A Kepler–Coulomb-probléma

Lévai Géza

MTA ATOMKI, Debrecen

1. **Az egzaktul megoldható modellek jelentősége**

2. **A Kepler–Coulomb-probléma jelentősége a klasszikus és a kvantummechanikában**

   Mindkét esetben alapvető felismerésekre vezetett

   Mennyiségi $\Longrightarrow$ minőségi jellegű ismeretek

   A modellalkotás iskolapéldái

3. **Részletes vizsgálatok: megoldások, megmaradó mennyiségek, szimmetriák**

4. **A Coulomb-probléma helye az egzaktul megoldható potenciálok között**

   Transzformációs módszerek, az egydimenziós Coulomb-potenciál

1. Az egzaktul megoldható modellek jelentősége

Hasznos, ha analitikusan leírható(k)

- Bármely állapot, akkor is, ha végtelen sok van
- Az aszimptotikus mennyiségek és a szingularitások
- Átmenetek kritikus pontokon
- A rendszer szimmetriái

Az egzakt megoldások segíthetik a numerikus módszerek fejlesztését és kombinálhatók is azokkal

2. A Kepler–Coulomb-probléma jelentősége a klasszikus és a kvantummechanikában

A klasszikus Kepler-probléma

Geocentrikus világkép *Kvantitatív módszerek a bolygók mozgásának leírására*

Kopernikuszi világkép *Világnézetileg áttörés, módszertanilag nem (körpályák)*

A Kepler-törvények *A korábbi ismeretek konzisztens, matematikai igényű szintézise*

I. A Naprendszer égitesteinek pályálya kúpszelet, fókuszukban a Nappal

II. A vezérsugár egyenlő idők alatt egyenlő területeket súrol

III. $T^2/a^3 = const.$

Galilei, Newton *A felismert kinematikai törvények dinamikai értelmezése*

A kvantummechanikai Kepler–Coulomb-probléma

Spektroszkópiai adatok	*Fenomenologikus formulák, magyarázat nélkül (Balmer)*
Korai atommodellek	*Maga az erőhatás ismert, de az nem, hogy mik között hat*
Bohr-féle atommodell	*Koncepcionális áttörés, de nem a végleges megoldás*
Hullámmechanika	*A korábbi ismeretek konzisztens, matematikai igényű szintézise*
Az igazi H-atom	*A további finomítások (rel., HFS, Lamb) kis korrekciókkal járnak*

3.1 A klasszikus Kepler-probléma és szimmetriái

$$E = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{\gamma m M}{r}$$

Mozgásállandók: E *konzervatív erőtér*

$\mathbf{L}$ (Kepler II. törvénye) *centrális erőtér*

És még valami: $\varepsilon = \frac{\mathbf{r}}{r} - \frac{1}{\gamma m^2 M}\mathbf{p} \times \mathbf{L}$ Runge–Lenz-vektor, Laplace-integrál

a pálya orientációjával és alakjával kapcsolatos

Az erőtörvény miatt fellépő dinamikai szimmetria

Szimmetrikusabb alakban: $\mathbf{A} = \gamma m M \left(\frac{m}{2|E|}\right)^{1/2} \varepsilon$

Ezzel:

$$E = \begin{cases} -\gamma^2 m^4 M^2 / [2(\mathbf{A}^2 + \mathbf{L}^2)] & \text{ha } E < 0 \\ \gamma^2 m^4 M^2 / [2(\mathbf{A}^2 - \mathbf{L}^2)] & \text{ha } E > 0 \end{cases}$$

A Runge–Lenz-vektor, mint mozgásállandó értelmezése

ε **iránya**: a vonzócentrumból a perihéliummal ellentétes irányba mutat

nagysága: a pálya excentricitása (dimenziótlan fizikai mennyiség)

$E < 0$ esetén a pálya zárt görbe: ellipszis

Bertrand-tétel:

$V(r) = ar^{\nu}$ alakú centrális potenciál esetén zárt pályák csak $a < 0$, $\nu = -1$ és $a > 0$, $\nu = 2$ esetén adódnak. Ez a Kepler-probléma és a harmonikus oszcillátor esete. Ilyenkor a pálya ellipszis alakú és a vonzócentrum az ellipszis gyújtópontjában, illetve a középpontjában van a két esetben.

1. megjegyzés: a harmonikus oszcillátor ,,szimmetrikusabb''

2. megjegyzés: zárt pályák kaphatók a fenti két esetben a

$$V(r) = ar^{\nu} + b/r^2$$

potenciál esetén is a pályamomentum bizonyos értékeinél: vagyis ha $[(\nu+2)(1+2b/L^2]^{1/2}$ racionális tört szám. Ekkor rozetta alakú pályák adódnak.

3.2 A kvantummechanikai Kepler–Coulomb-probléma

Mit tudunk a Coulomb-problémáról?

Harmonikus oszcillátor, hidrogénatom.
Van-e más is a világon? Én nem tudhatom,
De ha netán volna más, azt rúgja meg a ló,
Az csak perturbáció.

