

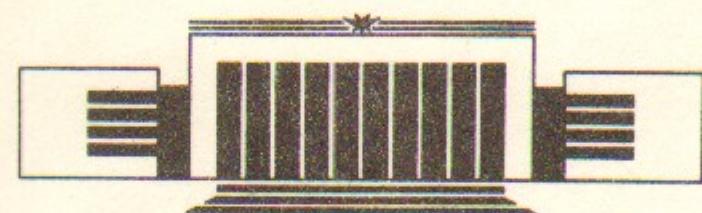


А.Г. Грозин

**РЕШЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ  
НА ЯЗЫКЕ REDUCE.**

6. Квантовый нелинейный осциллятор
7. Ротатор в слабом поле
8. Радиационные переходы в чармонии

**ПРЕПРИНТ 88-140**



НОВОСИБИРСК

## Решение физических задач на языке REDUCE.

- 6. Квантовый нелинейный осциллятор
- 7. Ротатор в слабом поле
- 8. Радиационные переходы в чармонии

A.G. Грозин

Институт ядерной физики  
630090, Новосибирск 90, СССР

### А Н Н О Т А Ц И Я

Настоящий препринт представляет собой заключительную часть пособия по применению языка аналитических вычислений REDUCE для решения физических задач. В нем приведено много примеров, которые могут быть полезны для конструирования программ решения физических задач самой различной природы. В этой части рассмотрена задача о квантовом нелинейном осцилляторе (п.6), ротаторе в слабом поле (п.7) и радиационные переходы в чармонии (п.8).

### SOLVING PHYSICAL PROBLEMS WITH REDUCE.

- 6. Quantum nonlinear oscillator
- 7. Rotator in a weak field
- 8. Radiative transitions in charmonium

A.G. Grozin

Institute of Nuclear Physics  
630090, Novosibirsk, USSR

### ABSTRACT

This preprint is the last part of the problem book on using REDUCE in physics. It contains many examples useful for the construction of programs for solving physical problems of very different nature. This part contains the problem of quantum nonlinear oscillator (sect. 6), rotator in a weak field (sect. 7) and radiative transitions in charmonium (sect. 8).

© Институт ядерной физики СО АН СССР

### 6. КВАНТОВЫЙ НЕЛИНЕЙНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

**Введение.** В этом и следующем параграфе мы рассмотрим примеры на стационарную теорию возмущений в квантовой механике. Она рассматривается в любом учебнике, см., например, §§ 38—39 в [1] или главу 6 в [2]. Однако обычно приводятся выражения лишь для нескольких первых порядков. Так, в [1] найдены три поправки к энергии и две — к волновой функции (см. § 38 и задачу к нему). В вырожденном случае в [1] (§ 39) поправки к энергии рассматриваются только до второго порядка. В этом параграфе мы рассмотрим известный, хотя и не попавший в распространенные учебники алгоритм нахождения поправок любого порядка в невырожденной теории возмущений. Обобщение на вырожденный случай приведено в следующем параграфе.

В качестве примера мы рассмотрим задачу о движении квантовой частицы вблизи минимума произвольного гладкого потенциала (нелинейный квантовый осциллятор). Невозмущенная задача о гармоническом осцилляторе обсуждается в любом учебнике, см., например, § 23 в [1] или главу 3 в [2]. Поправка 2-го порядка к энергии вычислена в задаче к § 38 в [1]. Здесь мы построим программу на языке REDUCE, которая, в принципе, может находить поправки любого порядка к энергиям и волновым функциям. Реально вычислены поправки до 6-го порядка, хотя это и потребовало много машинного времени.

В следующем параграфе рассмотрен пример на вырожденную теорию возмущений — ротатор в слабом внешнем поле. Там тоже

построена программа, которая в принципе может вычислять поправки любого порядка. Реально вычислены четыре поправки.

**Невырожденная теория возмущений.** Допустим, мы знаем собственные состояния и собственные значения невозмущенного гамильтониана  $\hat{H}_0$ , и хотим найти их для возмущенного гамильтониана  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$  в виде ряда по степеням возмущения  $\hat{V}$ . Сосредоточим свое внимание на невырожденном собственном состоянии  $|\psi_0\rangle$  невозмущенного гамильтониана:  $\hat{H}_0|\psi_0\rangle = E_0|\psi_0\rangle$ . При включении малого возмущения оно перейдет в близкое к нему собственное состояние  $|\psi\rangle$  полного гамильтониана:  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ ,  $E = E_0 + \Delta E$ . Нормируем  $|\psi\rangle$  так, что  $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\delta\psi\rangle$ , где добавка  $|\delta\psi\rangle$  ортогональна  $|\psi_0\rangle$ :  $\langle\psi_0|\delta\psi\rangle = 0$ , т. е.  $\langle\psi_0|\psi\rangle = 1$ . В конце вычислений, если это потребуется, всегда можно перейти к нормировке  $\langle\psi|\psi\rangle = 1$ . Уравнение, которое мы должны решать, имеет вид

$$\hat{H}|\psi\rangle + \hat{V}|\psi\rangle = E|\psi\rangle. \quad (1)$$

Выделим в нем части, параллельные и перпендикулярные  $|\psi_0\rangle$ . Параллельная часть получается умножением на  $\langle\psi_0|$ , и дает  $E_0 + \langle\psi_0|\hat{V}|\psi\rangle = E$ , или

$$\Delta E = \langle\psi_0|\hat{V}|\psi\rangle. \quad (2)$$

Перпендикулярную часть выделим, подействовав на (1) проекционным оператором  $\hat{P} = 1 - |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$  (который коммутирует с  $\hat{H}_0$ ). С учетом  $\hat{P}|\psi\rangle = |\delta\psi\rangle$  получим  $\hat{H}_0|\delta\psi\rangle + \hat{P}\hat{V}|\psi\rangle = E|\delta\psi\rangle$ , или

$$|\delta\psi\rangle = \hat{D}\hat{V}|\psi\rangle, \\ \hat{D} = \hat{P}/(E - \hat{H}_0) \quad (3)$$

(такая запись дроби допустима в силу коммутации  $\hat{P}$  с  $\hat{H}_0$ ). Уравнение (3) решается итерациями: подставляя в правую часть  $|\psi\rangle = |\psi_0\rangle + |\delta\psi\rangle$ , где  $|\delta\psi\rangle$  опять дается уравнением (3), и продолжая этот процесс, получим ряд

$$|\delta\psi\rangle = \hat{D}\hat{V}|\psi_0\rangle + \hat{D}\hat{V}\hat{D}\hat{V}|\psi_0\rangle + \dots \quad (4)$$

Подставляя его в (2), получим ряд для энергии

$$\Delta E = \langle\psi_0|\hat{V}|\psi_0\rangle + \langle\psi_0|\hat{V}\hat{D}\hat{V}|\psi_0\rangle + \langle\psi_0|\hat{V}\hat{D}\hat{V}\hat{D}\hat{V}|\psi_0\rangle + \dots \quad (5)$$

Формулы (4) — (5) называются рядами теории возмущений

Бриллюэна — Вигнера. Но они не решают поставленной задачи, так как в их правых частях содержится неизвестная энергия  $E$ . В них нужно подставить  $E = E_0 + \Delta E$ , и разложить по  $\Delta E$ :

$$\frac{1}{E_0 + \Delta E - \hat{H}_0} = \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0} - \frac{1}{E_0 - \hat{H}_0} \Delta E \frac{1}{E_0 + \Delta E - \hat{H}_0}, \\ \hat{D} = \hat{G} - \hat{G}\Delta E\hat{G} + \hat{G}\Delta E\hat{G}\Delta E\hat{G} - \dots, \quad (6)$$

где  $\hat{G} = \hat{P}/(E_0 - \hat{H}_0)$  и опять применена итерация. Подставляя это разложение в (4) — (5) и заменяя в нем каждое вхождение  $\Delta E$  опять на ряд (5), мы получим ряды теории возмущений Рэлея — Шредингера. Это ряды для  $\Delta E$  и  $|\delta\psi\rangle$  по степеням  $\hat{V}$ .

Чтобы разобраться в структуре этих рядов, немного сократим обозначения и будем вместо  $\langle\psi_0|$  и  $|\psi_0\rangle$  писать просто  $\langle i |$  и  $|i \rangle$ . Тогда

$$\Delta E = \langle\hat{V}\rangle + \langle\hat{V}(\hat{G} - \hat{G}\Delta E\hat{G} + \hat{G}\Delta E\hat{G}\Delta E\hat{G} - \dots)\hat{V}\rangle \\ + \langle\hat{V}(\hat{G} - \hat{G}\Delta E\hat{G} + \dots)\hat{V}(\hat{G} - \hat{G}\Delta E\hat{G} + \dots)\hat{V}\rangle + \dots$$

Подставляя вместо  $\Delta E$  в правую часть опять этот же ряд, мы получим, например, для члена  $-\langle\hat{V}\hat{G}\Delta E\hat{G}\hat{V}\rangle$  выражение вида

$$-\langle\hat{V}\hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle - \langle\hat{V}\hat{G}\langle\hat{V}(\hat{G} - \hat{G}\Delta E\hat{G} + \dots)\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle - \dots$$

Таким образом, возникают выражения со вложенными скобками  $\langle\dots|\dots\rangle\dots$ , причем появление вложенной скобки дает знак минус. Внутри этих скобок второго уровня опять проводится разложение по  $\Delta E$ , и появляются скобки третьего уровня и т. д.

Сформулируем правила, как написать выражение для  $\Delta E$  и  $|\delta\psi\rangle$  в  $n$ -м порядке теории возмущений:

- 1) написать  $\Delta E = \langle\hat{V}\hat{G}\hat{V}\dots\hat{G}\hat{V}\rangle$  и  $|\delta\psi\rangle = \hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\dots\hat{G}\hat{V}\rangle$ , где  $\hat{V}$  содержится  $n$  раз;
- 2) добавить выражения со всеми возможными способами размещения вложенных скобок, таких, что правее  $\langle$  и левее  $\rangle$  всегда стоит  $\hat{V}$ . Каждая пара скобок дает знак минус.

Например:

$$\Delta E_1 = \langle\hat{V}\rangle, \\ \Delta E_2 = \langle\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle, \\ \Delta E_3 = \langle\hat{V}\hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle - \langle\hat{V}\hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle, \\ \Delta E_4 = \langle\hat{V}\hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle - \langle\hat{V}\hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle - \langle\hat{V}\hat{G}\hat{V}\hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle$$

$$\begin{aligned}
& - \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle + \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle, \\
\Delta E_5 = & \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle - \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \\
& - \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle - \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \\
& - \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle - \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \\
& - \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle + \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \\
& + \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle + \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \\
& + \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle + \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \\
& + \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle.
\end{aligned}$$

Для поправок к состоянию:

$$\begin{aligned}
|\delta\psi_1\rangle &= \hat{G}\hat{V}\rangle, \\
|\delta\psi_2\rangle &= \hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle - \hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle, \\
|\delta\psi_3\rangle &= \hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle - \hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle - \hat{G}\hat{V}\hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle - \hat{G}\langle\hat{V}\hat{G}\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle \\
&\quad + \hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\langle\hat{V}\rangle\hat{G}\hat{V}\rangle
\end{aligned}$$

и т. д.

Как расшифровать эти символические выражения? Во-первых, любую внутреннюю скобку с любого уровня можно выносить наружу и рассматривать отдельно, поскольку это просто число. При этом могут возникать выражения типа  $\hat{G}^n$ . Между каждым  $\hat{G}^n$  и  $\hat{V}$  вставляем полный набор собственных состояний  $\hat{H}_0$ . Вклад  $|\psi_0\rangle$  везде выпадает из-за проектора  $\hat{P}$  в  $\hat{G}$ . Остается вклад остальных собственных состояний  $|i\rangle$  с энергиями  $E_{0i}$ . Операторы  $\hat{G}^n$  диагональны в этом базисе, и  $\langle i|\hat{G}^n|i\rangle = 1/(E_0 - E_{0i})^n$ . Поэтому, например,

$$\langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \hat{G}^2 \hat{V} \rangle = \sum_{i,j} \langle \psi_0 | \hat{V} | i \rangle \frac{1}{E_0 - E_{0i}} \langle i | \hat{V} | j \rangle \frac{1}{(E_0 - E_{0j})^2} \langle j | \hat{V} | \psi_0 \rangle$$

и т. д.

Как видно, критерий применимости теории возмущений к состоянию  $|\psi_0\rangle$  состоит в том, чтобы матричные элементы возмущения  $\langle i | \hat{V} | j \rangle$  были малы по сравнению с расстояниями от уровней  $|i\rangle$  и  $|j\rangle$  до уровня  $|\psi_0\rangle$ , а матричные элементы  $\langle i | \hat{V} | \psi_0 \rangle$  — по сравнению с расстояниями от уровня  $|i\rangle$  до  $|\psi_0\rangle$ . Теория возмущений заведомо неприменима к вырожденному невозмущенному уровню: при этом возникли бы нулевые знаменатели. Что делать в таком случае, мы рассмотрим в следующем параграфе.

**Гармонический осциллятор.** Мы собираемся рассмотреть по

теории возмущений задачу об одномерном движении частицы вблизи минимума произвольного гладкого потенциала в квантовой механике. Будем использовать те же обозначения, что и в §2. В качестве подготовительного шага необходимо решить невозмущенную задачу о гармоническом осцилляторе. Он имеет гамильтониан  $\hat{H} = \hat{p}^2/2m + m\omega^2\hat{x}^2/2$  (мы обозначили  $k = m\omega^2$ ).

В квантовой механике есть размерная константа  $\hbar$ , поэтому 2 величины  $m$  и  $\omega$  определяют масштаб длины  $\sqrt{\hbar/m\omega}$ , импульса  $\sqrt{\hbar m\omega}$ , энергии  $\hbar\omega$ , и вообще величины любой размерности. Они имеют смысл характерной амплитуды, импульса, энергии нулевых колебаний. Здесь и далее во всех квантовых задачах мы положим  $\hbar = 1$ . В задаче об осцилляторе положим также  $m = 1$  и  $\omega = 1$ , выбрав эти характерные масштабы за единицы измерения соответствующих величин. Тогда  $\hat{H} = (\hat{p}^2 + \hat{x}^2)/2$ .

Введем оператор  $\hat{a} = (\hat{x} + i\hat{p})/\sqrt{2}$  и эрмитово-сопряженный ему  $\hat{a}^\dagger = (\hat{x} - i\hat{p})/\sqrt{2}$ . Из коммутационного соотношения  $[\hat{p}, \hat{x}] = -i$  получим для них  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$ . Гамильтониан выражается через них как  $\hat{H} = \hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2$ , откуда  $[\hat{H}, \hat{a}] = -\hat{a}$ ,  $[\hat{H}, \hat{a}^\dagger] = \hat{a}^\dagger$ . Поэтому если  $|\psi\rangle$  — собственное состояние  $\hat{H}$  с энергией  $E$ :  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ , то  $\hat{a}|\psi\rangle$  и  $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle$  — тоже собственные состояния  $\hat{H}$  с энергиями  $E - 1$  и  $E + 1$ :  $\hat{H}\hat{a}|\psi\rangle = (\hat{a}\hat{H} - \hat{a})|\psi\rangle = (E - 1)\hat{a}|\psi\rangle$ ,  $\hat{H}\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = (E + 1)|\psi\rangle$  (если только они не равны 0). Значит, собственные значения  $\hat{H}$  образуют последовательность с шагом 1. Она ограничена снизу, поскольку  $\hat{H}$  — положительно определенный оператор. Поэтому существует состояние с наименьшей энергией  $|0\rangle$ , энергию которого уже нельзя понизить:  $\hat{a}|0\rangle = 0$ . Его энергия равна 1/2:

$$\hat{H}|0\rangle = \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2}\right)|0\rangle = \frac{1}{2}|0\rangle$$

(это энергия нулевых колебаний). Действуя на  $|0\rangle$  повышающим оператором  $\hat{a}^\dagger$   $n$  раз, мы получим состояние  $|n\rangle$  с энергией

$$E_n = n + \frac{1}{2}, \tag{6}$$

т. е.  $\hat{H}|n\rangle = (\hat{a}^\dagger \hat{a} + 1/2)|n\rangle = (n + 1/2)|n\rangle$ . Поэтому  $\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle = n|n\rangle$ , т. е.  $\hat{a}^\dagger \hat{a}$  действует как оператор номера уровня.

Мы имеем  $\hat{a}|n\rangle = c_n|n-1\rangle$ ; выбором фаз состояний  $|n\rangle$  можно сделать  $c_n$  действительными и положительными. Их можно найти из условия нормировки:  $\langle n-1|c_n^* c_n|n-1\rangle = \langle n|\hat{a}^\dagger \hat{a}|n\rangle$ ,

$|c_n|^2 = n$ . Действие оператора  $\hat{a}^+$  определяется при помощи эрмитова сопряжения. Таким образом,

$$\begin{aligned}\hat{a}|n\rangle &= \sqrt{n}|n-1\rangle, \\ \hat{a}^+|n\rangle &= \sqrt{n+1}|n+1\rangle,\end{aligned}\quad (7)$$

Отсюда опять следует  $\hat{a}^+\hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}\hat{a}^+|n-1\rangle = n|n\rangle$ .

Из формулы (7) легко получить матричные элементы операторов  $\hat{x} = (\hat{a} + \hat{a}^+)/\sqrt{2}$  и  $\hat{p} = (\hat{a} - \hat{a}^+)/\sqrt{2}i$  между состояниями  $|n\rangle$ . Например,

$$\langle n-1|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{n}{2}}, \quad \langle n+1|\hat{x}|n\rangle = \sqrt{\frac{n+1}{2}}. \quad (8)$$

**Ангармонический осциллятор.** Перейдем к задаче с возмущением  $\hat{V}(x)$ . Поскольку мы выбрали  $\sqrt{\hbar/m\omega}$  за единицу длины, коэффициент ряда  $c_i$  содержит в себе малость  $\sim (\sqrt{\hbar/m\omega}/L)^i$ . Разложение проводится по малому параметру  $a \sim \sqrt{\hbar/m\omega L^2}$ . Конечно,  $a$  является истинным параметром разложения только для уровней с  $n \sim 1$ , когда характерные  $x \sim \sqrt{\hbar/m\omega}$ . В случае  $n \gg 1$  амплитуда в  $\sqrt{n}$  раз больше, и роль параметра малости играет  $a\sqrt{n}$ , что мы и сможем проверить в конце вычислений.

Мы должны несколько обобщить правила теории возмущений, поскольку наше возмущение  $\hat{V} = \sum_{i=1}^{\infty} c_i \hat{x}^{i+2}$  содержит члены разного

порядка малости по  $a$ . Это делается просто: для нахождения, например, члена с  $a^n$  в  $\Delta E$  нужно выписать все выражения вида  $\langle \hat{V}_{i_1} \hat{G} \dots \hat{V}_{i_k} \rangle$  с  $i_1 + \dots + i_k = n$  и далее действовать по обычным правилам (здесь  $\hat{V}_i$  — член порядка  $a^i$  в  $\hat{V}$ ).

**Алгоритм.** Было бы неэффективно использовать буквально описанный алгоритм теории возмущений для вычислений, потому что одни и те же выражения  $\langle \dots \rangle$  приходилось бы считать много раз. Вместо этого вернемся на шаг назад, и не будем подставлять формулу для  $\Delta E$  в ряды для  $\Delta E$  и  $|\delta\Phi\rangle$ . Вместо этого, пусть поправки следующих порядков явно содержат  $\Delta E$  низших порядков.

Для вычисления  $\Delta E$  в  $m$ -м порядке теории возмущений необходимо сгенерировать и вычислить все выражения вида  $\langle \hat{V} \hat{G} \hat{\Delta} \hat{G} \hat{\Delta} \hat{G} \dots \hat{\Delta} \hat{G} \hat{V} \rangle$ , где  $\hat{\Delta}$  есть  $\hat{V}$  или  $-\Delta E$ , и сумма порядков малости всех  $\hat{V}$  и  $\Delta E$  не превышает  $m$ . Сумма этих выражений с порядком малости  $l$  представляет собой поправку  $\Delta E_l$ ,  $l$ -го порядка.

Выражение для нее содержит  $\Delta E_{l'}$  с  $l' < l$ . Далее, двигаясь от  $\Delta E_1 = \langle \hat{V}_1 \rangle$  к более высоким порядкам и подставляя ранее найденные выражения для  $\Delta E$  более низких порядков, получим явные формулы для всех  $\Delta E$ . В эту схему легко включается и вычисление поправок к состояниям.

Распишем выражения, которые надо генерировать, более подробно:

$$V_{n,n+j_k} G_{n+j_k} \Delta_{n+j_k, n+j_{k-1}} \dots G_{n+j_1} V_{n+j_1, n}.$$

Здесь подразумевается сумма по  $j_1, \dots, j_k$ , отличным от нуля. Удобнее не разделять 2 этапа: генерацию выражений и суммирование, а сразу генерировать все выражения такого вида со всеми возможными значениями  $j_1, \dots, j_k$ .

Задачи такого типа, в которых требуется перебор всех возможностей на многих уровнях, обычно решаются при помощи рекурсивных алгоритмов. Именно, процедура производит перебор на своем уровне, и каждый раз рекурсивно вызывает себя, чтобы решить более простую подзадачу — перебор на оставшихся уровнях.

В данном случае требуется перебрать все возможности для каждого фактора  $\Delta$ . Пусть уже имеется правая часть выражения до некоторого  $G_{n+j}$  включительно и пусть осталось распределить  $l$  порядков малости. Для решения этой задачи пишется процедура. Она перебирает все возможные  $\Delta$ , которые можно приписать слева к этому данному выражению. Это могут быть  $-\Delta E_k$  со всеми допустимыми  $k$ , или  $(\hat{V}_k)_{n+j+i,n+j}$  со всеми допустимыми  $k, i$ . Каждый раз процедура приписывает к данному ей выражению  $\Delta$  и соответствующее  $G$  и рекурсивно вызывает себя для того, чтобы распределить всеми возможными способами оставшиеся порядки малости. Процедура должна иметь 3 аргумента:  $l$  — число порядков малости, которые нужно распределить;  $j$  — текущее положение;  $a$  — уже построенная часть выражения. Для полного перебора всех возможностей ее нужно вызвать с аргументами  $m, 0, 1$ .

В самый первый раз (т. е. при  $l=m$ ) нельзя использовать  $-\Delta E$  в качестве  $\Delta$ . Во всех остальных случаях можно подставить  $-\Delta E_1, -\Delta E_2, \dots, -\Delta E_{k_m}$ ; максимальный порядок малости  $k$  не должен превышать  $l-1$ , потому что должна оставаться возможность вставить  $\hat{V}$  на самое левое место. После выбора каждой из этих возможностей выражение  $a$  домножается на  $-\Delta E_k$  и на  $G_{n+j}$ ,  $j$  не меняется, и рекурсивно вызывается процедура, чтобы распределить оставшиеся  $l-k$  порядков малости.

