Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

Ю. А. Аминов, Геометрия волновых функций электрона,
Матем. сб., 2013, том 204, номер 2, 3–30

DOI: <https://doi.org/10.4213/sm7930>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 35.173.137.237

26 апреля 2023 г., 15:22:43

УДК 514.77+514.8

Ю. А. Аминов

Геометрия волновых функций электрона

Каждой волновой функции ставится в соответствие подмногообразие коразмерности 2 в евклидовом пространстве. Детально изучается случай волновой функции одного электрона в атоме водорода и других водородоподобных атомах, соответствующей квантовым числам n, l, m . Установлены теоремы о поведении секционных кривизн и скалярной кривизны построенного подмногообразия в зависимости от значений этих квантовых чисел. Рассмотрена также внешняя геометрия подмногообразия.

Библиография: 9 названий.

Ключевые слова: атом водорода, подмногообразие, кривизна, квантовые числа.

DOI: 10.4213/sm7930

§ 1. Введение

В нашей работе [1] была высказана следующая общая концепция. Каждой стационарной волновой функции $\Psi(x^1, \dots, x^k)$ элементарной частицы, определенной над пространством с координатами $x^1, \dots, x^k$, ставится в соответствие k -мерное подмногообразие F^k коразмерности 2 в евклидовом пространстве E^{k+2} с координатами $x^1, \dots, x^{k+2}$ по следующему правилу:

$$x^{k+1} = \operatorname{Re} \Psi(x^1, \dots, x^k), \quad x^{k+2} = \operatorname{Im} \Psi(x^1, \dots, x^k).$$

Геометрические свойства подмногообразия F^k тесно связаны с физическими свойствами элементарной частицы, которой соответствует данная волновая функция. Возможно, геометрический подход приведет к новым аргументам и к новому пониманию в вопросе о смысле волновой функции, по поводу которого раньше велась оживленная дискуссия, см. [2]–[4]. Смыслу волновой функции посвящена интересная статья А. Д. Александрова [5]. Шрёдингер рассматривал непрерывное распределение электрического заряда, связанное с волновой функцией, а сами частицы в виде “пенных гребней” на фоне волн. Но в физике возобладавал вероятностный подход к пониманию волновой функции. Изложение этих вопросов имеется в книге [6]. Впрочем, в физических статьях встречаются и другие взгляды. Например, в статье В. А. Петрова, Р. А. Рютина и А. Е. Соболя “Физика больших расстояний в экспериментах на большом адронном коллайдере” в книге [7] говорится: “Пространство атома фактически пусто – электроны и ядро занимают ничтожную часть его объема, заполненного разреженным электрическим полем ...”. Наше изложение физического аспекта основано на книге [8].

В настоящей работе более подробно рассмотрим атом водорода. Уравнение Шрёдингера учитывает электрическое поле электрона и электрическое поле протона. Эти поля взаимодействуют между собой. В результате получается некоторое сложное поле, которое, возможно, описывается набором волновых функций. Если же это не так, если с помощью волновых функций можно вычислять только вероятности, то каким образом можно описать результирующее поле взаимодействия полей электрона и протона?

Пусть в евклидовом пространстве E^5 задано трехмерное подмногообразие в явном виде

$$x^4 = z(x^1, x^2, x^3), \quad x^5 = w(x^1, x^2, x^3), \quad (1)$$

где $x^1, \dots, x^5$ - ортогональные координаты в E^5 .

Стационарное уравнение Шрёдингера позволяет рассматривать отдельно действительную и мнимую части волновой функции, однако использование одновременно этих двух компонент для построения подмногообразия $F^3 \subset E^5$ более естественно. Ситуацию можно сравнить с рассмотрением винтовой линии в E^3 и ее проекций на двумерные плоскости. Винтовая линия, на наш взгляд, является более простым объектом, так как ее кривизна и кручение постоянны. В то же время проекции винтовой линии на произвольно выбранную плоскость имеют непостоянную кривизну, изменяющуюся по достаточно сложному закону.

Будем предполагать, что функции z и w заданы в шаре радиуса R евклидова пространства E^3 с координатами x^1, x^2, x^3 или во всем пространстве. В этой работе рассмотрим следующие вопросы:

- 1) подмногообразие, соответствующее волновой функции свободной частицы;
- 2) внутренняя геометрия волновой функции электрона в атоме водорода, метрика и формула для скалярной кривизны;
- 3) интегральные соотношения на скалярную кривизну и на кривизну K_{12} ;
- 4) внешняя геометрия волновой функции, вектор средней кривизны, тензор кривизны нормальной связности;
- 5) геометрическое обобщение уравнения Шрёдингера.

В 3-мерном евклидовом пространстве E^3 с декартовыми координатами x^1, x^2, x^3 введем сферическую систему координат r, θ, φ , положив

$$x^1 = r \sin \theta \cos \varphi, \quad x^2 = r \sin \theta \sin \varphi, \quad x^3 = r \cos \theta.$$

Метод разделения переменных в сферической системе координат для уравнения Шрёдингера дает набор собственных функций Ψ_{nlm} дискретного спектра с квантовыми числами n, l, m

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)F_{lm}(\theta)e^{im\varphi}.$$

Функции R_{nl} и F_{lm} известны, их определение дадим ниже. Заметим, что n - главное, l - орбитальное и m - магнитное квантовое число.

Очевидно, когда магнитное квантовое число $m = 0$, подмногообразие F^3 является гиперповерхностью $F^3 \subset E^4$. Введем функцию от двух переменных

$$\sigma(r, \theta) = R_{nl}(r)F_{lm}(\theta).$$

Правильнее было бы записывать функцию σ с индексами nlm , но ввиду громоздкости записи эти индексы будем опускать.

Будем рассматривать функцию $\sigma(r, \theta)$ в полуполосе $r \geq 0, 0 \leq \theta \leq \pi$. Сформулируем полученные нами результаты.

Точки (r, θ) , в которых функция R_{nl} на полуоси $(0, \infty)$ и функция F_{lm} на интервале $(0, \pi)$ принимают локально максимальные или минимальные значения, являются точками локального максимума или локального минимума функции $\sigma(r, \theta)$, т.е. экстремальными точками. В этих точках производные $R'_{nl}(r) = 0$ и $F'_{lm}(\theta) = 0$.

Точки (r, θ) , в которых $R_{nl}(r) = 0, F_{lm}(\theta) = 0$, будем называть узловыми точками функции σ . Рассмотрение показывает, что они являются седловыми.

ТЕОРЕМА 1. *Если магнитное квантовое число $m = 0$, то в экстремальных точках функции σ секционная кривизна K гиперповерхности $F^3 \subset E^4$ удовлетворяет неравенству $K \geq 0$.*

В следующей теореме магнитное квантовое число может быть отлично от нуля.

ТЕОРЕМА 2. *В узловых точках функции σ секционная кривизна $K \leq 0$. Существуют касательные к F^3 площадки, для которых $K < 0$.*

Будем считать, что r является первой координатой u^1 , θ – второй u^2 и φ – третьей координатой u^3 на F^3 . Индексами снизу у σ будем обозначать производные этой функции по этим координатам. Нами найден вид метрики подмногообразия F^3

$$ds^2 = (1 + \sigma_1^2)(dr)^2 + 2\sigma_1\sigma_2 dr d\theta + (r^2 + \sigma_2^2)(d\theta)^2 + (r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)(d\varphi)^2.$$

Коэффициенты этой метрики обозначим g_{ij} . Так как они зависят только от переменных r, θ , то поверхность $\varphi = \text{const}$ по теореме Бомпиани является вполне геодезической. Поэтому кривизна K_{12} подмногообразия F^3 по площадке, касающейся координатных линий r, θ , является внутренней кривизной метрики этой поверхности, т.е. метрики

$$ds_0^2 = (1 + \sigma_1^2)(dr)^2 + 2\sigma_1\sigma_2 dr d\theta + (r^2 + \sigma_2^2)(d\theta)^2.$$

Найдено следующее выражение для скалярной кривизны R подмногообразия F^3 :

$$\frac{R}{2} = -\frac{\nabla_2 \sqrt{g_{33}}}{\sqrt{g_{33}}} + K_{12},$$

где ∇_2 – оператор Лапласа–Бельтрами метрики ds_0^2 .

Следующая теорема посвящена асимптотическому поведению скалярной кривизны при $r \rightarrow 0$.

ТЕОРЕМА 3. *При $l > 1$ скалярная кривизна R на плоскости x^1, x^2 , т.е. $\theta = \pi/2$, вблизи ядра неположительна. Если $l = 1, m = 0$, то $R \leq 0$, если $l = m = 1$ или 0 , то $R > 0$.*

Нами также получены некоторые интегральные соотношения со скалярной кривизной и с кривизной K_{12} .

§ 2. Выражение вторых квадратичных форм подмногообразия $F^3 \subset E^5$ в декартовых координатах

Прежде всего установим выражение для тензора Римана подмногообразия F^3 в декартовых координатах x^1, x^2, x^3 . Для этого нам потребуется найти коэффициенты вторых квадратичных форм. Радиус-вектор подмногообразия и его касательные векторы

$$\rho = (x^1, x^2, x^3, z, w), \quad \rho_i = (\delta_{i1}, \delta_{i2}, \delta_{i3}, z_i, w_i).$$

Здесь нижние индексы у функций z и w обозначают производные по координатам. Вторые производные радиус-вектора имеют вид

$$\rho_{ij} = (0, 0, 0, z_{ij}, w_{ij}).$$

Имеем выражение коэффициентов метрики g_{ij} и детерминанта g матрицы метрического тензора g_{ij}

$$g_{ij} = \delta_{ij} + z_i z_j + w_i w_j, \quad g = 1 + |\text{grad } z|^2 + |\text{grad } w|^2 + [\text{grad } z, \text{grad } w]^2.$$

Пусть единичные и ортогональные друг другу нормали n_1, n_2 имеют вид

$$n_1 = (\xi_1, \dots, \xi_5), \quad n_2 = (\eta_1, \dots, \eta_5).$$

Должны выполняться 3 уравнения

$$\sum_{i=1}^5 \xi_i^2 = 1, \quad \sum_{i=1}^5 \xi_i \eta_i = 0, \quad \sum_{i=1}^5 \eta_i^2 = 1.$$

Введем два трехмерных вектора ξ и η :

$$\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3), \quad \eta = (\eta_1, \eta_2, \eta_3).$$

Условие ортогональности n_1 и n_2 к F^3 дает

$$\xi = -\xi_4 \text{grad } z - \xi_5 \text{grad } w, \quad \eta = -\eta_4 \text{grad } z - \eta_5 \text{grad } w. \quad (2)$$

