i\hbar}{2mr^2}\frac{\partial V_\theta}{\partial\theta} + \frac{i\hbar V_\theta\cot\theta}{2mr^2}) + \frac{\partial U(r)}{m\partial r} = 0;$$

$$\frac{\partial V_r}{\partial t} + V_r\frac{\partial V_r}{\partial r} - i\frac{\hbar}{2m}(\frac{\partial^2 V_r}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial V_r}{\partial r} - \frac{2V_r}{r^2}) + \frac{\partial[U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}]}{m\partial r} = 0;$$

$$V_r = \frac{\hbar k}{m} = -i\frac{\hbar}{m}\frac{\partial\ln\psi}{\partial r}; V_\theta = -i\frac{\hbar}{m}\frac{\partial\ln f(\theta)}{r\partial\theta}$$

Продифференцируем это уравнение по углу и разделим на радиус

$$\frac{\partial V_\theta}{\partial t} + \frac{V_\theta}{r}\frac{\partial V_\theta}{\partial\theta} - \frac{i\hbar}{2mr^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial V_\theta}{\partial\theta}) + \frac{i\hbar V_\theta}{2mr^2\sin^2\theta} = 0.$$

Это уравнение имеет не только нулевое решение, но и остаточную скорость.

Получаем уравнение Навье-Стокса с кинематической вязкостью $i\frac{\hbar}{2m}$ и давлением $p/\rho = [U(r) + \frac{\lambda\hbar^2}{2mr^2}]/m$. Можно совершить и обратный переход, от уравнения Навье-Стокса к уравнению (2), которое можно проинтегрировать.

Уравнение Шредингера сводится к уравнению где уравнение приведено к безразмерному виду

$$\frac{2ma_0^2E}{\hbar^2} = 2\varepsilon = k^2 - i\frac{dk}{dr} + 2u(r); u(r) = \frac{2ma_0^2U(r)}{\hbar^2} + \frac{l(l+1)}{r^2}\ . \quad (2)$$

В случае произвольного собственного значения имеем для водородоподобного атома радиальная часть волновой функции равна $R_{nl} = \exp(-r/n)r^l L_{nl}(r)$ см. [1]

$$\begin{aligned} ik(r) &= \frac{d}{dr}[-r/n + (l+1)\ln r + \ln L_{nl}(r)] = \\ &= \frac{-1}{n_r + l + 1} + \frac{l+1}{r} + \sum_{k=1}^{n-1} \frac{1}{r - a_k} \end{aligned} . \quad (3)$$

Можно получить решение (2), подставляя в (2) решение (3) и находя значение $n-1$ константы a_k и определить собственное значение энергии ε, приравнивая коэффициенты при одинаковых степенях радиуса. Но это возможно только в случае потенциала Кулона. В случае потенциала $2u(r) = -\frac{2}{r} + \frac{b}{r^2}$ решение ищем в виде (1), это получается при целом орбитальном числе.

Где величина n_r радиальное квантовое число.

$$ik(r) = -\sqrt{-2\varepsilon} + \frac{\sqrt{1/4+b} + 1/2}{r} + \sum_{k=1}^{n_r} \frac{1}{r - a_k}. \quad (4)$$

При условии $n_r = 0$ для основного состояния водородоподобного атома подставляем значение волнового числа в уравнение (2) с потенциалом $2u(r) = -\frac{2}{r} + \frac{b}{r^2}$ получаем собственное значение энергии $\varepsilon_{0b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+1/2)^2}$.

$$ik(r) = -\frac{1}{\sqrt{1/4+b}+1/2} + \frac{\sqrt{1/4+b}+1/2}{r}.$$

При этом волновая функция равна

$$\psi(r) = \exp\left(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+1/2}\right) r^{\sqrt{1/4+b}-1/2}.$$

При произвольном n в уравнение (2) надо подставлять значение (4) и находить значение собственной энергии и коэффициентов $a_k, k = 1,\ldots,n_r$.

$$\psi(r) = \exp\left(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+1/2+n_r}\right) r^{\sqrt{1/4+b}-1/2} L_{n_r b}(r)$$

При условии полином $L_{n_r b}(r) = \prod_{k=1}^{n_r} (r - a_k)$ в волновой функции имеет более сложный вид, зависящий от коэффициента $a_k(b)$. Величина собственной энергии равна $\varepsilon_{n_r b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+1/2+n_r)^2}$

В случае $n_r = 1$ получаем значение энергии $\varepsilon_{1b} = -\frac{1}{2(\sqrt{1/4+b}+3/2)^2}$.