Во всех случаях нужно еще рассмотреть возможности использования  $\hat{V}_k$  в качестве  $\Delta$ . Для этого в цикле выбираются  $\hat{V}_1, \hat{V}_2, \dots, \hat{V}_{k_m}$ . Для каждого из них прокручивается цикл по всем  $i$ , таким, что  $\hat{V}_k$  имеет ненулевой матричный элемент из  $|n+j\rangle$  в  $|n+j+i\rangle$ . При этом иногда мы можем попасть в исходное состояние  $|n\rangle$ . Это значит, что закончилась генерация одного из выражений, и следует прибавить его к элементу массива, в котором накапливаются  $\Delta E$ . Во всех остальных случаях производится рекурсивный вызов, в котором  $l$  заменяется на  $l-k$ ,  $j$  на  $j+i$ , а  $a$  домножается на  $(\hat{V}_k)_{n+j+i, n+j}$  и на  $\hat{G}_{n+j+i}$ .

Описанный алгоритм корректен, но нуждается в оптимизации для повышения эффективности. Рассмотрим возможные точки на плоскости  $l, j$ , в которые мы можем попасть в процессе перебора (рис. 1). Во-первых, легко понять, что член возмущения

$\hat{V}_k = c_k \hat{x}^{k+2}$  имеет матричные элементы, в которых изменение  $i$  квантового числа меняется от  $-(k+2)$  до  $k+2$  через 2. Поэтому при четных  $l$  все возможные  $j$  четные, а при нечетных — нечетные. В частности, мы не можем вернуться в исходное состояние  $j=0$ , пройдя нечетное количество порядков малости, т. е. отличны от нуля только поправки к энергии четных порядков. Далее, максимально быстрое движение  $j$  при изменении  $l$  происходит тогда, когда используются  $\hat{V}_1$ , и оно имеет скорость 3. Значит, чтобы успеть вернуться в  $j=0$ , мы не должны уходить из ромба на рис. 1. Этим условием определяются пределы всех циклов. Первый цикл по  $k$ , подставляющий  $\Delta = -\Delta E_k$ , идет по четным  $k$  до тех пор, пока не достигнет границы ромба. Попасть в точку  $j=0, l=0$  мы при этом не можем, так как всегда  $j \neq 0$ , а в этом случае оно не меняется; поэтому не нужна защита  $k \leq l-1$ .

Второй цикл по  $k$  и вложенный в него цикл по  $i$  записываются так, что цикл по  $i$  идет по пересечению его естественной области (от  $-(k+2)$  до  $k+2$  через 2) с ромбом; цикл по  $k$  кончается, когда это пересечение исчезает.

Алгоритм, совместно находящий поправки к энергии и волно-

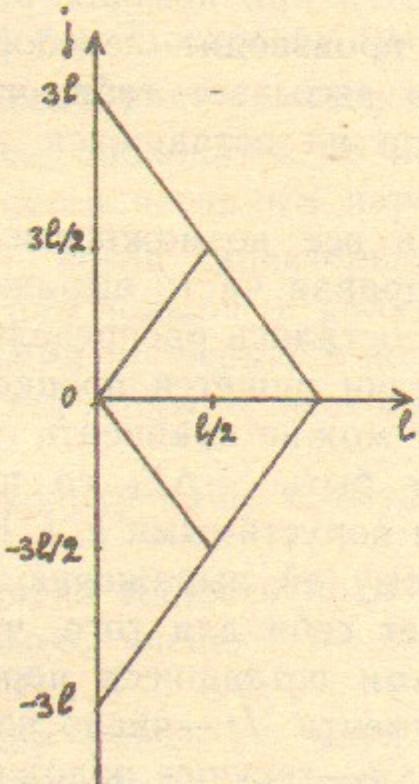


Рис. 1.

вой функции, устроен даже проще (хотя, разумеется, работает дольше). В этом случае снимаются все ограничения, связанные с попаданием в ромб: выражения для поправок к состояниям кончаются при  $j=0$ , и мы должны просмотреть весь большой треугольник на рис. 1. Каждый раз, когда вызывается процедура, ей передается правая часть выражения, оканчивающаяся фактором  $G_{n+j}$ . А это есть в точности коэффициент при  $|n+j\rangle$  в поправке к состоянию. Поэтому он накапливается в соответствующем массиве. Интересно, что при первом вызове процедуры она записывает в нулевой элемент этого массива невозмущенное состояние  $|n\rangle$ .

**Программа.** В первую очередь программа вычисляет и запоминает матричные элементы  $\langle n+j | \hat{x}^k | n \rangle$ . Это делается последовательно, начиная с матричных элементов  $\hat{x}$  (8), путем матричного умножения. Затем они домножаются на коэффициенты  $c$ , и получаются матричные элементы членов возмущения. Когда в программе требуются матричные элементы из состояния  $|n+j\rangle$ , они получаются при помощи функции SUB(N=N+J,X(K,I)).

При написании циклов в основной рекурсивной процедуре используются функции ABS, MIN, MAX. В цикле, подставляющем DE в качестве  $\Delta$ , возникает интересная проблема. Условие нахождения внутри ромба требует  $K \leq (3*L - ABS(J))/3$ . Поскольку  $K$  — целое, нужна целая часть результата деления. В REDUCEе нет функции выделения целой части рационального числа или деления нацело.

Поэтому мы определяем операцию DIV (аналогичную имеющейся в PASCALE). Сначала она описывается как процедура. Затем, для более удобного использования, она описывается как инфиксная операция, так что можно писать M DIV N вместо DIV(M,N). Ей задается приоритет, более высокий, чем у операции — (но более низкий, чем у операции \*, следующей за — в стандартном списке приоритетов). Поэтому M+N DIV L означает M+(N DIV L), а M\*N DIV L означает (M\*N) DIV L. Операция DIV может быть полезна и во многих других ситуациях.

Внутри процедуры DIV используется очень мощный аппарат модульной арифметики, встроенный в REDUCE. Конечно, его использование в данном случае есть стрельба из пушки по воробьям. Команда SETMOD N; устанавливает модуль, а включение флага MODULAR заставляет REDUCE производить все дальнейшие вычисления по модулю N. Эти действия нужно производить именно в таком порядке: если Вы при ON MODULAR; зададите SETMOD M;, то число M будет взято по текущему модулю! В

таком режиме REDUCE соответствующим образом производит умножение и деление полиномов и т. д. Все, что нужно нам в данный момент,— это вычислить числитель по модулю знаменателя. После этого флаг MODULAR выключается, и вычисляется частное от деления.

После вызова основной процедуры, в массиве D накоплены выражения для поправок различных порядков к уровням энергии. Они содержат поправки предыдущих порядков в виде оператора DE (см. п. 1, операторы как массивы свободных переменных). Чтобы получить окончательные выражения для поправок, производятся присваивания DE(K) := D(K) в порядке возрастания K.

В приводимой распечатке вычислены поправки к уровням энергии вплоть до 6-го порядка. Программа работала около получаса процессорного времени на EC-1061.

```

M:=6$
% QUANTUM NONLINEAR OSCILLATOR ;
% PERTURBATION THEORY TO THE ORDER M ;
SYMBOLIC OPERATOR TIME; TT:=TIME()$ 
ARRAY D(M); OPERATOR X,C,DE; FACTOR C; ON RAT;
% X(K,J) = <N+J!X**K!N> ;
X(1,1):=SQRT((N+1)/2)$ X(1,-1):=SQRT(N/2)$ X(1,0):=0$
FOR K:=2:M+2 DO FOR J:=-K:K DO X(K,J):=
  (IF J<K-1 THEN SUB(N=N+J,X(1,1))*X(K-1,J+1) ELSE 0)
  +(IF J>1-K THEN SUB(N=N+J,X(1,-1))*X(K-1,J-1) ELSE 0);
FOR K:=3:M+2 DO FOR J:=-K:K DO X(K,J):=C(K-2)*X(K,J);

PROCEDURE DIV(A,B);
BEGIN SCALAR C;
  SETMOD B;ON MODULAR;C:=A;OFF MODULAR;
  RETURN (A-C)/B
END;
DIV
INFIX DIV; PRECEDENCE DIV,-;

% PERTURBATION THEORY ;
PROCEDURE V(L,J,A);
<< IF L<M THEN
  FOR K:=2 STEP 2 UNTIL MIN((3*L-ABS(J)) DIV 3,L-1) DO
    V(L-K,J,A*DE(K)/J);
  FOR K:=1:MIN(L,1+(3*L-ABS(J))/2) DO
    FOR I:=MAX(-2-K,-3*(L-K)-J) STEP 2

```

```

      UNTIL MIN(2+K,3*(L-K)-J) DO
      IF J+I=0
        THEN D(M-L+K):=D(M-L+K)+A*SUB(N=N+J,X(K+2,I))
      ELSE V(L-K,J+I,-A*SUB(N=N+J,X(K+2,I))/(J+I))
    >>;
    V

V(M,0,1)$
FOR K:=2 STEP 2 UNTIL M DO WRITE DE(K):=D(K);
DE(2) := 3*C(2)*(2*N2+2*N+1)/4+C(1)2*(-30*N2-30*N-11)/8
DE(4) := 5*C(4)*(4*N3+6*N2+8*N+3)/8+5*C(3)*C(1)
  *(-28*N3-42*N2-40*N-13)/8+C(2)2*(
  34*N3-51*N2-59*N-21)/8+9*C(2)*C(1)2
  *(50*N3+75*N2+63*N+19)/8+15*C(1)4*(
  94*N3-141*N2-109*N-31)/32
DE(6) := 35*C(6)*(2*N4+4*N3+10*N2+8*N+3)/16+
  105*C(5)*C(1)*(-6*N4-12*N3-22*N2-16*N
  -5)/16+15*C(4)*C(2)*(-11*N4-22*N3
  -46*N2-35*N-12)/8+5*C(4)*C(1)2*(543
  *N4+1086*N3+1668*N2+1125*N+323)/16
  +C(3)2*(-630*N4-1260*N3-2030*N2-1400
  *N-449)/32+3*C(3)*C(2)*C(1)*(805*N4+
  1610*N3+2430*N2+1625*N+474)/8+C(3)*
  C(1)3*(-9765*N4-19530*N3-26580*N2-
  16815*N-4517)/16+3*C(2)3*(125*N4+
  250*N3+472*N2+347*N+111)/16+C(2)2*
  C(1)2*(-24945*N4-49890*N3-68424*N2-
  43479*N-11827)/32+3*C(2)*C(1)4*
  38775*N4+77550*N3+98160*N2+59385*N+
  15169)/64+C(1)6*(-115755*N4-231510*N3
  -278160*N2-162405*N-39709)/128

```

```

WRITE "TIME ",TIME() - TT," MSEC";
TIME 1979833 MSEC

```

Приведем еще программу, одновременно вычисляющую поправки к энергиям и состояниям. Поскольку поправки к энергиям мы уже видели, они не распечатываются. Формулы для поправок к состояниям существенно длиннее, поэтому мы ограничимся 4-м порядком теории возмущений. В программе KET(N) означает состояние  $|n\rangle$ .

```

M:=4$  

% QUANTUM NONLINEAR OSCILLATOR ;  

% PERTURBATION THEORY TO THE ORDER M ;  

SYMBOLIC OPERATOR TIME; TT:=TIME()$  

ARRAY D(M),DP(M); OPERATOR X,C,DE,KET; FACTOR KET; ON RAT;  

% X(K,J) = <N+J|X**K|N>;  

X(1,1):=SQRT((N+1)/2)$ X(1,-1):=SQRT(N/2)$ X(1,0):=0$  

FOR K:=2:M+2 DO FOR J:=-K:K DO X(K,J):=  

  (IF J<K-1 THEN SUB(N=N+J,X(1,1))*X(K-1,J+1) ELSE 0)  

  + (IF J>1-K THEN SUB(N=N+J,X(1,-1))*X(K-1,J-1) ELSE 0);  

FOR K:=3:M+2 DO FOR J:=-K:K DO X(K,J):=C(K-2)*X(K,J);  

% PERTURBATION THEORY ;  

PROCEDURE V(L,J,A);  

  << DP(M-L):=DP(M-L)+A*KET(N+J);  

  IF L<M THEN  

    FOR K:=2 STEP 2 UNTIL L-1 DO V(L-K,J,A*DE(K)/J);  

    FOR K:=1:L DO FOR I:=-2-K STEP 2 UNTIL 2+K DO  

      IF J+I=0  

        THEN D(M-L+K):=D(M-L+K)+A*SUB(N=N+J,X(K+2,I))  

        ELSE V(L-K,J+I,-A*SUB(N=N+J,X(K+2,I))/(J+I))  

  >>;  

V  

V(M,0,1)$  

FOR K:=1:M DO << DE(K):=D(K);WRITE DP(K):=DP(K) >>;  

DP(1) := (SQRT(N)*SQRT(N-1)*SQRT(N-2)*KET(N-3)*C(  

  1))/(6*SQRT(2)) + (3*SQRT(N)*KET(N-1)*C(1)*  

  N)/(2*SQRT(2)) + (-SQRT(N+1)*SQRT(N+2)*  

  )*SQRT(N+3)*KET(N+3)*C(1))/(6*SQRT(2))  

  - (3*SQRT(N+1)*KET(N+1)*C(1))*(N+1)/(2*SQRT(2))  

DP(2) := (SQRT(N)*SQRT(N-1)*SQRT(N-2)*SQRT(N-3)*

```

$$\begin{aligned}
& \text{SQRT}(N-4)*\text{SQRT}(N-5)*\text{KET}(N-6)*C(1)^2/144 \\
& + \text{SQRT}(N)*\text{SQRT}(N-1)*\text{SQRT}(N-2)*\text{SQRT}(N-3) \\
& * \text{KET}(N-4)*(2*C(2) + 4*C(1)^2*N - 3*C(1)^2)/32 \\
& + \text{SQRT}(N)*\text{SQRT}(N-1)*\text{KET}(N-2)*(8*C(2)*N - \\
& 4*C(2) + 7*C(1)^2*N^2 - 19*C(1)^2*N + C(1)^2)/ \\
& 16 + (\text{SQRT}(N+1)*\text{SQRT}(N+2)*\text{SQRT}(N+3)*\text{SQRT} \\
& (N+4)*\text{SQRT}(N+5)*\text{SQRT}(N+6)*\text{KET}(N+ \\
& 6)*C(1)^2)/144 + \text{SQRT}(N+1)*\text{SQRT}(N+2)* \\
& \text{SQRT}(N+3)*\text{SQRT}(N+4)*\text{KET}(N+4)*(-2*C(2) \\
& + 4*C(1)^2*N + 7*C(1)^2)/32 + \text{SQRT}(N+1)* \\
& \text{SQRT}(N+2)*\text{KET}(N+2)*(-8*C(2)*N - 12*C(2) \\
& + 7*C(1)^2*N^2 + 33*C(1)^2*N + 27*C(1)^2)/16 \\
& \text{DP}(3) := (\text{SQRT}(N)*\text{SQRT}(N-1)*\text{SQRT}(N-2)*\text{SQRT}(N-3)* \\
& \text{SQRT}(N-4)*\text{SQRT}(N-5)*\text{SQRT}(N-6)*\text{SQRT}(N- \\
& 7)*\text{SQRT}(N-8)*\text{KET}(N-9)*C(1)^3)/(2592*\text{SQRT}(2) \\
& ) + \text{SQRT}(N)*\text{SQRT}(N-1)*\text{SQRT}(N-2)*\text{SQRT}(N- \\
& 3)*\text{SQRT}(N-4)*\text{SQRT}(N-5)*\text{SQRT}(N-6)*\text{KET}( \\
& N-7)*C(1)*(2*C(2) + 2*C(1)^2*N - 3*C(1)^2)/ \\
& 192*\text{SQRT}(2) + \text{SQRT}(N)*\text{SQRT}(N-1)*\text{SQRT}(N- \\
& 2)*\text{SQRT}(N-3)*\text{SQRT}(N-4)*\text{KET}(N-5)*(48*C \\
& (3) + 170*C(2)*C(1)*N - 208*C(2)*C(1) + 80* \\
& C(1)^3*N^2 - 305*C(1)^3*N + 164*C(1)^3)/(960* \\
& \text{SQRT}(2)) + \text{SQRT}(N)*\text{SQRT}(N-1)*\text{SQRT}(N-2)* \\
& \text{KET}(N-3)*(720*C(3)*N - 720*C(3) + 1134*C(2)* \\
& C(1)*N^2 - 3996*C(2)*C(1)*N + 1566*C(2)*C(1) \\
& + 488*C(1)^3*N^3 - 2175*C(1)^3*N^2 + 4018* \\
& C(1)^3*N - 825*C(1)^3)/(1728*\text{SQRT}(2)) + \text{SQRT}( \\
& N)*\text{KET}(N-1)*(160*C(3)*N^2 + 80*C(3) - 54*C(2) \\
& *C(1)*N^3 - 796*C(2)*C(1)*N^2 - 138*C(2)*C(1) \\
& *N - 180*C(2)*C(1) + 60*C(1)^3*N^4 + 243* \\
& C(1)^3*N^3 + 978*C(1)^3*N^2 + 243*C(1)^3*N + 132 \\
& *C(1)^3)/(64*\text{SQRT}(2)) + (-\text{SQRT}(N+1)*\text{SQRT} \\
& (N+2)*\text{SQRT}(N+3)*\text{SQRT}(N+4)*\text{SQRT}(N+5)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& * \text{SQRT}(N+6) * \text{SQRT}(N+7) * \text{SQRT}(N+8) * \text{SQRT}(N \\
& + 9) * \text{KET}(N+9) * C(1)^3 / (2592 * \text{SQRT}(2)) + \\
& \text{SQRT}(N+1) * \text{SQRT}(N+2) * \text{SQRT}(N+3) * \text{SQRT}(N+4) \\
& ) * \text{SQRT}(N+5) * \text{SQRT}(N+6) * \text{SQRT}(N+7) * \text{KET}(N+ \\
& 7) * C(1) * (2 * C(2) - 2 * C(1)^2 * N - 5 * C(1)^2) / (192 * \\
& \text{SQRT}(2)) + \text{SQRT}(N+1) * \text{SQRT}(N+2) * \text{SQRT}(N \\
& + 3) * \text{SQRT}(N+4) * \text{SQRT}(N+5) * \text{KET}(N+5) * (- \\
& 48 * C(3) + 170 * C(2) * C(1) * N + 378 * C(2) * C(1) \\
& - 80 * C(1)^3 * N^2 - 465 * C(1)^3 * N - 549 * C(1)^3) / ( \\
& 960 * \text{SQRT}(2)) + \text{SQRT}(N+1) * \text{SQRT}(N+2) * \text{SQRT}(N \\
& + 3) * \text{KET}(N+3) * (-720 * C(3) * N - 1440 * C(3) \\
& + 1134 * C(2) * C(1) * N^2 + 6264 * C(2) * C(1) * N + \\
& 6696 * C(2) * C(1) - 488 * C(1)^3 * N^3 - 3639 * C(1)^3 * \\
& N^2 - 9832 * C(1)^3 * N - 7506 * C(1)^3) / (1728 * \text{SQRT}(2)) \\
& + \text{SQRT}(N+1) * \text{KET}(N+1) * (-160 * C(3) * \\
& N^2 - 320 * C(3) * N - 240 * C(3) - 54 * C(2) * C(1) * \\
& N^3 + 634 * C(2) * C(1) * N^2 + 1292 * C(2) * C(1) * N + \\
& 784 * C(2) * C(1) - 60 * C(1)^3 * N^4 + 3 * C(1)^3 * N^3 - \\
& 609 * C(1)^3 * N^2 - 1224 * C(1)^3 * N - 684 * C(1)^3) / (64 * \text{SQRT}(2)) \\
\text{DP}(4) := & (\text{SQRT}(N) * \text{SQRT}(N-1) * \text{SQRT}(N-2) * \text{SQRT}(N-3) * \\
& \text{SQRT}(N-4) * \text{SQRT}(N-5) * \text{SQRT}(N-6) * \text{SQRT}(N- \\
& 7) * \text{SQRT}(N-8) * \text{SQRT}(N-9) * \text{SQRT}(N-10) * \text{SQRT}(N- \\
& 11) * \text{KET}(N-12) * C(1)^4) / 124416 + \text{SQRT}(N) * \\
& \text{SQRT}(N-1) * \text{SQRT}(N-2) * \text{SQRT}(N-3) * \text{SQRT}(N-4) \\
& * \text{SQRT}(N-5) * \text{SQRT}(N-6) * \text{SQRT}(N-7) * \text{SQRT}(N- \\
& 8) * \text{SQRT}(N-9) * \text{KET}(N-10) * C(1)^2 * (6 * C(2) + \\
& 4 * C(1)^2 * N - 9 * C(1)^2) / 13824 + \text{SQRT}(N) * \text{SQRT}(N- \\
& 1) * \text{SQRT}(N-2) * \text{SQRT}(N-3) * \text{SQRT}(N-4) * \text{SQRT}(N- \\
& 5) * \text{SQRT}(N-6) * \text{SQRT}(N-7) * \text{KET}(N-8) * \\
& 1152 * C(3) * C(1) + 540 * C(2)^2 + 3120 * C(2) * \\
& C(1)^2 * N - 6132 * C(2) * C(1)^2 + 1000 * C(1)^4 * N^2 \\
& - 5200 * C(1)^4 * N + 4951 * C(1)^4) / 276480 + \text{SQRT}(N) * \text{SQRT}(N-1) * \text{SQRT}(N-2) * \text{SQRT}(N-3) * \text{SQRT}(N-4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& - 4) * \text{SQRT}(N-5) * \text{KET}(N-6) * (12960 * C(4) + \\
& 44928 * C(3) * C(1) * N - 73440 * C(3) * C(1) + 19440 \\
& * C(2)^2 * N - 35640 * C(2)^2 + 56970 * C(2) * C(1)^2 * \\
& N^2 - 266058 * C(2) * C(1)^2 * N + 215190 * C(2) * \\
& C(1)^2 + 14620 * C(1)^4 * N^3 - 100875 * C(1)^4 * N^2 + \\
& 242279 * C(1)^4 * N - 125895 * C(1)^4) / 622080 + \\
& \text{SQRT}(N) * \text{SQRT}(N-1) * \text{SQRT}(N-2) * \text{SQRT}(N-3) * \\
& \text{KET}(N-4) * (8640 * C(4) * N - 12960 * C(4) + 22272 * C \\
& (3) * C(1) * N^2 - 58176 * C(3) * C(1) * N + 41952 * C(3) \\
& * C(1) + 6840 * C(2)^2 * N^2 - 24840 * C(2)^2 * N + \\
& 20700 * C(2)^2 + 12080 * C(2) * C(1)^2 * N^3 - 131472 * \\
& C(2) * C(1)^2 * N^2 + 181336 * C(2) * C(1)^2 * N - 94392 \\
& * C(2) * C(1)^2 + 5890 * C(1)^4 * N^4 - 16260 * C(1)^4 * \\
& N^3 + 134576 * C(1)^4 * N^2 - 116118 * C(1)^4 * N + \\
& 47331 * C(1)^4) / 46080 + \text{SQRT}(N) * \text{SQRT}(N-1) * \\
& \text{KET}(N-2) * (21600 * C(4) * N^2 - 21600 * C(4) * N + \\
& 21600 * C(4) + 31104 * C(3) * C(1) * N^3 - 143136 * C(3) \\
& * C(1) * N^2 + 67104 * C(3) * C(1) * N - 62496 * C(3) \\
& * C(1) + 7920 * C(2)^2 * N^3 - 42120 * C(2)^2 * N^2 + \\
& 38520 * C(2)^2 * N - 25920 * C(2)^2 + 6740 * C(2) * \\
& C(1)^2 * N^4 - 167584 * C(2) * C(1)^2 * N^3 + 447706 * C(2) \\
& * C(1)^2 * N^2 - 124694 * C(2) * C(1)^2 * N + 136896 * \\
& C(2) * C(1)^2 + 8080 * C(1)^4 * N^5 - 1570 * C(1)^4 * N^4 \\
& + 160272 * C(1)^4 * N^3 - 343673 * C(1)^4 * N^2 + \\
& 30767 * C(1)^4 * N - 76908 * C(1)^4) / 23040 + (\text{SQRT}(N+1) * \text{SQRT}(N+2) * \text{SQRT}(N+3) * \text{SQRT}(N+4) * \\
& \text{SQRT}(N+5) * \text{SQRT}(N+6) * \text{SQRT}(N+7) * \text{SQRT}(N+8) * \text{SQRT}(N+9) * \text{SQRT}(N+10) * \text{SQRT}(N+11) \\
& * \text{SQRT}(N+12) * \text{KET}(N+12) * C(1)^4) / 124416 + \\
& \text{SQRT}(N+1) * \text{SQRT}(N+2) * \text{SQRT}(N+3) * \text{SQRT}(N+4) \\
& * \text{SQRT}(N+5) * \text{SQRT}(N+6) * \text{SQRT}(N+7) * \text{SQRT}(N+8)
\end{aligned}$$

```

+8)*SQRT(N+9)*SQRT(N+10)*KET(N+10)*
C(1)2*(-6*C(2)+4*C(1)2*N+13*C(1)2)/13824
+SQRT(N+1)*SQRT(N+2)*SQRT(N+3)*SQRT(N
+4)*SQRT(N+5)*SQRT(N+6)*SQRT(N+7)*SQRT
(N+8)*KET(N+8)*(1152*C(3)*C(1)+540*C(2)2
-3120*C(2)*C(1)2*N-9252*C(2)*C(1)2+
1000*C(1)4*N2+7200*C(1)4*N+11151*C(1)4)
/276480+SQRT(N+1)*SQRT(N+2)*SQRT(N+3)*
SQRT(N+4)*SQRT(N+5)*SQRT(N+6)*KET(N+6)
*(-12960*C(4)+44928*C(3)*C(1)*N+118368*C
(3)*C(1)+19440*C(2)2*N+55080*C(2)2-
56970*C(2)*C(1)2*N2-379998*C(2)*C(1)2*N-
538218*C(2)*C(1)2+14620*C(1)4*N3+144735*
C(1)4*N2+487889*C(1)4*N+483669*C(1)4)/
622080+SQRT(N+1)*SQRT(N+2)*SQRT(N+3)*
SQRT(N+4)*KET(N+4)*(-8640*C(4)*N-21600
*C(4)+22272*C(3)*C(1)*N2+102720*C(3)*C(
1)*N+122400*C(3)*C(1)+6840*C(2)2*N2+
38520*C(2)2*N+52380*C(2)2-12080*C(2)*
C(1)2*N3-167712*C(2)*C(1)2*N2-480520*C(
2)*C(1)2*N-419280*C(2)*C(1)2+5890*C(1)4
*N4+39820*C(1)4*N3+218696*C(1)4*N2+
457610*C(1)4*N+320175*C(1)4)/46080+SQRT
(N+1)*SQRT(N+2)*KET(N+2)*(-21600*C(4)*
N2-64800*C(4)*N-64800*C(4)+31104*C(3)
*C(1)*N4+236448*C(3)*C(1)*N2+446688*C(3
)*C(1)*N+303840*C(3)*C(1)+7920*C(2)2*N3
+65880*C(2)2*N2+146520*C(2)2*N+114480
*C(2)2-6740*C(2)*C(1)2*N4-194544*C(2)*
C(1)2*N3-990898*C(2)*C(1)2*N2-1549818*C
(2)*C(1)2*N-883620*C(2)*C(1)2+8080*