Fizikus induló – részlet

http://mafihe.hu/fizikus-indulo

Centrális potenciál, a szögváltozók szeparálhatók $\Longrightarrow$ $Y_l^m(\vartheta, \phi)$

Radiális Schrödinger-egyenlet:

$$H\psi(r) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right) - \frac{Z\mathrm{e}^2}{r}\right]\psi(r) = E\psi(r)$$

Kötött állapotok:

$$E_{nl} = -\frac{mZ^2\mathrm{e}^4}{2\hbar^2(n+l+1)^2} \qquad n,\ l = \ 0,\ 1,\ \ldots$$

Kötöttállapoti hullámfüggvények:

$$\psi_{nl}(r) = a_0\left(\frac{r_0 n!}{2\Gamma(n+2l+1)!}\right)^{1/2} \exp\left(-\frac{a_0}{2}r\right)(a_0 r)^{l+1} L_n^{(2l+1)}(a_0 r)$$

$a_0 = ((n+l+1)r_0)^{-1}$, $r_0 = \hbar^2/(2mZ\mathrm{e}^2)$

$L_n^{(\alpha)}(x)$: általánosított Laguerre-polinom, $L_n^{(\alpha)}(x) = \frac{\Gamma(n+\alpha+1)}{\Gamma(\alpha+1)n!}\ {}_1F_1(-n, \alpha+1, x)$

$F(-n, \alpha+1, x)$: konfluens hipergeometrikus függvény

Ugyanez általánosabban, D dimenzióban:

Radiális Schrödinger-egyenlet:

$$H\psi(r) \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{1}{r^2}\left(l+\frac{D-3}{2}\right)\left(l+\frac{D-1}{2}\right)\right) - \frac{Z\mathrm{e}^2}{r}\right]\psi(r) = E\psi(r)$$

Kötött állapotok:

$$E_{nl} = -\frac{mZ^2\mathrm{e}^4}{2\hbar^2\left(n+l+\frac{D-1}{2}\right)^2} \qquad n,\ l =\ 0,\ 1,\ \ldots,\ D>1$$

Kötöttállapoti hullámfüggvények:

$$\psi_{nl}(r) = a_0\left(\frac{r_0 n!}{2\Gamma(n+2l+D-2)!}\right)^{1/2}\exp\left(-\frac{a_0}{2}r\right)(a_0 r)^{l+\frac{D-1}{2}}L_n^{(2l+D-2)}(a_0 r)$$

$a_0 = ((n+l+(D-1)/2)r_0)^{-1}$, $r_0 = \hbar^2/(2mZ\mathrm{e}^2)$

A kvantummechanikai Kepler–Coulomb-probléma szimmetriái

$$H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{Ze^2}{r}$$

Mozgásállandók: E *időfüggetlen dinamika*

$\mathbf{L}^2$, L_3 $[H, \mathbf{L}^2] = [H, L_3] = 0$ *centrális potenciál,* $SO(3)$

$\varepsilon = \frac{\mathbf{r}}{r} + \frac{1}{2mZe^2}[\mathbf{L} \times \mathbf{p} - \mathbf{p} \times \mathbf{L}]$ Runge–Lenz-Pauli-vektor

$[\varepsilon, H] = 0 \quad \mathbf{L} \cdot \varepsilon = \varepsilon \cdot \mathbf{L} = 0$

az erőtörvény miatt fellépő dinamikai szimmetria

Szimmetrikusabb alakban: $\mathbf{A} = \frac{Ze^2}{\hbar^2} \left(\frac{m}{2H}\right)^{1/2} \varepsilon$

Felcserélési relációk

$E < 0 \quad [L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad [L_i, A_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}A_k \quad [A_i, A_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad SO(4)$

$E > 0 \quad [L_i, L_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad [L_i, A_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}A_k \quad [A_i, A_j] = -\mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}L_k \quad SO(3,1)$

A H-atom nívóinak degenerációja

$$\frac{1}{E} = \frac{2\hbar^2}{Z^2 \mathrm{e}^4 m}(\mathbf{A}^2 + \mathbf{L}^2 + \hbar^2)$$

Új operátorokat bevezetve:

$$\mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{A}) \qquad \mathbf{J}' = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{A})$$

Felcserélési relációk:

$$[J_i, J_j] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}J_k \quad [J_i', J_j'] = \mathrm{i}\hbar\epsilon_{ijk}J_k' \quad [J_i, J_j'] = 0 \quad SU(2) \times SU(2) \sim SO(4)$$

$$\mathbf{J}^2 = j(j+1)\hbar^2 \qquad \mathbf{J}'^2 = j'(j'+1)\hbar^2 \qquad (j,' = 0,\ \frac{1}{2},\ 1, \ldots)$$

$$F = \mathbf{J}^2 + \mathbf{J}'^2 = \frac{1}{2}(\mathbf{L}^2 + \mathbf{A}^2)$$

De mivel

$$G = \mathbf{L} \cdot \mathbf{A} = \mathbf{J}^2 - \mathbf{J}'^2 = 0 \quad \Longrightarrow \quad j = j'$$

$$F = 2j(j+1)\hbar^2 \qquad \Longrightarrow \quad \frac{1}{E} = \frac{2\hbar^2}{Z^2 \mathrm{e}^4 m}(4\mathbf{J}^2 + \hbar^2)$$

$$\boxed{E_N = -\frac{Z^2 \mathrm{e}^4 m}{2\hbar^2 N^2}} \qquad N = 2j + 1 = 1,\ 2,\ 3,\ \ldots$$

