Углы сферической системы координат и отрицательный радиус

Якубовский Е.Г.

e-mail yakubovski@rambler.ru

Сходимость рядов по сферическим функциям плохая из-за разного значения косинуса на концах изменения при вычислении скалярного произведения. Если ввести отрицательный радиус на второй части изменения меридионального угла, то скалярное произведение можно обобщить на весь период угла, и тогда сферические функции будут периодическими. Только надо учитывать, когда радиус положителен, а когда отрицателен. Формула для оператора Лапласа содержит квадрат радиуса. Формулы остаются неизменными при таком преобразовании и сходимость ряда не улучшается. Но перейдя в комплексное пространство удается построить периодические углы, однозначно связанные с декартовыми координатами. Вычислен метрический тензор и его определитель. Вычисления производились в двух случаях, с комплексно сопряженным произведением и без комплексного сопряжения. Удалось определить оператор проекции момента импульса для двух углов в двух случаях. с комплексно сопряженным произведением и без комплексного сопряжения. Построен оператор Лапласа в обоих случаях. Получилось альтернативное уравнение для двух случаев. Но осмыслить полученные результаты пока не удалось. Получились другие квантовые числа.

Является большим заблуждением думать, что меридиональный угол изменяется на отрезке $[0,\pi]$. Это приводит к плохой сходимости рядов, так как угол не периодичен. На самом деле сферическая функция содержит $\cos^n\theta$ разложение которого определяет угол $\cos n\theta$, выходящий за границы $[0,\pi]$. При этом будут существовать две частоты вращения, по меридиональному и азимутальному углу. Причем эти углы будут определяться однозначно из преобразования к декартовым координатам. Но углы будут однозначно соответствовать координатам $\varphi = \arg(x_1 + ix_2) + 2\pi k, \theta = \arg(x_3 + i\sqrt{x_1^2 + x_2^2}) + 2\pi k$. Определитель метрического тензора равен $r^2 \sin\theta dr d\theta d\varphi$. Преобразование координат

$$\begin{aligned} x_1 &= r\sin\theta\sin\varphi \\ x_2 &= r\sin\theta\cos\varphi. \\ x_3 &= r\cos\theta \end{aligned}$$

При переходе к углу $\theta \in [\pi, 2\pi]$ произойдет инверсия знака координат $\cos(\theta + \pi) = -\cos\theta, \sin(\theta + \pi) = -\sin\theta$, но углы определятся однозначно при этих значениях периода, только для сохранения периодичности углов меняется знак радиуса. Комплексный радиус используется при описании не сферического тела см. [1]. В зависимости от значения меридионального угла радиус бывает положительный и отрицательный. Сохраняется ортогональные сферические функции, только значение аргумента угла изменяется. Но необходимо рассматривать отдельно пространство с положительным и отрицательным радиусом, при этом угол меняется непрерывно и преобразование координат непрерывное, и производная по радиусу непрерывная, т.е. метрический тензор непрерывен. Радиус в операторе Лапласа входит в квадрате, так что оператор не изменится. Но дифференцировать уравнение надо по радиусу, если угол изменяется $\theta \in [0, \pi]$ и по отрицательному радиусу, если $\theta \in [\pi, 2\pi]$. Знак определителя метрического тензора, умноженный на дифференциалы сохраняется. Интегрировать при вычислении скалярного произведения векторов надо по всему периоду, во второй половине радиус меняет знак и ортогональность полином Лежандра сохранится, просто скалярное произведение умножится на два. Полином Лежандра изменится на множитель, но вычислять скалярное произведение надо отдельно со единичным множителем плюс по изменению углов $\theta \in [0, \pi]$ и с единичным множителем знака минус, связанным с $\theta \in [\pi, 2\pi]$ отрицательным радиусом dr. При этом сходимость ряда по функции Лежандра улучшится, так как каждый член ряда в начале периоде и в его конце будет принимать одинаковые значения.

К сожалению формулы описывающие переменные сферической системы координат инвариантны относительно изменения знака у радиуса и добавки угла π к меридиональному углу, например

$$\exp(ikr\cos\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} i^n (2n+1) j_n(kr) P_n(\cos\theta),$$
$$j_n(kr) = \sqrt{\frac{\pi}{2kr}} J_{n+1/2}(kr) = 2^n (kr)^n \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m (n+m)!}{m!(2n+2m+1)!}(kr)^{2m}.$$

Поэтому коэффициенты ряда не меняются. При ортонормированных функциях, наблюдается плохая сходимость ряда, коэффициент стремится к бесконечности. Несмотря на то, что угол периодический, так как радиус меняет знак, радиальная функция меняет знак и сходимость не улучшается.