```

```

C(1)4*N5+41970*C(1)4*N4+247352*C(1)4*N3
+914709*C(1)4*N2+1245609*C(1)4*N+
621270*C(1)4)/23040
WRITE "TIME ",TIME()-TT," MSEC";
TIME 271850 MSEC

```

**Заключение.** Сходятся ли ряды теории возмущений для квантового ангармонического осциллятора? Ответ на этот вопрос оказывается отрицательным. Действительно, включение возмущения  $c_1 \hat{x}^3$  со сколь угодно малым коэффициентом  $c_1$  делает потенциал неограниченным снизу. При этом, строго говоря, имеется только сплошной энергетический спектр от  $-\infty$  до  $+\infty$ . Конечно, состояния дискретного спектра гармонического осциллятора не могут бесследно исчезнуть при малых  $c_1$ . Они становятся квазистационарными состояниями, т. е. приобретают конечное время жизни и соответственно конечную ширину. Время жизни определяется вероятностью туннелирования в область большого отрицательного потенциала. При малых  $c_1$  эта вероятность экспоненциально мала (для не слишком больших  $n$ ). Теория возмущений не ухватывает этой качественной перестройки спектра. Она предсказывает, что спектр останется дискретным, только уровни энергии немножко сдвинутся.

На первый взгляд кажется, что для возмущения  $c_2 \hat{x}^4$  с положительным коэффициентом  $c_2$  дело обстоит лучше, так как спектр остается дискретным. Но если бы ряд теории возмущений сходился при  $c_2 > 0$ , то он должен был бы сходиться и при  $c_2 < 0$ . А в этом случае ситуация столь же плоха.

Имеют ли в таком случае ряды теории возмущений хоть какой-то смысл? Да, они правильно отражают все эффекты, пропорциональные степеням возмущения. Неучитываемые ими эффекты (вроде ширины уровней) малы экспоненциально. Например, функция  $\exp(-1/x)$  в точке  $x=0$  равна нулю вместе со всеми производными, и при попытке разложить ее в ряд по  $x$  мы получим ряд, у которого все коэффициенты равны нулю.

Ряды теории возмущений являются асимптотическими, а не сходящимися. Это значит, что если мы оборвем ряд на некотором члене, то разность этого обрванного ряда и истинной величины быстрее стремится к нулю при малом возмущении, чем последний учтенный член. Это не похоже на определение сходящегося ряда, когда мы при фиксированной величине возмущения берем все

больше членов ряда, и получаем ответы, сходящиеся к точному.

Но на самом деле мы всегда имеем именно фиксированную, хотя, возможно, и малую, величину возмущения, и хотим получить как можно более точный ответ. Члены асимптотического ряда сначала убывают, как и у сходящегося. Начиная с некоторого номера, они начинают возрастать, и ряд расходится. Ясно, что ряд имеет смысл суммировать, только пока его члены убывают. В этом случае можно надеяться, что ошибка порядка первого отброшенного члена, и мала по сравнению с последним учтеным. Это связано с тем, что ошибка есть величина высшего порядка малости по сравнению с последним учтеным членом, и того же порядка малости, что и первый отброшенный член, в пределе, когда возмущение стремится к нулю. Таким образом, асимптотический ряд, в отличие от сходящегося, в принципе не позволяет получить сколь угодно точный ответ, сколько бы членов мы ни посчитали. Ошибка всегда больше минимального члена ряда.

В случае двумерного осциллятора появляются дополнительные сложности. Даже если в гармоническом приближении  $\omega_1 \neq \omega_2$ , всегда существуют приближенно вырожденные уровни  $n_1\omega_1 \approx n_2\omega_2$ . Для таких уровней теория возмущений неприменима. Эта проблема аналогична той, которая возникала в классическом случае.

Рассмотрим еще один интересный вопрос, а именно, каким образом полученное решение задачи о квантовом нелинейном осцилляторе переходит при  $n \gg 1$  в классическое, которое мы обсуждали в п. 2. Как мы уже говорили, при  $n \sim 1$  малым параметром разложения является отношение амплитуды нулевых колебаний к характерной длине изменения потенциала  $\sqrt{\frac{\hbar}{m\omega L^2}}$ , а при  $n \gg 1$  амплитуда в  $\sqrt{n}$  раз больше, и параметром является  $\sqrt{\frac{\hbar n}{m\omega L^2}}$ . И действительно, энергия в нулевом приближении равна  $n + 1/2$ , вторая поправка к ней содержит  $n^2$ , четвертая —  $n^3$ , а шестая —  $n^4$ . При  $n \gg 1$  во всех этих выражениях можно оставить только старшие степени  $n$ .

При  $n \gg 1$  должен выполняться принцип соответствия Бора. А именно, с квантовой точки зрения, частица, находящаяся на  $n$ -м уровне, может излучить фотон, перейдя на  $(n-1)$ -й, или вообще  $(n-k)$ -й. Частота этого фотона равна  $E_n - E_{n-k}$ , или приближенно  $\frac{dE}{dn} k$ . С классической точки зрения, частоты излучаемого света

равны частоте колебаний  $\omega$  и ее гармоникам. Поэтому частота  $\omega = \frac{dE}{dn}$ . Теперь нужно сравнить квантовое выражение для  $\omega$  с классическим. Но квантовое выражение содержит номер уровня  $n$ , а классическое — амплитуду колебаний  $a$ . Нужно выразить их через одну и ту же величину — энергию. Тогда они должны совпадать.

Здесь мы приводим фрагмент программы, проверяющей принцип соответствия. В начале эта программа читает из файлов результаты работы программы из п. 2 — квадрат частоты  $W$  и движение частицы  $X$ , а также результаты работы программы этого параграфа — DE(2), DE(4) и DE(6). Она читает также процедуру BINOM из п. 1. Дальше она вычисляет в классическом случае энергию, выражает через нее квадрат амплитуды, и наконец получает выражение для частоты через энергию. Аналогично, в квантовом случае, программа вычисляет энергию (оставляя старшие члены по  $N$ ), выражает через нее  $N$  и подставляет в частоту. Эти выражения оказываются равными по принципу соответствия. Кстати, это является весьма нетривиальной проверкой обеих программ, которые основаны на совершенно разных подходах: одна на втором законе Ньютона, а другая на квантовомеханической теории возмущений.

```

WEIGHT A=1; WTLEVEL 8;
X:=SUB(T=0,X)$
EC:=X**2/2+FOR I:=1:6 SUM C(I)*X**I+2$ CLEAR X;
WC:=BINOM(W-1,1/2)$ CLEAR W,A;
LET A**2=2*N; EC:=EC$ WC:=WC$ CLEAR A**2;
EO:=N+
FOR I:=2:4 SUM N**I*SUB(A=0,A**I*SUB(N=1/A,D(2*(I-1))))$ 
WO:=DF(EO,N)$
FACTOR E; ON RAT;
WEIGHT N=1,E=1; WTLEVEL 4; NC:=E*BINOM(EC/N-1,-1)$
REPEAT
<<CLEAR N;N2:=SUB(N=N1,NC);WEIGHT N=1;NC:=SUB(N1=NC,N2)>>
UNTIL FREEOF(NC,N);
WTLEVEL 3; CLEAR N; WC:=SUB(N=NC,WC);
WC := E3*(560*C(6)-5040*C(5)*C(1)-3600*C(4)*C(2)+  

24120*C(4)*C(1)2-2520*C(3)2+45360*C(3)*C(  

2)*C(1)-94920*C(3)*C(1)3+5064*C(2)3-

```

```

128700*C(2)2*C(1)2+311670*C(2)*C(1)4-
164805*C(1)6/32+3*E2*(40*C(4)-280*C(3)*C
(1)-92*C(2)2+1020*C(2)*C(1)2-855*C(1)4/
16+3*E*(2*C(2)-5*C(1)2)/2+1
WEIGHT N=1; WTLEVEL 4; NO:=E*BINOM(E0/N-1,-1)$
REPEAT
<<CLEAR N;N2:=SUB(N=N1,NO);WEIGHT N=1;NO:=SUB(N1=NO,N2)>>
UNTIL FREEOF(NO,N);
WTLEVEL 3; CLEAR N; WO:=SUB(N=NO,WO)$
IF WO=WC
THEN WRITE "CORRESPONDENCE PRINCIPLE"
ELSE WRITE "ERROR";
CORRESPONDENCE PRINCIPLE

```

Интересно было бы проследить, каким образом распределение вероятности нахождения частицы в разных точках, полученное из волновых функций, вычисленных по теории возмущений, переходит при  $n \gg 1$  в классическое, получаемое из движения  $x(t)$ .

**Задача.** Рассмотрите двумерный нелинейный осциллятор. Если в линейном приближении частоты  $\omega_1$  и  $\omega_2$  различны, то большинство уровней не являются почти вырожденными, и для них применима обычная теория возмущений, изложенная в этом параграфе. При  $\omega_1 = \omega_2$  все уровни попарно вырождены, и нужно применять вырожденную теорию возмущений, см. § 7.

## 7. РОТАТОР В СЛАБОМ ПОЛЕ

**Вырожденная теория возмущений.** Обычная теория возмущений неприменима к уровням, матричный элемент возмущения между которыми сравним с их разностью энергий. В случае вырожденного уровня, поправки к энергиям и волновым функциям не могут быть разложены в ряд по возмущению, сколь бы мало оно ни было.

Пусть  $\hat{Q}$  — проектор на подпространство вырожденных или почти вырожденных собственных состояний  $\hat{H}_0$ , а  $\hat{P}$  — проектор на ортогональное подпространство. Они обладают очевидными свойствами:  $\hat{Q}^2 = \hat{Q}$ ,  $\hat{P}^2 = \hat{P}$ ,  $\hat{Q}\hat{P} = \hat{P}\hat{Q} = 0$ ,  $\hat{Q} + \hat{P} = 1$ ,  $[\hat{Q}, \hat{H}_0] = [\hat{P}, \hat{H}_0] = 0$ .

Можно попытаться переформулировать задачу: состояния из  $Q$  — подпространства учесть точно, а остальные — по теории возмущений. Тогда задача на собственные значения  $\hat{H}$  во всем пространстве должна свестись к задаче на собственные значения некоторого оператора  $\hat{S}$  в  $Q$ -подпространстве, которое предположительно имеет малую размерность. Собственные значения  $\hat{S}$  равны точным энергиям  $E_\alpha$ , а собственные состояния —  $Q$ -проекциям точных собственных состояний  $|\psi_\alpha\rangle$  полного гамильтониана  $\hat{H}$ , возникающих из  $Q$ -состояний при включении возмущения. Оператор  $\hat{S}$  неэрмитов, поскольку его собственные состояния не ортогональны. Кроме того, необходим оператор  $\hat{\Omega}$ , который, действуя на  $\hat{Q}|\psi_\alpha\rangle$ , дает  $|\psi_\alpha\rangle$ . Именно эти операторы  $\hat{S}$  и  $\hat{\Omega}$ , называемые секулярным и волновым оператором, мы и будем пытаться разложить в ряд по  $\hat{V}$  вместо точной энергии и волновой функции.

Доопределим  $\hat{S}$  и  $\hat{\Omega}$  таким образом, что, действуя на состояния из  $P$ -подпространства, они дают 0. Секулярный оператор действует в  $Q$ -подпространстве:  $\hat{Q}\hat{S} = \hat{S}\hat{Q} = \hat{S}$ ,  $\hat{P}\hat{S} = \hat{S}\hat{P} = 0$ . Волновой оператор имеет вид  $\hat{\Omega} = \hat{Q} + \delta$ , где  $\delta$ , действуя на  $\hat{Q}|\psi_\alpha\rangle$ , дает  $\hat{P}|\psi_\alpha\rangle$ . Поэтому  $\hat{P}\delta = \delta\hat{Q} = \delta$ ,  $\hat{Q}\delta = \delta\hat{P} = 0$  (или  $\hat{P}\hat{\Omega} = \delta$ ,  $\hat{\Omega}\hat{Q} = \hat{\Omega}$ ,  $\hat{Q}\hat{\Omega} = \hat{Q}$ ,  $\hat{\Omega}\hat{P} = 0$ ).

Основное уравнение, определяющее  $\hat{S}$  и  $\hat{\Omega}$ , есть

$$\hat{\Omega}\hat{S} = \hat{H}\hat{\Omega}. \quad (1)$$

Действительно, при действии на  $\hat{Q}|\psi_\alpha\rangle$ , слева имеем  $\hat{\Omega}\hat{S}\hat{Q}|\psi_\alpha\rangle = \hat{\Omega}E_\alpha\hat{Q}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$ , а справа  $\hat{H}\hat{\Omega}\hat{Q}|\psi_\alpha\rangle = \hat{H}|\psi_\alpha\rangle = E_\alpha|\psi_\alpha\rangle$ . При действии на любое состояние из  $P$ -подпространства, левая и правая части (1) дают 0.

Полезно все время держать в голове невырожденную теорию возмущений как простой частный случай. Тогда  $Q$ -подпространство содержит единственное состояние  $|\psi_0\rangle$ ,  $\hat{Q} = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$ ,  $\hat{P} = 1 - |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$ . В этом случае  $\hat{S} = |\psi_0\rangle E_0 \langle\psi_0|$ ,  $\delta = |\delta\psi\rangle\langle\psi_0|$  (или  $\hat{\Omega} = |\psi\rangle\langle\psi_0|$ ). Уравнение (1) сводится к  $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ .

Дальше будем действовать так же, как и в невырожденном случае: выделим в (1)  $Q$ - и  $P$ -проекции. Действуя на (1) слева проектором  $\hat{Q}$ , мы получим формулу  $\hat{S} = \hat{Q}\hat{H}\hat{\Omega}$ , или

$$\hat{S} = \hat{Q}(\hat{H}_0 + \hat{V}\hat{\Omega}), \quad (2)$$

выражающую  $\hat{S}$  через  $\hat{\Omega}$ . Она является обобщением формулы  $E = E_0 + \langle\psi_0|\hat{V}|\psi\rangle$  невырожденной теории. Действуя проектором  $\hat{P}$ , мы получим  $\delta\hat{S} = \hat{P}\hat{H}\hat{\Omega}$ ; правая часть равна  $\hat{P}\hat{H}_0\hat{\Omega} +$

$\hat{P}\hat{V}\hat{\Omega} = \hat{H}_0\delta + \hat{P}\hat{V}\hat{\Omega}$ , поэтому

$$\delta\hat{S} - \hat{H}_0\delta = \hat{P}\hat{V}\hat{\Omega}. \quad (3)$$

Эта формула является обобщением  $(E - \hat{H}_0)|\delta\psi\rangle = \hat{P}\hat{V}|\psi\rangle$ . Уравнение (3) надо решать итерациями: выразить из него  $\delta$  через правую часть, подставить в нее  $\hat{\Omega} = \hat{Q} + \delta$  и т. д.

Пусть  $|i\rangle$  — базис собственных состояний  $\hat{H}_0$  в  $P$ -подпространстве с энергиями  $E_{0i}$ , а  $|\alpha\rangle$  — произвольный базис в  $Q$ -подпространстве. Запишем уравнение (3) в матричном виде:

$$\delta_{i\beta} S_{\beta\alpha} - E_{0i} \delta_{i\alpha} = V_{i\alpha} + V_{ij} \delta_{j\alpha},$$

или опуская индексы  $\alpha$  и  $\beta$ ,

$$(\tilde{S} - E_{0i}) \delta_i = V_i + V_{ij} \delta_j,$$

где  $\tilde{S}$  — транспонированная матрица  $S$ . Отсюда  $\delta_i = \tilde{D}_i V_i + \tilde{D}_i V_{ij} \delta_j$ , где матрица  $\tilde{D}_i = (S - E_{0i})^{-1}$ . Продолжая итерации, мы получим ряд

$$\delta_{i\alpha} = D_{i\beta_1\alpha} V_{i\beta_1} + D_{i\beta_2\alpha} V_{i\beta_1} D_{j_1\beta_1\beta_2} V_{j_1\beta_1} + D_{i\beta_3\alpha} V_{i\beta_1} D_{j_1\beta_2\beta_3} V_{j_1\beta_2} D_{j_2\beta_1\beta_2} V_{j_2\beta_1} + \dots \quad (4)$$

С помощью (2) из него следует ряд для  $S$ :

$$S_{\alpha_1\alpha_2} = H_{0\alpha_1\alpha_2} + V_{\alpha_1\alpha_2} + V_{\alpha_1i_1} D_{i_1\beta_1\alpha_2} V_{i_1\beta_1} + V_{\alpha_1i_1} D_{i_1\beta_2\alpha_2} V_{i_1\beta_2} D_{i_2\beta_1\beta_2} V_{i_2\beta_1} + \dots \quad (5)$$

Формулы (4) и (5) являются обобщением рядов теории возмущений Бриллюэна — Вигнера на вырожденный случай.