További algebrai-csoportelméleti vonatkozások

A H-atom szimmetriacsoportja tehát

$E < 0$ esetén $SO(4)$ kompakt kötött állapotok

$E > 0$ esetén $SO(3,1)$ nem kompakt szórási állapotok

Megjegyzés: a 3D harmonikus oszcillátor szimetriacsoportja SU(3),
aminek 8 generátora van *több szimmetriaelem*

A páros és páratlan l-ű állapotok két különböző irrephez tartoznak

Definiálható spektrumgeneráló algebra is

$so(2,1) \sim su(1,1)$ a radiális állapotok között léptet: $\Delta n = \pm 1$, $\Delta l = 0$

Definiálható dinamikai csoport is

$SO(4,2)$ ez számos alcsoportot és csoportláncot tartalmaz

Ezek közül némelyik pl. parabolikus koordinátákban vett bázishoz kötődik

4. A Coulomb-probléma helye az egzaktul megoldható potenciálok között

Kvantummechanikai potenciálfeladatok megoldása

$$H\psi(x) \equiv -\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi(x) = k^2\psi(x) \equiv E\psi(x)$$

$$+\text{határfeltételek: } x \in (-\infty, \infty),\ [0, \infty),\ [a, b]$$

Több dimenzió esetén $H\psi = E\psi$ szeparálandó a fenti alakú egyenletekbe

Mik azok az egzaktul megoldható potenciálok?

Igazából **nincs** *pontos definiíció*

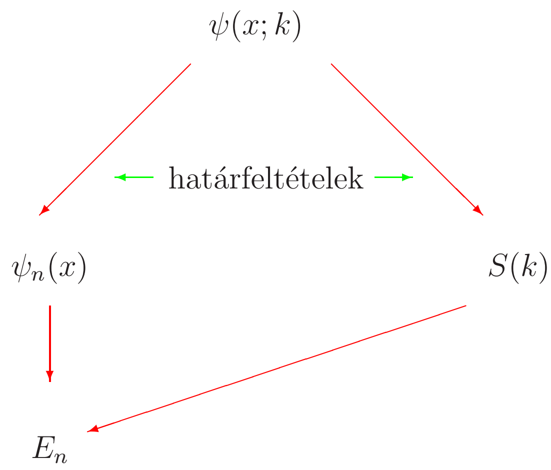
Nagyjából: Legyenek adottak zárt alakban

– a megoldások (általános $\psi(x;k)$; kötöttállapoti $\psi_n(x)$)

– az energia-sajátértékek (kötött állapotokra E_n)

– az S-mátrix $S(k)$ (ha létezik)

A megoldás szokásos menete:



Mi és mikor írható fel ezek közül zárt alakban?

$\psi(x;k)$: **HA** kifejezhető valamilyen speciális függvénnyel mint

$F(a;z(x;b))$ (hipergeometrikus fv., Bessel-fv.)

$a=\{a(k)\}$, $b=\{b(k)\}$ paraméterek

$z(x;b)$ változótranszformáció

$\psi_n(x)$: **HA** normálható alakba írható (ortogonális polinomok)

$E_n=k_n^2$: **HA** ez explicit módon megkapható

A Schrödinger-egyenlet egzakt megoldási módszerei

Történelmi áttekintés

Direkt módszerek		∼1928
Pl. a Sommerfeld-féle polinom módszer		
Faktorizációs módszer	*Schrödinger*	1940
A másodrendű differenciáloperátor két elsőrendű szorzata		
A faktorizációs módszer szisztematikus alkalmazása	*Infeld and Hull*	1951
Potenciálok osztályozása is		
Egy transzformációs módszer	*Bhattacharjie and Sudarshan*	1962
Megfelelő változótranszformáció választása		
A transzformációs módszer szisztematikus alkalmazása	*Natanzon*	1971
Általános 6 paraméteres függvényalakok		
Szuperszimmetrikus kvantummechanika (SUSYQM)	*Witten*	1981
A faktorizációs módszer high-tech változata		

Ezek nem függetlenek, de mindnek megvan a maga szerepe

Változótranszformáció:

Schrödinger-egyenlet $\Longrightarrow$ valamely F speciális függvény differenciálegyenlete

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + (E - V(x))\psi(x) = 0 \qquad \text{itt tekintve} \qquad \psi(x) = \mathbf{f}(x)F(\mathbf{z}(x))$$