Введем обозначения

$$A = 1 + |\text{grad } z|^2, \quad B = (\text{grad } z, \text{grad } w), \quad C = 1 + |\text{grad } w|^2, \\ D^2 = AC - B^2.$$

Условия единичности и ортогональности векторов n_1, n_2 дают три уравнения

$$A\xi_4^2 + 2B\xi_4\xi_5 + C\xi_5^2 = 1, \quad A\xi_4\eta_4 + B(\xi_4\eta_5 + \xi_5\eta_4) + C\xi_5\eta_5 = 0, \\ A\eta_4^2 + 2B\eta_4\eta_5 + C\eta_5^2 = 1. \quad (3)$$

Введем функцию

$$f(t) = \frac{\sqrt{A - (Dt)^2}}{A}.$$

Разрешим первое и третье уравнения системы (3) относительно ξ_4, η_4 :

$$\xi_4 = -\frac{B\xi_5}{A} \pm f(\xi_5), \quad \eta_4 = -\frac{b\eta_5}{A} \pm f(\eta_5).$$

После подстановки во второе уравнение системы (3) и проведения элементарных преобразований получим

$$\xi_5^2 + \eta_5^2 = \frac{A}{D^2}. \quad (4)$$

Положим

$$\xi_5 = \frac{\sqrt{A}}{D} \cos \beta, \quad \eta_5 = \frac{\sqrt{A}}{D} \sin \beta.$$

Тогда

$$f(\xi_5) = \frac{\sin \beta}{\sqrt{A}}, \quad f(\eta_5) = \frac{\cos \beta}{\sqrt{A}}.$$

Подставим полученные выражения для $\xi_5, \eta_5, f(\xi_5), f(\eta_5)$ в выражения ξ_4, η_4 . При этом нетрудно установить, что выбор знаков перед $f(\xi_5)$ и $f(\eta_5)$ в выражениях ξ_4 и η_4 должен быть противоположным. Получим

$$\begin{aligned} \xi_4 &= \frac{1}{\sqrt{A}} \left(-\frac{B}{D} \cos \beta + \sin \beta \right), & \xi_5 &= \frac{\sqrt{A}}{D} \cos \beta, \\ \eta_4 &= \frac{1}{\sqrt{A}} \left(-\frac{B}{D} \sin \beta - \cos \beta \right), & \eta_5 &= \frac{\sqrt{A}}{D} \sin \beta. \end{aligned}$$

Отсюда получаем

$$\xi_4^2 + \eta_4^2 = \frac{C}{D^2}, \quad \xi_4 \xi_5 + \eta_4 \eta_5 = -\frac{B}{D^2}, \quad \xi_5^2 + \eta_5^2 = \frac{A}{D^2}. \quad (5)$$

Запишем коэффициенты вторых квадратичных форм L_{ij}^α по отношению к нормальям n_α , $\alpha = 1, 2$,

$$L_{ij}^1 = (n_1, r_{ij}) = \xi_4 z_{ij} + \xi_5 w_{ij}, \quad L_{ij}^2 = (n_2, r_{ij}) = \eta_4 z_{ij} + \eta_5 w_{ij}.$$

§ 3. Вектор средней кривизны H

По определению имеем

$$H = \frac{1}{3} (L_{ij}^1 n_1 + L_{ij}^2 n_2) g^{ij}.$$

Используя выражения для вторых квадратичных форм, находим

$$H = \frac{1}{3} [(\xi_4 z_{ij} + \xi_5 w_{ij}) n_1 + (\eta_4 z_{ij} + \eta_5 w_{ij}) n_2] g^{ij}.$$

Найдем теперь компоненты H^l этого вектора, т.е. проекции на неподвижные координатные оси. Пусть $k = 1, 2, 3$. Получим

$$H^k = \frac{1}{3} [\xi_4 \xi_k + \eta_4 \eta_k] z_{ij} + (\xi_5 \xi_k + \eta_5 \eta_k) w_{ij} g^{ij}.$$

Принимая во внимание соотношения (2), можем записать

$$H^k = -\frac{1}{3D^2} [(Cz_k - Bw_k)z_{ij} + (Aw_k - Bz_k)w_{ij}]g^{ij}, \quad k = 1, 2, 3. \quad (6)$$

Далее с помощью (4) и (5) получим

$$H^4 = \frac{1}{3} [(\xi_4^2 + \eta_4^2)z_{ij} + (\xi_5\xi_4 + \eta_5\eta_4)w_{ij}]g^{ij} = \frac{1}{3D^2} [Cz_{ij} - Bw_{ij}]g^{ij}. \quad (7)$$

Аналогично

$$H^5 = \frac{1}{3D^2} [-Bz_{ij} + Aw_{ij}]g^{ij}. \quad (8)$$

Обозначим через q_i компоненты вектора $[\text{grad } z, \text{grad } w]$. Нетрудно найти компоненты обратного метрического тензора

$$g^{ij} = (1 + |\text{grad } z|^2 + |\text{grad } w|^2)\delta^{ij} - (z_i z_j + w_i w_j) + q_i q_j.$$

Таким образом, все компоненты вектора H выражены через производные функций z и w . Обозначим $z_{ij}g^{ij} = P$, $w_{ij}g^{ij} = Q$. С помощью выражений для H^l находим

$$|H|^2 = \frac{1}{9} [P^2 + Q^2 + (P \text{grad } w - Q \text{grad } z)^2].$$

Поэтому вектор средней кривизны $H = 0$ в том и только том случае, когда

$$z_{ij}g^{ij} = 0, \quad w_{ij}g^{ij} = 0. \quad (9)$$

Это система двух нелинейных уравнений для двух функций z , w .

§ 4. Тензор Римана

Знание вторых квадратичных форм позволяет легко найти тензор Римана подмногообразия, используя уравнение Гаусса

$$R_{ijkl} = \sum_{p=1}^2 (L_{ik}^p L_{jl}^p - L_{il}^p L_{jk}^p).$$

Подставив выражения коэффициентов вторых квадратичных форм, получим

$$R_{ijkl} = (\xi_4^2 + \eta_4^2)(z_{ik}z_{jl} - z_{il}z_{jk}) + (\xi_4\xi_5 + \eta_4\eta_5)(z_{ik}w_{jl} - z_{il}w_{jk} + w_{ik}z_{jl} - w_{il}z_{jk}) + (\xi_5^2 + \eta_5^2)(w_{ik}w_{jl} - w_{il}w_{jk}).$$

Подставив выражения для $\xi_4^2 + \eta_4^2$, $\xi_4\xi_5 + \eta_4\eta_5$, $\xi_5^2 + \eta_5^2$ получим окончательно представление тензора Римана с помощью производных функций z и w

$$R_{ijkl} = \frac{1}{D^2} \{ (z_{ik}z_{jl} - z_{il}z_{jk})C - (z_{ik}w_{jl} + z_{jl}w_{ik} - z_{il}w_{jk} - z_{jk}w_{il})B + (w_{ik}w_{jl} - w_{il}w_{jk})A \}. \quad (10)$$

Здесь

$$A = 1 + |\text{grad } z|^2, \quad B = (\text{grad } z, \text{grad } w), \quad C = 1 + |\text{grad } w|^2, \\ D^2 = AC - B^2 = 1 + |\text{grad } z|^2 + |\text{grad } w|^2 + |[\text{grad } z, \text{grad } w]|^2.$$

Введем 5-мерные векторы нормали к подмногообразию F^3

$$\bar{l} = \text{grad } z - e_4, \quad \bar{m} = \text{grad } w - e_5$$

и их линейные комбинации

$$\sigma_{ij} = z_{ij}\bar{m} - w_{ij}\bar{l}.$$

Тогда компоненты тензора Римана записываются в следующем виде:

$$R_{ijkl} = \frac{1}{D^2} \{ (\sigma_{ik}\sigma_{jl}) - (\sigma_{il}\sigma_{jk}) \}.$$

Круглые скобки здесь обозначают скалярное произведение в E^5 .

§ 5. Тензор кривизны нормальной связности

Для тензора кривизны нормальной связности $T_{\alpha\beta|ij}$ для подмногообразия в евклидовом пространстве имеем следующее выражение:

$$T_{\alpha\beta|ij} = (L_{ik}^\alpha L_{jl}^\beta - L_{jk}^\alpha L_{il}^\beta) g^{kl}.$$

В рассматриваемом случае подмногообразия $E^3 \subset E^5$ имеются только две нормали, поэтому у этого тензора только три компоненты

$$T_{12|23}, \quad T_{12|31}, \quad T_{12|12}.$$

Используя уравнения Кодацци и то обстоятельство, что коразмерность равна 2, можем показать, что этот тензор удовлетворяет тождеству Бианки–Падова

$$T_{\alpha\beta|(ij,k)} = 0,$$

где круглые скобки обозначают сумму, полученную круговой подстановкой индексов i, j, k . Можем записать

$$T_{12|ij} = [(\xi_4 z_{ik} + \xi_5 w_{ik})(\eta_4 z_{jl} + \eta_5 w_{jl}) - (\xi_4 z_{jk} + \eta_5 w_{jk})(\eta_4 z_{il} + \eta_5 w_{il})] g^{kl} \\ = \xi_4 \eta_4 (z_{ik} z_{jl} - z_{jk} z_{il}) g^{kl} + \xi_4 \eta_5 (z_{ik} w_{jl} - z_{jk} w_{il}) g^{kl} \\ + \xi_5 \eta_4 (w_{ik} z_{jl} - w_{jk} z_{il}) g^{kl} + \xi_5 \eta_5 (w_{ik} w_{jl} - w_{jk} w_{il}) g^{kl}. \quad (11)$$

Имеем

$$z_{jk} z_{il} g^{kl} = z_{jl} z_{ik} g^{lk}.$$

Поэтому первое слагаемое в (11) равно нулю. Аналогично и четвертое слагаемое равно нулю. Далее, заметим, что

$$(w_{ik} z_{jl} - w_{jk} z_{il}) g^{kl} = (w_{il} z_{jk} - w_{jl} z_{ik}) g^{kl}.$$

Кроме того,

$$\xi_4 \eta_5 - \xi_5 \eta_4 = -\frac{1}{D}.$$

Следовательно, получаем выражение для тензора кривизны нормальной связности подмногообразия $F^3 \subset E^5$

$$T_{12|ij} = -\frac{1}{D}(z_{ik}w_{jl} - z_{jk}w_{il})g^{kl}. \quad (12)$$

§ 6. Волновая функция свободной частицы и подмногообразия F^3

Вернемся теперь к подмногообразию F^k , соответствующему волновой функции. Как известно, геометрия подмногообразия состоит из внутренней и внешней геометрии. Мы покажем, что геометрические свойства F^k тесно связаны с физическими характеристиками элементарной частицы.