Для получения рядов Рэлея — Шредингера, дающих разложение  $\hat{S}$  и  $\hat{\Omega}$  по  $\hat{V}$ , нужно подставить в (4), (5) разложение  $\hat{D}_i = \hat{G}_i - \hat{G}_i \hat{\Delta} \hat{G} + \hat{G}_i \hat{\Delta} \hat{G} \hat{\Delta} \hat{G}_i - \dots$ , где  $\hat{\Delta}$  — весь ряд (5) без члена  $\hat{H}_0$ ; в ряды для  $\hat{\Delta}$  опять подставить разложение  $\hat{D}$ , и так до бесконечности. Структура получившихся рядов описана в предыдущем параграфе с помощью скобочных обозначений. Новым моментом является расстановка индексов  $Q$ -подпространства  $\alpha, \beta, \dots$

Из формул (4), (5) видно, что индексы всех входящих в них матриц  $D$  расставлены так, будто эти матрицы размещены в обратном порядке после последнего  $V$ . Члены разложения  $D$  симметричны, поэтому в нем тоже можно считать, что матрицы  $G$  и  $\Delta$  размещены в обратном порядке. Отсюда следует правило расстановки индексов: выражение  $M \dots M \rangle_a$ , где  $M$  — матрицы  $G$  или вложенные скобки  $\langle \dots \rangle$ , нужно понимать как  $M_{\beta_1\alpha} \dots M_{\beta_n\beta_1} \rangle_{\beta_1}$ . Для вложенных скобок этот рецепт нужно применять снова. Например,

один из членов разложения  $\hat{S}_{\alpha_1\alpha_2}$  вид

$$\begin{aligned} &=_{\alpha_1} \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle_{\alpha_2} \\ &=_{\alpha_1} \langle \hat{V} \hat{G}_{\beta_5\alpha_2} \beta_4 \langle \hat{V} \rangle_{\beta_5} \hat{G}_{\beta_3\beta_4} \beta_2 \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle_{\beta_3} \hat{G}_{\beta_1\beta_2} \hat{V} \rangle_{\beta_1} \\ &=_{\alpha_1} \langle \hat{V} \hat{G}_{\beta_5\alpha_2} \beta_4 \langle \hat{V} \rangle_{\beta_5} \hat{G}_{\beta_3\beta_4} \beta_2 \langle \hat{V} \hat{G}_{\gamma_3\beta_3} \gamma_2 \langle \hat{V} \rangle_{\gamma_3} \hat{G}_{\gamma_1\gamma_2} \hat{V} \rangle_{\gamma_1} \hat{G}_{\beta_1\beta_2} \hat{V} \rangle_{\beta_1}. \end{aligned}$$

Эти правила несколько упрощаются, если невозмущенные состояния в  $Q$ -подпространстве точно вырождены (и имеют энергию  $E_0$ ). Кстати, общий случай почти вырожденных состояний можно свести к этому случаю, если отнести  $\hat{Q}(\hat{H}_0 - E_0)$  к возмущению. В точно вырожденном случае  $G_i = 1/(E - E_{0i})$  — число, а не матрица. Единственными матрицами являются скобки. Тогда правило состоит в том, что из скобки  $\langle \dots \rangle$  нужно выносить все вложенные скобки верхнего уровня, и размещать их после исходной скобки в обратном порядке. Если в вынесенных скобках есть еще вложенные скобки, то это правило надо применять опять. Например, для одного из членов  $\hat{S}$ :

$$\begin{aligned} \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle &= \langle \hat{V} \hat{G}^3 \hat{V} \rangle \langle \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle \langle \hat{V} \rangle \\ &= \langle \hat{V} \hat{G}^3 \hat{V} \rangle \langle \hat{V} \hat{G}^2 \hat{V} \rangle \langle \hat{V} \rangle \langle \hat{V} \rangle. \end{aligned}$$

Для одного из членов  $\hat{\Omega}$ :

$$\hat{G} \hat{V} \hat{G} \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle \hat{G} \langle \hat{V} \rangle \hat{G} \hat{V} \rangle = \hat{G} \hat{V} \hat{G}^3 \hat{V} \rangle \langle \hat{V} \rangle \langle \hat{V} \hat{G} \hat{V} \rangle.$$

В окончательных формулах подразумевается перемножение скобок  $\langle \dots \rangle$  по обычному матричному правилу.

**Ротатор.** Ротатор — это частица массы  $m$ , движущаяся по окружности радиуса  $r$ . Его гамильтониан имеет вид  $\hat{H}_0 = \hat{M}^2/2I$ , где  $I = mr^2$  — момент инерции, а оператор момента импульса в координатном представлении имеет вид  $\hat{M} = -i\partial/\partial\phi$ . Нормированные собственные состояния  $\hat{M}$  с собственными значениями  $m$  равны  $\langle \phi | m \rangle = e^{im\phi}/\sqrt{2\pi}$ . Они являются и собственными состояниями  $\hat{H}_0$  с энергиями  $E_m = m^2/2I$ . Состояния  $|\pm m\rangle$  попарно вырождены, за исключением  $|0\rangle$ .

Поместим теперь ротатор во внешнее поле  $\hat{V}$ . В силу периодичности,  $\hat{V}(\phi) = \sum_l c_l e^{il\phi}$ . Поскольку  $V(\phi)$  — действительная функция,  $c_{-l} = c_l^*$ . Сдвигом начала отсчета энергии можно добиться  $c_0 = 0$ . Размерная оценка дает  $c_l \sim c_1(r/L)^l$ , где  $L$  — характерная длина изменения потенциала. Внешнее поле можно считать слабым и

рассматривать по теории возмущений при  $IV \ll 1$ .

Таким образом, в этой задаче имеется 2 малых параметра:  $r/L$  и  $Ic_1$ . В зависимости от их соотношения, нужно по-разному отбирать наиболее существенные члены ряда теории возмущений. При  $r/L \ll Ic_1$  можно рассматривать только возмущение  $c_1 e^{i\varphi} + c_{-1} e^{i\varphi}$ . Выбором начала отсчета  $\varphi$  можно добиться того, чтобы коэффициент  $c_1$  был действительным:  $\hat{V} = 2c_1 \cos\varphi$ . Тогда можно выделить подпространства четных  $(|0\rangle, (|m\rangle + | -m \rangle)/\sqrt{2})$  и нечетных  $(|m\rangle - | -m \rangle)/\sqrt{2}i$  состояний, и возмущение не смешивает их. Эти подпространства можно рассматривать отдельно; в каждом из них спектр  $H_0$  невырожден, так что можно применять обычную теорию возмущений.

Поскольку наша цель — проиллюстрировать применение вырожденной теории возмущений, рассмотрим более сложное возмущение  $\hat{V} = c_1 e^{i\varphi} + c_{-1} e^{i\varphi} + c_2 e^{2i\varphi} + c_{-2} e^{-2i\varphi}$ . Для определенности будем считать  $c_2 \sim c_1$ . Матричные элементы возмущения  $\langle m+l|\hat{V}|m\rangle = c_l$ ,  $l = \pm 1, \pm 2$ . Выбором начала отсчета  $\varphi$  добиваемся  $c_{-1} = c_1$ .

В этой задаче в  $n$ -м порядке теории возмущений отличны от 0 скобки  $_{m+l}\langle \dots \rangle_m$  при  $|l| \leq 2n$ . Они могут связывать вырожденные состояния  $|m\rangle$  и  $| -m \rangle$  при  $|l| = 2m$ . Поэтому пары вырожденных уровней  $|\pm m\rangle$  расщепляются при  $|m| \leq n$ .

**Алгоритм.** Мы собираемся проводить вычисления до  $n$ -го порядка теории возмущений. Рассмотрим пару вырожденных уровней  $|\pm m\rangle$  с  $m \leq n$ , которые расщепляются при включении возмущения. Для каждого значения  $m$  суммирование по состояниям, не принадлежащим вырожденному подпространству, требует проверки разных условий (состояние не равно  $|m\rangle$  и  $| -m \rangle$ ), поэтому рекурсивную процедуру перебора нужно вызывать отдельно для каждого  $m$ .

Процедура  $V$  содержит 3 параметра:  $k$  — количество порядков малости, которые нужно распределять;  $j$  — текущий номер состояния;  $a$  — уже построенная часть выражения. В первую очередь она накапливает в массиве DP вклады в волновой оператор  $\hat{\Omega}$ . При  $k < n$  (т. е. не в первый раз) процедура пробует приписать к  $a$  фактор  $-G\Delta E_i$ . Поскольку  $\Delta E_i$  являются матрицами, важен их порядок: мы должны вынести все  $\Delta E_i$  из  $a$  вправо в обратном порядке. Чтобы иметь возможность это сделать, процедура запоминает во втором аргументе  $\Delta E_i$  текущую позицию. Далее, если еще есть, что распределять ( $k > 0$ ), к  $a$  приписывается  $Gc_l$ . Если мы попали в исходное состояние  $|m\rangle$  или вырожденное с ним сос-

тояние  $| -m \rangle$ , то получилось законченное выражение для  $\langle \dots \rangle$  в некотором порядке малости. Такие выражения накапливаются в массивах D1 и D2. Из этих скобок  $\langle m| \dots |m\rangle$  и  $\langle -m| \dots |m\rangle$  можно получить симметричные скобки  $\langle -m| \dots | -m \rangle$  и  $\langle m| \dots | -m \rangle$ , необходимые для построения полной матрицы, заменив все  $c_l$  на  $c_{-l}$ . Для облегчения этого, процедура вместо  $c_l$  везде использует  $c_{zl}$ ; разные варианты потом получаются при  $z = \pm 1$ .

Пусть перебор возможностей при данном  $m$  произведен вызовом  $V(N, M, 1)$ . Теперь надо построить секулярный оператор  $\hat{S}$  и волновой оператор  $\hat{\Omega}$ . Они являются суммами вкладов разных порядков  $k$  (вклады в  $\hat{S}$  складываются в массив SS). Вклады данного порядка получаются из соответствующих элементов D1, D2, DP. Но они могут содержать  $\Delta E_i$ , которые фактически являются матрицами  $S$  низших порядков. Эти матрицы рассматриваются в нужном порядке по их позициям. Для каждой позиции рассматриваются все возможные порядки  $i$ . Из  $\hat{S}$  и  $\hat{\Omega}$  извлекаются члены, содержащие этот фактор  $\Delta E_i$ , и домножаются справа на соответствующую матрицу из SS.

Для данного  $m$ , секулярный оператор  $\hat{S}$  представляет собой матрицу  $2 \times 2$ , индекс 1 соответствует  $|m\rangle$ , а 2 —  $| -m \rangle$ . Волновой оператор  $\hat{\Omega}$  является вектором-строкой  $2 \times 1$ , компоненты которого содержат состояния KET(J) с  $J \neq \pm M$ . Собственные значения  $\hat{S}$  представляют собой энергию, а собственные векторы (столбцы  $1 \times 2$ ) — проекции состояний на подпространство  $|\pm m\rangle$ . Полные состояния получаются сложением этой проекции (напомним, верхняя компонента соответствует KET(M), а нижняя — KET(-M)) и результата действия оператора  $\delta$  на нее. Все эти действия выполняет процедура EIGEN.

Эту программу можно использовать и для вычисления поправок к энергиям и волновым функциям тех состояний  $|m\rangle$ , которые не расщепляются в рассматриваемом порядке теории возмущений. Это может быть сделано для любого  $m$ , заданного аналитически. В таком случае нет нужды в переменной  $z$ , и ее можно сразу приравнять 1. Условие попадания в  $| -m \rangle$  никогда не будет выполняться, так что массив D2 останется незаполненным. В D1 будут лежать поправки к энергии, а в DP — к состоянию. Эти выражения содержат  $\Delta E_i$  низших порядков, так что нужен цикл для их подстановки.

**Программа.** Здесь приведены результаты работы программы в 4-м порядке теории возмущений. Вызов процедуры EIGEN закомментирован, потому что выводимые ей формулы слишком длинны.

Вместо этого просто распечатывается секулярная матрица  $SM$  и первый элемент  $\Omega$ ; второй получается из него заменами  $KET(M) \rightarrow KET(-M)$  и  $C(L) \rightarrow C(-L)$ . Для тех  $m$ , для которых расщепление отсутствует, вычисляется только 3-й порядок, так как формулы для поправок 4-го порядка были бы слишком сложными.

```
% ROTATOR IN A WEAK EXTERNAL FIELD ;
% PERTURBATION THEORY TO THE ORDER N ;
% PERTURBATION V=C(1)*EXP(I*FI) +C(-1)*EXP(-I*FI) ;
% +C(2)*EXP(2*I*FI)+C(-2)*EXP(-2*I*FI) ;
SYMBOLIC OPERATOR TIME; TT:=TIME()$  

ARRAY DP(N),D1(N),D2(N),SS(N,2,2); OPERATOR C,DE,KET;
FACTOR KET; ON RAT;
MATRIX S(2,2),O(1,2),SM(2,2),OM(1,2),ST(1,1),
S0(2,2),S1(2,2),S2(2,2),O0(1,2),O1(1,2),V1(2,1);
ON GCD;
C(-1):=C(1)$

PROCEDURE V(K,J,A);
<< DP(N-K):=DP(N-K)+A*KET(Z*J);
IF K<N THEN FOR I:=1:K-1 DO
V(K-I,J,A*DE(I,K)/(J**2-M**2)*2);
IF K>0 THEN FOR L:=-2:2 DO IF L NEQ 0 THEN
IF J+L=M
THEN D1(N-K+1):=D1(N-K+1)+A*C(Z*L)
ELSE IF J+L=-M
THEN D2(N-K+1):=D2(N-K+1)+A*C(Z*L)
ELSE V(K-1,J+L,A*C(Z*L)/(M**2-(J+L)**2)*2)
>>;
V

PROCEDURE EIGEN;
<< EA:=(SM(1,1)+SM(2,2))/2;
ED:=SQRT(DE11**2+4*SM(1,2)*SM(2,1));
WRITE "LEVEL SPLITTING";
WRITE "D=",ED;
E1:=EA+ED/2;
V1:=MAT((-SM(1,2)),(SM(1,1)-E1));
WRITE "ENERGY ",E1;ST:=OM*V1;
WRITE "STATE ",V1(1,1)*KET(MM)+V1(2,1)*KET(-MM)+ST(1,1);
E1:=EA-ED/2;
V1:=MAT((-SM(1,2)),(SM(1,1)-DE1));
```

```
WRITE "ENERGY ",E1;ST:=OM*V1;
WRITE "STATE ",V1(1,1)*KET(MM)+V1(2,1)*KET(-MM)+ST(1,1);
>>;
EIGEN

% SPLITTING DEGENERATE STATES |+-M>;
FOR MM:=1:N DO
<< M:=MM;FOR I:=1:N DO D1(I):=D2(I):=DP(I):=0;
V(N,M,I);
WRITE "STATES +-",MM;WRITE "-----";
SM:=MAT((0,0),(0,0));
OM:=MAT((0,0));
% PERTURBATION ORDER K ;
FOR K:=1:N DO
<< S(1,1):=SUB(Z=1,D1(K));
S(2,2):=SUB(Z=-1,D1(K));
S(2,1):=SUB(Z=1,D2(K));
S(1,2):=SUB(Z=-1,D2(K));
O(1,1):=SUB(Z=1,DP(K));
O(1,2):=SUB(Z=-1,DP(K));
FOR K1:=N-1 STEP -1 UNTIL N-K+1 DO
FOR I1:=1:K1-N+K DO
<< FOR IA:=1:2 DO
<< FOR IB:=1:2 DO
<< S0(IA,IB):=SUB(DE(I1,K1)=0,S(IA,IB));
S1(IA,IB):=DF(S(IA,IB),DE(I1,K1));
S2(IA,IB):=SS(I1,IA,IB)
>>;
O0(1,IA):=SUB(DE(I1,K1)=0,O(1,IA));
O1(1,IA):=DF(O(1,IA),DE(I1,K1))
>>;
S:=S0+S1*S2;O:=O0+O1*S2
>>;
FOR IA:=1:2 DO FOR IB:=1:2 DO
SS(K,IA,IB):=S(IA,IB);
SM:=SM+S;OM:=OM+O
>>;
%EIGEN;
WRITE SM:=SM;WRITE OM(1,1):=OM(1,1);
>>;
```

STATES + -1

$$\begin{aligned}
 \text{SM}(1,1) := & (-45*C(2)^2*C((-2))^2 + 72192*C(2)*C(1)^2*C((-2)) \\
 & - 10080*C(2)*C(1)^2 - 2160*C(2)*C((-2)) \\
 & - 121280*C(1)^4 - 44640*C(1)^2*C((-2)) + 11520*C(1)^2)/8640 \\
 \text{SM}(1,2) := & (406*C(2)^2*C(1)^2 - 9*C(2)^2*C((-2)) + 884*C(2) \\
 & *C(1)^2*C((-2)) - 1024*C(2)*C(1)^2 + 144*C(2) \\
 & - 2048*C(1)^4 + 288*C(1)^2)/144 \\
 \text{SM}(2,1) := & (884*C(2)*C(1)^2*C((-2)) - 9*C(2)*C((-2))^2 - \\
 & 2048*C(1)^4 + 406*C(1)^2*C((-2))^2 - 1024* \\
 & C(1)^2*C((-2)) + 288*C(1)^2 + 144*C((-2)))/144 \\
 \text{SM}(2,2) := & (-45*C(2)^2*C((-2))^2 + 72192*C(2)*C(1)^2*C((-2)) \\
 & - 44640*C(2)*C(1)^2 - 2160*C(2)*C((-2)) \\
 & - 121280*C(1)^4 - 10080*C(1)^2*C((-2)) + 11520*C(1)^2)/8640 \\
 \text{OM}(1,1) := & (\text{KET}(9)*C(2)^4)/46080 + (1823*\text{KET}(8)*C(2)^3*C( \\
 & 1))/6350400 + \text{KET}(7)*C(2)^2*(-1575*C(2) \\
 & + 2438*C(1)^2)/1814400 + \text{KET}(6)*C(2)*C(1) \\
 & *(-2625*C(2)^2 - 2472*C(2) + 800*C(1)^2)/ \\
 & 302400 + \text{KET}(5)*(1225*C(2)^3*C((-2)) - 64992* \\
 & C(2)^2*C(1)^2 + 50400*C(2)^2 - 58240*C(2)* \\
 & C(1)^2 + 4480*C(1)^4)/2419200 + \text{KET}(4)*C(1) \\
 & *(-240571*C(2)^2*C((-2)) + 115500*C(2)^2 + \\
 & 55440*C(2)*C(1)^2 + 92400*C(2) - 16800* \\
 & C(1)^2)/756000 + \text{KET}(3)*(-330*C(2)^2*C(1)^2 \\
 & - 45*C(2)^2*C((-2)) - 5132*C(2)*C(1)^2*C((-2)) \\
 & + 1536*C(2)*C(1)^2 - 2160*C(2) + 1568 \\
 & *C(1)^4 + 1440*C(1)^2)/8640 + \text{KET}(2)*C(1)* \\
 & (-17065*C(2)^2*C((-2)) + 37888*C(2)*C(1)^2 \\
 & + 10368*C(2)*C((-2)) - 5040*C(2) + 64*
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & C(1)^2*C((-2)) - 3040*C(1)^2 - 2880)/4320 \\
 & + \text{KET}(0)*C(1)*(-960*C(2)*C(1)^2 + 5637*C(2) \\
 & *C((-2))^2 + 3120*C(2)*C((-2)) - 760* \\
 & C(1)^2*C((-2)) - 7200*C(1)^2 - 2880*C((-2)) \\
 & + 1080)/540 + \text{KET}((-2))*C(1)*(-21742*C(2) \\
 & *C((-2))^2 + 46700*C(1)^2*C((-2)) - 4800 \\
 & *C(1)^2 + 15225*C((-2))^2 - 9600*C((-2)))/ \\
 & 5400 + \text{KET}((-3))*(-25*C(2)*C((-2))^3 + 3200 \\
 & *C(1)^4 - 11092*C(1)^2*C((-2))^2 + 5200* \\
 & C(1)^2*C((-2)) - 900*C((-2))^2)/14400 + \text{KET} \\
 & ((-4))*C(1)*C((-2))*(380*C(1)^2 - 2035*C((-2) \\
 & )^2 + 1413*C((-2)))/5400 + \text{KET}((-5))* \\
 & C((-2))^2*(-1121*C(1)^2 + 150*C((-2)))/21600 \\
 & + (-967*\text{KET}((-6))*C(1)*C((-2))^3)/63000 + \\
 & (-\text{KET}((-7))*C((-2))^4)/3456
 \end{aligned}$$