és az eredménnyel összevetve a

$$\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}\mathbf{z}^2} + Q(\mathbf{z})\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\mathbf{z}} + R(\mathbf{z})F(\mathbf{z}) = 0$$

egyenletet adódik

$$E - V(x) = \frac{\mathbf{z}'''(x)}{2\mathbf{z}'(x)} - \frac{3}{4}\left(\frac{\mathbf{z}''(x)}{\mathbf{z}'(x)}\right)^2 + (\mathbf{z}'(x))^2\left(R(\mathbf{z}(x)) - \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}Q(\mathbf{z})}{\mathrm{d}\mathbf{z}} - \frac{1}{4}Q^2(\mathbf{z}(x))\right) \ .$$

A megoldások:

$$\psi(x) \sim (\mathbf{z}'(x))^{-\frac{1}{2}} \exp\left(\frac{1}{2}\int^{\mathbf{z}(x)} Q(\mathbf{z})\mathrm{d}\mathbf{z}\right) F(\mathbf{z}(x)) \ .$$

A még ismeretlen $\mathbf{z}(x)$ függvény megkapható a

$$\boxed{\left(\frac{\mathrm{d}\mathbf{z}}{\mathrm{d}x}\right)^2 \phi(\mathbf{z}) = C \ ,}$$

differenciálegyenlet direkt integrálásával

$$\int \phi^{1/2}(\mathbf{z})\mathrm{d}\mathbf{z} = C^{1/2}x + \delta \ .$$

δ: integrációs állandó, koordinátaeltolás

Így egy **konstans tag** adódik $E - V(x) = ...$ jobb oldalán **is**

Az F speciális függvény és a $\mathbf{z}(x)$ változótranszformáció **mindent meghatároz**

De hogy jön ki ebből valami konkrét potenciál... ...mondjuk a Coulomb?

$F(\mathbf{z}) = F(-n, \beta; \mathbf{z})$ konfluens hipergeometrikus függvény

$\sim L_n^{(\beta-1)}(\mathbf{z})$ általánosított Laguerre-polinom

$Q(\mathbf{z}) = \beta \mathbf{z}^{-1} - 1$ $\quad R(\mathbf{z}) = n\mathbf{z}^{-1}$

Legyen továbbá $\mathbf{z}(x) = \rho \mathbf{h}(r)$

$$\begin{aligned} E_n - V(r) &= \frac{\mathbf{h}'''(r)}{2\mathbf{h}'(r)} - \frac{3}{4}\left(\frac{\mathbf{h}''(r)}{\mathbf{h}'(r)}\right)^2 \\ &+ \frac{(\mathbf{h}'(r))^2}{\mathbf{h}(r)}\rho\left(n + \frac{\beta}{2}\right) + (\mathbf{h}'(r))^2\frac{\rho^2}{4} + \frac{(\mathbf{h}'(r))^2}{(\mathbf{h}(r))^2}\frac{\beta}{2}\left(1 - \frac{\beta}{2}\right) \end{aligned}$$

$= C$	$= C$	$= C$
$\Downarrow$	$\Downarrow$	$\Downarrow$
Harmonikus oszcillátor	Coulomb	Morse
LI	LII	LIII

Mi jön ki még ebből az esetből?

Potenciál	Harmonikus oszcillátor	Coulomb	Morse
Osztály	LI	LII	LIII
$(\mathbf{h}')^2 =$	$C\mathbf{h}$	C	$\mathbf{h}^2$
$\mathbf{h}(r) =$	$\frac{C}{4}r^2 \equiv \frac{\omega}{2}r^2$	$C^{1/2}r \equiv \frac{\mathrm{e}^2}{n+l+1}r$	$D\exp(-C^{1/2}r)$
$V(r) =$	$\frac{\omega^2}{4}r^2 + \frac{l(l+1)}{r^2}$	$-\frac{\mathrm{e}^2}{r} + \frac{l(l+1)}{r^2}$	$-D(s+1/2)\exp(-C^{1/2}r)$ $+\frac{D^2C}{4}\exp(-2C^{1/2}r)$
$E_n =$	$\omega(2n+l+3/2)$	$-\frac{\mathrm{e}^4}{4(n+l+1)^2}$	$-C(s-n)^2$

Hasonlóan tárgyalható a $P_n^{(\alpha,\beta)}(z)$ Jacobi-polinom és a $H_n(z)$ Hermite-polinom esete is

Az alakinvariáns potenciálok listája:

$(z')^2 =$ (Osztály)	$V(x)$	$x \in$	Név
$C(1-z^2)$ (PI)	$(B^2 - A^2 - A)\mathrm{sech}^2(x) + B(2A+1)\mathrm{sech}(x)\tanh(x)$	$(-\infty, \infty)$	Scarf II
	$(B^2 + A^2 + A)\mathrm{cosech}^2(x) - B(2A+1)\mathrm{cosech}(x)\coth(x)$	$[0, \infty)$	ált. Pöschl–Teller
	$(B^2 + A^2 - A)\mathrm{cosec}^2(ax) - B(2A-1)\mathrm{cosec}(x)\cot(x)$	$[0, \pi]$	Scarf I
	$A(A-1)\sec^2(x) + B(B-1)\mathrm{cosec}^2(x)$	$[0, \pi/2]$	Pöschl–Teller I
	$-A(A+1)\mathrm{sech}^2(x) + B(B-1)\mathrm{cosech}^2(x)$	$(-\infty, \infty)$	Pöschl–Teller II
$C(1-z^2)^2$ (PII)	$-A(A+1)\mathrm{sech}^2(x) + 2B\tanh(x)$	$(-\infty, \infty)$	Rosen–Morse II
	$A(A-1)\mathrm{cosech}^2(x) - 2B\coth(x)$	$[0, \infty)$	Eckart
	$A(A+1)\mathrm{cosec}^2(x) - 2B\cot(x)$	$[0, \pi]$	Rosen–Morse I
Cz (LI)	$\frac{1}{4}\omega^2 x^2 + \frac{l(l+1)}{x^2} - (l + \frac{3}{2})\omega$	$[0, \infty)$	3d harmonikus oszcillátor
C (LII)	$\frac{e^4}{4(l+1)^2} - \frac{e^2}{x} + \frac{l(l+1)}{x^2}$	$[0, \infty)$	Coulomb
Cz^2 (LIII)	$A^2 - B(2A+1)\exp(-x) + B^2\exp(-2x)$	$(-\infty, \infty)$	Morse
C (HI)	$-\frac{1}{2}\omega + \frac{1}{4}\omega^2 x^2$	$(-\infty, \infty)$	1d harmonikus oszcillátor

Általánosabb potenciálok is származtathatók így

Natanzon osztály *Natanzon 1971*

- A hullámfüggvények kifejezhetők egyetlen (konfluens) hipergeometrikus függvénnyel

  A gyakorlatban: Jacobi- és általánosított Laguerre-polinomokkal

- A SUSY partnerük általában kívül esik a Natanzon osztályon

  Azok megoldásai két (konfluens) hipergeometrikus függvénnyel fejezhetők ki

- A $(z')^2\phi(z) = C$ differenciálegyenlet bonyolultabb az esetükben

  Néha $z(x)$ nem is ismert, csak $x(z)$: *implicit potenciálok*

- Minden 6 paraméter függvénye

  3 paraméter $z(x)$-ben, 3 a csatolási konstansokban

- Az alakinvariáns potenciálok a Natanzon osztályúak speciális alosztályai

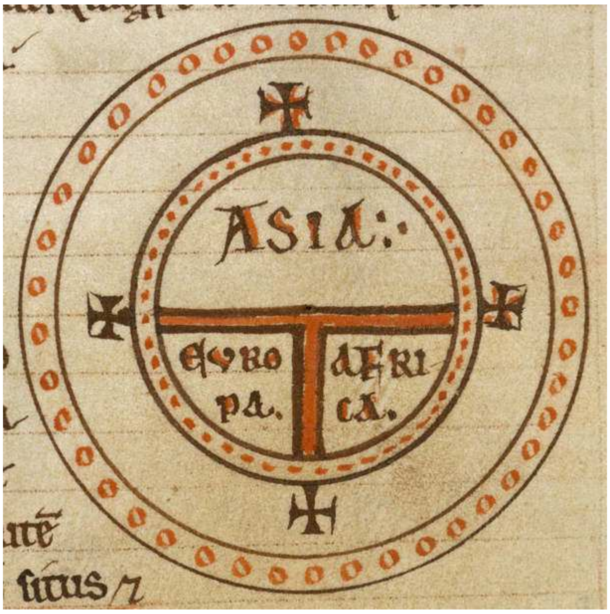
Példák Natanzon osztálzú potenciálokra

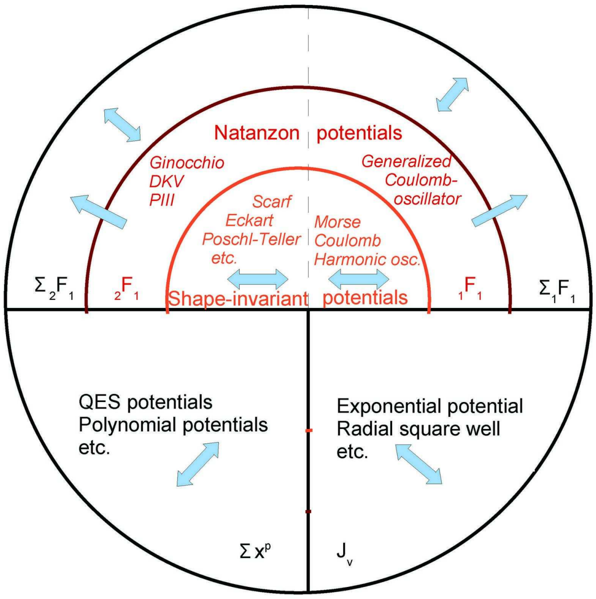
Ginocchio-potenciál (implicit):
speciális határeset: általánosított Pöschl–Teller potenciál *Ginocchio 1984*

PIII potenciál (implicit): $(z')^2 = C(1 - z^2)^2/z$
Nincs alakinvariáns határesete *Lévai 1991*

DKV potential: $(z')^2 = (1 - z^2)^2/z^2$
Nincs alakinvariáns határesete *Dutt, Khare, Varshni 1995*

Általánosított Coulomb-potenciál (implicit): $(z')^2 = z/(z + \theta)$
Határesetek: Coulomb (LII) and H.O. (LI) potentials *Lévai, Williams 1993*
Új oldalról világítja meg a Coulomb–oszcillátor kapcsolatot


ASIA:·
EVRO
PA.
AFRI
CA.