В комплексном пространстве не надо менять значение радиуса и углы будут периодическими

$$\begin{aligned} x_1 &= \exp(i\theta) r \sin\varphi \\ x_2 &= \exp(i\theta) r \cos\varphi . \\ x_3 &= \exp(i\theta) r \end{aligned}$$

Что эквивалентно

$$z = x_2 + ix_1 = r\exp(i\theta + i\varphi)$$
$$x_3 = r\exp(i\theta)$$

Углы определятся однозначно $\varphi = \arg(x_2 + ix_1) = \arg[i(\operatorname{Re} x_1 + \operatorname{Im} x_2) + \operatorname{Re} x_2 - \operatorname{Im} x_1) - \arg(x_3) + 2\pi k, \theta = \arg(x_3) + 2\pi k$. И следовательно сходимость улучшится.

Выведем метрический тензор в комплексном пространстве

$$ds^2 = g_{kl} dq^k dq^l = (g_{kl} + g_{lk}) dq^k dq^l / 2 = (g_{kl} + g_{kl}^*) dq^k dq^l / 2 = \operatorname{Re} g_{kl} dq^k dq^l$$
$$g_{lk} = \frac{\partial x_i}{\partial q_l} \frac{\partial x_l^*}{\partial q_k}$$

Метрический тензор равен $g_{kl}=(\frac{\partial x_l}{\partial q_k}\frac{\partial x_l^*}{\partial q_l}+\frac{\partial x_l}{\partial q_l}\frac{\partial x_l^*}{\partial q_k})/2$ $g_{rr}=2, g_{\theta\theta}=2r^2, g_{r\theta}=0, g_{r\varphi}=0, g_{\theta\varphi}=r^2, g_{\varphi\kappa}=r^2$ и надо строить другие ортогональные полиномы. Корень из определителя метрического тензора равен $\sqrt{2}r^2drd\theta d\varphi$ Ортогональный полином произвольного порядка $P_0(\theta)=1,...,P_n(\theta)=\exp(in\theta)$. Скалярное произведение считается по формуле $\int_0^{2\pi}P_k^*(\theta)P_n(\theta)d\theta=2\pi\delta_{kn}$. При этом нормировка функции осуществляется по формуле $\int_0^{2\pi}P_n^*(\theta)P_n(\theta)d\theta=2\pi$.

В случае соответствия углам классического преобразования действительных координат значения метрического тензора не диагональные

$$\begin{aligned}x_1&=-i\exp(i\theta)r\sin\varphi\\x_2&=-i\exp(i\theta)r\cos\varphi\\x_3&=\exp(i\theta)r\end{aligned}$$

Величины $g_{rr}=g_{\theta\theta}=0, g_{r\theta}=(-i+1)r, g_{\theta r}=(i-1)r, (g_{r\theta}+g_{\theta r})/2=0, g_{r\varphi}=0, g_{\theta\varphi}=r^2$. Величина $g_{\varphi\varphi}=-r^2$ при значении определителя метрического тензора, равного нулю. Т.е. дифференциальные уравнения в этой системе координат невозможны и надо описывать орбитальный и спиновый момент с помощью матриц. Но в действительном пространстве удалось описать орбитальный момент с большими проблемами для собственных значений и собственных функций. Орбитальный момент считается только с конечным полиномом Лежандра при целом орбитальном моменте для модуля орбитального момента и одной проекции. используя не стандартное комплексное новое преобразование координат удалось получить простые собственные функции, соответствующие простым преобразованиям.

В новых координатах имеем

$$\widehat{P}_\theta \psi_n = n\psi_n, \psi_n = \exp(in\theta), \widehat{P}_\theta = \frac{\partial}{\partial i\theta}$$
$$\widehat{P}_\varphi \psi = m\psi, \psi = \exp(im\varphi), \widehat{P}_\varphi = \frac{\partial}{\partial i\varphi} \tag{1}$$

Тогда имеем

$$< n \mid a \mid n >= \int_0^{2\pi} \psi_n^*(\theta) a \psi_n(\theta) d\theta = n \int_0^{2\pi} \psi_n^*(\theta) \psi_n(\theta) d\theta = n$$