STATES + -2

$$\begin{aligned}
 \text{SM}(1,1) := & (-331625*C(2)^2*C((-2))^2 + 768000*C(2)* \\
 & C(1)^2*C((-2)) + 201600*C(2)*C(1)^2 + 504000* \\
 & C(2)*C((-2)) + 51968*C(1)^4 + 201600*C(1)^2*C( \\
 & ((-2)) + 403200*C(1)^2)/1512000 \\
 \text{SM}(1,2) := & (-100*C(2)^3*C((-2)) - 96*C(2)^2*C(1)^2 + 225* \\
 & *C(2)^2 + 500*C(2)*C(1)^2 + 100*C(1)^4)/450 \\
 \text{SM}(2,1) := & (-100*C(2)*C((-2))^3 + 100*C(1)^4 - 96*C(1)^2 \\
 & *C((-2))^2 + 500*C(1)^2*C((-2)) + 225*C((-2))^2)/450 \\
 \text{SM}(2,2) := & (-331625*C(2)^2*C((-2))^2 + 768000*C(2)* \\
 & C(1)^2*C((-2)) + 201600*C(2)*C(1)^2 + 504000* \\
 & C(2)*C((-2)) + 51968*C(1)^4 + 201600*C(1)^2*C( \\
 & ((-2)) + 403200*C(1)^2)/1512000
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
OM(1,1) := & \frac{(KET(10)*C(2)^4)/138240 + (2911*KET(9)*C(2)^3*C(1))/34927200 + KET(8)*C(2)^2*(-675*C(2)^2 + 674*C(1)^2)/1944000 + KET(7)*C(2)*C(1)*(-357*C(2)^2 - 1298*C(2) + 280*C(1)^2)/453600 + KET(6)*(5145*C(2)^3*C((-2)) - 14572*C(2)^2*C(1)^2 + 75600*C(2)^2 - 54720*C(2)*C(1)^2 + 2880*C(1)^4)/7257600 + KET(5)*C(1)*(523655*C(2)^2*C((-2)) + 859950*C(2)^2 + 271896*C(2)*C(1)^2 + 2570400*C(2) - 302400*C(1)^2)/47628000 + KET(4)*(-4550*C(2)^2*C(1)^2 - 16625*C(2)^2*C((-2)) + 27500*C(2)*C(1)^2 + 25600*C(2)*C(1)^2 - 252000*C(2) + 19072*C(1)^4 + 100800*C(1)^2)/1512000 + KET(3)*C(1)*(-24605*C(2)^2*C((-2)) - 12160*C(2)*C(1)^2 - 25600*C(2)*C((-2)) - 50400*C(2) + 640*C(1)^2*C((-2)) - 17472*C(1)^2 - 100800)/252000 + KET(1)*C(1)*(14000*C(2)*C(1)^2 - 30725*C(2)*C((-2))^2 + 22400*C(2)*C((-2)) + 18032*C(1)^2*C((-2)) + 9800*C(1)^2 + 6300*C((-2)) + 63000)/94500 + KET(0)*(128*C(2)*C(1)^2*C((-2)) - 225*C(2)*C((-2))^2 + 176*C(1)^4 - 96*C(1)^2*C((-2))^2 + 384*C(1)^2*C((-2)) + 360*C(1)^2 + 540*C((-2)))/1080 + KET((-1))*C(1)*(-1957*C(2)*C((-2))^2 + 2480*C(1)^2*C((-2)) + 1800*C(1)^2 - 1440*C((-2))^2 + 6300*C((-2)))/8100 + KET((-3))*C(1)*C((-2))*(-80*C(1)^2 + 69*C((-2))^2 - 352*C((-2)))/900
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + KET((-4))*C((-2))^2*(352*C(1)^2 - 75*C((-2))^2)/5400 + (27*KET((-5))*C(1)*C((-2))^3)/700 + (KET((-6))*C((-2))^4)/1152 \\
\text{STATES } & + -3 \\
\hline \\
SM(1,1) := & (3009825*C(2)^2*C((-2))^2 + 12544000*C(2)*C(1)^2*C((-2)) + 12700800*C(2)*C(1)^2 + 74088000*C(2)*C((-2)) + 1292544*C(1)^4 + 12700800*C(1)^2*C((-2)) + 67737600*C(1)^2)/592704000 \\
SM(1,2) := & C(2)^2*(225*C(2) + 518*C(1)^2)/3600 \\
SM(2,1) := & C((-2))^2*(518*C(1)^2 + 225*C((-2)))/3600 \\
SM(2,2) := & (3009825*C(2)^2*C((-2))^2 + 12544000*C(2)*C(1)^2*C((-2)) + 12700800*C(2)*C(1)^2 + 74088000*C(2)*C((-2)) + 1292544*C(1)^4 + 12700800*C(1)^2*C((-2)) + 67737600*C(1)^2)/592704000 \\
OM(1,1) := & (KET(11)*C(2)^4)/322560 + (10027*KET(10)*C(2)^3*C(1))/302702400 + KET(9)*C(2)^2*(-10395*C(2) + 7718*C(1)^2)/39875200 + KET(8)*C(2)*C(1)*(-627*C(2)^2 - 4436*C(2) + 720*C(1)^2)/3326400 + KET(7)*(77385*C(2)^3*C((-2)) - 219712*C(2)^2*C(1)^2 - 1760000*C(2)*C(1)^2 + 70400*C(1)^4)/532224000 + KET(6)*C(1)*(24622157*C(2)^2*C((-2)) + 94303440*C(2)^2 + 24263360*C(2)*C(1)^2 + 535550400*C(2) - 46569600*C(1)^2)/17603308800 + KET(5)*(-15876*C(2)^2*C(1)^2 - 64827*C(2)^2*C((-2)) + 53704*C(2)*C(1)^2*C((-2)) + 100352*C(2)*C(1)^2 - 2963520*C(1)^2)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& 2) + 65728*C(1)^4 + 846720*C(1)^2)/23708160 \\
& + KET(4)*C(1)*(-759675*C(2)^2*C((-2)) - \\
& 2196992*C(2)*C(1)^2 - 4390400*C(2)*C((-2)) \\
& - 23284800*C(2) + 224000*C(1)^2*C((-2)) \\
& - 5788800*C(1)^2 - 84672000)/296352000 + \\
& KET(2)*C(1)*(658560*C(2)*C(1)^2 + 110005*C(2) \\
& *C((-2))^2 + 470400*C(2)*C((-2)) + 173760* \\
& C(1)^2*C((-2)) + 1608768*C(1)^2 - 1058400*C \\
& ((-2)) + 29635200)/74088000 + KET(1)*( \\
& 17000*C(2)*C(1)^2*C((-2)) + 7875*C(2)* \\
& C((-2))^2 + 11072*C(1)^4 + 2700*C(1)^2* \\
& C((-2))^2 + 25600*C(1)^2*C((-2)) + 100800* \\
& C(1)^2 + 252000*C((-2)))/1008000 + KET(0)* \\
& C(1)*(97715*C(2)*C((-2))^2 + 109088*C(1)^2*C( \\
& -2)) + 100800*C(1)^2 + 48600*C((-2))^2 \\
& + 655200*C((-2)))/4536000 + KET((-1)) \\
& *(225*C(2)*C((-2))^3 + 640*C(1)^4 + 3424*C(1)^2 \\
& *C((-2))^2 + 7040*C(1)^2*C((-2)) + 7200* \\
& C((-2))^2)/115200 + KET((-2))*C(1)*C((-2))* \\
& (420*C(1)^2 + 54*C((-2))^2 + 1043*C((-2)))/ \\
& 12600 + (-149*KET((-4))*C(1)*C((-2)))^3/6300
\end{aligned}$$

STATES + -4

$$\begin{aligned}
SM(1,1) & := (2954259*C(2)^2*C((-2))^2 + 16934400*C(2)* \\
& C(1)^2*C((-2)) + 34927200*C(2)*C(1)^2 + \\
& 366735600*C(2)*C((-2)) + 1918400*C(1)^4 + \\
& 34927200*C(1)^2*C((-2)) + 349272000*C(1)^2)/5501034000
\end{aligned}$$

$$SM(1,2) := C(2)^4/288$$

$$SM(2,1) := C((-2))^4/288$$

$$\begin{aligned}
SM(2,2) & := (2954259*C(2)^2*C((-2))^2 + 16934400*C(2)* \\
& C(1)^2*C((-2)) + 34927200*C(2)*C(1)^2 + \\
& 366735600*C(2)*C((-2)) + 1918400*C(1)^4 + \\
& 34927200*C(1)^2*C((-2)) + 349272000*C(1)^2)/5501034000 \\
OM(1,1) & := (KET(12)*C(2)^4)/645120 + (17909*KET(11)* \\
& C(2)^3*C(1))/1135134000 + KET(10)*C(2)^2*( \\
& -19305*C(2) + 11438*C(1)^2)/194594400 + \\
& KET(9)*C(2)*C(1)*(-2145*C(2)^2 - 23646*C(2) \\
& + 3080*C(1)^2)/32432400 + KET(8)*(63921* \\
& C(2)^3*C((-2)) - 165340*C(2)^2*C(1)^2 + \\
& 5405400*C(2)^2 - 2256800*C(2)*C(1)^2 + \\
& 72800*C(1)^4)/1297296000 + KET(7)*C(1)*( \\
& 17271099*C(2)^2*C((-2)) + 108301050*C(2)^2 \\
& + 24151400*C(2)*C(1)^2 + 940539600*C(2) \\
& - 64864800*C(1)^2)/48162114000 + KET(6)*( \\
& -50490*C(2)^2*C(1)^2 - 243243*C(2)^2*C((-2) \\
& )) + 131220*C(2)*C(1)^2*C((-2)) + 345600*C \\
& (2)*C(1)^2 - 22453200*C(2) + 211520*C(1)^4 \\
& + 4989600*C(1)^2)/224532000 + KET(5)*C(1) \\
& *(-1424577*C(2)^2*C((-2)) - 12177600*C(2)* \\
& C(1)^2 - 22579200*C(2)*C((-2)) - 227026800* \\
& C(2) + 1646400*C(1)^2*C((-2)) - 44413600* \\
& C(1)^2 - 1222452000)/5501034000 + KET(3)*C( \\
& 1)*(399168*C(2)*C(1)^2 - 114597*C(2)*C((-2))^2 \\
& - 152768*C(1)^2*C((-2)) + 1853280*C(1)^2 \\
& - 3492720*C((-2)) + 62868960)/220041360 \\
& + KET(2)*(9996*C(2)*C(1)^2*C((-2)) + 7203*C( \\
& 2)*C((-2))^2 + 10944*C(1)^4 + 490*C(1)^2*
\end{aligned}$$

```

 $C((-2))^2 + 25088*C(1)^2*C((-2)) + 211680*$ 
 $C(1)^2 + 740880*C((-2))/4445280 + KET(1)*$ 
 $C(1)*(276507*C(2)*C((-2))^2 + 612520*C(1)^2*C($ 
 $(-2)) + 1058400*C(1)^2 + 110250*C((-2))^2$ 
 $+ 10054800*C((-2))/166698000 + KET($ 
 $0)*(1155*C(2)*C((-2))^3 + 1440*C(1)^4 + 3884*$ 
 $C(1)^2*C((-2))^2 + 24480*C(1)^2*C((-2)) +$ 
 $37800*C((-2))^2/1814400 + KET((-1))*C(1)*$ 
 $*C((-2))*(600*C(1)^2 + 125*C((-2))^2 + 2454*C($ 
 $(-2))/226800 + KET((-2))*C((-2))^2*(1838*$ 
 $C(1)^2 + 1575*C((-2))/453600 + (2161*KET($ 
 $(-3))*C(1)*C((-2))^3)/529200$ 
CLEAR M; N:=3$;
FOR I:=1:N DO D1(I):=D2(I):=DP(I):=0;
FOR ALL X,Y LET DE(X,Y)=DE(X);
Z:=1$;
V(N,M,1)$;
FOR K:=1:N DO
<< WRITE DE(K):=D1(K); WRITE DP(K):=DP(K) >>;
DE(1) := 0;
DP(1) := (KET(M-2)*C((-2))/(2*M-2) + (2*KET(M-1)
    *C(1))/(2*M-1) + (-KET(M+2)*C(2))/(2*
    M+2) + (-2*KET(M+1)*C(1))/(2*M+1));
DE(2) := (4*C(2)*C((-2))*M^2 - C(2)*C((-2)) + 4*C(1)^2*M^2
    - 4*C(1)^2)/(4*M^4 - 5*M^2 + 1);
DP(2) := (KET(M-4)*C((-2))^2)/(8*M^2 - 24*M + 16) + KET
    (M-3)*C(1)*C((-2))*(6*M-5)/(12*M^3 - 36*M^2
    + 33*M-9) + (KET(M-2)*C(1)^2)/(2*M^2 - 3
    *M+1) + KET(M-1)*C(1)*C((-2))*(-2*M
    + 5)/(4*M^3 - 4*M^2 - M+1) + (KET(M+4)*
    C(2)^2)/(8*M^2 + 24*M + 16) + KET(M+3)*C(2)
    *C(1)*(6*M+5)/(12*M^3 + 36*M^2 + 33*M+9) +

```

```

 $KET(M+2)*C(1)^2)/(2*M^2 + 3*M + 1) + KET(M$ 
 $+ 1)*C(2)*C(1)*(-2*M - 5)/(4*M^4 + 4*M^3 - M^2 - 1)$ 
DE(3) := 6*C(1)^2*(C(2) + C((-2)))/(4*M^4 - 5*M^2 + 1);
DP(3) := (KET(M-6)*C((-2))^3)/(48*M^3 - 288*M^2 + 528*M
    - 288) + KET(M-5)*C(1)*C((-2))^2*(60*M^2
    - 160*M + 89)/(480*M^5 - 3600*M^4 + 10200*M^3
    - 13500*M^2 + 8220*M - 1800) + KET(M-4)*
    C(1)^2*C((-2))*(6*M-7)/(24*M^4 - 120*M^3 + 210*
    M^2 - 150*M + 36) + KET(M-3)*C(1)*(16*
    C(1)^2*M^2 - 24*C(1)^2*M - 16*C(1)^2 - 12*
    C((-2))^2*M^2 + 72*C((-2))^2*M - 81*C((-2))^2)/
    (96*M^5 - 432*M^4 + 600*M^3 - 180*M^2 - 156*M + 72
    ) + KET(M-2)*C((-2))*(24*C(2)*C((-2))*M^3 -
    36*C(2)*C((-2))*M^2 - 6*C(2)*C((-2))*M + 9*C(2)*
    C((-2)) + 352*C(1)^2*M^2 - 1104*C(1)^2*M
    + 800*C(1)^2)/(384*M^6 - 2112*M^5 + 4128*M^4
    - 3120*M^3 + 96*M^2 + 912*M - 288) + 2*KET(M
    - 1)*C(1)*(8*C(2)*C((-2))*M^2 + 48*C(2)*C((-2))
    )*M - 50*C(2)*C((-2)) + 12*C(1)^3*M^3 - 21*
    C(1)^2*M - 9*C(1)^2)/(48*M^6 - 96*M^5 - 24*M^4
    + 120*M^3 - 33*M^2 - 24*M + 9) + (-KET(M
    + 6)*C(2)^3)/(48*M^3 + 288*M^2 + 528*M + 228)
    + KET(M+5)*C(2)^3*C(1)*(-60*M^2 - 160*M -
    89)/(480*M^5 + 3600*M^4 + 10200*M^3 + 13500*M^2
    + 8220*M + 1800) + KET(M+4)*C(2)*
    C(1)^2*(-6*M-7)/(24*M^4 + 120*M^3 + 210*M^2 +
    150*M + 36) + KET(M+3)*C(1)*(12*C(2)^2*M^2
    + 72*C(2)^2*M + 81*C(2)^2*M^2 - 24

```

$$\begin{aligned}
 & *C(1)^2 *M + 16*C(1)^2 / (96*M^5 + 432*M^4 + 600* \\
 & M^3 + 180*M^2 - 156*M - 72) + KET(M+2)*C(2) \\
 & *(-24*C(2)*C((-2))*M^3 - 36*C(2)*C((-2))*M^2 \\
 & + 6*C(2)*C((-2))*M + 9*C(2)*C((-2)) + 352* \\
 & C(1)^2 *M^2 + 1104*C(1)^2 *M + 800*C(1)^2) / (384*M^6 \\
 & + 2112*M^5 + 4128*M^4 + 3120*M^3 + 96*M^2 - \\
 & 912*M - 288) + 2*KET(M+1)*C(1)*(8*C(2)*C( \\
 & (-2))^2 - 48*C(2)*C((-2))*M - 50*C(2)*C( \\
 & (-2)) - 12*C(1)^2 *M^3 + 21*C(1)^2 *M - 9*C(1)^2) / \\
 & (48*M^6 + 96*M^5 - 24*M^4 - 120*M^3 - 33*M^2 + 24*M + 9)
 \end{aligned}$$

WRITE "TIME ", TIME() - TT, " MSEC";

TIME 797210 MSEC

**Заключение.** Полученные результаты можно проверить в простом случае  $c_2 = c_{-2} = 0$ . Тогда четное и нечетное подпространства независимы, и столбцы  $(1, 1)$  и  $(1, -1)$  должны быть собственными векторами секулярной матрицы. Расщепление состояний  $|\pm 1\rangle$  возникает во 2-м, а  $|\pm 2\rangle$  — в 4-м порядке теории возмущений. Уровни  $|\pm 3\rangle$  и  $|\pm 4\rangle$  остаются нерасщепленными, поэтому соответствующие секулярные матрицы сводятся к единичной.

## 8. РАДИАЦИОННЫЕ ПЕРЕХОДЫ В ЧАРМОНИИ

**Введение.** Наш последний пример относится к физике элементарных частиц. Однако для его понимания не требуется ничего, кроме элементарной квантовой механики. Речь идет об угловых распределениях и корреляциях в процессах рождения и распада состояний чармония в  $e^+e^-$  — аннигиляции, в частности, в каскадах радиационных переходов. Относительно радиационных переходов см. гл. 5 книги [3] или гл. 16 учебника [2]. Эти вопросы обсуждались в большом числе статей, в основном мимоходом, наряду с гораздо более сложным динамическим рассмотрением механизмов этих процессов. Поэтому довольно трудно дать полный набор ссылок. Во избежание возможных пропусков я вообще не привожу ссылок; все приводимые в этом параграфе результаты элементарны и известны в литературе.

**Теория.** Волновая функция частицы со спином 1 является век-

тором. При повороте на угол  $\delta\vec{\phi}$  она преобразуется как  $e_i \rightarrow e_i + i(s_j)_{ik}\delta\phi_j e_k = e_i + \epsilon_{ijk}\delta\phi_j e_k$ , откуда операторы проекций спина даются матрицами  $(s_j)_{ik} = -i\epsilon_{ijk}$ . Если проекция спина на ось  $z$  равна 0, то вектор поляризации  $\vec{e}_0 = \vec{e}_z$  (так как он не меняется при вращениях вокруг оси  $z$ ). В случае проекций  $\pm 1$ , векторы поляризации получаются действием матриц  $s_{\pm}$  и равны  $\vec{e}_{\pm} = (\pm \vec{e}_x + i\vec{e}_y)/\sqrt{2}$ . Эти векторы удовлетворяют соотношению полноты  $\sum e_i e_j^* = \delta_{ij}$ . Если нас интересуют состояния с проекциями спина 0 или  $\pm 1$  на произвольное направление  $\vec{n}$ , то  $\sum e_i e_j^* = n_i n_j$  или  $\delta_{ij} - n_i n_j$ , соответственно.

В накопителях со встречными  $e^+e^-$  — пучками сталкиваются ультраквантитативистские электрон и позитрон, образуя покоящийся виртуальный фотон  $\gamma^*$ . Спиральность ультраквантитативистских фермионов сохраняется в электромагнитных взаимодействиях. Поэтому спиральности аннигилирующих  $e^+$  и  $e^-$  должны быть противоположны, т. е. проекции спина на ось пучков  $\vec{n}$  одинаковы и равны  $\pm 1/2$ . Проекция орбитального момента на направление движения  $\vec{n}$  равна 0. Поэтому проекция спина  $\gamma^*$  на  $\vec{n}$  равна  $\pm 1$ . Если  $e^+$  и  $e^-$  не поляризованы, то  $\gamma^*$  с проекциями спина  $\pm 1$  рождаются с равной вероятностью. Поэтому нужно усреднять по направлениям вектора поляризации  $\vec{e}$  по формуле  $e_i e_j^* = (\delta_{ij} - n_i n_j)/2$ .

Очень легко также рассмотреть случай частичной или полной поперечной поляризации  $e^+$  и  $e^-$ . При полной поляризации  $\gamma^*$  линейно поляризован, вектор  $\vec{e}$  направлен по биссектриссе  $\vec{e}_1$  между направлениями поляризации  $\vec{\xi}_+$  и  $\vec{\xi}_-$ . Поэтому все дальнейшие вычисления даже упрощаются: не нужно усреднять по  $\vec{e}$ . При частичной поляризации

$$\overline{e_i e_j^*} = \frac{1 + \xi_+ \xi_-}{2} e_{1i} e_{1j} + \frac{1 - \xi_+ \xi_-}{2} e_{2i} e_{2j}, \quad \vec{e}_2 = \vec{n} \times \vec{e}_1.$$

Если  $\gamma^*$  распадается на 2 бесспиновых частицы (например,  $\pi^+ \pi^-$ ), разлетающихся с импульсом  $\vec{p}'$ , то матричный элемент распада  $M \sim \phi_1 \phi_2 \vec{p}' \cdot \vec{e}$ , где  $\phi_1, \phi_2$  — волновые функции рождающихся частиц,  $\vec{e}$  — волновая функция  $\gamma^*$ . Усредняя  $|M|^2$  по  $\vec{e}$ , мы получим угловое распределение  $1 - (\vec{n} \cdot \vec{n}')^2 = \sin^2 \theta$ , где  $\vec{n}'$  — ось распада. Иными словами, проекция спина  $\gamma^*$  на ось распада  $\vec{n}'$  должна быть равна 0, т. е. вектор поляризации  $\vec{e}$  должен быть равен  $\vec{n}'$ . Вероятность этого равна  $(\vec{e} \cdot \vec{n}')^2 \sim 1 - (\vec{n} \cdot \vec{n}')^2$ .

В случае распада  $\gamma^*$  на 2 ультраквантитативистских фермиона, проекция спина  $\gamma^*$  на  $\vec{n}'$  должна быть равна  $\pm 1$ . Суммируя вероят-

ность по этим двум возможностям и усредняя по возможным направлениям  $e$ , мы получим угловое распределение

$$(\delta_{ij} - n_i n_j)(\delta_{ij} - n'_i n'_j) = 1 + (\vec{n} \cdot \vec{n}')^2 = 1 + \cos^2 \theta.$$

Оно относится к процессу  $e^+ e^- \rightarrow \mu^+ \mu^-$ , а также  $e^+ e^- \rightarrow q\bar{q}$ , где кварк и антакварк порождают адронные струи.

После рассмотрения этих простых примеров, перейдем к процессам рождения и распада состояний чармония. Это — связанные состояния тяжелого кварка  $c$  и его антакварка  $\bar{c}$ . Спины кварка и антакварка могут сложиться в 0 или 1; орбитальный момент  $l=0, 1, 2, \dots$ . Четность равна произведению внутренних четностей на орбитальную:  $P=P_c P_{\bar{c}} (-1)^l$ ; поскольку внутренние четности фермиона и антифермиона противоположны,  $P_c = -P_{\bar{c}}$ , то  $P=(-1)^{l+s}$ . Зарядовая четность  $C$  определяется так. При полной перестановке  $c$  и  $\bar{c}$  волновая функция меняет знак, так как это фермионы. Перестановка координат дает множитель  $(-1)^l$ . Перестановка спинов дает  $(-1)^{s+1}$ , так как спиновая волновая функция с  $s=1$  симметрична, а с  $s=0$  — антисимметрична (см. п. 5, сложение моментов  $1/2$  и  $1/2$ ). Перестановка зарядов дает  $C$ . Отсюда  $(-1)^{l+s+1} C = -1$ , т. е. окончательно  $C = (-1)^{l+s}$ . Спин  $s$  складывается с орбитальным моментом  $l$  в полный момент  $j$ . Итак, при  $s=0$  и разных  $l$  получаются состояния  $j^{PC}=0^{-+}, 1^{+-}, 2^{-+} \dots$  При  $s=1$  это  $1^{--}; 0^{++}, 1^{++}, 2^{++}; 1^{--}, 2^{--}, 3^{--}; \dots$

При данных  $s, l$  и  $j$  состояния нумеруются главным квантовым числом  $n$ . Состояния с одинаковыми  $n$  и  $l$  имеют близкие энергии, отличающиеся только из-за относительно слабого спин-орбитального и спин-спинового взаимодействий. Состояния с наименьшими энергиями имеют  $n=1$  и следовательно  $l=0$ . При  $s=0$  — это  $\eta_c(0^{-+})$ , а при  $s=1$  — это  $\psi(1^{--})$ . Их орбитальные возбуждения с  $n=2$   $\eta'_c$  и  $\psi'$  лежат существенно выше. Уровни с  $n=2, l=1$  в кулоновском потенциале имели бы такую же энергию. В чармонии потенциал некулоновский, и эти уровни лежат существенно ниже. При  $s=0$  это безымянное состояние  $1^{+-}$ ; при  $s=1$  это  $0^{++}, 1^{++}, 2^{++}$ , называемые  $\chi_0, \chi_1, \chi_2$ . Низшие уровни чармония изображены на рис. 2.

