УДК 539.194.01

ОПЕРАТОР КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ МНОГОАТОМНОЙ МОЛЕКУЛЫ В ТОЧНЫХ КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ КООРДИНАТАХ

Ю. И. Пономарев

В последнее время появился ряд работ, в которых колебательная задача решается в точных колебательных координатах [1, 2]. Задание оператора кинетической энергии в этих координатах эквивалентно переходу к криволинейным координатам, поскольку мгновенный набор ортов направляющих связей сам является функцией колебательных координат. Представляет интерес выбор удобной формы этого оператора в точных координатах.

Построим вначале оператор импульса в криволинейных координатах. Для этого запишем уравнение для компонентов импульса в линейных координатах x^k

$$(\hat{p}_k - p_k)\,\psi(x) = 0. \tag{1}$$

Здесь $p_k = -i\hbar\,\partial/\partial x$. Перейдем к криволинейным координатам, воспользовавшись преобразованием ковариантного вектора $\mathscr{P}_\alpha$

$$p_k = \mathscr{P}_\alpha \frac{\partial q^\alpha}{\partial x^k}$$

и производной

$$\frac{\partial}{\partial x^k} = \frac{\partial q^\alpha}{\partial x^k}\,\frac{\partial}{\partial q^\alpha}.$$

ψ-функция преобразуется по закону

$$\psi(x^k) = \varphi(q^\alpha)\,J^{1/2},$$

где $J = |\partial q^\alpha/\partial x^k|$ — якобиан преобразования.

Представим уравнение (1) в виде

$$\frac{\partial q^\alpha}{\partial x^k}\left(-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial q^\alpha} - \mathscr{P}_\alpha\right) J^{1/2}\varphi = 0. \tag{2}$$

Умножая уравнение (2) слева на $J^{-1/2}$ приходим к уравнению

$$(\hat{\mathscr{P}}_\alpha - \mathscr{P}_\alpha)\,\varphi = 0,$$

в котором оператор импульса в криволинейных координатах имеет вид

$$\hat{\mathscr{P}}_\alpha = J^{-1/2}\left(-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right) J^{1/2} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha} + \frac{1}{2}\,\frac{\partial \ln J}{\partial q^\alpha}\right). \tag{3}$$

Совершенно аналогично можно получить выражение для оператора кинетической энергии

$$\hat{\mathscr{T}} = J^{-1/2}\,\hat{T}\,J^{1/2}.$$

Так как оператор $\hat{T}$ в криволинейных координатах имеет вид

$$\hat{T} = -\frac{\hbar^2}{2}\,J\,\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\,\frac{G^{\alpha\beta}}{J}\,\frac{\partial}{\partial q^\beta}\quad (J = |G_{\alpha\beta}|^{1/2}),$$

то в базисе собственных функций φ он запишется окончательно

$$\hat{\mathscr{T}} = -\frac{\hbar^2}{2}\,J^{1/2}\,\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\,\frac{G^{\alpha\beta}}{J}\,\frac{\partial}{\partial q^\beta}. \tag{4}$$

Сравнивая выражения (3) и (4), можно убедиться, что оператор кинетической энергии в криволинейных координатах выражается через соответствующие импульсы следующим образом:

$$\hat{\mathscr{T}} = \frac{1}{2}\,\hat{\bar{\mathscr{P}}}_\alpha G^{\alpha\beta}\hat{\mathscr{P}}_\beta. \tag{5}$$

Оператор $\hat{\bar{\mathscr{P}}}_\alpha$ имеет вид

$$\hat{\bar{\mathscr{P}}}_\alpha = J^{1/2}\left(-i\hbar\,\frac{\partial}{\partial q^\alpha}\right) J^{-1/2} = -i\hbar\left(\frac{\partial}{\partial q^\alpha} - \frac{1}{2}\,\frac{\partial \ln J}{\partial q^\alpha}\right).$$

Разложим оператор импульса $\mathscr{P}$ в ряд по координатам q. Предварительно представим в виде рядов якобиан и его логарифм

$$J = J_0 \left(1 + \frac{1}{J_0} \frac{\partial J}{\partial q^\alpha} q^\alpha + \frac{1}{2J_0} \frac{\partial^2 J}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} q^\alpha q^\beta + \ldots \right),$$

$$\ln J = \ln J_0 + \frac{1}{J_0} \frac{\partial J}{\partial q^\alpha} q^\alpha + \frac{\partial}{2J_0} \frac{\partial^2 J}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} q^\alpha q^\beta - \frac{1}{2J_0^2} \frac{\partial J}{\partial q^\alpha} \frac{\partial J}{\partial q^\beta} q^\alpha q^\beta + \ldots,$$