Natanzon potentials
Ginocchio
DKV
PIII
Generalized
Coulomb-
oscillator
Scarf
Eckart
Poschl-Teller
etc.
Morse
Coulomb
Harmonic osc.
Σ_2F_1
${}_2F_1$
Shape-invariant potentials
${}_1F_1$
Σ_1F_1
QES potentials
Polynomial potentials
etc.
Exponential potential
Radial square well
etc.
Σx^p
J_v

A változótranszformációs módszer működik Schrödinger-egyenletek között is

$$Q(z) = 0 \qquad\qquad R(z) = e - v(z)$$

ahol $v(z)$ egy megoldott potenciálfeladat e energia-sajátértékekkel ésf $F(z)$ sajátfüggvényekkel

$$E - V(x) = \frac{z'''}{2z'} - \frac{3}{4}\left(\frac{z''}{z'}\right)^2 + (z')^2(e - v(z)) \ .$$

$$\psi(x) \sim (z'(x))^{-\frac{1}{2}} F(z(x)) \ .$$

Vegyük úgy, hogy $e = E^C$ $\quad v(z) = -\frac{Z\mathrm{e}^2}{z} + \frac{l^C(l^C+1)}{z^2}$ $\quad$ és $\quad z = \frac{1}{2}x^2$

Ekkor

$$V(x) = -E^C x^2 + \frac{(L^O + 1/2)(L^O + 3/2)}{x^2}$$

$$E = Z\mathrm{e}^2$$

$$\psi(x) \sim x^{L^O+3/2} \exp\left(-\frac{a_0}{4}x^2\right) L_n^{(L^O+1)}(a_0/2x^2)$$

Ezek a 4-dimenziós harmonikus oszcillátorra vonatkozó kifejezések $L^O = 2l^C$ esetén

Ez nem más, mint a Kustaanheimo–Stiefel transzformáció

3D Coulomb probléma		4D harmonikus oszcillátor
$V(r) = -Ze^2 r^{-1}$		$V(R) = E^C R^2$
r	$\Longleftrightarrow$	$\frac{1}{2}z^2$
$2l^C$	$\Longleftrightarrow$	L^O (páros!)
Ze^2	$\Longleftrightarrow$	$E^O/2$
E^C	$\Longleftrightarrow$	$\omega^2/4$

És valóban, egy lábjegyzetben ott az igazság:

Harmonikus oszcillátor, hidrogénatom[2].
Van-e más is a világon? Én nem tudhatom,
De ha netán volna más, azt rúgja meg a ló,
Az csak perturbáció.

[2] Igazából a hidrogénatom is visszavezethető a négydimenziós harmonikus oszcillátorra.

Az általánosított Coulomb probléma (LI+LII)

G. Lévai, B. W. Williams: J. Phys. A **26** *(1993) 3301*
G. Lévai, B. Kónya, Z. Papp: J. Math. Phys. **39** *(1998) 5811*

Származtatása az ismertetett változótranszformációval:

$$\psi(r) = f(r)F(-n, \beta, \rho h(r))$$

ahol a $h(r)$ függvényt a következő differenciálegyenlet definiálja:

$$(h')^2 \left(1 + \frac{\theta}{h}\right) = C$$

Speciális esetek:

$\theta \to 0$: $\Longrightarrow$ $(h')^2 = C$ Coulomb (LII)

$\theta \to \infty$, de $\tilde{C} \equiv C/\theta$ $\Longrightarrow$ $(h')^2 = \tilde{C}h$ Harmonikus oszcillátor (LI)

A potenciál:

$$V(r) = -\frac{q}{h(r)+\theta} + \left(\beta - \frac{1}{2}\right)\left(\beta - \frac{3}{2}\right)\frac{C}{4h(r)(h(r)-\theta)} - \frac{3C}{16(h(r)+\theta)^2} + \frac{5C\theta}{16(h(r)+\theta)^3}$$

ahol a $h(r)$ függvény implicit módon adott:

$$r = r(h) = C^{-1/2}\left[\theta \tanh^{-1}\left(\left(\frac{h}{h+\theta}\right)^{1/2}\right) + (h(h+\theta))^{1/2}\right]$$