Образующийся в  $e^+ e^-$ -аннигиляции виртуальный фотон  $\gamma^*$  ( $1^{--}$ ) может перейти в  $\psi$  или  $\psi'$ , если имеет подходящую энергию. Состояния с  $C=+1$  могут получаться из них в результате радиационных переходов. В переходах  $\psi' \rightarrow \chi_0, \chi_1, \chi_2 + \gamma$ , а также

$\chi_0, \chi_1, \chi_2 \rightarrow \psi + \gamma$ , фотон уносит четность  $P_\gamma = -1$ ; минимальный уносимый момент  $j_\gamma = 1$  (фотон не может иметь  $j=0$ ). Переходы с излучением фотона в состоянии  $1^-$  называются электрическими дипольными (E1). В случае  $\chi_1$  и  $\chi_2$  возможны и большие значения  $j$ , т. е. высшие мультипольности. Они подавлены степенями малого параметра  $(ka)^2 \sim (v/c)^2$ , где  $k$  — импульс фотона,  $a$  — радиус чармония,  $v$  — скорость движения в нем кварков. В переходах  $\psi, \psi' \rightarrow \eta_c, \eta'_c + \gamma$  излучается фотон  $1^+$ . Это — магнитные дипольные (M1) переходы. Энерговыделения в переходах много меньше массы чармония, поэтому можно считать образующиеся состояния покоящимися. Состояние  $1^{+-}$  не рождается на встречных пучках ни прямо, ни в результате радиационного перехода.

Матричные элементы электрических дипольных переходов  $\psi' \rightarrow \chi_0, \chi_1, \chi_2 + \gamma$  имеют вид

$$M_0 \sim \chi^* \vec{e}^* \cdot \vec{\Psi}', \quad M_1 \sim \epsilon_{ijk} \chi_i^* e_j^* \Psi_k', \quad M_2 \sim \chi_i^* e_i^* \Psi_i'. \quad (1)$$

Это единственные скаляры, которые можно построить из векторных волновых функций  $\vec{\Psi}'$  и фотона  $\vec{e}$ , а также скалярной волновой функции  $\chi_0$ , псевдовекторной  $\chi_1$  или тензорной  $\chi_2$ . Правда, в случае  $\chi_1$  и  $\chi_2$  можно построить дополнительные скаляры, если использовать  $\vec{k}$ . Эти высшие члены разложения по  $k$ , т. е. реально по безразмерному параметру  $ka$ , соответствуют высшим мультипольностям. Мы ограничимся главным E1 переходом.

Аналогично, матричные элементы E1-переходов  $\chi_0, \chi_1, \chi_2 \rightarrow \psi + \gamma$  имеют вид

$$M_0 \sim \chi \vec{e}^* \cdot \vec{\Phi}, \quad M_1 \sim \epsilon_{ijk} \chi_i^* e_j^* \Phi_k^*, \quad M_2 \sim \chi_i^* e_i^* \Phi_i^*. \quad (2)$$

Вероятность распада  $\psi' \rightarrow \chi_0 + \gamma$  пропорциональна  $e_i e_j^* \Phi_i^* \Phi_j^*$ . Суммируя по поляризациям фотона ( $\sum e_i e_j^* = \delta_{ij} - l_i l_j$ , где  $\vec{l}$  — направление вылета фотона) и усредняя по поляризациям  $\psi' (\Phi_i \Phi_j^* = (\delta_{ij} - n_i n_j)/2)$ , получим угловое распределение фотона

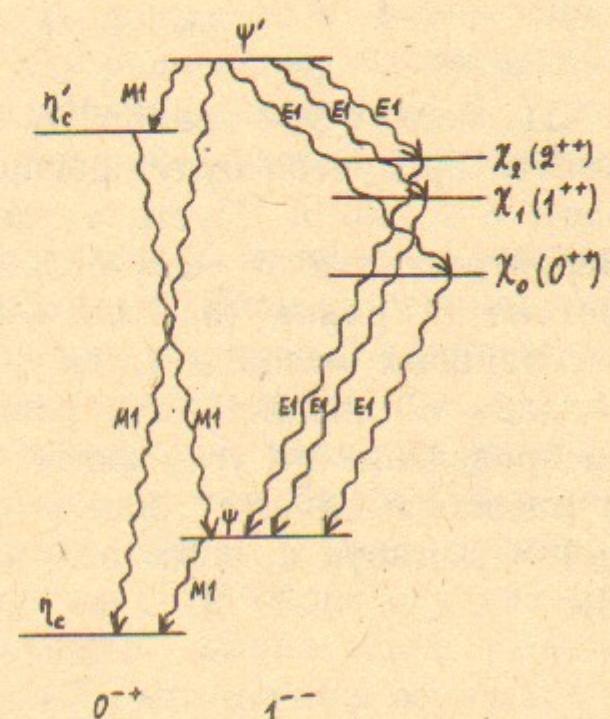


Рис. 2.

$$(\delta_{ij} - l_i l_j)(\delta_{ij} - n_i n_j) = 1 + (\vec{l} \cdot \vec{n})^2.$$

Поскольку  $\chi_0$  — скаляр, на что бы он ни распался, направления вылета продуктов будут распределены изотропно и не скоррелированы с  $\vec{l}$  или  $\vec{n}$ . Пусть  $\chi_0$  переходит в  $\psi$  с излучением фотона. Вероятность этого  $\sim e^i e_j^* \psi_i \psi_j$ , просуммированная по поляризациям фотона  $\vec{e}'$ , равна  $(\delta_{ij} - l_i l_j) \psi_i^* \psi_j$ . Если  $\psi$  затем распался на пару бесспиновых мезонов ( $\pi^+ \pi^-$ ,  $K\bar{K}$ ), то проекция спина  $\psi$  на ось распада  $\vec{n}'$  должна быть равна 0, т. е.  $\vec{\Phi} = \vec{n}'$ . Отсюда получаем распределение по углу фотон — ось распада:  $1 - (\vec{l}' \cdot \vec{n}')^2$ . Если же  $\psi$  распался на  $e^+ e^-$  или  $\mu^+ \mu^-$ , проекция спина  $\psi$  на  $\vec{n}'$  равна  $\pm 1$ . Суммируя по этим возможностям, имеем угловое распределение

$$(\delta_{ij} - l_i l_j)(\delta_{ij} - n_i n_j) = 1 + (\vec{l}' \cdot \vec{n}')^2.$$

Матричные элементы  $M1$  переходов  $\psi, \psi' \rightarrow \eta_c, \eta'_c + \gamma$  имеют вид

$$M \sim \eta_c^* \epsilon_{ijk} \psi_i e_j^* k_k \sim \eta_c^* \vec{\Phi} \cdot (\vec{e} \times \vec{l}).$$

При суммировании по двум поляризациям фотона, перпендикулярным к  $\vec{l}$ , векторы  $\vec{e}$  и  $\vec{e} \times \vec{l}$  совершенно равноправны, т. е.

$$\sum (\vec{e} \times \vec{l})_i (\vec{e} \times \vec{l})_j = \delta_{ij} - l_i l_j.$$

Поэтому угловое распределение фотонов здесь такое же, как в E1-переходе  $\psi' \rightarrow \chi_0 + \gamma$ .

Угловые распределения и корреляции при радиационных переходах в состояния  $\chi_1$  и  $\chi_2$  более сложные. Их мы будем вычислять на REDUCEe. При этом мы будем использовать пакет процедур VPACK. Чтобы не разбивать изложения, его описание будет приведено в конце этого параграфа. Сейчас нам важно только то, что процедура AVER(N,A) усредняет A по направлениям вектора N; процедура TRANS(N,M,A) усредняет A по направлениям вектора N, поперечным к вектору M; E3(L,M,N) обозначает единичный антисимметричный тензор  $\epsilon_{lmn}$  в 3-мерном пространстве. При получении угловых распределений и корреляций мы не будем следить за общими множителями, поэтому нет нужды отличать усреднения и суммирования по поляризациям. Команды REDUCEa MASS P=M; MSHELL P; эквивалентны LET P.P=M\*\*2; (такая терминология происходит от векторов энергии-импульса в теории относительности, квадрат которых равен квадрату массы; говорят, что они лежат на массовой поверхности  $p^2 = m^2$ ).

**Рождение и распады  $\chi_1$ .** Вероятность рождения  $\chi_1$  равна квадрату модуля матричного элемента (1), усредненному по поляризациям  $\psi'$  и просуммированному по поляризациям фотона  $\vec{e}$ . Проделав по поляризациям  $\chi_1$ , мы получим угловое распределение фотона.

Если  $\chi_1$  распадается на два бесспиновых мезона, то вектор поляризации  $\chi_1$  направлен по оси распада  $\vec{n}'$ . Если  $\chi_1$  распадается на барион и антибарион, то по сохранению кварковой спиральности они должны иметь противоположные спиральности, т. е. одинаковые проекции спина на  $\vec{n}'$ . Это утверждение является строгим только в пределе большой массы чармония; тем более интересна его экспериментальная проверка. В этом случае  $\vec{\chi}$  надо суммировать по направлениям, перпендикулярным  $\vec{n}'$ . В обоих случаях мы получаем корреляцию ось  $e^+ e^-$ -пучков  $\vec{n}$  — направление вылета фотона  $\vec{l}$  — ось распада  $\vec{n}'$ . Усреднив по  $\vec{n}'$ , мы должны вернуться к знакомому угловому распределению фотонов в процессе  $\psi' \rightarrow \chi_1 + \gamma$ , которое, конечно, не зависит от того, на что потом распался  $\chi_1$ . Усреднив по  $\vec{l}$ , мы получим угловое распределение продуктов распада; усреднив по  $\vec{n}$ , — распределение по углу между направлением вылета фотона и осью распада.

Пусть теперь  $\chi_1$  переходит в  $\psi$  с излучением фотона. Матричный элемент всего процесса  $\psi' \rightarrow \chi_1 + \gamma \rightarrow \psi + \gamma + \gamma$  равен произведению матричных элементов  $\psi' \rightarrow \chi_1 + \gamma$  и  $\chi_1 \rightarrow \psi + \gamma$ , просуммированному по поляризациям  $\chi_1$ . Вероятность получается при возведении его в квадрат, усреднении по поляризациям  $\psi'$ , суммировании по поляризациям  $\gamma$  и  $\gamma'$ . Если просуммировать по поляризациям  $\psi$ , то мы получим корреляцию ось пучков  $\vec{n}$  — фотон  $\vec{l}$  — фотон  $\vec{l}'$ . От нее опять можно вернуться к угловому распределению  $\vec{n} —  $\vec{l}$ ; более интересно найти угловое распределение второго фотона  $\vec{n} —  $\vec{l}'$  и распределение по углу между фотонами  $\vec{l} —  $\vec{l}'$ .$$$

Можно не суммировать по поляризациям  $\psi$ , а рассмотреть его конкретные распады. В случае  $\psi \rightarrow \pi^+ \pi^-$  ( $K\bar{K}$ ),  $\vec{\Phi} = \vec{n}'$  (ось распада); при  $\psi \rightarrow e^+ e^-$  ( $\mu^+ \mu^-$ ), нужно суммировать по направлениям  $\vec{\Phi}$ , перпендикулярным  $\vec{n}'$ . В обоих случаях мы получаем корреляцию ось пучков  $\vec{n}$  — фотон  $\vec{l}$  — фотон  $\vec{l}'$  — ось распада  $\vec{n}'$ . Из нее можно получить множество частных корреляций и угловых распределений, усредняя по некоторым из векторов. Усреднение по  $\vec{n}'$  возвращает нас к уже известным результатам. В программе вычислена только наиболее интересная величина — угловое распределение продуктов распада  $\psi$ .

VECDIM 3; IN VPACKS

MASS N=1,F=1,L=1,E=1,P=1,H=1,L1=1,E1=1,N1=1,F1=1;  
MSHELL N,F,L,E,P,H,L1,E1,N1,F1;

% PSI'→HII + PHOTON ;  
% ----- ;  
% N-BEAM DIRECTION ;  
% F-PSI' POLARIZATION ;  
% L-PHOTON DIRECTION ;  
% E-PHOTON POLARIZATION ;  
% H-HII POLARIZATION ;  
M:=E3(H,E,F)\$ MM:=M\*\*2\$  
MM:=TRANS(E,L,MM)\$ MM:=TRANS(F,N,MM)\$  
WRITE "DISTRIBUTION N-L ",NUM(AVER(H,MM));

DISTRIBUTION N-L -L.N<sup>2</sup>+3

% PSI'→HII + PHOTON HII→MESON+MESON ;  
% ----- ;  
% N1-DECAY AXIS ;  
MM1:=SUB(H=N1,MM)\$  
WRITE "CORRELATION N-L-N1 ",NUM(MM1);  
CORRELATION N-L-N1 -L.N<sup>2</sup>+2\*L.N\*L.N1\*N.N1+1  
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,MM1));  
DISTRIBUTION N-N1 N.N1<sup>2</sup>+1  
WRITE "DISTRIBUTION L-N1 ",NUM(AVER(N,MM1));  
DISTRIBUTION L-N1 L.N1<sup>2</sup>+1

% PSI'→HII + PHOTON HII→BARYON+ANTIBARYON ;  
% ----- ;  
MM:=TRANS(H,N1,MM)\$  
WRITE "CORRELATION N-L-N1 ",NUM(MM);  
CORRELATION N-L-N1 -L.N\*L.N1\*N.N1+1  
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,MM));  
DISTRIBUTION N-N1 -N.N1<sup>2</sup>+3  
WRITE "DISTRIBUTION L-N1 ",NUM(AVER(N,MM));  
DISTRIBUTION L-N1 -L.N1<sup>2</sup>+3  
% PSI'→HII + PHOTON HII→PSI+PHOTON';  
% ----- ;

% LI-PHOTON DIRECTION ;  
% E1-PHOTON POLARIZATION ;  
% F1-PSI POLARIZATION ;  
M:=M+E3(H,E1,F1)\$ M:=AVER(H,M)\$ MM:=M\*\*2\$ CLEAR M;  
MM:=TRANS(E,L,MM)\$ MM:=TRANS(E1,L1,MM)\$  
MM:=TRANS(F,N,MM)\$ MM1:=AVER(F1,MM)\$  
WRITE "CORRELATION N-L-L1 ",NUM(MM1);  
CORRELATION N-L-L1 -LN<sup>2</sup>+L.N\*L.L1\*N.L1+2  
WRITE "DISTRIBUTION N-L1 ",NUM(AVER(L,MM1));  
DISTRIBUTION N-L1 N.L1<sup>2</sup>+5  
WRITE "DISTRIBUTION L-L1 ",NUM(AVER(N,MM1));  
DISTRIBUTION L-L1 L.L1<sup>2</sup>+5  
% PSI'→HII + PHOTON HII→PSI+PHOTON'PSI→PI+PI-;  
% ----- ;  
% N1-DECAY AXIS ;  
MM1:=SUB(F1=N1,MM)\$  
WRITE "CORRELATION N-L-L1-N1 ",NUM(MM1);  
CORRELATION N-L-L1-N1 -2\*L.N\*L.N1\*N.N1-L.N1<sup>2</sup>\*  
N.L1<sup>2</sup>+L.N1<sup>2</sup>+2\*L.N1\*L.L1\*N.N1\*N.L1-2\*L.N1\*L.L1\*N1.  
L1-L.L1<sup>2</sup>\*N.N1<sup>2</sup>+L.L1<sup>2</sup>+N.N1<sup>2</sup>-2\*N.N1\*N.L1\*N1.L1+  
N.L1<sup>2</sup>+2\*N1.L1<sup>2</sup>  
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,AVER(L1,MM1)));  
DISTRIBUTION N-N1 -N.N1<sup>2</sup>+3  
% PSI'→HII + PHOTON HII→PSI+PHOTON'PSI→MU+MU-;  
% ----- ;  
MM:=TRANS(F1,N1,MM)\$  
WRITE "CORRELATION N-L-L1-N1 ",NUM(MM);  
CORRELATION N-L-L1-N1 -2\*L.N<sup>2</sup>+2\*L.N\*L.N1\*N.N1+2\*L  
.N\*L.L1\*N.L1+L.N1<sup>2</sup>\*N.L1<sup>2</sup>-L.N1<sup>2</sup>-2\*L.N1\*L.L1\*N.N1\*N  
.L1+2\*L.N1\*L.L1\*N1.L1+L.L1<sup>2</sup>\*N.N1<sup>2</sup>-L.L1<sup>2</sup>-  
N.N1<sup>2</sup>+2\*N.N1\*N.L1\*N1.L1-N.L1<sup>2</sup>-2\*N1.L1<sup>2</sup>+4  
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,AVER(L1,MM1)));  
DISTRIBUTION N-N1 N.N1<sup>2</sup>+5

**Рождение и распады  $\chi_2$ .**  $\chi_2$  имеет спин 2, и его волновая функция является тензором. Нам необходимо сначала изучить ее свойства.

Система из двух частиц со спином 1, имеющих волновые функции  $\vec{e}_1$  и  $\vec{e}_2$ , описывается тензорной волновой функцией  $t_{ij} = e_{1i}e_{2j}$ . Ее можно разложить на симметричную и антисимметричную части  $(t_{ij} + t_{ji})/2$  и  $(t_{ij} - t_{ji})/2$ . Антисимметричная часть  $t_{ij}^a = \epsilon_{ijk}e_k/\sqrt{2}$ , где  $e_k = \epsilon_{ijk}t_{ij}/\sqrt{2}$ . Симметричную часть можно дополнительно разложить на часть, пропорциональную  $\delta_{ij}$ ,  $t_{kk}\delta_{ij}/3$ , и бесследовую часть  $(t_{ij} + t_{ji})/2 - t_{kk}\delta_{ij}/3$ . Единичная часть содержит скалярное произведение  $\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2$ , и имеет одну независимую компоненту. Антисимметричная часть содержит векторное произведение  $\vec{e}_1 \times \vec{e}_2$ , и содержит 3 независимых компоненты. Симметричная бесследовая часть содержит 5 независимых компонент (симметричная матрица  $3 \times 3$  имеет их 6, минус одно условие равенства следа нулю). Итого мы имеем  $1+3+5=3\times 3$  степеней свободы, как и следовало ожидать.

Все это есть сложение моментов 1 и 1, изложенное на другом языке. Волновая функция  $\delta_{ij}/\sqrt{3}$  относится к состоянию с суммарным спином 0; 3 функции  $\epsilon_{ijk}e_k/\sqrt{2}$  — к спину 1; 5 оставшихся — к спину 2: для  $m=\pm 2$   $t_{ij} = e_{\pm i}e_{\pm j}$ , для  $m=\pm 1$

$$t_{ij} = \frac{e_{0i}e_{-i} + e_{+i}e_{0j}}{\sqrt{2}},$$

для  $m=0$

$$t_{ij} = \frac{e_{+i}e_{-i} + e_{-i}e_{+j} + 2e_{0i}e_{0j}}{\sqrt{6}} = \frac{-\delta_{ij} + 3e_{0i}e_{0j}}{\sqrt{6}}$$

(это единственный симметричный бесследовый тензор, который можно построить из  $\delta_{ij}$  и  $\vec{e}_0$ ; коэффициент следует из нормировки  $t_{ij}^*t_{ij}=1$ ). Посмотрев на распечатку в § 5, мы легко увидим, что там написано то же самое.

Должно выполняться условие полноты

$$\sum_{j,m} |j,m\rangle \langle j,m| = 1, \quad \text{или} \quad \sum_{ij} t_{ij} t_{ij}^* = \delta_{ii'} \delta_{jj'}.$$

Вклад в эту сумму от  $j=0$  равен  $\delta_{ij}\delta_{ij'}/3$ ; от  $j=1$ :

$$\frac{1}{2} \epsilon_{ijk} \epsilon_{i'j'k'} \sum_k e_k e_k^* = \frac{1}{2} (\delta_{ii'} \delta_{jj'} - \delta_{ij} \delta_{ij'}).$$

Следовательно,

$$\sum_{ij} t_{ij} t_{ij'}^* = \frac{\delta_{ii'} \delta_{jj'} + \delta_{ii'} \delta_{jj'}}{2} - \frac{\delta_{ij} \delta_{ij'}}{3}.$$

Как и следовало, этот тензор симметричен по  $i$  и  $j$ , по  $i'$  и  $j'$ , и дает 0 при свертке по любой из этих пар индексов. Это единственный тензор с такими свойствами; общий множитель восстанавливается из свойства проектора  $P_{ijr} P_{i'j'r'} = P_{ijr'j'r}$ . Вклад в эту сумму от  $m=0$  равен  $(\delta_{ij} - 3n_i n_j)(\delta_{rr'} - 3n_r n_{r'})/6$ ; от  $m=\pm 1$ :

$$\sum_{\pm} \frac{(n_i e_{\pm i} + n_{-i} e_{\pm i})(n_r e_{\pm r}^* + n_{-r} e_{\pm r}^*)}{2},$$

что легко находится при помощи  $\sum_{\pm} e_{\pm i} e_{\pm i}^* = \delta_{ij} - n_i n_j$ . Вклад от  $m=\pm 2$  можно найти так: он равен

$$\sum_{\pm} e_{\pm i} e_{\pm j} e_{\pm i'}^* e_{\pm j'}^* = \frac{(\vec{e} + i\vec{e} \times \vec{n})(\vec{e} + i\vec{e} \times \vec{n})(\vec{e} - i\vec{e} \times \vec{n})_i (\vec{e} - i\vec{e} \times \vec{n})_j}{2} + \\ + \text{компл. сопр.}$$

Он не должен зависеть от  $\vec{e} = \vec{e}_x$ , поэтому его можно усреднить по направлениям  $\vec{e}$ , перпендикулярным  $\vec{n}$ . Но проще получить его из соотношения полноты.

Дальше все вычисляется, как для  $\chi_1$ . Вероятность рождения  $\chi_2$  равна квадрату модуля матричного элемента (1), усредненному по поляризациям  $\psi'$  и просуммированному по поляризациям фотона  $\vec{e}$ . Просуммировав по всем поляризациям  $\chi_2$ , мы получим угловое распределение фотона.

