Письма в ЖЭТФ, том 38, вып. 10, стр. 501 – 505 *25 ноября 1983 г.*

ДИНАМИЧЕСКИЕ АЛГЕБРЫ КУЛОНОВСКОЙ ЗАДАЧИ ДВУХ ЦЕНТРОВ

А.М.Фролов

В работе построены динамические алгебры кулоновской задачи двух центров. Рассмотрены представления этих алгебр и получены условия эквивалентности представлений построенных динамических алгебр кулоновской задаче двух центров. Развитый подход имеет значение для установления аналитических свойств кулоновских двухцентровых функций, нахождения рекурентных соотношений между интегралами этих функций и т. п.

В настоящее время в связи с успешным применением представлений групп $O(2,2) \otimes O(4)$, $O(2,2) \otimes O(2,2)$ [1,2] в кулоновской задаче двух центров актуальной стала задача построения динамических групп для подобных систем. В работе построены соответствующие алгебры и для представлений приведены условия эквивалентности исходных кулоновских двухцентровых задач кулоновским задачам одного центра.

Рассматривается нерелятивистская кулоновская задача двух неподвижных центров q_1 и q_2 ($|q_1| \geqslant |q_2|$), расположенных на оси z, с междуцентровым расстоянием R и началом координат, выбранном в левом центре. Используются атомные единицы. В координатах вытянутого сфероида (КВС) ξ, η, α, связанных с декартовыми:

$$x = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\cos\alpha\,; \quad y = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\sin\alpha\,,$$

$$z = \frac{R}{2}(\xi\eta + 1) \tag{1}$$

переменные ξ, η, α в уравнении Шредингера разделяются и волновая функция $\psi_i(\xi, \eta, \alpha; R)$ представима в виде

$$\psi_j(\xi, \eta, \alpha; R) = N_j(R)\,\Pi^1_j(\xi, R)\,\Sigma^1_j(\eta, R)\,e^{im\alpha}\,. \tag{2}$$

В качестве примера приведем здесь уравнение для функции $\Pi^1_j(\xi, R)$[3]:

$$\left[\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{R^2}{2}E_j(\xi^2-1) + R(q_1+q_2)\xi + \lambda_j - \frac{m^2}{\xi^2-1}\right]\Pi^1_j(\xi, R) = 0,$$

где $E_j(R)$ – энергия системы, $\lambda_j(R)$ – константа разделения.

Известно, что при тех же R, E, λ и m^2 существуют решения кулоновской задачи двух центров для системы q_1; $-q_2$;

$$\varphi_j(\xi, \eta, a; R) = M_j(R)\,\Pi^2_j(\xi, R)\,\Sigma^2_j(\eta, R)\,e^{im\alpha} \tag{2'}$$

$N_j(R)$ и $M_j(R)$ – "постоянные" нормировки.

Функция $\Pi^1_j(\xi, R)$ совпадает с радиальной кулоновской сфероидальной функцией [3].

Функция $\Sigma^1_j(\eta, R)$ есть угловая кулоновская сфероидальная функция одноцентровой системы $Q_- = q_1 - q_2$. Функции $\Pi^2_j(\eta, R)$ и $\Sigma^2_j(\xi, R)$ являются угловой и радиальной кулоновскими сфероидальными функциями для одноцентровых систем Q_+ и Q_-, соответственно.

Базисные функции пространства представлений искомых алгебр обозначим через Φ и будем искать Φ в виде произведения (2) и (2′), где полагаем в (2) $\xi = \xi_1$; $\eta = \eta_2$; $\alpha = \alpha_1$, а в (2′) $\xi = \xi_2$; $\eta = \eta_1$; $a = a_2$.

Путем очевидных, но трудоемких преобразований получаем систему уравнений для Φ:

$$\begin{cases} \dfrac{R^2}{2}(\xi_1^2 - \eta_1^2)(H(1, Q_+) - E)\Phi = 0 \\[2ex] \dfrac{R^2}{2}(\xi_2^2 - \eta_2^2)(H(2, Q_-) - E)\Phi = 0 \end{cases} \tag{3}$$

Где $H(i, Q)$ – гамильтониан одноцентровой кулоновской системы Q, записанный в КВС, переменных с индексом i. Для эквивалентности (3) исходному двухцентровому уравнению Шредингера необходимо выполнение следующих условий для обеих уравнений в (3):

1) Совпадение E. 2) Совпадение m_1^2 и m_2^2. 3) Совпадение λ-констант разделения в КВС.

Для того, чтобы в рамках предлагаемого подхода получить все решения кулоновской задачи двух центров, следует рассматривать следующие области изменения переменных:
$-1 \leqslant \xi < +\infty$; $-1 \leqslant \eta < +\infty$; $0 \leqslant \alpha < 2\pi$.