Известно, что волновая функция определена с точностью до множителя $e^{i\theta}$, где $\theta = \text{const}$, т.е. функции Ψ и $\bar{\Psi} = e^{i\theta}\Psi$ описывают один и тот же процесс, что связано с тем, что модули этих функций одинаковы.

Но для подмногообразия $F^3 \subset E^5$ умножение Ψ на $e^{i\theta}$ обозначает замену координат в плоскости x_4, x_5

$$\bar{z} = z \cos \theta - w \sin \theta, \quad \bar{w} = z \sin \theta + w \cos \theta.$$

Возникает вопрос: будут ли более общие ортогональные преобразования подмногообразия F^3 в E^5 , которые не меняют геометрию F^3 , соответствовать тому же волновому процессу?

Интересно, прежде всего, рассмотреть геометрию подмногообразия, отвечающего волновой функции свободной частицы, которая имеет вид

$$\Psi = C_0 e^{i(p_1 x_1 + p_2 x_2 + p_3 x_3 - \omega t)},$$

где C_0, p_k, ω – постоянные числа. Можно считать, что C_0 – действительное число. Найдём кривизну подмногообразия F^3 . Для этого воспользуемся формулой (10) для тензора Римана R_{ijkl} подмногообразия, заданного в явном виде

$$x^4 = z(x^1, x^2, x^3), \quad x^5 = w(x^1, x^2, x^3).$$

Напомним обозначения

$$A = 1 + |\text{grad } z|^2, \quad B = (\text{grad } z, \text{grad } w), \quad C = 1 + |\text{grad } w|^2, \\ D^2 = AC - B^2.$$

Тогда для тензора Римана имеет место выражение

$$R_{ijkl} = \frac{1}{D^2} \{ (z_{ik}z_{jl} - z_{il}z_{jk})C - (z_{ik}w_{jl} + z_{jl}w_{ik} - z_{il}w_{jk} - z_{jk}w_{il})B \\ + (w_{ik}w_{jl} - w_{il}w_{jk})A \}.$$

Здесь z_{ij} обозначают вторые частные производные функции z .

В случае свободной частицы рассматриваем стационарную часть волновой функции. Имеем

$$\begin{aligned} z &= C_0 \cos \alpha, & w &= C_0 \sin \alpha, & \alpha &= \sum_{i=1}^3 p_i x_i, \\ z_i &= -C_0 p_i \sin \alpha, & z_{ij} &= -C_0 p_i p_j \cos \alpha, \\ w_i &= C_0 p_i \cos \alpha, & w_{ij} &= -C_0 p_i p_j \sin \alpha. \end{aligned}$$

Легко видеть, что коэффициенты в круглых скобках при A , B , C в формуле (10) для R_{ijkl} равны нулю. Например,

$$z_{ik}z_{jl} - z_{il}z_{jk} = C_0^2 \cos^2 \alpha (p_i p_k p_j p_l - p_i p_l p_j p_k) = 0.$$

Следовательно, тензор кривизны подмногообразия волновой функции свободной частицы равен нулю: $R_{ijkl} = 0$.

Аналогично рассматривается тензор кривизны нормальной связности T_{ij} , для которого имеет место следующее выражение:

$$T_{ij} = -\frac{1}{D}(z_{ik}w_{jl} - z_{jk}w_{il})g^{kl}.$$

Подставляя выражения вторых производных z и w , получим

$$z_{ik}w_{jl} - z_{jk}w_{il} = C_0^2 \cos \alpha \sin \alpha (p_i p_k p_j p_l - p_j p_k p_i p_l) = 0.$$

Следовательно, тензор кривизны нормальной связности подмногообразия F^3 свободной частицы тоже равен нулю: $T_{ij} = 0$.

В то же время, вектор средней кривизны H отличен от нуля и пропорционален волновому вектору $(0, 0, 0, z, w)$. Для компонент вектора средней кривизны имеем выражения (6)–(8), установленные выше,

$$\begin{aligned} H^k &= -\frac{1}{3D^2}[(Cz_k - Bw_k)P + (Aw_k - Bz_k)Q], \quad k = 1, 2, 3, \\ H^4 &= \frac{1}{3D^2}[CP - BQ], \quad H^5 = \frac{1}{3D^2}[AQ - BP]. \end{aligned}$$

Имеем в этом случае

$$A = 1 + C_0^2 p^2 \sin^2 \alpha, \quad B = -C_0^2 p^2 \sin \alpha \cos \alpha, \quad C = 1 + C_0^2 p^2 \cos^2 \alpha.$$

Кроме того,

$$\begin{aligned} D^2 &= 1 + |\text{grad } z|^2 + |\text{grad } w|^2 = 1 + C_0^2 p^2, & [\text{grad } z, \text{grad } w] &= 0, \\ P &= z_{ij}g^{ij} = -C_0 p^2 \cos \alpha, & Q &= w_{ij}g^{ij} = -C_0 p^2 \sin \alpha. \end{aligned}$$

Используя эти выражения, получим

$$Cz_k - Bw_k = -C_0 p_k \sin \alpha, \quad Aw_k - Bz_k = C_0 p_k \cos \alpha.$$

Подставим эти выражения в формулы для компонент вектора средней кривизны. Имеем

$$H^k = 0, \quad k = 1, 2, 3, \quad H^4 = -\frac{p^2}{3}C_0 \cos \alpha, \quad H^5 = -\frac{p^2}{3}C_0 \sin \alpha.$$

Следовательно, для свободной частицы

$$H^4 + iH^5 = -\frac{p^2}{3}\Psi.$$

§ 7. Волновые функции одного электрона в водородоподобных атомах

В настоящей работе рассмотрим стационарные волновые функции одного электрона с дискретным спектром в атоме водорода и в водородоподобных атомах. В этом случае Ψ зависит от трех координат $\Psi = \Psi(x_1, x_2, x_3)$ и подмногообразие F^3 задается в виде

$$x^4 = \operatorname{Re} \Psi(x^1, x^2, x^3), \quad x^5 = \operatorname{Im} \Psi(x^1, x^2, x^3). \quad (13)$$

Функция Ψ является решением уравнения Шрёдингера, которое в системе единиц Хартри имеет вид

$$\Delta \Psi + 2\left(E + \frac{Z}{r}\right)\Psi = 0,$$

где Δ – оператор Лапласа, E – энергия (постоянное число), Z – число протонов в ядре. В общем случае Ψ является комплексной функцией.

В трехмерном евклидовом пространстве E^3 с координатами x^1, x^2, x^3 введем сферическую систему координат r, θ, φ , положив

$$x^1 = r \sin \theta \cos \varphi, \quad x^2 = r \sin \theta \sin \varphi, \quad x^3 = r \cos \theta. \quad (14)$$

Метод разделения переменных в сферической системе координат дает набор собственных функций Ψ_{nlm} дискретного спектра с квантовыми числами n, l, m

$$\Psi_{nlm} = R_{nl}(r)F_{lm}(\theta)e^{im\varphi}.$$

Заметим, что n – главное квантовое число, l – орбитальное квантовое число и m – магнитное квантовое число. Эти числа могут принимать следующие значения:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l, \quad l = 0, \dots, n-1.$$

Определение R_{nl} и F_{lm} дадим ниже. Их выражения известны, см., например, [8]. Функция R_{nl} имеет $n-l-1$ нуль на полуоси $(0, \infty)$ и функция F_{lm} имеет $l-|m|$ нулей на открытом интервале $(0, \pi)$. В дальнейшем используем обозначение $\sigma(r, \theta) = R_{nl}F_{lm}$.

Запишем выражения функций R_{nl} и F_{lm}

$$R_{nl}(r) = \bar{a}e^{-\lambda r}r^l \sum_{k=0}^{n-l-1} \frac{C_{n+l}^{2l+1+k}}{k!} (-2\lambda r)^k,$$

где $\bar{a}$ – некоторая положительная постоянная, $\lambda = Z/n$. Эту формулу преобразуем таким образом, чтобы разложение под знаком суммы начиналось с 1, т.е. запишем

$$R_{nl}(r) = ae^{-\lambda r} r^l (1 - a_1 r + a_2 r^2 + \dots), \quad (15)$$

где $a, a_1, a_2, \dots$ – положительные постоянные. В дальнейшем нам понадобится коэффициент a_1

$$a_1 = \frac{n - l - 1}{(l + 1)n} Z. \quad (16)$$

Функция F_{lm} выражается через присоединенную функцию Лежандра: $F_{lm}(\theta) = P_{lm}(\cos \theta)$,

$$P_{lm}(x) = b(1 - x^2)^{m/2} \frac{d^{l+m}(x^2 - 1)^l}{dx^{l+m}}. \quad (17)$$

Здесь b – некоторая положительная постоянная. Произведение ab в дальнейшем опять будем обозначать буквой a . В определении присоединенной функции Лежандра надо положить $x = \cos \theta$.

§ 8. Метрика подмногообразия F^3

Будем считать, что r – первая криволинейная координата u^1 , $\theta = u^2$, $\varphi = u^3$. В некоторых случаях удобно использовать старые обозначения координат, в других – новые. Будем пользоваться и теми, и другими. Запишем выражение для радиус-вектора $\rho(r, \theta, \varphi)$ подмногообразия $F^3 \subset E^5$ и его производных, которые обозначим индексами снизу,

$$\begin{aligned} \rho &= \begin{pmatrix} r \sin \theta \cos \varphi \\ r \sin \theta \sin \varphi \\ r \cos \theta \\ \sigma \cos m\varphi \\ \sigma \sin m\varphi \end{pmatrix}, & \rho_1 &= \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \\ \sigma_1 \cos m\varphi \\ \sigma_1 \sin m\varphi \end{pmatrix}, \\ \rho_2 &= \begin{pmatrix} r \cos \theta \cos \varphi \\ r \cos \theta \sin \varphi \\ -r \sin \theta \\ \sigma_2 \cos m\varphi \\ \sigma_2 \sin m\varphi \end{pmatrix}, & \rho_3 &= \begin{pmatrix} -r \sin \theta \sin \varphi \\ r \sin \theta \cos \varphi \\ 0 \\ -m\sigma \sin m\varphi \\ m\sigma \cos m\varphi \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Следовательно, матрица коэффициентов g_{ij} метрики ds^2 подмногообразия F^3 имеет вид

$$\|g_{ij}\| = \begin{pmatrix} 1 + \sigma_1^2 & \sigma_1 \sigma_2 & 0 \\ \sigma_1 \sigma_2 & r^2 + \sigma_2^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Замечательным свойством метрики ds^2 является то обстоятельство, что коэффициенты g_{ij} не зависят от φ . По теореме Бомпиани поверхности $\varphi = \text{const}$ являются вполне геодезическими. Поэтому кривизна K_{12} подмногообразия F^3 по