везде подразумевается суммирование по повторяющимся индексам. Обозначив

$$A_\alpha = \frac{1}{2J_0} \frac{\partial J}{\partial q^\alpha}, \quad A_{\alpha\beta} = \frac{1}{2J_0^2} \left(J_0 \frac{\partial^2 J}{\partial q^\alpha \partial q^\beta} - \frac{\partial J}{\partial q^\alpha} \frac{\partial J}{\partial q^\beta} \right),$$

получаем выражение для оператора импульса

$$\mathscr{P}_\alpha = \mathscr{P}_{0\alpha} + \mathscr{P}_{1\alpha} + \mathscr{P}_{2\alpha} + \ldots, \tag{6}$$

где

$$\mathscr{P}_{0\alpha} = -i\hbar \partial / \partial q^\alpha, \quad \mathscr{P}_{1\alpha} = -t\hbar A_\alpha, \quad \mathscr{P}_{2\alpha} = -i\hbar A_{\alpha\beta} q^\beta.$$

Преобразуем оператор кинетической энергии с учетом разложения (6)

$$2\hat{\mathscr{T}} = (\mathscr{P}_{0\alpha} - \mathscr{P}_{1\alpha} - \mathscr{P}_{2\alpha} - \ldots) G^{\alpha\beta}(q) (\mathscr{P}_{0\beta} + \mathscr{P}_{1\beta} + \mathscr{P}_{2\beta} + \ldots) = \mathscr{P}_{0\alpha} G^{\alpha\beta}(q) \mathscr{P}_{0\beta} -$$

$$- i\hbar (\mathscr{P}_{0\alpha} G_0^{\alpha\beta} A_\beta - A_\alpha G_0^{\alpha\beta} \mathscr{P}_{0\beta}) - i\hbar \left(\mathscr{P}_{0\alpha} \frac{\partial G^{\alpha\beta}}{\partial q^\gamma} A_\beta - A_\alpha \frac{\partial G^{\alpha\beta}}{\partial q^\gamma} q^\gamma \mathscr{P}_{0\beta} \right) -$$

$$- i\hbar (\mathscr{P}_{0\alpha} G_0^{\alpha\beta} A_{\beta\gamma} q^\gamma - A_{\alpha\gamma} q^\gamma G_0^{\alpha\beta} \mathscr{P}_{0\beta}) + \hbar^2 A_\alpha A_\beta G_0^{\alpha\beta} + \ldots.$$

Поскольку индексы α и β немые, изменим во вторых членах в скобках обозначения $\alpha \rightleftarrows \beta$. Воспользуемся также симметрией матрицы $G^{\alpha\beta}$ и перестановочным соотношением

$$\mathscr{P}_{0\alpha} q^\gamma - q^\gamma \mathscr{P}_{0\alpha} = -i\hbar \delta_\alpha^\gamma.$$

Выражение для оператора кинетической энергии, в котором оператор импульса задан с точностью до третьего члена разложения, примет вид

$$\hat{\mathscr{T}} = \frac{1}{2} \mathscr{P}_{0\alpha} G^{\alpha\beta}(q) \mathscr{P}_{0\beta} - \frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial G^{\alpha\beta}}{\partial q^\alpha} A_\beta + G_0^{\alpha\beta} A_{\alpha\beta} - A_\alpha A_\beta G_0^{\alpha\beta} \right) + \ldots \tag{7}$$

Члены, заключенные в скобку, дают постоянную добавку к уровням энергии. Таким образом, отброшенные в работах [1,2] члены кинетической энергии во втором приближении теории возмущения никакого вклада в колебательные переходы не дают.

Литература

[1] Л. А. Грибов, Г. В. Ховрин. ДАН СССР, *217*, 307, 1974.
[2] Ю. И. Пономарев, М. Р. Расовский. Опт. и спектр., *41*, 545, 1976.

Поступило в Редакцию 5 января 1978 г.

УДК 535.4+534

О ДИФРАКЦИИ ГАУССОВЫХ ПУЧКОВ СВЕТА НА АКУСТИЧЕСКИХ ВОЛНАХ

А. А. Глинский

При расчетах дифракции света на акустических волнах в литературе до сих пор рассматривались пучки света с равномерным распределением амплитуды по сечению пучка. Поэтому представляет интерес провести расчет дифракции света на плоской звуковой волне при гауссовом распределении амплитуды. Применим для этой цели использованный ранее в работах [1, 2] метод, в котором поле дифрагированной волны E_1 определяется интегралом

$$E_1 = -\frac{n_0}{2\pi c^2} \int_V \frac{dV}{R} \Delta \left[\frac{\partial^2 E_0}{\partial t^2} \right]_{t - \frac{n_0 R}{c}}. \tag{1}$$

Здесь E_0 — электрическое поле первичной световой волны, R — расстояние от элемента объема dV пучка звуковой волны до точки наблюдения, Δ — отклонение пока-