Подсчитаем матрицу, обратную к матрице метрического тензора

$$g^{lk} = \begin{Vmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & 2r^2 & r^2 \\ 0 & r^2 & r^2 \end{Vmatrix}^{-1} = \begin{Vmatrix} r^4 & 0 & 0 \\ 0 & 2r^2 & -2r^2 \\ 0 & -2r^2 & 4r^2 \end{Vmatrix} / 2r^4 = \begin{Vmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 1/r^2 & -1/r^2 \\ 0 & -1/r^2 & 2/r^2 \end{Vmatrix}$$

Оператор Лапласа имеет вид

$$\Delta = \frac{1}{\sqrt{g}} \frac{\partial}{\partial q^l} (\sqrt{g} g^{lk} \frac{\partial}{\partial q^k} = \frac{1}{2r^2} [\frac{\partial}{\partial r} (r^2 \frac{\partial}{\partial r}) + 2 \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + 4 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 4 \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \varphi} \tag{2}$$

Оба оператора (1) коммутируют с оператором (2), т.е. можно получить собственные значения для всех операторов. При этом оператор модуля момента импульса имеет собственные значения

$$(\frac{\partial^2}{\partial \theta^2} + 2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} - 2 \frac{\partial^2}{\partial \theta \partial \varphi}) \psi_{nm} = -(n^2 + 2m^2 - 2nm) \psi_{nm}, \psi_{nm} = \exp(in\theta + im\varphi).$$

Оказалось что состояние квантовой системы описывают две проекции момента импульса, а не модуль момента импульса и его проекция.

Но в комплексном пространстве нельзя использовать произведение комплексно-сопряженных величин. Так тогда величины модуля определяются положительные, и при вычислениях могут оказаться отрицательными, что вызывает перенормировки. Поэтому построим алгоритм без произведения комплексно сопряженных величин.

Выведем метрический тензор в комплексном пространстве, удовлетворяющим свойствам

$$ds^2 = g_{kl} dq^k dq^l = (g_{kl} + g_{lk}) dq^k dq^l / 2$$
$$g_{lk} = \frac{\partial x_i}{\partial q_l} \frac{\partial x_l}{\partial q_k}$$

Определитель метрического тензора равен

$$\begin{gathered} g_{rr} = 2\exp(2i\theta/3), g_{\theta\theta} = 2r^2 \exp(2i\theta/3)/9, g_{r\theta} = 2ir\exp(2i\theta/3)/3, g_{r\varphi} = 0, \\ g_{\theta\varphi} = 0, g_{\varphi\varphi} = r^2 \exp(2i\theta/3) \end{gathered}.$$

и надо строить другие ортогональные полиномы. Корень из определителя метрического тензора равен $2^{3/2} r^2 \exp(i\theta) dr d\theta d\varphi / 9$ Ортогональный полином произвольного порядка $P_0(\theta) = \exp(-i\theta), \ldots, P_n(\theta) = \exp[-i(n+1)\theta]$. Скалярное произведение считается по формуле $\int_0^{2\pi} P_k^*(\theta) P_n(\theta) \exp(i\theta) d\theta = 2\pi\delta_{k(n-1)}$. При этом нормировка функции осуществляется по формуле $\int_0^{2\pi} P_{n+1}^*(\theta) P_n(\theta) \exp(i\theta) d\theta = 2\pi$.

Построим повышающий индекс и понижающий индекс оператор.

$$\begin{gathered}
\hat{a}\psi_n[\exp(2in\theta)] = n\psi_{-n}, \psi_n = \exp(-in\theta), \hat{a} = \frac{\partial[\exp(2in\theta)]}{\partial i\theta} \\
\hat{a}_+\psi_n[\exp(2in\theta)] = n\exp(-i\theta)\psi_{-(n+1)}, \psi_n = \exp(-in\theta), \hat{a}_+ = \frac{\partial[\exp(2in\theta)]}{\partial i\theta} \\
\hat{a}_-\psi_n[\exp(2in\theta)] = n\exp(i\theta)\psi_{-(n-1)}, \psi_n = \exp(-in\theta), \hat{a}_- = \frac{\partial[\exp(2in\theta)]}{\partial i\theta} \\
\hat{P}_\varphi \psi_m \exp(-2im\varphi) = m\psi_{-m}, \psi_m = \exp(im\varphi), \hat{P}_\varphi = \frac{\partial[\exp(-2im\theta)]}{\partial i\varphi}
\end{gathered} \quad (3)$$