Если  $\chi_2$  распадается на 2 бесспиновых мезона, то проекция спина  $\chi_2$  на ось распада  $\vec{n}'$   $m=0$ ; при распаде на барион и антибарион  $m=\pm 1$ . При распаде на два глюона (которые порождают адронные струи), спиральности глюонов равны  $\pm 1$ , поэтому  $m=0$  или  $\pm 2$ . Вычисление в квантовой хромодинамике показывает, что распад происходит только при  $m=\pm 2$  (это не следует из законов сохранения). В случае каждого из этих трех типов распадов, нужно суммировать только по поляризациям  $\chi_2$  с соответствующими  $m$ . В результате, получаем корреляцию ось пучков  $\vec{n}$  — направление вылета фотона  $\vec{l}$  — ось распада  $\vec{n}'$ . Из нее следуют все частные распределения.

Пусть теперь  $\chi_2$  переходит в  $\psi$  с излучением фотона. Матричный элемент всего процесса  $\psi' \rightarrow \chi_2 + \gamma \rightarrow \psi + \gamma + \gamma$  равен произве-

дению матричных элементов  $\psi' \rightarrow \chi_2 + \gamma$  и  $\chi_2 \rightarrow \psi + \gamma'$ , просуммированному по всем поляризациям  $\chi_2$ . Вероятность распада получается при возведении его в квадрат, усреднении по поляризациям  $\psi'$ , суммировании по поляризациям  $\gamma$  и  $\gamma'$ . Если просуммировать по поляризациям  $\psi$ , то мы получим корреляцию ось пучков  $\bar{p}$  — фотон  $\bar{l}$ . Из нее можно получить разные распределения. Корреляции в случае различных распадов  $\psi$  вычисляются точно так же, как раньше.

```
% PSI'→HI2+PHOTON ;
% -----
;% HI2 SPIN PROJECTORS ;
% M=0      H0 ;
% M=+-1    H1 ;
% M=+-2    H2 ;
% ALL      HS ;
VECTOR I1,I2,J1,J2;
HS:=(I1.I2*J1.J2+I1.J2*J1.I2)/2-I1.J1*I2.J2/3$;
H0:=3/2*(N1.I1*N1.J1-I1.J1/3)*(N1.I2*N1.J2-I2.J2/3)$;
H1:=1/2*(N1.I1*E.J1+N1.J1*E.I1)*(N1.I2*E.J2+N1.J2*E.I2)$;
H1:=TRANS(E,N1,H1)$ H2:=HS-H0-H1$;
M2:=F.I1*E.J1*F.I2*E.J2$ INDEX I1,I2,J1,J2; MM:=M2*HS$;
MM:=TRANS(E,L,MM)$ MM:=TRANS(F,N,MM)$;
WRITE "DISTRIBUTION N-L ",NUM(MM);
DISTRIBUTION N-L L.N2+13

% PSI'→HI2+PHOTON HII→MESON+MESON ;
% -----
MM:=M2*H0$ CLEAR H0;
MM:=TRANS(E,L,MM)$ MM:=TRANS(F,N,MM)$;
WRITE "CORRELATION N-L-N1 ",NUM(MM);
CORRELATION N-L-N1 L.N2-6*L.N*L.N1*N.N1+9*
L.N12*N.N12-3*L.N12-3*N.N12+4
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,MM));
DISTRIBUTION N-N1 -3*N.N12+5
WRITE "DISTRIBUTION L-N1 ",NUM(AVER(N,MM));
DISTRIBUTION L-N1 -3*L.N12+5

% PSI'→HI2+PHOTON HII→BARYON+ANTIBARYON ;
% -----;
```

```
MM:=M2*H1$ CLEAR H1;
MM:=TRANS(E,L,MM)$ MM:=TRANS(F,N,MM)$;
WRITE "CORRELATION N-L-N1 ",NUM(MM);
CORRELATION N-L-N1 L.N*L.N1*N.N1-2*L.N12*N.N12+1
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,MM));
DISTRIBUTION N-N1 -N.N12+3
WRITE "DISTRIBUTION L-N1 ",NUM(AVER(N,MM));
DISTRIBUTION L-N1 -L.N12+3

% PSI'→HI2+PHOTON HII→GLUON+GLUON ;
% -----
MM:=M2*H2$ CLEAR H2;
MM:=TRANS(E,L,MM)$ MM:=TRANS(F,N,MM)$;
WRITE "CORRELATION N-L-N1 ",NUM(MM);
CORRELATION N-L-N1 L.N*L.N1*N.N1-L.N12*N.N12+
L.N12+N.N12+2
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,MM));
DISTRIBUTION N-N1 3*N.N12+7
WRITE "DISTRIBUTION L-N1 ",NUM(AVER(N,MM));
DISTRIBUTION L-N1 3*L.N12+7

% PSI'→HI2+PHOTON HI2→PSI+PHOTON';
% -----
M:=HS*F.I1*E.J1*F1.I2*E1.J2$ CLEAR HS;
MM:=M**2$ CLEAR M;
MM:=TRANS(E,L,MM)$ MM:=TRANS(E1,L1,MM)$;
MM:=TRANS(F,N,MM)$ MM1:=AVER(F1,MM)$;
WRITE "CORRELATION N-L-L1 ",NUM(MM1);
CORRELATION N-L-L1 L.N2+3*L.N*L.L1*N.L1+6*L.L12+6*N.L12+22
WRITE "DISTRIBUTION N-L1 ",NUM(AVER(L,MM1));
DISTRIBUTION N-L1 21*N.L12+73
WRITE "DISTRIBUTION L-L1 ",NUM(AVER(N,MM1));
DISTRIBUTION L-L1 21*L.L12+73

% PSI'→HI2+PHOTON HI2→PSI+PHOTON' PSI→PI+PI-
% -----
MM1:=SUB(F1=N1,MM)$
```

```

WRITE "CORRELATION N-L-L1-N1 ",NUM(MM1);
CORRELATION N-L-L1-N12-4*L.N*N1.L12+4*L.N2-6*L.N
*N.L1*N.N1+12*L.N*L.N1*N.L1*N1.L1+12*L.N*L.L1*N.N1*
N1.L1-9*L.N12*N.L12-3*L.N12-18*L.N1*L.L1*N.N1*
L1-6*L.N1*L.L1*N1.L1-9*L.L12*N.N12+9*L.L12-3*
N.N12-6*N.N1*N.L1*N1.L1+9*N.L12+2*N1.L12+16
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,AVER(L1,MM1)));
DISTRIBUTION N-N1 -21*N.N12+47
% PSI'→HI2+PHOTON HI2→PSI+PHOTON'PSI→MU+MU-
% -----
MM:=TRANS(F1,N1,MM)$
WRITE "CORRELATION N-L-L1-N1 ",NUM(MM);
CORRELATION N-L-L1-N1 4*L.N2*N1.L12-2*L.N2+6*L.N*L.
N1*N.N1-12*L.N*L.N1*N.L1*N1.L1-12*L.N*L.L1*N.N1*N1.
L1+6*L.N*L.L1*N.L1+9*L.N12*N.L12+3*L.N12+18*L.
N1*L.L1*N.N1*N.L1+6*L.N1*L.L1*N1.L1+9*L.L12
N.N12+3*L.L12+3*N.N12+6*N.N1*N.L1*N1.L1+3*
N.L12-2*N1.L12+28
WRITE "DISTRIBUTION N-N1 ",NUM(AVER(L,AVER(L1,MM)));
DISTRIBUTION N-N1 21*N.N12+73

```

**Задача.** Рассмотрите случай поперечно поляризованных  $e^+e^-$ -пучков.

**Пакет процедур VPACK.** Команда IN VPACK\$ вводит файл с пакетом процедур для некоторых часто встречающихся векторных и тензорных операций. Знак \$ вместо ; подавляет распечатку вводимых операторов. Если бы в файле были операторы, результаты которых распечатываются в ходе выполнения (например, WRITE или X := ... ;), то эти результаты были бы напечатаны. Результатом описания процедуры является ее имя; если закончить описание знаком \$ вместо ;, то оно печататься не будет. Именно это и сделано в файле VPACK, так что он вводится молча.

В пакете VPACK содержатся процедуры усреднения по направлениям вектора, а также по направлениям вектора, перпендикулярным к другому данному вектору; дифференцирования по век-

тору; простые процедуры упрощения тензорных выражений, от которых требуется только симметричная или антисимметричная по паре индексов часть; и, наконец, описание трехмерного тензора  $\epsilon_{ijk}$ . Эти операции вместе или в различных сочетаниях применяются в самых разных областях физики. Так, процедура усреднения тензора по направлениям вектора применялась при вычислении степенных поправок в правилах сумм в квантовой хромодинамике и в приближении самосогласованного поля в ориентационных фазовых переходах. Во втором случае пространство 3-мерно, а в первом 4-мерно (и иногда даже требуются вычисления в пространстве, размерность которого задана аналитическим выражением). Поэтому ясно, что такие процедуры нужно делать максимально общими, и пользователь должен иметь возможность их применять, не зная их внутреннего устройства. Это требует специальных усилий. Здесь мы опишем алгоритмы и приемы, использованные при написании пакета VPACK, и приведем его распечатку.

В REDUCEe можно включать в название переменной и т. д. любой символ, даже если он не является ни буквой, ни цифрой. Чтобы он воспринимался как часть имени, перед ним надо поставить знак ] (на некоторых машинах знак !). REDUCE использует многие переменные, содержащие знаки \* и =. Чтобы случайно не испортить такую внутреннюю переменную REDUCEa, эти знаки лучше в имена не включать. Имена всех внутренних объектов пакета VPACK начинаются с точки. Чтобы не нарушать его работу, такие имена не нужно использовать в главной программе. Вообще, в программе лучше использовать только нормальные имена, оставив всякие ухищрения для специализированных пакетов процедур.

Скалярные переменные могут быть локальными (описание SCALAR в блоке BEGIN ... END), поэтому для них не нужно изобретать хитрых имен. Все остальные объекты (операторы, массивы, векторы, процедуры, ...) в REDUCEe являются глобальными. Это, конечно, существенный недостаток. Если Вам нужен такой объект для использования в одной процедуре или в группе процедур, приходится изобретать для него хитрое имя (вероятно, со специальными символами), чтобы уменьшить вероятность его совпадения с каким-нибудь другим именем. Хуже того, процедуры системы REDUCE не защищены от переопределения пользователем! Поэтому, если Вы получили сообщение PROCEDURE ... REDEFINED (и Вы не переопределяете какую-нибудь свою процедуру), значит, Вы уже что-то испортили в системе. Лучше всего

немедленно выйти из REDUCEa, а потом повторить все сначала, назвав процедуру по-другому.

Пакет VPACK начинается с двух вспомогательных процедур. Процедура CALLLET(A,B) создает правило подстановки, в левой части которого стоит вычисленное значение A, а в правой вычисленное значение B (так как фактические параметры процедур всегда вычисляются). Например, последовательность операторов A := X; B := Y; CALLLET(A,B); создаст подстановку LET X=Y; (если переменные X и Y свободны). Эта процедура вообще полезна очень часто. Много примеров ее использования приведено в учебнике [4].

Вторая вспомогательная процедура DUMMY ничего не делает, а просто возвращает свой аргумент. Она применяется для корректировки некоторых ошибок REDUCEa: он не всегда выполняет все упрощения (см., например, пример с векторами в п. 1; есть и другие аналогичные случаи). При вычислении параметра процедуры упрощения почему-то происходят более полно. Если Вы подозреваете, что выражение X недоупрощено, попробуйте X := DUMMY(X).

Усреднение тензора  $a$  по направлениям вектора  $\vec{p}$  производится так. Средние от членов с нечетным числом  $\vec{p}$  равны 0; от членов без  $\vec{p}$  — самим этим членам. Среднее от  $p_i p_j$  должно быть равно  $c \delta_{ij}$ . Константа  $c$  находится из условия, что свертка по  $i$  и  $j$  левой части, равная  $\vec{p}^2$ , совпадает со сверткой правой части, равной  $cd$ , где  $d$  — размерность пространства. Поэтому  $p_i p_j = (\vec{p}^2/d) \delta_{ij}$ . Аналогично можно вывести формулы для средних от произведений 4, 6 и т. д. векторов  $\vec{p}$ . Но это нам не поможет, так как заранее неизвестно, какое максимальное число векторов  $\vec{p}$  будет встречаться в членах тензора  $a$ .

Поэтому мы будем сводить среднее от произведения  $l$  векторов  $\vec{p}$  к среднему от произведения  $l-2$  векторов  $\vec{p}$  по формуле

$$p_{i_1} p_{i_2} p_{i_3} \dots p_{i_l} = c(\delta_{i_1 i_2} p_{i_3} p_{i_4} \dots p_{i_l} + \delta_{i_1 i_3} p_{i_2} p_{i_4} \dots p_{i_l} + \dots + \delta_{i_1 i_l} p_{i_2} p_{i_3} \dots p_{i_{l-1}}).$$

Константа  $c$  находится из равенства сверток по  $i_1$  и  $i_2$  левой и правой частей. Слева мы получаем  $\vec{p}^2 p_{i_3} p_{i_4} \dots p_{i_l}$ . Справа первый член дает  $cd p_{i_3} p_{i_4} \dots p_{i_l}$ , а остальные  $l-2$  члена — по  $cp_{i_3} p_{i_4} \dots p_{i_l}$  каждый. Итак, мы получаем общую рекуррентную формулу

$$p_{i_1} p_{i_2} \dots p_{i_l} = \frac{\vec{p}^2}{d+l-2} (\delta_{i_1 i_2} p_{i_3} p_{i_4} \dots p_{i_l} + \delta_{i_1 i_3} p_{i_2} p_{i_4} \dots p_{i_l} + \dots + \delta_{i_1 i_l} p_{i_2} p_{i_3} \dots p_{i_{l-1}}).$$

Процедура AVER сначала выясняет, чему равна размерность пространства (которая устанавливается пользователем при помощи команды VECDIM). Для этого она вводит индекс .I, и сворачивает его с самим собой. Далее, факторы P.R не должны участвовать в подсчетах числа векторов Р в каждом члене, в подстановках P.X → ... и т. д. Поэтому нужно убрать их, заменив на свободную переменную .P. Но если перед вызовом AVER была задана подстановка LET P.R = ..., то она пропадет. Вряд ли это понравилось бы пользователю, воспринимающему AVER как черный ящик. Поэтому процедура сохраняет значение P.R при входе в локальную переменную P.R. Перед выходом, если значение P.R не равно просто P.R, подстановка восстанавливается при помощи CALLLET. Конечно, это не полное восстановление: в случае LET P.R = X; X := Y; B := AVER(P.R); будет восстановлена подстановка LET P.R = Y; и команда CLEAR X; не вернет ее в прежнее состояние. Но это лучше, чем ничего.

В начале работы весь тензор A (с заменой P.R на .P) помещается в локальную переменную A1. Основная часть работы производится циклом, который применяет к членам A1 рекуррентную формулу, уменьшающую число векторов Р на 2, и перекачивает члены, не содержащие Р (т. е. готовые куски ответа), в локальную переменную A2. Цикл заканчивается, когда A1 = 0.

В цикле сначала нужно выяснить, сколько Р в каком члене, и выбрать в каждом члене один (любой!) Р.М в качестве  $p_{i_1}$ . Для этого Р умножается на свободную переменную .D, а все выражение — на функцию .F(). Затем степень .D и любой М из Р.М переносятся в аргументы .F. Подстановка не срабатывает для членов, где .D входит в 1-й степени. Такие члены содержат один вектор Р, поэтому они уничтожаются, вместе с другими членами с нечетным числом Р. Далее, члены без Р (они все еще содержат .F без аргументов) переносятся в переменную A2. Дальше нужно генерировать из каждого члена в A1, содержащего L векторов Р, L-1 членов рекуррентной формулы. Число L для каждого члена хранится в аргументе функции .F. Один вектор Р уже удален, а его индекс спрятан в другой аргумент .F. Для генерации этих членов, к Р прибавляется .D\*.Q, где .Q — свободный вектор, а .D\*\*2 = 0. При этом получаются L-1 членов, в которых один из Р заменен на .Q (они содержат .D), и один исходный член. Он вычитается, и полагается .D = 1. Теперь осталось только собрать индекс из аргумента .F и от вектора .Q в  $\delta_{ij}$ , умножить на .P и поделить на D + L - 2, и рекуррентная формула применена.

Совершенно аналогично устроена процедура TRANS(P,Q,A), усредняющая A по направлениям P, перпендикулярным Q. В ней вместо  $\delta_{ij}$  стоит  $\delta_{ij} - Q_i Q_j / Q^2$ , а усреднение производится по  $(D-1)$ -мерному пространству.

Зачем нужно было давать хитрые имена произвольным переменным .L, .M, .N, встречающимся в подстановках с FOR ALL? Если бы они назывались просто L, M, N, и процедура TRANS была бы вызвана с параметром Q, равным L, M или N, то Q в правой части подстановки воспринималось бы не как вектор L, M или N, существующий вне процедуры, а как произвольная переменная подстановки! Такое поведение системы довольно неожиданно.

Процедура DIF(M,N,A) дифференцирует выражение A по вектору M с индексом N. Конечно, с точки зрения REDUCEa N должен быть описан как вектор. Алгоритм был описан в §1. Единственное его улучшение — подстановка LET ] .D\*\*2=0;, которая позволяет несколько сократить промежуточные выражения.

Процедуры SYM(M,N,A) и ANTI(M,N,A) служат для упрощения тензора A, от которого нужна только симметричная или антисимметричная часть по паре индексов M и N. Конечно, всегда легко симметризовать тензор при помощи  $A := (A + + \text{SUB}(M=N, N=M, A)) / 2$ . Однако в данном случае имеется в виду другая, в некотором смысле обратная задача. A может содержать, скажем, члены P.M\*Q.N и P.N\*Q.M. Если нас интересует только симметричная часть A, то мы можем рассматривать эти члены как подобные, и привести их к одному виду (любому). При этом уменьшится число членов в выражении A, что может быть существенно для его понимания и использования.

Эта задача решается так же, как определение четных и нечетных функций в п. 1 — с использованием подстановки с условием ORDP. Однако реально возникает сложность. Из-за ошибки в REDUCEe, которую мы наблюдали в примере с векторами в §1, в результате применения такой подстановки может получиться не просто выражение с переставленными M и N, а несокращенная дробь, к числителю которой снова применима эта подстановка; возникает переполнение стека.

Эта проблема обходится так. Подстановка применяется при выключенном флаге RESUBS. В таком режиме REDUCE делает только один шаг вычисления за раз. Шагом является, например, однократное применение подстановки. Поскольку только что было проведено полное вычисление (присваивание в процедурах SYM и

ANTI), и добавилась только одна новая подстановка, то этот шаг состоит в однократном применении именно этой подстановки (если бы мы не позаботились об этом, шаг мог бы быть затрачен на применение какой-нибудь подстановки, заданной пользователем вне процедуры). Затем нормальный режим работы восстанавливается, и предпринимается попытка получше упростить результат при помощи DUMMY. Процедура ANTI дополнительно удаляет члены типа M.N и P.M\*P.N. В конце она пытается восстановить подстановку для M.N, если она была. Для подстановок для P.M\*P.N, которые тоже могли быть испорчены, таких попыток не делается.

Режим OFF RESUBS, вообще говоря, использовать не рекомендуется, так как не всегда легко предсказать, что же именно REDUCE считает одним шагом вычисления, и какой шаг он собирается сделать в первую очередь.

Наконец, в пакете VPACK вводится трехмерный тензор  $\epsilon_{ijk}$ . В REDUCEe встроено описание такого тензора в 4-мерном пространстве. Заметим, что оператор может быть объявлен симметричным или антисимметричным по всем аргументам при помощи команд SYMMETRIC и ANTISYMMETRIC. Так что наш пример с функциями двух переменных в §1 можно было решить проще, без ORDP. Но введение своих подстановок, конечно, гибче, например, можно описать функции, симметричные только по части аргументов.

```

PROCEDURE CALLLET(A,B)$LET A=BS
PROCEDURE DUMMY(X)$XS

PROCEDURE AVER(P,A)$
BEGIN SCALAR A1,A2,D,PP;OPERATOR J.F;
  VECTOR J.Q,J=M,J=N;
  INDEX J.I;D:=J.I.J.I;CLEAR J.I;
  PP:=P.P;
  LET P.P=J.P;A1:=A;CLEAR P.P;A2:=0;
  REPEAT <<
    A1:=J.F()*SUB(P=J.D*P,A1);
    FOR ALL J.L.J.M
      LET J.F()*J.D**J.L*P.J.M=J.F(J.L,J.M);
    A1:=A1;FOR ALL J.L.J.M CLEAR J.F()*J.D**J.L*P.J.M;
    FOR ALL J.M LET J.F()*J.D*P.J.M=0;
    FOR ALL J.L.J.M SUCH THAT NOT FIXP(J.L/2)
  
```

```

LET J.F([].L,]M)=0;
A1:=A1;
FOR ALL J.M CLEAR J.F()*.D*P.]M;
FOR ALL J.L,]M SUCH THAT NOT FIXP(J.L/2)
    CLEAR J.F([].L,]M);
A2:=A2+DF(A1,J.F());A1:=SUB(J.F()=0,A1);
LET J.D**2=0;A1:=SUB(P=P+J.D*].Q,A1);CLEAR J.D**2;
A1:=SUB(J.D=1,A1-SUB(J.D=0,A1));
FOR ALL J.L,]M,]N
    LET J.F([].L,]M)*].Q,]N=].P*].M,]N/(D+[].L-2);
A1:=A1;
    FOR ALL J.L,]M,]N CLEAR J.F([].L,]M)*].Q,]N;>>
UNTIL A1=0;
CLEAR J.F;CLEAR J.Q,]=].M,]=].N;
IF PP NEQ P.P THEN CALLLET(P.P,PP);
RETURN SUB(J.P=P.P,A2)
ENDS$
```

PROCEDURE TRANS(P,Q,A)\$  
BEGIN SCALAR A1,A2,D,PP;OPERATOR J.F;  
VECTOR J.Q,]=].M,]=].N;  
INDEX J.I;D:=[].I,]I;CLEAR J.I;  
PP:=P.P;  
LET P.P=].P;A1:=A;CLEAR P.P;A2:=0;  
REPEAT <<  
 A1:=J.F()\*SUB(P=].D\*P,A1);  
 FOR ALL J.L,]M  
 LET J.F()\*.D\*\*].L\*P,]M=J.F([].L,]M);  
 A1:=A1;FOR ALL J.L,]M CLEAR J.F()\*.D\*\*].L\*P,]M;  
 FOR ALL J.M LET J.F()\*.D\*P,]M=0;  
 FOR ALL J.L,]M SUCH THAT NOT FIXP(J.L/2)
 LET J.F([].L,]M)=0;
 A1:=A1;
 FOR ALL J.M CLEAR J.F()\*.D\*P,]M;
 FOR ALL J.L,]M SUCH THAT NOT FIXP(J.L/2)
 CLEAR J.F([].L,]M);
 A2:=A2+DF(A1,J.F());A1:=SUB(J.F()=0,A1);
 LET J.D\*\*2=0;A1:=SUB(P=P+J.D\*].Q,A1);CLEAR J.D\*\*2;
 A1:=SUB(J.D=1,A1-SUB(J.D=0,A1));
 FOR ALL J.L,]M,]N LET J.F([].L,]M)\*].Q,]N=
 ].P\*].M,]N-Q,]M\*Q,]N/Q.Q)/(D+[].L-3);

```

A1:=A1;
    FOR ALL J.L,]M,]N CLEAR J.F([].L,]M)*].Q,]N;>>
UNTIL A1=0;
CLEAR J.F;CLEAR J.Q,]=].M,]=].N;
IF PP NEQ P.P THEN CALLLET(P.P,PP);
RETURN SUB(J.P=P.P,A2)
ENDS$
```

