Краткие сообщения по физике № 5-1988 г.

УДК 539.19

О ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОВЕРХНОСТЯХ ДЛЯ СПЕКТРОВ ВРАЩАТЕЛЬНЫХ ОПЕРАТОРОВ

А.С.Бруев

Предложен новый метод нахождения потенциальных поверхностей для спектров вращательных операторов.

Метод эффективных потенциальных поверхностей, первоначально предложенный Брауном для решения системы трехчленных рекуррентных соотношений с медленно меняющимися коэффициентами /1/, оказался удобным для многих физических приложений /2 – 6/. С его помощью изучают структурные перестройки в спектрах вращательных /7 – 9/ и колебательных /10/ операторов. В этом случае каждой структурной перестройке отвечает появление локального экстремума на эффективной потенциальной поверхности.

В данной работе описан новый метод нахождения потенциальных поверхностей, применение которого не ограничено известным случаем /1/. В качестве конкретного примера найдены потенциальные поверхности для гамильтониана жесткого асимметричного волчка при произвольных значениях квантовых чисел.

Волновая функция асимметричного волчка в представлении проекций вращательного момента a_k^{JE} удовлетворяет известному рекуррентному соотношению /5/. Его можно упростить, если положить $a_k^{JE} = [(J-K)!\,(J+K)!]^{-1/2} b_k^{JE}$. Соответственно для b_k^{JE} находим:

$$V_{k-1}^J b_{k-2}^{JE} + (G_k^J - E)\, b_k^{JE} + V_{k+1}^J b_{k+2}^{JE} = 0,$$

$$V_{k\pm1}^J = \frac{1}{4}(A-B)(J \pm K)(J \pm K - 1)\,;\; G_k^J = \frac{1}{2}(A+B)[J(J+1) - K^2] + CK^2, \tag{1}$$

где A, B, C – вращательные постоянные волчка. Следуя /11/, рассмотрим фурье-разложение $f(\beta) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} b_k^{JE} e^{ik\beta}$. Используя (1) находим одномерное "волновое уравнение" $\hat{H}f = Ef$, где гамильтониан $\hat{H}$ имеет вид:

$$\hat{H} = \left[\frac{A+B}{2} - C - \frac{A-B}{2}\cos 2\beta\right]\frac{d^2}{d\beta^2} + \left[\frac{A-B}{2}(2J+3)\sin 2\beta\right]\frac{d}{d\beta} + \frac{A+B}{2}J(J+1) + \frac{A-B}{2}(J+2)(J+1)\cos 2\beta. \tag{2}$$

Гамильтониан (2) не эрмитов, поэтому сделаем замену

$$f(\beta) = \left[\frac{A+B}{2} - C - \frac{A-B}{2}\cos 2\left\{\arccos\left[\cos\alpha\left(1 - \frac{A-B}{A-C}\sin^2\alpha\right)^{-1/2}\right]\right\}\right]^{-(J+1/2)} \times \left(1 - \frac{A-B}{A-C}\sin^2\alpha\right)^{-J/2}\chi(\alpha), \tag{3}$$

которая позволит получить следующее выражение для гамильтониана

$$\hat{H} = [A - C - (A-B)\sin^2\alpha]^{1/2}\frac{d}{d\alpha}[A - C - (A-B)\sin^2\alpha]^{1/2}\frac{d}{d\alpha} + BJ(J+1) + (A-B)J(J+1)\cos^2\alpha. \tag{4}$$

Отметим, что решения уравнения $\hat{H}\chi = E\chi$ можно выразить через функции Ламе /12/.

Перейдем к классическим каноническим переменным $q = \alpha$ и $p = \hat{p} = -id/d\alpha$ и найдем соответствующую классическую функцию Гамильтона $H(p,q)$. Из-за некоммутативности операторов q и $\hat{p}$ переход от оператора $\hat{H}$ к $H(p,q)$ неоднозначен. Поэтому потребуем, чтобы выполнялось условие $\lim\limits_{p\to 0} H(p,q) = 0$. Тогда

$$H(p,q) = -[A - C - (A - B)\sin^2 q]p^2 + BJ(J+1) + (A - B)J(J+1)\cos^2 q. \quad (5)$$

Выражение для потенциальной кривой $U(q) = J(J+1)[A\cos^2 q + B\sin^2 q]$ получается из (5) при $p = 0$. Это выражение совпадает с аналогичной формулой работы /6/ при замене q на $q' = \pi/2 - q$. При каноническом преобразовании $p \to Q$ и $q \to -P$ функция Гамильтона (5) становится периодической функцией импульса P. Для классической скорости $\dot{Q} = \partial H(P,Q)/\partial P$ находим $\dot{Q} = -(A - B)\sin 2P[J(J+1) - q^2]$. Отсюда следует, что точкам поворота отвечают значения импульса $P = 0, \pi/2$ с потенциальными кривыми $U_1(Q) = AJ(J+1) - (A - C)Q^2$ и $U_2(Q) = BJ(J+1) - (B - C)Q^2$. Полученные выражения совпадают с аналогичными формулами работы /5/.