Тогда имеем

$$<n\,|\,\hat{a}\,|\,n>=\int_0^{2\pi}\psi_n(\theta)\hat{a}[\psi_n(\theta)\exp(2in\theta)\exp(i\theta)]d\theta=(n+1)\int_0^{2\pi}\psi_n(\theta)\psi_{-n}(\theta)\exp(i\theta)d\theta=0$$

$$<n+1\,|\,\hat{a}_+\,|\,n>=\int_0^{2\pi}\psi_{n+1}(\theta)\hat{a}_+[\psi_n(\theta)\exp(2in\theta)\exp(i\theta)]d\theta=$$

$$=(n+1)\int_0^{2\pi}\psi_{n+1}(\theta)\psi_{-(n+1)}(\theta)d\theta=n+1$$

$$<n-1\,|\,\hat{a}_-\,|\,n>=\int_0^{2\pi}\psi^*_{n-1}(\theta)\hat{a}_-[\psi_n(\theta)\exp(2in\theta)\exp(-i\theta)]d\theta=$$

$$=(n-1)\int_0^{2\pi}\psi_{n-1}(\theta)\psi_{-(n-1)}(\theta)d\theta=n-1$$

Подсчитаем матрицу, обратную к матрице метрического тензора

$$g^{lk}=2^3\exp(2i\theta)/9\begin{Vmatrix}2 & 2ir & 0\\ 2ir & 2r^2 & 0\\ 0 & 0 & r^2\end{Vmatrix}^{-1}=\begin{Vmatrix}r^4 & -2ir^3 & 0\\ -2ir^3 & 2r^2 & 0\\ 0 & 0 & 8r^2\end{Vmatrix}9/2^3r^4=\begin{Vmatrix}1/2 & -i/r & 0\\ -i/r & 1/r^2 & 0\\ 0 & 0 & 4/r^2\end{Vmatrix}9/4$$

Оператор Лапласа имеет вид

$$\Delta=\frac{9}{4r^2\exp(i\theta)}[\frac{\partial}{\partial r}(r^2\exp(i\theta)\frac{\partial}{2\partial r})-$$
$$-i\frac{\partial r\exp(i\theta)}{\partial r}\frac{\partial}{\partial\theta}-i\frac{\partial r\exp(i\theta)}{\partial\theta}\frac{\partial}{\partial r}+\frac{\partial^2\exp(i\theta)}{\partial\theta^2}+4\frac{\partial^2\exp(i\theta)}{\partial\varphi^2}$$

Приведем подобные члены

$$2\Delta=\frac{9}{4}\frac{\partial^2}{\partial r^2}-\frac{9}{2r}\frac{\partial}{\partial r}-\frac{9i}{r}\frac{\partial^2}{\partial\theta\partial r}+\frac{9\partial^2}{2r^2\partial\theta^2}+\frac{9i}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{18\partial^2}{r^2\partial\varphi^2}\qquad(4)$$

Оба оператора (3) не коммутируют с оператором (4), т.е. нельзя получить собственные значения для всех операторов. При этом оператор модуля момента импульса имеет собственные значения

$$(\frac{\partial^2}{2\partial\theta^2}+\frac{2\partial^2}{\partial\varphi^2}-i\frac{\partial}{\partial\theta})\psi_{nm}=-(n^2/2+2m^2+in)\psi_{nm},\psi_{nm}=\exp(-in\theta+im\varphi).$$

Оказалось что состояние квантовой системы описывают две проекции момента импульса, а не модуль момента импульса и его проекция.

Радиальная часть оператора Лапласа имеет вид

$$\Delta = \frac{9}{8}\frac{\partial^2}{\partial r^2} - \frac{9(1+n)}{4r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{9(n^2/2+2m^2+in)}{2r^2}.$$

При условии $n=-2$ получаем волновую функцию, $\psi_{(-2)m} = R_{(-2)m}(r)\exp(2i\theta + im\varphi)$ которая соответствует переходу на волновую функцию $\psi_{1m} = R_{1m}(r)\exp(-i\theta + im\varphi)$ с $n=1, \Delta\theta = -3\theta, \Delta n = 3$.

получаем уравнение, которое можно решить

$$\Delta = \frac{9}{8}[\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r}\frac{\partial}{\partial r} - \frac{8(m^2+1-i)}{r^2}]$$

Литература

1. Якубовский Е.Г. Преобразование произвольного тела в сферу комплексного радиуса. «Энциклопедический фонд России», 2017, 18 стр. http://russika.ru/userfiles/390_1492726821.pdf