PROCEDURE DIF(P,M,A)\$  
BEGIN SCALAR B;
 LET J.D\*\*2=0;B:=SUB(P=P+J.D\*M,A);CLEAR J.D\*\*2;
 RETURN SUB(J.D=0,DF(J.D,B))
ENDS\$

PROCEDURE ANTI(M,N,A)\$  
BEGIN SCALAR B,MN;VECTOR J,]=].X,]=].Y;
MN:=M.N;
 LET M.N=0;FOR ALL J.X LET M,]X\*N,]X=0;
 B:=A;
 CLEAR M.N;FOR ALL J.X CLEAR M,]X\*N,]X;
 FOR ALL J.X,]Y SUCH THAT ORDP(J.X,]Y)
 LET M,]X\*N,]Y=-M,]Y\*N,]X;
 OFF RESUBS;B:=B;ON RESUBS;
 FOR ALL J.X,]Y SUCH THAT ORDP(J.X,]Y)
 CLEAR M,]X\*N,]Y;
 IF MN NEQ M.N THEN CALLLET(M.N,MN);
 CLEAR J,]=].X,]=].Y;
 RETURN DUMMY(B)
ENDS\$

PROCEDURE SYM(M,N,A)\$  
BEGIN SCALAR B;VECTOR J,]=].X,]=].Y;
 FOR ALL J.X,]Y SUCH THAT J.X NEQ J.Y AND ORDP(J.X,]Y)
 LET M,]X\*N,]Y=M,]Y\*N,]X;
 OFF RESUBS;B:=A;ON RESUBS;
 FOR ALL J.X,]Y SUCH THAT J.X NEQ J.Y AND ORDP(J.X,]Y)
 CLEAR M,]X\*N,]Y;
 CLEAR J,]=].X,]=].Y;
 RETURN DUMMY(B)
ENDS\$

OPERATOR E3;ANTISYMMETRIC E3;

```

VECTOR ] = I1,] = I2,] = I3,] = J1,] = J2,] = J3;
FOR ALL I1,I2,I3 LET E3(I1,I2,I3)**2 =
  I1.I1*I2.I2*I3.I3 + 2*I1.I2.I3*I3.I1
  - I1.I1*(I2.I3)**2 - I2.I2*(I3.I1)**2 - I3.I3*(I1.I2)**2;
FOR ALL I1,I2,I3,J1,J2,J3 LET E3(I1,I2,I3)*E3(J1,J2,J3) =
  + I1.J1*I2.J2*I3.J3 - I1.J1*I2.J3*I3.J2
  + I1.J2*I2.J3*I3.J1 - I1.J2*I2.J1*I3.J3
  + I1.J3*I2.J1*I3.J2 - I1.J3*I2.J2*I3.J1;
END;

```

### ЗАДАЧИ

**Задача 1.** Вычислите волновые функции первых 10 состояний осциллятора (см. [1], §23, или [2], гл. 3).

**Решение.** Выбираем  $m=1$  и  $k=1$ . В координатном представлении

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x + \frac{\partial}{\partial x} \right), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( x - \frac{\partial}{\partial x} \right).$$

Состояние  $|0\rangle$  определяется из условия  $a|0\rangle = 0$ . Его волновая функция равна  $\exp(-x^2/2)$ ; для нормировки ее надо поделить на  $\sqrt{2\pi}$ . Волновые функции высших состояний получаются по рекуррентной формуле  $|n\rangle = \hat{a}^+|n-1\rangle/\sqrt{n}$ .

```

N:=10$  

% N FIRST OSCILLATOR WAVE FUNCTIONS ;  

ARRAY PSI(N);  

FOR ALL X,Y LET SQRT(X)*SQRT(Y)=SQRT(X*Y);  

PSI(0):=E**(-X**2/2)/SQRT(2*PI);  

PSI(0) := 1/(SQRT(E)X2*SQRT(PI*2))  

FOR I:=1:N DO WRITE  

PSI(I):=(X*PSI(I-1)-DF(PSI(I-1),X))/SQRT(2*I);  

PSI(1) := X/(SQRT(PI)*SQRT(E)X2)  

PSI(2) := (2*X2-1)/(2*SQRT(PI)*SQRT(E)X2)  

PSI(3) := (X*(2*X2-3))/(SQRT(E)X2*SQRT(PI*6))

```

$$\begin{aligned}
\text{PSI}(4) &:= (4*X^4 - 12*X^2 + 3)/(4*SQRT(E)^{X^2}*SQRT(PI*3)) \\
\text{PSI}(5) &:= (X*(4*X^4 - 20*X^2 + 15))/(2*SQRT(E)^{X^2}*SQRT(PI*30)) \\
\text{PSI}(6) &:= (8*X^6 - 60*X^4 + 90*X^2 - 15)/(12*SQRT(E)^{X^2}*SQRT(PI*10)) \\
\text{PSI}(7) &:= (X*(8*X^6 - 84*X^4 + 210*X^2 - 105))/(12*SQRT(E)^{X^2}*SQRT(PI*35)) \\
\text{PSI}(8) &:= (16*X^8 - 224*X^6 + 840*X^4 - 840*X^2 + 105)/(48*SQRT(E)^{X^2}*SQRT(PI*35)) \\
\text{PSI}(9) &:= (X*(16*X^8 - 288*X^6 - 2520*X^2 + 945))/(72*SQRT(E)^{X^2}*SQRT(PI*70)) \\
\text{PSI}(10) &:= (32*X^{10} - 720*X^8 + 5040*X^6 - 12600*X^4 + 9450 \\
&\quad *X^2 - 945)/(720*SQRT(E)^{X^2}*SQRT(PI*14))
\end{aligned}$$

**Задача 2.** Напишите процедуру, получающую волновую функцию атома водорода с квантовыми числами  $n, l, m$ , а также процедуру, вычисляющую вероятность электрического дипольного перехода из одного состояния в другое.

**Решение.** Используем атомную систему единиц. Процедура Y вычисляет сферическую функцию, см. [1], формулы (28.7) и (c. 4) (мы не включили множитель  $i^l$ ). Процедура PSI вычисляет радиальную функцию атома водорода, см. [1], формулы (36.13) и (d.13). Процедура E1 вычисляет матричные элементы компонент дипольного момента, и возвращает вероятность перехода в единицу времени без множителя  $\omega^3$ , см. [3], §45, или [2], гл. 16.

Программа вычисляет и печатает несколько первых сферических функций, кулоновских радиальных функций и вероятностей перехода, включая переходы между компонентами тонкой структуры. В действительности вероятности дипольных переходов в водороде могут быть вычислены в общем виде, см. [3], §52. Программа не использует этих общих формул, а прямо вычисляет интег拉лы.

Некоторые выражения приводятся REDUCEом к довольно неожиданной форме, например, с появлением  $SQRT(E)$ . Чтобы результаты интегрирования были разумными, пришлось добавить несколько простых подстановок. В компонентах дипольного момента мы используем выражения с комплексными экспонентами вместо  $COS(F)$  и  $SIN(F)$ , потому что оказалось, что интегратор испытывает затруднения при работе со смешанными выражениями, содержащими

жащими тригонометрические функции и комплексные экспоненты. Наконец, REDUCE не всегда полностью упрощает выражения с корнями (пример см. в [4]). Чтобы заставить его сделать по возможности более полное упрощение, используется процедура DUMMY. Если Вы пропустите эту программу без вызовов DUMMY, некоторые матричные элементы будут выглядеть довольно странно!

```
% HIDROGEN WAVE FUNCTIONS AND E1 TRANSITIONS ;
FOR ALL X LET COS(X)**2=1-SIN(X)**2;
FOR ALL X,Y LET SQRT(X)*SQRT(Y)=SQRT(X*Y);
FOR ALL X LET LOG(SQRT(X))=LOG(X)/2;
FOR ALL X LET TAN(X)=SIN(X)/COS(X);

PROCEDURE DUMMY(X);X;
DUMMY

PROCEDURE Y(L,M);
(IF M<0 THEN -1 ELSE 1)
*SQRT((2*L+1)/(4*PI)*FOR I:=L-ABS(M)+1:L+ABS(M) PRODUCT I)
/(2**L*FOR I:=1:L PRODUCT I)
*SUB(X=COS(T),DF((X**2-1)**L,X,L-ABS(M)))
/SIN(T)**ABS(M)*E**(I*M*F);
Y

FOR L:=0:4 DO FOR M:=-L:L DO
WRITE "Y(“,L,“,M,“)=“,Y(L,M);

Y(0,0)=1/(2*SQRT(PI))
Y(1,(-1))=(SQRT(3)*SIN(T))/(2*E^(F*I)*SQRT(PI*2))
Y(1,0)=(SQRT(3)*COS(T))/(2*SQRT(PI))
Y(1,1)=(-SQRT(3)*E^(F*I)*SIN(T))/(2*SQRT(PI*2))
Y(2,(-2))=(-SQRT(30)*SIN(T)^2)/(8*SQRT(PI)*E^(2*F*I))
Y(2,(-1))=(SQRT(15)*COS(T)*SIN(T))/(2*E^(F*I)*SQRT(PI*2))
Y(2,0)=(SQRT(5)*(-3*SIN(T)^2+2))/(4*SQRT(PI))
Y(2,1)=(-SQRT(15)*E^(F*I)*COS(T)*SIN(T))/(2*SQRT(PI*2))
Y(2,2)=(SQRT(30)*E^(2*F*I)*SIN(T)^2)/(8*SQRT(PI))
Y(3,(-3))=(SQRT(35)*SIN(T)^3)/(8*SQRT(PI)*E^(3*F*I))
```

$$Y(3,(-2)) = (-\text{SQRT}(210)*\text{COS}(T)*\text{SIN}(T)^2)/(8*\text{SQRT}(\text{PI})*\text{E}^{(2*F*I)})$$

$$Y(3,(-1)) = (\text{SQRT}(21)*\text{SIN}(T)*(-5*\text{SIN}(T)^2 + 4))/(8*\text{SQRT}(\text{PI})*\text{E}^{(F*I)})$$

$$Y(3,0) = (\text{SQRT}(7)*\text{COS}(T)*(-5*\text{SIN}(T)^2 + 2))/(4*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(3,1) = (\text{SQRT}(21)*\text{E}^{(F*I)}*\text{SIN}(T)*(5*\text{SIN}(T)^2 - 4))/(8*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(3,2) = (\text{SQRT}(210)*\text{E}^{(2*F*I)}*\text{COS}(T)*\text{SIN}(T)^2)/(8*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(3,3) = (-\text{SQRT}(35)*\text{E}^{(3*F*I)}*\text{SIN}(T)^3)/(8*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(4,(-4)) = (-3*\text{SQRT}(70)*\text{SIN}(T)^4)/(32*\text{SQRT}(\text{PI})*\text{E}^{(4*F*I)})$$

$$Y(4,(-3)) = (3*\text{SQRT}(35)*\text{COS}(T)*\text{SIN}(T)^4)/(8*\text{SQRT}(\text{PI})*\text{E}^{(3*F*I)})$$

$$Y(4,(-2)) = (3*\text{SQRT}(10)*\text{SIN}(T)^2*(7*\text{SIN}(T)^2 - 6))/(16*\text{SQRT}(\text{PI})*\text{E}^{(2*F*I)})$$

$$Y(4,(-1)) = (3*\text{SQRT}(5)*\text{COS}(T)*\text{SIN}(T)*(-7*\text{SIN}(T)^2 + 4))/(8*\text{SQRT}(\text{PI})*\text{E}^{(F*I)})$$

$$Y(4,0) = (3*(35*\text{SIN}(T)^4 - 40*\text{SIN}(T)^2 + 8))/(16*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(4,1) = (3*\text{SQRT}(5)*\text{E}^{(F*I)}*\text{COS}(T)*\text{SIN}(T)*(7*\text{SIN}(T)^2 - 4))/(8*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(4,2) = (3*\text{SQRT}(10)*\text{E}^{(2*F*I)}*\text{SIN}(T)^2*(-7*\text{SIN}(T)^2 + 6))/(16*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(4,3) = (-3*\text{SQRT}(35)*\text{E}^{(3*F*I)}*\text{COS}(T)*\text{SIN}(T)^3)/(8*\text{SQRT}(\text{PI}))$$

$$Y(4,4) = (3*\text{SQRT}(70)*\text{E}^{(4*F*I)}*\text{SIN}(T)^4)/(32*\text{SQRT}(\text{PI}))$$
  

$$\text{PROCEDURE PSI}(N,L);$$

$$2/N**2$$

$$/\text{SQRT}((\text{FOR } I:=1:N+L \text{ PRODUCT } I)*(\text{FOR } I:=1:N-L-1 \text{ PRODUCT } I))$$

$$*\text{E}**(\text{R}/\text{N})*(\text{N}/(2*\text{R}))*\text{E}^{(L+1)}$$

$$*\text{SUB}(Z=2*\text{R}/\text{N},\text{DF}(\text{E}**(-Z)*\text{Z}**\text{N},Z,\text{N}-\text{L}-1));$$

$$\text{PSI}$$

$$\text{FOR } N:=1:4 \text{ DO FOR } L:=0:N-1 \text{ DO}$$

$$\text{WRITE } "PSI(“,N,“,L,“)=“,PSI(N,L);$$

$$\text{PSI}(1,0)=2/\text{E}^{\text{R}}$$

$$\text{PSI}(2,0)=(\text{SQRT}(\text{E})^{\text{R}}*(-\text{R}+2))/(2*\text{SQRT}(2)*\text{E}^{\text{R}})$$

$$\text{PSI}(2,1)=\text{SQRT}(\text{E})^{\text{R}}/(2*\text{SQRT}(6)*\text{E}^{\text{R}})$$

$$\text{PSI}(3,0)=(2*(2*\text{R}^2-18*\text{R}+27))/(81*\text{SQRT}(3)*\text{E}^{(\text{R}/3)})$$

$$\text{PSI}(3,1)=(-2*\text{R}+9)/(27*\text{SQRT}(6)*\text{E}^{(\text{R}/3)})$$

$$\text{PSI}(3,2)=1/(9*\text{SQRT}(30)*\text{E}^{(\text{R}/3)})$$

$\text{PSI}(4,0) = (\text{E}^{(R/4)} * (-R^3 + 24*R^2 - 144*R + 192)) / (768 * \text{SQRT}(\text{E})^R)$   
 $\text{PSI}(4,1) = (\text{E}^{(R/4)} * (R^2 - 16*R + 48)) / (128 * \text{SQRT}(15) * \text{SQRT}(\text{E})^R)$   
 $\text{PSI}(4,2) = (\text{E}^{(R/4)} * (-R + 8)) / (192 * \text{SQRT}(5) * \text{SQRT}(\text{E})^R)$   
 $\text{PSI}(4,3) = \text{E}^{(R/4)} / (96 * \text{SQRT}(35) * \text{SQRT}(\text{E})^R)$

```

PROCEDURE E1(N2,L2,M2,N1,L1,M1);
BEGIN SCALAR A;ARRAY D(3);
A:=SUB(I=-I,PSI(N2,L2)*Y(L2,M2))*PSI(N1,L1)*Y(L1,M1);
D(1):=R*SIN(T)*(E**(I*F)+E**(-I*F))/2;
D(2):=R*SIN(T)*(E**(I*F)-E**(-I*F))/(2*I);
D(3):=R*COS(T);
FOR J:=1:3 DO
  << D(J):=INT(D(J)*A,F);
  D(J):=DUMMY(SUB(F=2*PI,D(J))-SUB(F=0,D(J)));
  D(J):=INT(D(J)*SIN(T),T);
  D(J):=DUMMY(SUB(T=PI,D(J))-SUB(T=0,D(J)));
  D(J):=INT(D(J)*R**2,R);
  WRITE D(J):=-DUMMY(SUB(R=0,D(J)))
>>;
A:=FOR J:=1:3 SUM D(J)*SUB(I=-I,D(J));
CLEAR D;RETURN A
END;
E1
%
```

```

% 2P→1S ;
E1(1,0,0,2,1,0);
D(1) := 0
D(2) := 0
D(3) := (16*SQRT(2))/81
512/6561

```

```

E1(1,0,0,2,1,1);
D(1) := (-16)/81
D(2) := 16/(81*I)
D(3) := 0
512/6561

```

```
% 2P→2S ;
```

```

E1(2,0,0,2,1,0);
D(1) := 0
D(2) := 0
D(3) := (-1)/2
1/4
E1(2,0,0,2,1,1);
D(1) := SQRT(3)/(2*SQRT(6))
D(2) := (-SQRT(3))/(2*SQRT(6)*I)
D(3) := 0
1/4
% 3P→1S ;
E1(1,0,0,3,1,0);
D(1) := 0
D(2) := 0
D(3) := (9*SQRT(3))/(64*SQRT(6))
81/8192
E1(1,0,0,3,1,1);
D(1) := (-9)/128
D(2) := 9/(128*I)
D(3) := 0
81/8192
% 3P→2S ;
E1(2,0,0,3,1,0);
D(1) := 0
D(2) := 0
D(3) := 1584/3125
2509056/9765625
E1(2,0,0,3,1,1);
D(1) := (-1584*SQRT(3))/(3125*SQRT(6))
D(2) := (1584*SQRT(3))/(3125*SQRT(6)*I)
D(3) := 0
2509056/9765625
% 3P→3S ;
E1(3,0,0,3,1,0);
```

D(1) := 0	3/102400
D(2) := 0	
D(3) := (-3*SQRT(3))/(4*SQRT(2))	E1(1,1,1,3,2,0);
27/32	D(1) := SQRT(15)/(320*SQRT(30))
	D(2) := SQRT(15)/(320*SQRT(30)*I)
E1(3,0,0,3,1,1);	D(3) := 0
D(1) := (3*SQRT(3))/8	1/102400
D(2) := (-3*SQRT(3))/(8*I)	E1(1,1,0,3,2,0);
D(3) := 0	D(1) := 0
27/32	D(2) := 0
% 3S→2P ;	D(3) := 1/160
E1(2,1,0,3,0,0);	1/25600
D(1) := 0	% 3D→2P ;
D(2) := 0	E1(2,1,1,3,2,2);
D(3) := (-288)/(3125*SQRT(6))	D(1) := (-72)/3125
13824/9765625	D(2) := 72/(3125*I)
E1(2,1,1,3,0,0);	D(3) := 0
D(1) := 144/(3125*SQRT(3))	10368/9765625
D(2) := 144/(3125*SQRT(3)*I)	E1(2,1,1,3,2,1);
D(3) := 0	D(1) := 0
13824/9765625	D(2) := 0
% 3D→1P ;	D(3) := 72/3125
E1(1,1,1,3,2,2);	5184/9765625
D(1) := (-SQRT(3))/320	E1(2,1,0,3,2,1);
D(2) := SQRT(3)/(320*I)	D(1) := (-72*SQRT(5))/(3125*SQRT(10))
D(3) := 0	D(2) := (72*SQRT(5))/(3125*SQRT(10)*I)
3/51200	D(3) := 0
E1(1,1,1,3,2,1);	5184/9765625
D(1) := 0	E1(2,1,1,3,2,0);
D(2) := 0	D(1) := (24*SQRT(15))/(3125*SQRT(10))
D(3) := (3*SQRT(5))/(320*SQRT(15))	D(2) := (24*SQRT(15))/(3125*SQRT(10)*I)
3/102400	D(3) := 0
E1(1,1,0,3,2,1);	1728/9765625
D(1) := (-3*SQRT(5))/(320*SQRT(30))	E1(2,1,0,3,2,0);
D(2) := (3*SQRT(5))/(320*SQRT(30)*I)	D(1) := 0
D(3) := 0	D(2) := 0

D(3) := (48\*SQRT(15))/(3125\*SQRT(5))  
6912/9765625

% 3D→3P ;

E1(3,1,1,3,2,2);  
D(1) := 1/80  
D(2) := (-1)/(80\*I)  
D(3) := 0  
1/3200

E1(3,1,1,3,2,1);  
D(1) := 0  
D(2) := 0  
D(3) := (-1)/80  
1/6400

E1(3,1,0,3,2,1);  
D(1) := SQRT(5)/(80\*SQRT(10))  
D(2) := (-SQRT(5))/(80\*SQRT(10)\*I)  
D(3) := 0  
1/6400

E1(3,1,1,3,2,0);  
D(1) := (-SQRT(15))/(240\*SQRT(10))  
D(2) := (-SQRT(15))/(240\*SQRT(10)\*I)  
D(3) := 0  
1/19200

E1(3,1,0,3,2,0);  
D(1) := 0  
D(2) := 0  
D(3) := (-SQRT(15))/(120\*SQRT(5))  
1/4800

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Ландау Л.Д, Лишин Е.М. Квантовая механика.— М.: Наука, 1974.
2. Елютин П.В., Кривченков В.Д. Квантовая механика.— М.: Наука, 1976.
3. Берестецкий В.Б., Лишин Е.М., Питаевский Л.П. Квантовая электродинамика.— М.: Наука, 1980.
4. Rayna G. REDUCE: Software for Algebraic Computation. Springer—Verlag, 1987.

А.Г. Грозин

#### РЕШЕНИЕ ФИЗИЧЕСКИХ ЗАДАЧ НА ЯЗЫКЕ REDUCE.

6. Квантовый нелинейный осциллятор
7. Ротатор в слабом поле
8. Радиационные переходы в чармонии

Ответственный за выпуск С.Г.Попов

Работа поступила 28 октября 1988 г.  
Подписано в печать 3.11.88 г. МН 08566  
Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 3,7 печ.л., 3,0 уч.-изд.л.  
Тираж 290 экз. Бесплатно. Заказ № 140

Набрано в автоматизированной системе на базе фотонаборного автомата ФА1000 и ЭВМ «Электроника» и отпечатано на ротапринте Института ядерной физики СО АН СССР,  
Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.