Предполагая, что ξ и η меняются, независимо из (1) получаем, что x и y могут принимать либо вещественные, либо мнимые значения, а z только вещественные. Отсюда сразу следует, что (3) эквивалентна совокупности четырех систем уравнений в декартовых координатах и каждое из двух уравнений этих систем есть уравнение для одноцентровой кулоновской задачи (Q_+ или Q_-), записанное либо в евклидовых ($r^2 = x^2 + y^2 + z^2$), либо в псевдоевклидовых ($r^2 = - x^2 - y^2 + z^2$) координатах. Соответственно находим динамические алгебры (3):

1) $SO(4,2) \oplus SO(4,2)$; 2) $SO^*(4,2) \oplus SO(4,2)$;

3) $SO(4,2) \oplus SO^*(4,2)$; 4) $SO^*(4,2) \oplus SO^*(4,2)$,

где через $SO^*(4,2)$ обозначена динамическая алгебра одноцентровой кулоновской псевдоевклидовой задачи:

$$\sqrt{- x^2 - y^2 + z^2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} - \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{2Q}{\sqrt{- x^2 - y^2 + z^2}} - 2E\right)\Phi = 0.$$

Динамическая алгебра $SO(4,2)$ имеет генераторы [4] :

$$\begin{aligned} &\mathbf{J} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}; \quad T = \mathbf{r}\cdot\mathbf{p} - i; \quad \mathbf{\Gamma} = r\mathbf{p}; \quad \mathbf{A} = \frac{\mathbf{r}}{r}\Gamma_4 - \mathbf{p}(\mathbf{r},\mathbf{p}), \\ &\Gamma_0 = \frac{1}{2}r(p^2+1); \quad \Gamma_4 = \frac{1}{2}r(p^2-1); \quad \mathbf{M} = \frac{\mathbf{r}}{r}\Gamma_0 - \mathbf{p}(\mathbf{r},\mathbf{p}). \end{aligned} \tag{4}$$

Для них установлено соответствие ($1 \leqslant i \leqslant 3$):

$$L_{ij} = \epsilon_{ijk} J_k; \; L_{i4} = A_i; \; L_{0i} = M_i; \; L_{i5} = \Gamma_i; \; L_{05} = \Gamma_0; \; L_{45} = \Gamma_4; \; L_{04} = T.$$

Коммутационное соотношение стандартно:

$$[L_{ik}, L_{lm}] = i(\delta_{il}L_{km} + \delta_{km}L_{il} - \delta_{im}L_{kl} - \delta_{kl}L_{im}) \tag{5}$$

инвариантные операторы имеют численные значения: $C_2 = - 6; C_3 = 0; C_4 = 12$. Базисный вектор представления $SO(4,2)$ задается как совокупность трех чисел $|\mu j m>$:

$$\begin{aligned} &J_z|\mu j m> = m|\mu j m> \qquad J^2|\mu j m> = j(j+1)|\mu j m> \\ &\Gamma_0|\mu j m> = \mu|\mu j m> (E<0) \quad \Gamma_4|\mu j m> = \mu|\mu j m> (E>0) \end{aligned} \tag{6}$$

Динамическая алгебра $SO^*(4,2)$ имеет генераторы: Γ_0; Γ_4; T; J_z; M_z; Γ_z; A_z, совпадающие с генераторами $SO(4,2)$, только: $p^2 = - p_x^2 - p_y^2 + p_z^2$; $r^2 = - x^2 - y^2 + z^2$; где $p_l = (-i)\dfrac{\partial}{\partial x_l}$ $(l = 1, 2, 3)$. Генераторы $J_x, J_y, A_x, A_y, M_x, M_y, \Gamma_x, \Gamma_y$ принимают вид

$$\begin{aligned} &J_x = yp_z + zp_y; &&A_x = \frac{1}{2}x(p^2-1) + p_x(\mathbf{r},\mathbf{p}) \\ &J_y = -zp_x - xp_z; &&A_y = \frac{1}{2}y(p^2-1) + p_y(\mathbf{r},\mathbf{p}) \\ &\Gamma_x = -rp_x; &&M_x = \frac{1}{2}x(p^2+1) + p_x(\mathbf{r},\mathbf{p}) \\ &\Gamma_y = -rp_y; &&M_y = \frac{1}{2}y(p^2+1) + p_y(\mathbf{r},\mathbf{p}) \end{aligned}$$