площадке, касающейся координатных линий r, θ , совпадает с внутренней кривизной поверхности $\varphi = \text{const}$, т.е. кривизной метрики $ds_0^2 = (dr)^2 + r^2(d\theta)^2 + (d\sigma)^2$. Ниже мы приведем выражение кривизны K_{12} через производные функции σ . Заметим, что каждая поверхность $\varphi = \text{const}$ лежит в некотором 3-мерном евклидовом пространстве, которое задается уравнениями

$$x^1 \sin \varphi - x^2 \cos \varphi = 0, \quad x^4 \sin m\varphi - x^5 \cos m\varphi = 0.$$

Введем матрицу символов Кристоффеля первого рода

$$\begin{pmatrix} \Gamma_{11,1} & \Gamma_{11,2} & \Gamma_{11,3} \\ \Gamma_{12,1} & \Gamma_{12,2} & \Gamma_{12,3} \\ \Gamma_{22,1} & \Gamma_{22,2} & \Gamma_{22,3} \\ \Gamma_{13,1} & \Gamma_{13,2} & \Gamma_{13,3} \\ \Gamma_{23,1} & \Gamma_{23,2} & \Gamma_{23,3} \\ \Gamma_{33,1} & \Gamma_{33,2} & \Gamma_{33,3} \end{pmatrix}.$$

Через производные функции σ эта матрица записывается так:

$$\begin{pmatrix} \sigma_1 \sigma_{11} & \sigma_2 \sigma_{11} & 0 \\ \sigma_1 \sigma_{12} & r + \sigma_2 \sigma_{12} & 0 \\ -r + \sigma_1 \sigma_{22} & \sigma_2 \sigma_{22} & 0 \\ 0 & 0 & r \sin^2 \theta + m^2 \sigma \sigma_1 \\ 0 & 0 & r^2 \sin \theta \cos \theta + m^2 \sigma \sigma_2 \\ -r \sin^2 \theta - m^2 \sigma \sigma_1 & -r^2 \sin \theta \cos \theta - m^2 \sigma \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, символы Кристоффеля с одним индексом 3 равны нулю. Оказывается, что и компоненты тензора Римана R_{hijk} с одним индексом 3 тоже равны нулю: $R_{3212} = R_{3121} = 0$. Чтобы показать это, запишем общее выражение для компонент тензора Римана

$$R_{hijk} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g_{hk}}{\partial u^i \partial u^j} + \frac{\partial^2 g_{ij}}{\partial u^h \partial u^k} - \frac{\partial^2 g_{hj}}{\partial u^i \partial u^k} - \frac{\partial^2 g_{ik}}{\partial u^h \partial u^j} \right) + g^{lm} (\Gamma_{ij,m} \Gamma_{hk,l} - \Gamma_{ik,m} \Gamma_{hj,l}).$$

Не ограничивая общности, можно положить $h = 3$, остальные индексы равны 1 или 2. Первое выражение в круглых скобках равно нулю, так как $g_{3i} = 0$ при $i = 1, 2$ и так как g_{ij} не зависят от u^3 . Так как символы Кристоффеля первого рода с одним индексом 3 равны нулю, то второе выражение с символами Кристоффеля принимает вид

$$g^{33} (\Gamma_{ij,3} \Gamma_{3k,3} - \Gamma_{ik,3} \Gamma_{3j,3}).$$

Это выражение тоже равно нулю, так как $\Gamma_{ij,3} = \Gamma_{ik,3} = 0$. Итак, $R_{3121} = R_{3221} = 0$.

Отсюда следует, что матрица кривизны F^3 , составленная из компонент тензора Римана R_{hijk} , несколько упрощается и приобретает вид

$$\begin{pmatrix} R_{2323} & R_{2331} & 0 \\ R_{2331} & R_{1313} & 0 \\ 0 & 0 & R_{1212} \end{pmatrix}.$$

Установим формулу для скалярной кривизны $R = R_{hijk}g^{hj}g^{ik}$. Заметим, что $g^{13} = g^{23} = 0$ и $g^{33} = 1/g_{33}$. С учетом этих соотношений и вида матрицы кривизны получим

$$\frac{R}{2} = g^{33}(R_{2323}g^{22} + 2R_{1323}g^{12} + R_{1313}g^{11}) + R_{1212}(g^{11}g^{22} - (g^{12})^2).$$

Запишем выражения компонент тензора Римана в первых круглых скобках

$$\begin{aligned} R_{2323} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_{33}}{\partial u^2 \partial u^2} + g^{33}(\Gamma_{32,3})^2 - \sum_{l,m=1}^2 \Gamma_{33,l} \Gamma_{22,m} g^{lm}, \\ R_{1323} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_{33}}{\partial u^1 \partial u^2} + g^{33} \Gamma_{32,3} \Gamma_{13,3} - \sum_{l,m=1}^2 \Gamma_{33,l} \Gamma_{12,m} g^{lm}, \\ R_{1313} &= -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_{33}}{\partial u^1 \partial u^1} + g^{33}(\Gamma_{31,3})^2 - \sum_{l,m=1}^2 \Gamma_{33,l} \Gamma_{11,m} g^{lm}. \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\Gamma_{33,l} = -\frac{1}{2} \frac{\partial g_{33}}{\partial u^l}, \quad \Gamma_{ij,m} g^{lm} = \Gamma_{ij}^l.$$

Выражение для скалярной кривизны записывается в таком виде:

$$\frac{R}{2} = g^{33} \left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2 g_{33}}{\partial u^i \partial u^j} - \Gamma_{ij}^l \frac{\partial g_{33}}{\partial u^l} \right) g^{ij} + g^{33} \Gamma_{3k,3} \Gamma_{3l,3} g^{kl} \right] + \frac{R_{1212}}{g_{11}g_{22} - (g_{12})^2}.$$

Обозначим ∇_2 – оператор Лапласа–Бельтрами метрики $ds_0^2 = (dr)^2 + r^2(d\theta)^2 + (d\sigma)^2$ и grad – градиент в этой же метрике. Тогда скалярная кривизна записывается так:

$$\frac{R}{2} = -\frac{\nabla_2 g_{33}}{2g_{33}} + \frac{|\text{grad } g_{33}|^2}{4g_{33}^2} + \frac{R_{1212}}{g_{11}g_{22} - (g_{12})^2}. \quad (19)$$

Легко проверить, что первые два члена справа можно объединить, и мы получим

$$\frac{R}{2} = -\frac{\nabla_2 \sqrt{g_{33}}}{\sqrt{g_{33}}} + \frac{R_{1212}}{g_{11}g_{22} - (g_{12})^2}. \quad (20)$$

Этой формулой воспользуемся в дальнейшем.

§ 9. Выражение скалярной кривизны через производные функции σ

Докажем, что имеет место следующее выражение для скалярной кривизны:

$$\begin{aligned} \frac{R}{2} &= -m^2 \left\{ \frac{\sigma^2 [r^2 + (\sigma_2 \sin \theta - \sigma_1 \cos \theta)^2] + r^2 \sin^2 \theta (r^2 \sigma_1^2 + \sigma_2^2)}{(r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)^2 (r^2 (1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2)} \right. \\ &\quad \left. - \frac{2r^2 \sigma \sin \theta (r \sigma_1 \sin \theta + \sigma_2 \cos \theta)}{(r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)^2 (r^2 (1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2)} \right\} \\ &\quad - \frac{r [\sigma_{11}(r^2 + \sigma_2^2) - 2\sigma_{12}\sigma_1\sigma_2 + \sigma_{22}(1 + \sigma_1^2)] + \sigma_1 [2\sigma_2^2 + r^2(1 + \sigma_1^2)]}{(r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)(r^2 (1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2)^2} \\ &\quad \times \{m^2 \sigma r - r \sin \theta (r \sigma_1 \sin \theta + \sigma_2 \cos \theta)\} + K_{12}. \end{aligned} \quad (21)$$

Последнее слагаемое в правой части является кривизной K_{12} подмногообразия F^3 и может быть вычислено по формуле

$$K_{12} = \frac{(\sigma_{11}\sigma_{22} - \sigma_{12}^2)/r^2 + (\sigma_{11}\sigma_1)/r + (2\sigma_{12}\sigma_2)/r^3 - \sigma_2^2/r^4}{(1 + \sigma_1^2 + \sigma_2^2/r^2)^2}, \quad (22)$$

так как K_{12} является кривизной метрики $ds_0^2 = (dr)^2 + r^2(d\theta)^2 + (d\sigma)^2$, записанной в полярных координатах.

Для дальнейшего вычисления скалярной кривизны воспользуемся формулой (19). Найдем $\nabla_2 g_{33}$. Введем вспомогательное пространство E^3 с координатами (y_1, y_2, y_3) . На координатной плоскости y_1, y_2 введем полярные координаты, положив $y_1 = r \sin \theta$, $y_2 = r \cos \theta$. (Заметим, что $y_1 = x_1$, $y_2 = x_3$ при $\varphi = 0$ в сферической системе координат.) В E^3 определим поверхность F^2 по формуле

$$y_3 = \tilde{\sigma}(y_1, y_2) = \sigma(r, \theta).$$

Если $y = (y_1, y_2, y_3)$ – радиус-вектор точки на этой поверхности, то $g_{33} = y_1^2 + m^2 y_3^2$. Следовательно,

$$\nabla_2 g_{33} = 2y_1 \nabla_2 y_1 + 2m^2 y_3 \nabla_2 y_3 + 2(|\text{grad } y_1|^2 + m^2 |\text{grad } y_3|^2).$$

Обозначим через $\tilde{H}$ среднюю кривизну поверхности F^2 и через $n = (n_1, n_2, n_3)$ – единичную нормаль. Известна следующая формула:

$$\nabla_2 y = 2\tilde{H}n.$$

Записывая ее покомпонентно, получим

$$\nabla_2 y_1 = 2\tilde{H}n_1, \quad \nabla_2 y_3 = 2\tilde{H}n_3.$$

Поэтому

$$\nabla_2 g_{33} = 4\tilde{H}(y_1 n_1 + m^2 y_3 n_3) + 2(|\text{grad } y_1|^2 + m^2 |\text{grad } y_3|^2).$$

Будем считать, что r, θ – криволинейные координаты на поверхности F^2 . Имеем выражение единичной нормали n в этих координатах

$$n = \mu \{ \cos \theta \sigma_2 + r \sin \theta \sigma_1, r \cos \theta \sigma_1 - \sin \theta \sigma_2, -r \},$$