Волновая функция при этих значениях параметра равна

$$\psi(r) = \exp\left(-\frac{r}{\sqrt{1/4+b}+3/2}\right) r^{\sqrt{1/4+b}-1/2} [r - (\sqrt{1/4+b}+1/2)(\sqrt{1/4+b}+3/2)].$$

При условии $b = 0$ получаем правильное значение волновой функции

$$\psi(r)=\exp(-\frac{r}{2})(r-2)\sim\exp(-\frac{r}{2})(1-r/2).$$

В случае если решение является вырожденной гипергеометрической волновой функцией можно реализовать предлагаемую идею.

По заданному модулю момента инерции построена радиальная компонента волновой функции. Но необходимо получить волновую функцию угловой зависимости по заданному модулю орбитального момента. Построим полиномы Лежандра не целого порядка, для чего рассмотрим дифференциальное уравнение

$$(1-z^2)\frac{d^2P(z)}{dz^2}-2z\frac{dP(z)}{dz}+bP(z)=0. \qquad (1)$$

Решение будем искать в виде $P(z)=z^{\mu}(a_0+...+a_n z^n+...)$

$$[(\mu+n+2)(\mu+n+1)a_{n+2}+a_n[b-(\mu+n)(\mu+n+1)]=0.$$

При заданном модуле момента b определим величину N, решая квадратное уравнение $\mu=-1/2+\sqrt{1/4+b}-2N$. Где величина n удовлетворяет условию $N=\mathrm{int}[(-1/2+\sqrt{1/4+b})/2],|\mu|<1$. Таким образом при условии $b=l(l+1)$ получаем $\mu=1$ при нечетном значении l значение $2N+1=l$ и ряд надо строить по нечетным значениям индекса, и получается у ряда множитель z. При четном значении $2N=l$ ряд надо строить по четным степеням z и имеем $\mu=0$. Получаем для полинома Лежандра при произвольном орбитальном числе $P(z)=z^{\mu}(1+...+a_N z^{2N})=z^{\mu}\prod_{n=1}^{N}(z^2-\alpha_n^2)$

Разделим уравнение (1) на неизвестную функцию и воспользуется равенством

$$\frac{d^2P(z)}{P(z)dz^2}=\frac{d^2\ln P(z)}{dz^2}+[\frac{d\ln P(z)}{dz}]^2.$$

$$(1-z^2)\frac{d^2P(z)}{P(z)dz^2}-2z\frac{d\ln P(z)}{dz}+b=0$$

Подставим выражение для второй производной, получим

$$(1-z^2)(\frac{dk}{dz}+k^2)-2zk+b=0;k=\frac{d\ln P(z)}{dz}. \qquad (2)$$

Величина $$k(z)=\frac{d[\mu\ln z+\sum_{n=1}^{p}\ln(z^2-\alpha_n^2)]}{dz}=\frac{\mu}{z}+\sum_{n=1}^{N}(\frac{1}{z+\alpha_n}+\frac{1}{z-\alpha_n}).$$

Подставляя решение в дифференциальное уравнение (2) имеем $N+1$ неизвестный коэффициент при $N+1$ уравнениях. Рассмотрим случай произвольного модуля момента импульса

$$\begin{aligned}&(1-z^2)[\frac{\mu^2}{z^2}+\frac{1}{(z+\alpha_n)^2}+\frac{1}{(z-\alpha_n)^2}+\frac{2\mu}{z}(\frac{1}{z+\alpha_n}+\frac{1}{z-\alpha_n})+\\&+\frac{2}{(z+\alpha_n)(z-\alpha_n)}-\frac{\mu}{z^2}-\frac{1}{(z+\alpha_n)^2}-\frac{1}{(z-\alpha_n)^2}]-2\mu-\frac{4z^2}{z^2-\alpha^2}+b=0\end{aligned}.$$

Это уравнение приводится к виду

$$\frac{\mu^2-\mu}{z^2}+\frac{4\mu+2-(4\mu+6)\alpha_n^2}{z^2-\alpha_n^2}-\mu^2+\mu-6\mu-6+b=0$$

$$\frac{(\mu^2-\mu)(z^2-\alpha_n^2)+[4\mu+2-(4\mu+6)\alpha_n^2]z^2}{z^2(z^2-\alpha_n^2)}-\mu^2+\mu-6\mu-6+b=0$$

$$4\mu+2-(4\mu+6)\alpha_n^2+\mu^2-\mu=0;(\mu^2-\mu)\alpha_n^2=0,b=\mu^2+5\mu+6$$

Возможны три варианта решения $\mu=0,\mu=1$. Имеем три решения $P(z)=\begin{cases}z(z^2-3/5),\mu=1,l=3,b=12\\ z^2-1/3,\mu=0,l=2,b=6\end{cases},$. Имеем квадратное уравнение в третьем случае $\mu^2+3\mu+2=0$, $\alpha_n=0$. Полином Лежандра имеет вид $P(z)=\begin{cases}z,\mu=-1,b=2,l=1\\ 1,\mu=-2,b=0,l=0\end{cases}$.