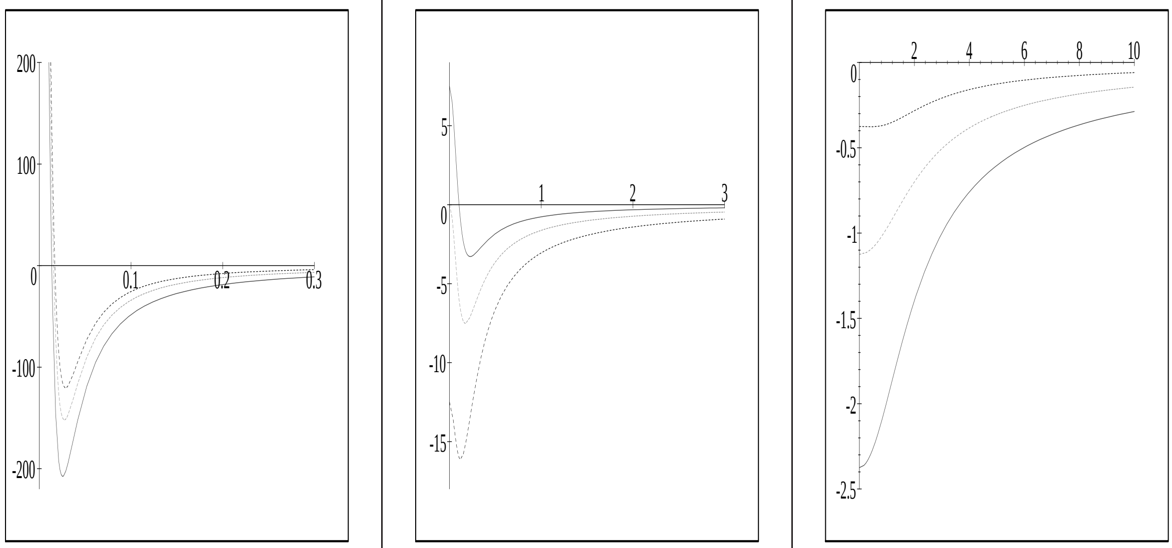
Kötött állapotok:

$$E_n = -\frac{C}{4}\rho_n^2\ ; \qquad \rho_n = \frac{2}{\theta}\left[\left((n+\beta/2)^2 + \frac{q\theta}{C}\right)^{1/2} - (n+\beta/2)\right]$$

Kötöttállapoti hullámfüggvények:

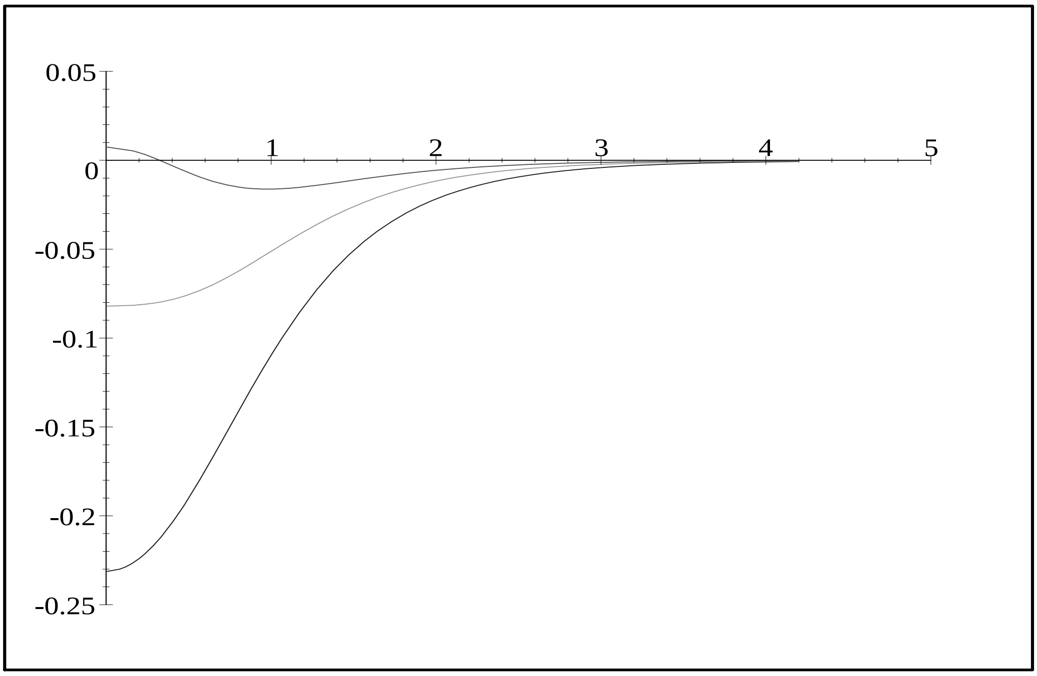
$$\psi_n(r) = \left(\frac{n!C^{1/2}}{\Gamma(n+\beta)(2n+\beta+\theta\rho_n)}\right)^{1/2}(h(r)+\theta)^{1/4}(h(r))^{(2\beta-1)/4}\exp\left(-\frac{\rho_n}{2}h(r)\right)L_n^{(\beta-1)}(\rho_n h(r))$$