где

$$\mu = \frac{1}{\sqrt{r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2}}.$$

Запишем выражения коэффициентов второй квадратичной формы F^2

$$L = -\mu r \sigma_{11}, \quad M = -\mu r \left(\sigma_{12} - \frac{\sigma_2}{r} \right), \quad N = -\mu r^2 \left(\frac{\sigma_{22}}{r} + \sigma_1 \right).$$

Следовательно, для средней кривизны получим выражение

$$\tilde{H} = -\frac{r[\sigma_{11}(r^2 + \sigma_2^2) - 2\sigma_{12}\sigma_1\sigma_2 + \sigma_{22}(1 + \sigma_1^2)] + \sigma_1[r^2(1 + \sigma_1^2) + 2\sigma_2^2]}{2[r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2]^{3/2}}.$$

С помощью компонент y_i и n_i находим

$$y_1 n_1 + m^2 y_3 n_3 = \frac{-r\sigma m^2 + r \sin \theta (\cos \theta \sigma_2 + r \sin \theta \sigma_1)}{\sqrt{r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2}}.$$

С помощью обычных формул римановой геометрии находим

$$|\text{grad } y_1|^2 = \frac{r^2 + (\sin \theta \sigma_2 - r \cos \theta \sigma_1)^2}{r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2} = n_3^2 + n_2^2,$$

$$|\text{grad } y_3|^2 = \frac{r^2 \sigma_1^2 + \sigma_2^2}{r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2} = n_1^2 + n_2^2.$$

Далее находим

$$\frac{|\text{grad } g_{33}|^2}{4(g_{33})^2} = \frac{r^2 \sin^2 \theta (n_3^2 + n_2^2)}{[r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2]^2} + \frac{m^4 \sigma^2 (r^2 \sigma_1^2 + \sigma_2^2) + 2m^2 r^2 \sigma \sin \theta (r \sin \theta \sigma_1 + \cos \theta \sigma_2)}{[r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2]^2 [r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2]}.$$

Подставим полученные выражения в

$$-\frac{\nabla_2 g_{33}}{2g_{33}} + \frac{|\text{grad } g_{33}|^2}{4(g_{33})^2}.$$

При этом заметим, что слагаемые, содержащие m^4 в числителе, взаимно уничтожаются. Непосредственная подстановка дает выражение для скалярной кривизны (21).

§ 10. Секционная и скалярная кривизны в экстремальных и узловых точках

Запишем выражение скалярной кривизны в экстремальных точках функции σ , т.е. в точках, где $R'_{nl} = 0$, $F'_{lm} = 0$. В этих точках $\sigma_1 = \sigma_2 = 0$, $\sigma \neq 0$. Имеем довольно простое выражение

$$\frac{R}{2} = -\frac{m^2 \sigma^2}{(r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)^2} - \frac{m^2 \sigma (\sigma_{11} r^2 + \sigma_{22})}{r^2 (r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)} + \frac{\sigma_{11} \sigma_{22}}{r^2}.$$

Вторые производные функции σ в экстремальных точках можно выразить через значения σ и r . Действительно, для функций $R_{nl}(r)$ и $F_{lm}(\theta)$ известны следующие уравнения:

$$R''_{nl} + \frac{2R'_{nl}}{r} + \left[-\frac{Z^2}{n^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R_{nl} = 0,$$

$$F''_{lm} + \frac{\cos \theta}{\sin \theta} F'_{lm} + \left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] F_{lm} = 0.$$

Поэтому в экстремальных точках получим

$$\sigma_{11} = -\left[-\frac{Z^2}{n^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] \sigma, \quad \sigma_{22} = -\left[l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right] \sigma.$$

Обозначим

$$-\frac{Z^2}{n^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} = T, \quad l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} = M.$$

Величина T является кинетической энергией электрона. Область, где $T \geq 0$, является областью классической орбиты электрона [8]. С помощью этих обозначений для скалярной кривизны в экстремальных точках можно записать

$$\frac{R}{2} = \sigma^2 \left[-\frac{m^2}{(r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)^2} + \frac{m^2(T r^2 + M)}{r^2(r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2)} + \frac{TM}{r^2} \right].$$

Имеет место следующая

ЛЕММА 1. *В экстремальных точках функции σ имеют место неравенства $T \geq 0$, $M \geq 0$.*

В свою очередь эта лемма основывается на следующей лемме.

ЛЕММА 2. *Функции R_{nl} и F_{lm} обладают следующим свойством: их точки локального максимума лежат выше оси абсцисс, а точки локального минимума лежат ниже этой оси.*

Рассмотрим функции $R_{nl}(r)$. Заметим, что каждая функция $R_{nl}(r) \rightarrow 0$ при $r \rightarrow \infty$. Функция $R_{n0}(r)$ стремится к конечному положительному пределу при $r \rightarrow 0$. При $l > 0$ и $r \rightarrow 0$ функция $R_{nl}(r) \rightarrow 0$. Известно, что число ее нулей на открытом луче $(0, \infty)$ равно $n - l - 1$ и эти нули простые. Экстремальные точки на этом же луче являются нулями полинома степени $n - l$, т.е. их число только на 1 больше числа нулей R_{nl} . Если бы был локальный минимум, лежащий выше оси абсцисс, то экстремальных точек было бы по крайней мере на 2 больше.

Аналогичное рассуждение справедливо и для функций $F_{lm}(\theta)$. При $m = 0$ функция $F_{l0}(\theta)$ имеет конечные значения в граничных точках $\theta = 0$, $\theta = \pi$. При $|m| > 0$ $F_{lm}(0) = F_{lm}(\pi) = 0$. Напомним также, что $F_{lm}(\theta)$ имеет $l - |m|$ нулей на открытом интервале $(0, \pi)$.

Детальные выражения некоторых функций R_{nl} и F_{lm} и их графики приведены в книге [8].

Покажем, как из леммы 2 следует лемма 1. Рассмотрим экстремальную точку функции R_{nl} , например, точку локального максимума. В этой точке $\sigma > 0$, $\sigma_{11} \leq 0$. Из соотношения, связывающего σ и σ_{11} , следует $T \geq 0$. В точке локального минимума имеем $\sigma < 0$, $\sigma_{11} \geq 0$. Поэтому, опять $T \geq 0$. Аналогичным образом доказывается неравенство $M \leq 0$. Лемма 1 доказана.

Отсюда можно заключить, что все экстремальные точки лежат в области классической орбиты электрона.

Эта область согласно [8; § 3] лежит между сферами с радиусами r_1 , r_2 ,

$$r_{1,2} = \frac{n^2}{Z} \pm \frac{n}{Z} \sqrt{n^2 - l(l+1)}.$$

Эта область определяется из условия, что кинетическая энергия электрона неотрицательна

$$-\frac{Z^2}{n^2} + \frac{2Z}{r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \geq 0.$$

Из выражения K_{12} в экстремальной точке

$$K_{12} = \frac{\sigma^2 T M}{r^2}$$

и леммы 1 следует, что в экстремальной точке $K_{12} \geq 0$.

Имеет место следующая

ЛЕММА 3. *Если $m = 0$, то в экстремальной точке матрица кривизны диагональная. В узловых точках матрица кривизны диагональная и без условия $m = 0$.*

Для доказательства этой леммы нам достаточно показать, что в этих точках $R_{1323} = 0$. В экстремальной точке по определению $R'_{nl}(r) = 0$ и $F'_{lm}(\theta) = 0$. Следовательно, в этой точке $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_{12} = 0$. Имеем

$$R_{1323} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_{33}}{\partial u^1 \partial u^2} + g^{33} \Gamma_{32,3} \Gamma_{13,3} - \sum_{l,m=1}^2 \Gamma_{33,l} \Gamma_{12,m} g^{lm}.$$

В экстремальной точке матрица коэффициентов метрики диагональная и символы Кристоффеля упрощаются. Мы получим, не предполагая пока $m = 0$,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 g_{33}}{\partial u^1 \partial u^2} &= 4r \sin \theta \cos \theta, & \Gamma_{32,3} &= r^2 \sin \theta \cos \theta, & \Gamma_{31,3} &= r \sin^2 \theta. \\ \Gamma_{12,2} &= 0, & \Gamma_{33,2} \Gamma_{12,2} &= -r^3 \sin \theta \cos \theta, \\ g^{22} &= \frac{1}{r^2}, & g^{33} &= \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2}. \end{aligned}$$

Поэтому

$$R_{1323} = -2r \sin \theta \cos \theta + \frac{r^3 \sin^3 \theta \cos \theta}{r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2} + r \sin \theta \cos \theta.$$

Очевидно, при $m = 0$ имеем $R_{1323} = 0$. Утверждение доказано для экстремальных точек. В узловой точке $R_{nl}(r) = 0$ и $F_{nl}(\theta) = 0$. Поэтому в этой точке $\sigma = \sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_{11} = \sigma_{22} = 0$. Но $\sigma_{12} = R'_{nl} F'_{lm} \neq 0$, так как нули функций $R_{nl}(r)$ и $F_{lm}(\theta)$ простые. В узловой точке для R_{1323} получим то же выражение, которое выписано выше. Так как в этой точке $\sigma = 0$, то получим $R_{1323} = 0$, что и доказывает лемму.

ЛЕММА 4. *Если $m = 0$, то в экстремальной точке $K_{13} = K_{23} = 0$. В узловой точке заключение справедливо и без условия $m = 0$.*

Действительно, в экстремальной и узловой точке получим

$$R_{1313} = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 g_{33}}{\partial u^1 \partial u^1} + g^{33} (\Gamma_{31,3})^2 = -\sin^2 \theta + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} (r \sin^2 \theta)^2 = 0.$$

Аналогично доказывается, что $R_{2323} = 0$.

Из лемм 1, 3 и 4 следует теорема 1.

В узловой точке, так как $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_{11} = \sigma_{22} = 0$, получим

$$K_{12} = -\frac{\sigma_{12}^2}{r^2} < 0,$$

что и доказывает теорему 2.

§ 11. Асимптотическое поведение скалярной кривизны

Рассмотрим поведение скалярной кривизны при $r \rightarrow 0$ на плоскости x_1, x_2 , т.е. при $\theta = \pi/2$. Используя выражения (15)–(17) докажем теорему 3.

Сначала будем предполагать, что $l > 1$.