В общем случае при конечном числе членов ряда задача сведется к решению системы нелинейных алгебраических уравнений

$$\begin{gathered}\mu(\mu-1)\prod_{s=1}^{N}(z^2-\alpha_s^2)+Q_{N-1}(z^2)z^2=0\\ b=\mu^2+\mu+4N^2+4\mu N+2N\end{gathered}. \qquad (3)$$

Уравнение (3) содержит свободный член, пропорциональный $\mu(\mu-1)\prod_{s=1}^{N}\alpha_s^2$ он равен нулю, в случае если равен нулю один из сомножителей. Если первые члены $\mu(\mu-1)=0$ равны нулю, то получаем стандартное разложение решения с целым орбитальным моментом

$$b(\mu=0)=2N(2N+1)=l(l+1);b(\mu=1)=2(N+1)[2(N+1)-1]=l(l-1).$$

Где один из орбитальных моментов четный, а другой нечетный. Причем формула учитывает квадратичный характер аргумента. Если равно нулю значение α_s , то определятся остальные значения коэффициентов α_s из системы уравнений $N-1$ степени с $N-1$ количеством неизвестных коэффициентов. При $N=1$ получается уравнение нулевой степени, и коэффициент α_s только один. Тогда величина μ определится по произвольному положительному числу $b\geq(2N+1)2N$ по формуле $\mu=-(4N+1)/2+\sqrt{1/4+b}$.

Величину b можно представить в виде

$$b=(2N+\mu)(2N+1+\mu).$$

Запишем оператор Лапласа с помощью введенного телесного угла см.[2]

$$\Delta=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{1}{r^2}[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta})+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}]+$$

$$+\frac{\alpha}{4r^2}[\frac{1}{\sin\Theta_\alpha/2}\frac{\partial}{\partial\Theta_\alpha/2}(\sin\Theta_\alpha/2\frac{\partial}{\partial\Theta_\alpha/2})+\frac{1}{\sin^2\Theta_\alpha/2}\frac{\partial^2}{\partial(\Omega_\alpha/2)^2}]=$$

$$=\frac{\partial^2}{\partial r^2}+\frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{l(l+1)+\alpha L(L+1)}{r^2},L_{eff}(L_{eff}+1)=l(l+1)+\alpha L(L+1);$$

$$\alpha=\mp(\frac{e}{\sqrt{\hbar c}})^{L!/2}=\mp\frac{1}{137^{L!/2}},E_n=-\frac{me^4}{2\hbar^2(n_r+L_{eff}+1)^2}$$

$$\frac{1}{\sin\Theta_\alpha/2}\frac{\partial}{\partial\Theta_\alpha/2}(\sin\Theta_\alpha/2\frac{\partial}{\partial\Theta_\alpha/2})-\frac{S^2}{\sin^2\Theta_\alpha/2}+L(L+1)=0$$

$$\psi(r,\Theta_\alpha,\Omega_\alpha)=R_{n_rL_{eff}}(r)Y_{lm}(\theta)Y_{LS}(\Theta_\alpha/2)\exp(iS\Omega_\alpha)$$

$$R_{n_rL}(r)=F(-n_r,L_{eff},r)=\frac{1}{L_{eff}(L_{eff}+1)...(L_{eff}+n_r-1)}z^{1-L_{eff}}\times$$

$$\times\exp(r)\frac{d^{n_r}}{dr^{n_r}}[\exp(-r)r^{n_r+L_{eff}-1}];$$

Где величина L,S определяют суммарный модуль спина электронов, и его проекцию. Сферические функции полуцелого порядка определяются полиномом Лежандра полуцелого порядка $Y_{LS}(\Theta/2)\sim P_L^S(\cos\Theta/2)$ и описаны в разделе (2.1). Дело в том, что телесный угол имеет период 4π, и значит, описывает полуцелый спин.