Coulomb határeset $\Longleftarrow$	Általánosított Coulomb-potenciál	$\Longrightarrow$ Oszcillátor határeset
$\theta \to 0$		$\theta \to \infty$; $\tilde{C} \equiv C/\theta$
$\frac{q}{C^{1/2}} = \frac{2mZ\mathrm{e}^2}{\hbar^2}$		$\tilde{C}\tilde{q} = \left(\frac{2m\omega}{\hbar}\right)^{1/2}$; $\tilde{q} = q/\theta^2$
$\beta = 2l + D - 1$		$\beta = l + D/2$
$C^{1/2}r$	$h(r)$	$\frac{\tilde{C}}{4}r^2$
$\frac{2mZ\mathrm{e}^2}{\hbar^2 r}$	$-\frac{q}{h(r)+\theta} \longrightarrow -\frac{q}{h(r)+\theta} + \frac{q}{\theta}$	$\frac{2m}{\hbar^2}\frac{m\omega^2}{2}r^2$
$\frac{1}{r^2}\left(l + \frac{D-3}{2}\right)\left(l + \frac{D-1}{2} + \frac{3}{16}\right)$	$\left(\beta - \frac{1}{2}\right)\left(\beta - \frac{3}{2}\right)\frac{C}{4h(r)(h(r)-\theta)}$	$\frac{1}{r^2}\left(l + \frac{D-3}{2}\right)\left(l + \frac{D-1}{2}\right)$
$-\frac{3}{16r^2}$	$-\frac{3C}{16(h(r)+\theta)^2}$	0
0	$\frac{5C\theta}{16(h(r)+\theta)^3}$	0
$-\frac{2m}{\hbar^2}\frac{mZ^2\mathrm{e}^4}{2\hbar^2[n_r+l+(D-1)/2]^2}$	$-\frac{C}{4}\rho_n^2 \longrightarrow -\frac{C}{4}\rho_n^2 + \frac{q}{\theta}$	$\frac{2m}{\hbar^2}\hbar\omega(2n + l + D/2)$



$\theta = 0.01$ | $\theta = 0.1$ | $\theta = 1$

Az általánosított Coulomb-potenciál q=0.5, 1.25, 2.5, θ=0.01, 0.1, 1, C=1 és $\beta = 3/2$ esetén.



A θ=1 és q=0.5, 1.25, 2.5 értékeknek megfelelő töltéseloszlások.

A Coulomb–oszcillátor kapcsolat további vonatkozásai

A probléma	Coulomb-szerű	oszcillátor-szerű
	$x \to \infty$-re	Kis x-ekre
	$n \to \infty$-re	Kis n-ekre

További Coulomb–oszcillátor kapcsolatok

$$l^O + \frac{D^O}{2} = 2l^C + D^C - 1$$

$l^O = 2l^C$ feltételezésével

D^C	2	3	4	5	...
D^O	2	4	6	8	...

Az egydimenziós Coulomb probléma és a furcsaságai

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - \frac{Z\mathrm{e}^2}{|x|}\right]\psi(x) = E\psi(x) \qquad x = (-\infty, \infty)$$

Fizikai relevancia: H-atom erős mágneses térben

Asztrofizikai körülmények között akár $B = 5 \times 10^5$ Tesla is lehet

$\Longrightarrow$ extrém módon megnyúlt elektronpályák

A Pauli-egyenlet hengerkoordinátákban

$$H = H_{2DHO} + H_{1DC} + \frac{\mathrm{e}^2}{z}\left(1 - \frac{z}{r}\right) + \mathrm{const}{*}(k + 2s_z)$$

Elvi és módszertani probléma: szingularitás $x = 0$-ban

Mi a teendő?

– Két radiális feladat „összeragasztása”?

– A szingularitás levágása $x = \pm\epsilon$-nál és $\epsilon \to 0$?

Meglepően sokáig tartott a kérdés rendezése

Az American Journal of Physics „házivetélkedője"

- **Loudon** 1959:
  - Alapállapot $E_0 = -\infty$, $\psi_0(x) = \delta(x)$
  - Kétszeresen degenerált energianívók
- **Andrews** 1966:
  - Márpedig az $E_0 = -\infty$ állapot nem létezik
- **Haines** 1969:
  - Nincs degeneráció: csak a páratlan megoldások tartoznak a szokásos Coulomb energiákhoz
  - A páros megoldások (negatív) kontinuum energiájúak
- **Andrews** 1976:
  - Márpedig Haines kontinuum állapotai nem léteznek
- **Gesztesy** 1980:
  - A Hamilton-operátor hermiticitásával is gondok vannak
- **Davtyan** 1987:
  - A degenerációért egy O(2) csoport felelős, mint a szokásos Coulomb problémánál egy O(4) csoport

- **Oseguera** 1993: **A MEGOLDÁS!** (Már Andrews is pedzegette 1976-ban)
  - Nincsen $E_0 = -\infty$ állapot
  - Nincsenek kontinuum állapotok
  - Nincs degeneráció
  - Van viszont két, a szingularitás által teljesen elválasztott rendszer
- **Moshinsky** $\Longleftrightarrow$ **Newton** 1994:
  - Még ekkor is vitatkoztak a dologról neves tudósok...

Erről nekünk is volt mondanivalónk az általánosított Coulomb-potenciál kapcsán...

$V(x)$ végessé tehető $x = 0$-ban és utána közelíthető az 1D Coulomb-határeset

A reflexiós tényező kiszámítható...

...és az 1D határesetben alátámasztja a két szeparált rendszer elméletét