1. Пусть $l - m$ – нечетное число. С помощью (17) запишем выражение $F_{lm}(\theta) = b \sin^m \theta T_{lm}(\cos \theta)$, где полином T_{lm} имеет вид

$$T_{lm}(\cos \theta) = (\cos \theta)^{l-m} c_{l-m} - (\cos \theta)^{l-m-2} c_{l-m-2} + \dots$$

Коэффициенты c_k – положительные постоянные, $b = \text{const} \neq 0$. Если $l - m$ – нечетное число, то разложение полинома T_{lm} оканчивается на $\pm c_1 \cos \theta$. Поэтому $T_{lm}(\pi/2) = 0$. Следовательно, при $l - m$ нечетном и $\theta = \pi/2$ имеем

$$\sigma = \sigma_1 = \sigma_{11} = 0.$$

Следовательно,

$$\frac{R}{2} = -\frac{m^2 \sigma_2^2}{r^2(r^2 + \sigma_2^2)} - \frac{(\sigma_{12}r - \sigma_2)^2}{(r^2 + \sigma_2^2)^2} \leq 0.$$

2. Пусть $l - m$ – четное число. В этом случае выражение скалярной кривизны сложнее. Имеем

$$\begin{aligned} \sigma_2 = R_{nl} F'_{lm} &= R_{nl} \{ m(\sin \theta)^{m-1} \cos \theta T_{lm} \\ &- (\sin \theta)^{m+1} [(\cos \theta)^{l-m-1} c_{l-m} - \dots \pm c_2 \cos \theta] \} = 0. \end{aligned}$$

Выражение скалярной кривизны запишем в виде суммы трех слагаемых

$$\frac{R}{2} = A_1 + A_2 + A_3.$$

Рассмотрим каждое слагаемое отдельно. Первое

$$A_1 = -\frac{m^2(\sigma - r\sigma_1)^2}{(r^2 + m^2\sigma^2)^2(1 + \sigma_1^2)}.$$

Имеем

$$\begin{aligned} \sigma - r\sigma_1 &= ae^{-\lambda r} (r^l L_{nl} - r(-\lambda r^l L_{nl} + l r^{l-1} L_{nl} + r^l L'_{nl}) F_{lm} \\ &= (ae^{-\lambda r} r^l (1 - l) L_{nl} + \dots) b c_0, \end{aligned}$$

где точками заменены члены, содержащие r в степени, большей l . Итак, выпишывая только главные члены асимптотики, получим

$$A_1 = -m^2(\bar{b})^2 a^2 e^{-2\lambda r} r^{2l-4} (1 - l)^2 + \dots < 0,$$

где $\bar{b}$ – положительная постоянная.

При рассмотрении A_2 и A_3 заменим σ_{11} и σ_{22} с помощью выше приведенных уравнений

$$\begin{aligned}
 A_2 &= -\frac{[\sigma_{11}r^2 + \sigma_{22}(1 + \sigma_1^2) + \sigma_1r(1 + \sigma_1^2)][m^2\sigma - r\sigma_1]}{(r^2 + m^2\sigma^2)(1 + \sigma_1^2)r^2} \\
 &= -\left(\frac{\{-2\sigma_1/r - [-Z^2/n^2 + 2Z/r - l(l+1)/r^2]\sigma\}r^2}{(r^2 + m^2\sigma^2)(1 + \sigma_1^2)^2r^2} - \frac{[l(l+1) - m^2]\sigma(1 + \sigma_1^2) + \sigma_1r(1 + \sigma_1^2)}{(r^2 + m^2\sigma^2)(1 + \sigma_1^2)^2r^2}\right)[m^2\sigma - r\sigma_1] \\
 &= \frac{2\sigma_1r - l(l+1)\sigma + l(l+1)\sigma - m^2\sigma - \sigma_1r}{(r^2 + m^2\sigma^2)(1 + \sigma_1^2)^2r^2}[m^2\sigma - r\sigma_1] \\
 &= -\frac{(m^2\sigma - \sigma_1r)^2}{(r^2 + m^2\sigma^2)(1 + \sigma_1^2)^2r^2} = -a^2(\bar{b})^2e^{-2\lambda r}r^{2l-4}(-m^2 + l)^2 + \dots \leq 0.
 \end{aligned}$$

Рассмотрим A_3 :

$$\begin{aligned}
 A_3 &= \frac{\sigma_{11}(\sigma_{22} + \sigma_1r)}{r^2(1 + \sigma_1^2)^2} = \frac{[2\sigma_1r - l(l+1)\sigma][l(l+1) - m^2]\sigma - \sigma_1r}{r^4(1 + \sigma_1^2)^2} \\
 &= -a^2(\bar{b})^2e^{-2\lambda r}r^{2l-4}l(l-1)(l^2 - m^2) + \dots < 0.
 \end{aligned}$$

Итак, все три A_i неположительны при достаточно малом r , и при этом A_1 и A_3 строго отрицательны и имеют один и тот же порядок убывания модулей $2l - 4$, в то же время порядок убывания модуля A_2 не меньше $2l - 4$. Следовательно, и в этом случае скалярная кривизна на плоскости $\theta = \pi/2$ вблизи ядра строго отрицательна.

Если $l = 1$ или $l = 0$ картина может быть другой, так как надо привлекать следующие члены разложений.

Пусть $l = m = 1$. Функция σ в этом случае записывается в виде

$$\sigma = R_{n1}F_{11} = ae^{-\lambda r}rL_{n1}(r)\sin\theta,$$

причем полином $L_{n1}(0) = 1$. Заметим, что при $\theta = \pi/2$ производная $\sigma_2 = 0$. Выражение скалярной кривизны в этом случае следующее:

$$\begin{aligned}
 \frac{R}{2} &= -\frac{(\sigma - r\sigma_1)^2}{(r^2 + \sigma^2)^2(1 + \sigma_1^2)} \\
 &\quad - \frac{\{[\sigma_{11}r^2 + \sigma_{22}(1 + \sigma_1^2)] + r\sigma_1(1 + \sigma_1^2)\}(\sigma - r\sigma_1)}{r^2(r^2 + \sigma^2)(1 + \sigma_1^2)^2} + \frac{\sigma_{11}(\sigma_{22} + \sigma_1r)}{r^2(1 + \sigma_1^2)^2}.
 \end{aligned}$$

Заметим, что

$$\sigma - r\sigma_1 = ae^{-\lambda r}r^2(a_1 + \lambda + r(\lambda a_1 + 2a_2)) + \dots$$

Так как $\lambda = Z/n$, $a_1 = (n - 2)/(2n)$, см. (16), то мы получим

$$\sigma - r\sigma_1 = \frac{Z}{2}a^2e^{-2\lambda r}r^2 + O(r^3).$$

Поэтому A_1 имеет вид

$$A_1 = -\frac{Z^2}{4}a^2e^{-2\lambda r} + O(r).$$

Далее в выражениях A_2 и A_3 заменим вторые производные функции σ с помощью выписанных выше уравнений и возьмем главные члены асимптотики. Получим

$$\begin{aligned} A_2 &= \frac{(\sigma_1 r - \sigma)(1 - \sigma_1^2) + 2Z\sigma r + O(r^3)}{r^2(r^2 + \sigma^2)(1 + \sigma_1^2)^2}(\sigma - r\sigma_1) \\ &= \frac{3}{4}Z^2a^2e^{-2\lambda r} + \frac{\sigma_1^2(\sigma - r\sigma_1)^2}{r^2(r^2 + \sigma^2)(1 + \sigma_1^2)^2} + O(r). \end{aligned}$$

Аналогично получим следующее выражение:

$$A_3 = \frac{2(\sigma - r\sigma_1) - 2Z\sigma r + O(r^3)}{r^2(1 + \sigma_1^2)^2}(\sigma_1 r - \sigma) = \frac{Z^2}{2}a^2e^{-2\lambda r} + O(r).$$

Запишем общее выражение для скалярной кривизны

$$\frac{R}{2} = \left(-\frac{1}{4} + \frac{3}{4} + \frac{1}{2}\right)Z^2a^2e^{-2\lambda r} + \sigma_1^2a^2e^{-2\lambda r} + O(r).$$

Это выражение положительно при достаточно малом r . Следовательно, при $l = m = 1$ скалярная кривизна $R > 0$.

Пусть $l = 1$, $m = 0$. Так как $F_{10} = \sqrt{3/(4\pi)}\cos\theta$, то при $\theta = \pi/2$ имеем $\sigma = \sigma_1 = \sigma_{11} = 0$.

Выражение скалярной кривизны очень простое:

$$\frac{R}{2} = -\left[\frac{\sigma_{12}r - \sigma_2}{r^2 + \sigma_2^2}\right]^2 \leq 0.$$

Остается только рассмотреть случай $l = 0$, $m = 0$. Заметим, что $F_{00} = 1/\sqrt{4\pi}$. Функция σ имеет вид

$$\sigma = ae^{-\lambda r}(1 - a_1r + a_2r^2 + \dots),$$

где a_k – положительные постоянные. Скалярная кривизна имеет следующее выражение:

$$\frac{R}{2} = \frac{[2r\sigma_{11} + \sigma_1(1 + \sigma_1^2)]\sigma_1}{r^2(1 + \sigma_1^2)^2}.$$

Запишем выражения производных функции σ

$$\sigma_1 = ae^{-\lambda r}(-\lambda - a_1 + (\lambda a_1 + 2a_2)r + \dots), \quad \sigma_{11} = ae^{-\lambda r}(\lambda^2 + 2\lambda a_1 + 2a_2 + \dots).$$

Поэтому при $r \rightarrow 0$ σ_1 стремится к отрицательной постоянной, а $r\sigma_{11}$ стремится к нулю. Поэтому при $r \rightarrow 0$ скалярная кривизна $R > 0$. Теорема 3 доказана.

§ 12. Вектор средней кривизны подмногообразия, соответствующего волновой функции

Покажем, что, как и в случае свободной частицы, проекция вектора средней кривизны на плоскость волнового вектора, т.е. на плоскость ортов e_4, e_5 пропорциональна волновому вектору, т.е.

$$H^4 + iH^5 = \mu\Psi, \quad (23)$$

где μ – действительное число.