Целый спин описывается углами сферической системы координат. Например, собственные функции ψ_{jm} могут быть приведены в соответствие с компонентами ковариационного спинора ранга $2j$ по формулам (4). Собственные функции целочисленного момента j являются шаровые функции.

$$Y_{10}=i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}\cos\theta=i\sqrt{\frac{3}{4\pi}}n_z=ia_z=\sqrt{2}\psi^{12}$$
$$Y_{1\pm1}=\mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\sin\theta\exp(\pm i\phi)=\mp i\sqrt{\frac{3}{8\pi}}(n_x\pm in_y)=\mp(a_x\pm ia_y)$$
$$\psi^{11}=(a_x-ia_y)/\sqrt{2};\psi^{22}=-(a_x+ia_y)/\sqrt{2} \qquad (4)$$
$$Y_{jm}(\theta,\varphi)=\psi_{jm}=\sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}}\psi_{\underbrace{11...1}_{j+m}\underbrace{22...2}_{j-m}}$$

Формулы можно записать в виде

$$a_z=i\sqrt{2}\psi^{12};a_x=(\psi^{22}-\psi^{11})/\sqrt{2};a_y=(\psi^{11}+\psi^{22})/\sqrt{2}.$$

Эту формулу можно переписать с помощью матриц Паули в виде

$$\mathbf{a}=i\sqrt{2}\mathbf{s}^{\lambda}_{\mu}\psi^{\mu}_{\lambda} \qquad \psi^{\mu}_{\lambda}=-i\sqrt{2}\mathbf{a}\mathbf{s}^{\mu}_{\lambda}$$

Все последние формулы взяты из [1]§57 .

Если часть частиц вакуума образует полуцелый спин, а часть частиц вакуума образует целый спин, то образуется система с произвольным спином. Описывать их надо с долей целой шаровой функцией α и с долей нечетной шаровой функцией $1-\alpha$, зависящей от половины телесного угла, тогда спин будет равен

$$S=m\alpha+(1-\alpha)s_z,s_z=(2k+1)/2;L(L+1)=j(j+1)\alpha+(1-\alpha)s(s+1)$$

а сферическая функция равна

$$\psi=\alpha P^m_j(\cos\theta)\exp(im\varphi)+(1-\alpha)P^{s_z}_s(\cos\Theta/2)\exp(is_z\Omega),$$

Причем с такой волновой функцией имеются проблемы с CPT инвариантностью, спиновая функция при инверсии умножается на положительную или отрицательную мнимую единицу. Ее четность равна $\widehat{P}\psi(t,\mathbf{r})=(-1)^s\psi(t,-\mathbf{r});\widehat{P}^4=1$. Это соответствует внутренней симметрии частиц и античастиц. Заметим, что произошел выбор между представлением

$\hat{P}^2 = -1$ и между $\hat{P}^2 = 1$, в пользу первого преобразования. CPT преобразование спинора волновой функции определяется выражением (5) и соответствует умножению волновой функции на положительное или отрицательное значение мнимой единицы

$$\hat{C}\hat{P}\hat{T}\psi(t,\mathbf{r}) = [\alpha E + (1-\alpha)\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3]\psi(-t,-\mathbf{r}) = [\alpha E + (1-\alpha)i\gamma^5]\psi(-t,-\mathbf{r})$$
$$(\gamma^5)^2 = 1; \gamma^5\gamma^\mu + \gamma^\mu\gamma^5 = 0, \quad (5)$$

В спинорном представлении имеем

$$i\gamma^5 = \begin{Vmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{Vmatrix}, \xi^\alpha \to -i\xi^\alpha, \eta_{\dot\alpha} \to i\eta_{\dot\alpha}.$$

Для частиц вакуума с произвольным спином можно было воспользоваться одной угловой частью волновой функцией. Для этого надо ввести углы

$$\cos\Theta_\alpha = [j(j+1)\cos\theta + s(s+1)\cos(\Theta/2)]/L(L+1), \exp(iS\Omega_\alpha) = \exp[i(m\varphi + s_z\Omega)]$$

$$S = m + s_z, s_z = (2k+1)/2; L(L+1) = j(j+1) + s(s+1)$$

и определять сферические функции с квантовыми числами S, L в итоге получим волновую функцию $Y_L^S(\Theta_\alpha, \Omega_\alpha) = P_L^S(\cos\Theta_\alpha)\exp(iS\Omega_\alpha)$. Но как удовлетворить условиям CPT теоремы с такой волновой функцией? Угловая часть волновой функции при инверсии умножается на комплексную величину $\pm(-1)^L$, где величина L действительная в общем случае. Модуль этой величины равен единице. Знак плюс-минус появился из-за зарядового сопряжения заряда.

Список литературы

1. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.* Квантовая механика Нерелятивистская теория т.III, Наука, М.,1969,768с.
2. Якубовский Е.Г. Форма элементарных частиц в виде тора, причем спин описывается двумя плоскостями вращения. «энциклопедический фонд России», 2017, 10 стр. http://russika.ru/sa.php?s=1320