Отметим, что формулы для $U_{1,2}(Q)$ при $J \gg 1$ можно получить более простым путем с помощью следующих преобразований. Классическую энергию вращения волчка представим в виде $E_r = M^2(A\cos^2\varphi_M + B\sin^2\varphi_M) + M_3^2(C - A\cos^2\varphi_M - B\sin^2\varphi_M)$, где M_3 – проекция вращательного момента M на ось z' системы K', связанной с волчком, угол φ_M – азимутальный угол вектора M в системе K'. Введя канонические переменные $Q = M_3$ и $P = -\varphi_M$, для функции Гамильтона имеем $H = M^2(A\cos^2 P + B\sin^2 P) + Q^2(C - A\cos^2 P - B\sin^2 P)$ откуда при $P = 0, \pi/2$ получаются выражения для $U_{1,2}(Q)$, совпадающие с выше найденными при $J \gg 1$. Следовательно роль координаты в рассмотренном выше представлении выполняет "классическая " проекция M_3. Имея это в виду, обозначив $\hat{J}_3 = Q$ и используя соотношения $J(J+1) = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + Q^2$ и $E = A\hat{J}_1^2 + B\hat{J}_2^2 + CQ^2$, имеем

$$\hat{J}_1^2 = \frac{1}{A-B}[E - BJ(J+1) - (C - B)Q^2], \quad \hat{J}_2^2 = \frac{1}{A-B}[AJ(J+1) + (C - A)Q^2 - E].$$

Из этих выражений для $\dot{Q} = i[\hat{H},Q]$ находим $\dot{Q} = -2[AJ(J+1) + (C - A)Q^2 - E]^{1/2}[E - BJ(J+1) - (C - B)Q^2]^{1/2}$, откуда при $\dot{Q} = 0$ следуют соотношения $U_{1,2}(Q)$.

В заключение отметим, что сведение задачи о спектре асимметричного волчка к решению одномерного уравнения может быть выполнено различными методами /13 – 17/, но все они приводят к одинаковому результату для спектра.

ЛИТЕРАТУРА

1. Браун П. А. Теор. мат. физ., 37, 355 (1978).
2. Браун П. А. Теор. мат. физ., 41, 336 (1979); ЖЭТФ, 84, 850 (1983); 86, 68 (1984).
3. Браун П. А., Мирошниченко Г. П. Опт. и спектр., 45, 1081 (1978); 48, 1081 (1980).
4. Braun P. A., Shirokov A. M., Smirnov Yu. F. Mol. Phys., 56, 573 (1985).
5. Бруев А. С. ЖЭТФ, 90, 35 (1986).
6. Бруев А. С Краткие сообщения по физике ФИАН, № 6, 42 (1987).
7. Pavlichenkov I. M., Zhilinskii B. I. Chem. Phys., 100, 339 (1985).
8. Жилинский Б. И., Павличенков И. М. ДАН СССР, 289, 652 (1986); ЖЭТФ, 92, 387 (1987).
9. Жилинский Б. И., Садовский Д. А. Опт. и спектр., 61, 481 (1986).
10. Павлов–Веревкин В. Б., Жилинский Б. И. Хим. физика, 6, 1459 (1987).
11. Talman J. D. Nucl. Phys., A161, 481 (1971).
12. Бейтмен Г., Эрдейи А. Высшие трансцендентные функции. М., Наука, 1967, т.3, с.112.
13. Kramers H. A., Itman G. P. Zs. f. Phys., 53, 553 (1929); 58, 217 (1930).
14. Spence R. D. Am. J. Phys., 27, 329 (1959).
15. Лукач И., Смородинский Я. А. В сб. Современные проблемы оптики и ядерной физики, Киев, Наукова Думка, 1974, с. 186.
16. Auqustin S. D., Rabitz H. J. Chem. Phys., 71, 4956 (1979); 73, 268 (1980).
17. Павличенков И. М. Ядерная физика, 33, 98 (1981).

Институт общей физики АН СССР

Поступила в редакцию 13 января 1988 г.