Для доказательства используем следующее выражение для вектора средней кривизны:

$$3H = \rho_{,ij}g^{ij},$$

где запятой обозначены ковариантные производные радиус-вектора ρ подмногообразия F^3 . Следовательно, для компонент H^4 и H^5 имеем выражения

$$H^4 = \frac{1}{3}z_{,ij}g^{ij}, \quad H^5 = \frac{1}{3}w_{,ij}g^{ij}.$$

Здесь индексы пробегает значения от 1 до 3. Запишем

$$\sum_{i,j=1}^3 z_{,ij}g^{ij} = \sum_{i,j=1}^2 z_{,ij}g^{ij} + z_{,33}g^{33}.$$

Имеет место соотношение

$$z_{,ij} = \frac{\partial^2 z}{\partial u^i \partial u^j} - \Gamma_{ij}^k \frac{\partial z}{\partial u^k}.$$

Здесь k пробегает значения от 1 до 3. При $i, j \leq 2$ имеем

$$\frac{\partial^2 z}{\partial u^i \partial u^j} = \sigma_{ij} \cos mu_3.$$

Далее,

$$\Gamma_{ij}^k = \Gamma_{ij,1}g^{1k} + \Gamma_{ij,2}g^{2k} + \Gamma_{ij,3}g^{3k}.$$

Заметим, что символы Кристоффеля с одним индексом 3 равны нулю: $\Gamma_{ij,3} = 0$. Кроме того, $g^{13} = g^{23} = 0$. Следовательно,

$$-\sum_{i,j=1}^2 \sum_{k=1}^3 \Gamma_{ij}^k \frac{\partial z}{\partial u^k} g^{ij} = -\sum_{i,j,l,s=1}^2 \Gamma_{ij,l} g^{ls} \sigma_s \cos mu^3.$$

Рассмотрим выражение

$$z_{,33} = \frac{\partial^2 z}{\partial u^3 \partial u^3} - \Gamma_{33}^k \frac{\partial z}{\partial u^k} = -m^2 \sigma \cos mu^3 - (\Gamma_{33,1}g^{1k} + \Gamma_{33,2}g^{2k}) \frac{\partial z}{\partial u^k}.$$

Можем считать, что k здесь принимает только значения 1, 2. Получим

$$z_{,33} = -m^2 \sigma \cos mu^3 + \frac{1}{2} \sum_{l,s} \frac{\partial g_{33}}{\partial u^l} g^{ls} \sigma_s \cos mu^3.$$

Итак,

$$H^4 = \left[\nabla_2 \sigma - m^2 \sigma + \sum_{l,s}^2 \frac{1}{2} \frac{\partial g_{33}}{\partial u^l} g^{ls} \sigma_s \right] \cos mu^3 = Q(u^1, u^2) \sigma \cos mu^3.$$

Здесь ∇_2 – оператор Лапласа–Бельтрами метрики ds_0^2 . Аналогично получим

$$H^5 = Q(u^1, u^2) \sigma \sin mu^3.$$

Последние два соотношения записываем в виде

$$H^4 + iH^5 = Q(u^1, u^2) \Psi.$$

Таким образом, наше утверждение (23) доказано.

§ 13. Тензор кривизны нормальной связности в координатах r, θ, φ

Для вычисления тензора кривизны нормальной связности $T_{12|ki}$ в координатах r, θ, φ используем следующие нормали к подмногообразию F^3 :

$$n_1 = \mu \begin{pmatrix} -\sigma m \sin \varphi \\ \sigma m \cos \varphi \\ 0 \\ r \sin \theta \sin m\varphi \\ -r \sin \theta \cos m\varphi \end{pmatrix}, \quad n_2 = \lambda \begin{pmatrix} -\cos \varphi (\sigma_2 \cos \theta + r \sigma_1 \sin \theta) \\ -\sin \varphi (\sigma_2 \cos \theta + r \sigma_1 \sin \theta) \\ \sigma_2 \sin \theta - r \sigma_1 \cos \theta \\ r \cos m\varphi \\ r \sin m\varphi \end{pmatrix},$$

где $\mu = 1/\sqrt{r^2 \sin^2 \theta + m^2 \sigma^2}$, $\lambda = 1/\sqrt{r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2}$. Непосредственной проверкой убеждаемся, что эти векторы ортогональны к касательным векторам ρ_i и друг другу. Запишем производные вектора n_1

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_1}{\partial r} &= \mu \begin{pmatrix} -\sigma_1 m \sin \varphi \\ \sigma_1 m \cos \varphi \\ 0 \\ \sin \theta \sin m\varphi \\ -\sin \theta \cos m\varphi \end{pmatrix} + \alpha_1 n_1, & \frac{\partial n_1}{\partial \theta} &= \mu \begin{pmatrix} -\sigma_2 m \sin \varphi \\ \sigma_2 m \cos \varphi \\ 0 \\ r \cos \theta \sin m\varphi \\ -r \cos \theta \cos m\varphi \end{pmatrix} + \alpha_2 n_1, \\ \frac{\partial n_1}{\partial \varphi} &= \mu \begin{pmatrix} -\sigma m \cos \varphi \\ -\sigma m \sin \varphi \\ 0 \\ rm \sin \theta \cos m\varphi \\ -rm \sin \theta \sin m\varphi \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Здесь α_i – некоторые числа. Запишем коэффициенты кручения базиса нормалей $\mu_{\alpha\beta|i} = (n_{\beta u^i} n_2)$. С помощью выписанных производных вектора n_1 получаем

$$\begin{aligned} \mu_{21|i} &= (n_{1u^i} n_2) = 0, \quad i = 1, 2, \\ \mu_{21|3} &= \Lambda, \quad \Lambda = \mu \lambda m [\sigma (\sigma_2 \cos \theta + r \sigma_1 \sin \theta) + r^2 \sin \theta]. \end{aligned}$$

По определению тензор кривизны нормальной связности

$$T_{21|ki} = \frac{\partial \mu_{21|i}}{\partial u^k} - \frac{\partial \mu_{21|k}}{\partial u^i}.$$

С помощью выписанных коэффициентов кручения находим

$$T_{21|12} = 0, \quad T_{21|13} = \frac{\partial \Lambda}{\partial r}, \quad T_{21|23} = \frac{\partial \Lambda}{\partial \theta}.$$

Следовательно, линейная форма на поверхности $\varphi = \text{const}$

$$\omega = T_{21|13}dr + T_{21|23}d\theta = d\Lambda$$

замкнута, т.е. $d\omega = 0$.

Установленные выражения для $T_{12|ij}$ показывают, что в общем случае, когда $m \neq 0$, тензор кривизны нормальной связности подмногообразия F^3 отличен от нуля.

§ 14. Интегральные соотношения

Рассмотрим выражение для скалярной кривизны. Обозначим через τ единичный вектор, касательный к координатной φ -линии на подмногообразии F^3 , и через $\text{Ric}(\tau)$ – кривизну Риччи в направлении вектора τ этого подмногообразия. Заметим, что

$$\frac{R}{2} = \text{Ric}(\tau) + K_{12}.$$

Следовательно, используя (20), получим

$$\text{Ric}(\tau) = -\frac{\nabla_2 \sqrt{g_{33}}}{\sqrt{g_{33}}}. \quad (24)$$

Поэтому в тех точках, где g_{33} достигает локального максимума, кривизна Риччи $\text{Ric}(\tau) \geq 0$.

Рассмотрим на подмногообразии 3-мерную торообразную область, которая строится следующим образом. Пусть Γ – замкнутая кривая $g_{33} = \text{const}$ на поверхности $\varphi = \text{const}$ – граница области на этой поверхности, содержащей этот локальный максимум. Из каждой точки области D выпустим φ -линию. Множество точек этих линий, когда φ изменяется от 0 до 2π , образует торообразное тело T . Рассмотрим интеграл от кривизны Риччи $\text{Ric}(\tau)$ по объему тела T . Элемент объема F^3 обозначим dV , элемент площади области D через dS_0 , а единичную внешнюю нормаль к кривой Γ обозначим ν . Учитывая (24) имеем

$$\int_T \text{Ric}(\tau) dV = -2\pi \int_D \nabla_2 \sqrt{g_{33}} dS_0 = -2\pi \int_\Gamma (\text{grad } \sqrt{g_{33}}, \nu) ds_0.$$

Здесь градиент функции g_{33} берется в метрике ds_0^2 . Так как на кривой Γ этот градиент имеет противоположное направление к ν , то

$$\int_T \text{Ric}(\tau) dV \geq 0.$$

Если же замкнутая кривая Γ не обязательно есть линия уровня функции g_{33} , то имеет место оценка для модуля интеграла от кривизны Риччи

$$\left| \int_T \text{Ric}(\tau) dV \right| \leq 2\pi(1+m)l(\Gamma),$$

где $l(\Gamma)$ – длина кривой Γ .

Действительно, рассмотрим функцию $\sigma(r, \theta)$ над плоскостью с координатами $x^1 = r \sin \theta$, $x^3 = r \cos \theta$, положив в (14) $\varphi = 0$. Тогда можно записать

$$ds_0^2 = (dx^1)^2 + (dx^3)^2 + (d\sigma)^2, \quad g_{33} = (x^1)^2 + m^2 \sigma^2.$$

Так как для производных в направлении, ортогональном к Γ , имеем

$$\left| \frac{dx^1}{ds_0} \right| \leq 1, \quad \left| \frac{d\sigma}{ds_0} \right| \leq 1,$$

то получим

$$|(\text{grad } \sqrt{g_{33}}, \nu)| = \left| \frac{x^1 \frac{dx^1}{ds_0} + m^2 \sigma \frac{d\sigma}{ds_0}}{\sqrt{(x^1)^2 + m^2 \sigma^2}} \right| \leq 1 + m,$$

что и доказывает наше утверждение.

Второе интегральное соотношение получим с помощью формулы Гаусса–Бонне. Будем предполагать, что $l > 1$. Пусть область G на поверхности $\varphi = \text{const}$ ограничена координатными линиями $r = \rho_1$, $r = \rho_2$, $\theta = \theta_1$, $\theta = \theta_2$, причем $F'_{lm}(\theta_i) = 0$. Тогда интеграл от K_{12} по бесконечной полуполосе

$$\lim_{\rho_1 \rightarrow 0, \rho_2 \rightarrow \infty} \int_G K_{12} dS_0 = 0. \quad (25)$$

Запишем формулу Гаусса–Бонне для области, ограниченной кусочно гладкой кривой Γ

$$\int_G K_{12} dS_0 + \int_\Gamma k_g ds_0 + \sum_i (\pi - \alpha_i) = 2\pi, \quad (26)$$

здесь k_g – геодезическая кривизна границы. Напомним общую формулу для геодезической кривизны линии $f(r, \theta) = \text{const}$

$$k_g = \frac{1}{W} \left\{ \left(\frac{g_{12}f_\theta - g_{22}f_r}{M(f)} \right)_r + \left(\frac{g_{12}f_r - g_{11}f_\theta}{M(f)} \right)_\theta \right\},$$

где мы ввели обозначения

$$M(f) = \sqrt{g_{11}f_\theta^2 - 2g_{12}f_r f_\theta + g_{22}f_r^2}, \quad W = \sqrt{g_{11}g_{22} - g_{12}^2} = \sqrt{r^2(1 + \sigma_1^2) + \sigma_2^2}.$$

Запишем геодезическую кривизну линии $\theta = \text{const}$

$$k_{g\theta} = \frac{1}{W} \left\{ \left(\frac{\sigma_1 \sigma_2}{\sqrt{1 + \sigma_1^2}} \right)_1 - \left(\frac{1 + \sigma_1^2}{\sqrt{1 + \sigma_1^2}} \right)_2 \right\} = \frac{\sigma_2 \sigma_{11}}{W(1 + \sigma_1^2)^{3/4}}.$$

По предположению на граничной линии $\theta = \text{const}$ выполняется $\sigma_2 = 0$. Следовательно, эта линия геодезическая. Рассмотрим геодезическую кривизну линии $r = \text{const}$. Имеем

$$k_{gr} = \frac{1}{W} \left\{ -\frac{r}{\sqrt{r^2 + \sigma_2^2}} + \frac{r^2 \sigma_1 \sigma_{22}}{(r^2 + \sigma_2^2)^{3/2}} \right\}.$$

Заметим, что для линии $r = \text{const}$ элемент длины дуги равен $ds_0 = \sqrt{r^2 + \sigma_2^2} d\theta$. Интеграл по длине дуги линии $r = \text{const}$ от ее геодезической кривизны запишем в виде суммы двух интегралов

$$\int_r k_g ds_0 = I_1(r) + I_2(r),$$

где

$$I_1 = - \int_{r=\text{const}} \frac{r}{W} d\theta, \quad I_2 = \int_{r=\text{const}} \frac{r^2 \sigma_1 \sigma_{22}}{W(r^2 + \sigma_2^2)} d\theta.$$

В предположении $l > 1$ при $r \rightarrow 0$ или $r \rightarrow \infty$

$$I_1 \rightarrow \theta_1 - \theta_2.$$

Так как в формуле Гаусса–Бонне в интегралах интегрирование происходит в противоположных направлениях, то

$$\lim_{\rho_1 \rightarrow 0} I_1(\rho_1) + \lim_{\rho_2 \rightarrow \infty} I_1(\rho_2) = 0.$$

Интеграл $I_2(r)$ асимптотически при $r \rightarrow 0$ запишется в виде

$$I_2(r) = a^2 e^{-2\lambda r} r^{2l-2} l \int_{r=\text{const}} \frac{F_{lm} F_{lm}''}{\sqrt{1 + a^2 e^{-2\lambda r} r^{2l-2} (l^2 F_{lm}^2 + (F_{lm}')^2)}} d\theta \times \frac{1}{(1 + a^2 e^{-2\lambda r} r^{2l-2} (F_{lm}')^2)}.$$

Поэтому

$$\lim_{r \rightarrow 0} I_2(r) = 0.$$

Аналогично, так как числитель дроби, входящей под знак интеграла, содержит $e^{-\lambda r}$, получим

$$\lim_{r \rightarrow \infty} I_2(r) = 0.$$

Рассмотрим теперь углы α_i в вершинах координатного прямоугольника. По формуле из дифференциальной геометрии имеем

$$\cos \alpha_i = \frac{g_{12}}{\sqrt{g_{11} g_{22}}} = \frac{\sigma_1 \sigma_2}{\sqrt{(1 + \sigma_1^2)(r^2 + \sigma_2^2)}}.$$

Так как на линиях $\theta = \theta_i$ имеем $\sigma_2 = 0$, то $\cos \alpha_i = 0$, т.е. $\alpha_i = \pi/2$. Поэтому

$$\sum_i (\pi - \alpha_i) = 2\pi.$$

Следовательно, с учетом (26) устанавливаем (25).

§ 15. Геодезические линии

Рассмотрим геодезические линии подмногообразия F^3 . Используем обозначения координат $u^1 = r$, $u^2 = \theta$, $u^3 = \varphi$. Установим один первый интеграл системы уравнений геодезических линий

$$\frac{d^2 u^k}{ds^2} + \Gamma_{ij}^k \frac{du^i}{ds} \frac{du^j}{ds} = 0, \quad k = 1, 2, 3.$$

Выберем из этой системы уравнение, соответствующее $k = 3$, которое в нашем случае запишется в виде

$$\frac{d^2 u^3}{ds^2} + 2 \left(\Gamma_{13,3} \frac{du^1}{ds} + \Gamma_{23,3} \frac{du^2}{ds} \right) \frac{du^3}{ds} g^{33} = 0.$$

Так как для символов Кристоффеля имеем выражения

$$\Gamma_{i3,3} = \frac{1}{2} \frac{\partial g_{33}}{\partial u^i}, \quad i = 1, 2,$$

то это уравнение переписывается в виде

$$\frac{d^2 u^3}{ds^2} + \frac{d \ln g_{33}}{ds} \frac{du^3}{ds} = 0.$$

Поэтому существует некоторая постоянная c_0 такая, что имеет место равенство

$$\frac{du^3}{ds} = \frac{c_0}{g_{33}},$$

которое является искомым первым интегралом системы уравнений геодезических линий. Из него следует, что если геодезическая линия касается поверхности $\varphi = \text{const}$, т.е. $c_0 = 0$, то она лежит на этой поверхности. Это также следует из упоминавшегося выше свойства, которое утверждает, что поверхность $\varphi = \text{const}$ вполне геодезична.

Выше мы уже упоминали, что кривые $\theta = \theta_i = \text{const}$ на поверхности $\varphi = \text{const}$ являются геодезическими, если $\sigma_2(r, \theta_i) = 0$.

Не ясно значение геодезических линий с физической точки зрения. Не будут ли это траектории пробных электрически заряженных частиц (например, α -частиц), попавших в сложное поле взаимодействия электрона и протона? В книге [9] высказывается гипотеза о существовании частиц с дробным электрическим зарядом, хотя пока их никому не удалось наблюдать.

§ 16. Одно геометрическое обобщение уравнения Шрёдингера

Рассмотрим связь уравнения Шрёдингера с вариационной геометрической проблемой в том случае, когда магнитное квантовое число $m = 0$. Пусть в ограниченной области G пространства E^3 с координатами x^1, x^2, x^3 задана функция $V(x^1, x^2, x^3)$, которая в уравнении Шрёдингера играет роль потенциала. Рассмотрим гиперповерхность $F^3 \subset E^4$, задаваемую в виде $z = z(x^1, x^2, x^3)$. Пусть область D гиперповерхности F^3 лежит над G . Заметим, что элемент 4-мерного

объема области в E^4 , заключенной между областями G и D равен $z dx^1 dx^2 dx^3$. Будем искать экстремум интеграла

$$J = \frac{1}{2} \int_G V(x^1, x^2, x^2) z^2 dx^1 dx^2 dx^3$$

при условии, что 3-мерный объем Ω^3 области D

$$\Omega^3 = \int_G \sqrt{1 + |\text{grad } z|^2} dx^1 dx^2 dx^3$$

постоянен. По правилам вариационного исчисления рассматриваем функционал

$$J + \lambda \Omega^3 = \int_G L dx^1 dx^2 dx^3,$$

где $\lambda = \text{const}$ и $L = \frac{1}{2} V z^2 + \lambda \sqrt{1 + |\text{grad } z|^2}$. Уравнение Эйлера–Лагранжа записывается в виде

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{\partial L}{\partial z_{x^i}} \right) - \frac{\partial L}{\partial z} = \lambda \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{z_{x^i}}{\sqrt{1 + |\text{grad } z|^2}} \right) - V z = 0.$$

Здесь по i ведется суммирование. Для гиперповерхности средняя кривизна H вычисляется по следующей формуле:

$$H = \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x^i} \left(\frac{z_{x^i}}{\sqrt{1 + |\text{grad } z|^2}} \right).$$

Поэтому уравнение экстремума функционала $J + \lambda \Omega^3$ можно записать в виде

$$3\lambda H - V z = 0. \quad (27)$$

Линейная часть этого уравнения по производным z_{x^i} дает стационарное уравнение Шрёдингера, так как выражение для средней кривизны можно записать в виде

$$H = \frac{1}{3} \left(\frac{\nabla_2 z}{\sqrt{1 + |\text{grad } z|^2}} - \frac{z_{x^i x^j} z_{x^i} z_{x^j}}{(1 + |\text{grad } z|^2)^{3/2}} \right),$$

где ∇_2 – оператор Лапласа. Действительно, отбрасывая члены с первыми производными функции z , получим, что уравнение (27) превращается в уравнение $\lambda \nabla_2 z - V z = 0$. При соответствующем выборе потенциальной функции V это уравнение будет совпадать с уравнением Шрёдингера. Таким образом, уравнение (27) является геометрическим обобщением стационарного уравнения Шрёдингера, связанным с вариационной проблемой.

Список литературы

- [1] Ю. А. Аминов, “Геометрия волновых функций”, *Докл. РАН*, **440**:4 (2011), 439–442; англ. пер.: Yu. A. Aminov, “Geometry of wave functions”, *Dokl. Math.*, **84**:2 (2011), 656–659.
- [2] Э. Шрёдингер, *Избранные труды по квантовой механике*, Наука, М., 1976; пер. с англ.: E. Schrödinger, *Collected papers on wave mechanics*, Blackie, London, 1928.

- [3] В. А. Фок, А. Эйнштейн, Б. Подольский, Н. Розен, Н. Бор, “Можно ли считать, что квантово-механическое описание физической реальности является полным?”, *УФН*, 1936, № 4, 436–457.
- [4] А. Д. Александров, “О парадоксе Эйнштейна в квантовой механике”, *Докл. АН СССР*, **84**:2 (1952), 253–256.
- [5] А. Д. Александров, “О смысле волновой функции”, *Докл. АН СССР*, **85**:2 (1952), 291–294.
- [6] И. С. Дмитриев, *Электрон глазами химика*, Химия, Л., 1986.
- [7] *Вглубь материи. Физика XXI века глазами создателей экспериментального комплекса на Большом адронном коллайдере в Женеве*, Сборник статей, Этерна, М., 2009.
- [8] Г. Бете, Э. Солпитер, *Квантовая механика атомов с одним и двумя электронами*, ГИФМЛ, М., 1960; пер. с англ.: Н. А. Bethe, E. E. Salpeter, *Quantum mechanics of one- and two- electron atoms*, Springer-Verlag, Berlin–New York, 1957.
- [9] Б. Грин, *Элегантная Вселенная. Суперструны, скрытые размерности и поиски окончательной теории*, Едиториал УРСС, М., 2005; пер. с англ.: В. Greene, *The elegant universe*, Springer-Verlag, New York, 1999.

Ю. А. Аминов (Yu. A. Aminov)

Физико-технический институт низких температур
им. Б. И. Веркина НАН Украины, г. Харьков
E-mail: aminov@ilt.kharkov.ua

Поступила в редакцию
09.09.2011 и 19.07.2012