Если соответствие задано тем же самым образом, что и для $SO(4,2)$, то коммутационное соотношение (5) остается без изменения, кроме случая, когда оба генератора в левой части (5) не лежат в подалгебре $T; \Gamma_0; \Gamma_4; J_z; A_z; M_z; \Gamma_z$, тогда в правой части (5) $i \to -i$. Инвариантные операторы имеют те же значения, что и в $SO(4,2)$. Базисный вектор представления $SO^*(4,2)$ алгебры так же задается совокупностью трех чисел $|\mu j m>$ (j=

$= -\frac{1}{2} + i\sigma$, где σ – вещественно) и удовлетворяет тем же условиям (6). Отсюда сразу получается, что базисный вектор представления динамических алгебр системы (3) задается как совокупность 6-ти чисел: $|\mu_1 j_1 m_1 > |\mu_2 j_2 m_2 >$. Базисный вектор представления динамической алгебры двухцентровой кулоновской задачи обозначим через ψ и будем искать в виде линейной комбинации:

$$\psi = \int\int C_1(\lambda, j_1) C_2(\lambda, j_2) |\mu_1 j_1 m_1 > |\mu_2 j_2 m_2 > dj_1 dj_2 .$$

Совпадение E и m^2 приводит к равенствам:

$$\frac{Q_+^2}{\mu_1^2} = \frac{Q_-^2}{\mu_2^2}; \qquad m_1^2 = m_2^2 = m^2 .$$

Оператор разделения переменных $\hat{\lambda}$ имеет вид

$$\hat{\lambda} = J^2 + R\left[\left(\frac{1}{2} - E\right) A_z + \left(\frac{1}{2} + E\right) M_z\right] + \frac{R^2}{2}\,[r(H-E)] .$$

При $R \to 0$ получаем оператор разделения в сферических координатах, а при $R \to \infty$ в параболических. На искомых векторах ψ действие $\hat{\lambda}$ эквивалентно действию операторов разделения переменных в КВС ($\hat{\lambda}_{КВС}$):

$$\hat{\lambda}_{КВС} = J^2 + \sqrt{-2E}\, RA_z \,(E < 0); \quad \hat{\lambda}_{КВС} = J^2 + \sqrt{2E}\, RM_z \,(E > 0).$$

В общем случае уравнения для определения $C_1(\lambda, j_1)$ и $C_2(\lambda, j_2)$ следующие из условия совпадения λ в КВС являются интегральными уравнениями, получение которых требует использования реккурентных соотношений для коэффициентов векторного сложения представления группы $O(2,1)$ (основной серии). В случае динамической алгебры $SO(4,2) \oplus \oplus SO(4,2)$ результаты [5] позволяют привести задачу к задаче на совпадение собственных значений двух конечномерных ($E < 0$) или бесконечномерных ($E > 0$) матриц. Так как при $E < 0\ |m| \leqslant j \leqslant n-1$, то размерности двух конечномерных задач, имеющих одинаковые собственные значения только при определенных R, есть $\mu_1 - |m|$ и $\mu_2 - |m|$, что впервые было найдено Демковым [6]. Получаемые симметричные трехдиагональные матрицы $\hat{\lambda}$ имеют матричные элементы:

$$\lambda_{k,k} = j(j+1), \quad \text{где}: \quad k = j + 1 - |m| ,$$

$$\lambda_{k,k+1} = \frac{|Q|}{\mu} R \sqrt{\frac{[(j+1)^2 - m^2][\mu^2 - (j+1)^2]}{4(j+1)^2 - 1}} \quad (E < 0),$$

$$\lambda_{k,k+1} = \frac{|Q|}{\mu} R \sqrt{\frac{[(j+1)^2 - m^2][\mu^2 + (j+1)^2]}{4(j+1)^2 - 1}} \quad (E > 0).$$

Для системы $q_1 = 5$, $q_2 = 1$ ($E < 0$) для примера был воспроизведен результат [6]: $\lambda = 10/3$; $R = \sqrt{10/3}$.

В заключение выражаю благодарность Н.Ф.Трусковой, С.К.Суслову и Я.А.Смородинскому.

Литература

1. *Трускова Н.Ф.* **ЯФ**, 1978, **28**, 558.
2. *Трускова Н.Ф.* **ЯФ**, 1979, **29**, 243.

3. *Комаров В.И., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю.* Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. М.: Наука, 1976.

4. *Барут А. Рончка Р.* Теория представлений групп и ее приложения, М.: Мир, 1980, т. 2.

5. *Никифоров А.Ф., Суслов С.К.* ИПМ, Препринт 83, 1982.

6. *Демков Ю.Н.*, Письма в ЖЭТФ, 1968, 7, 101.

Институт атомной энергии

Институт атомной энергии
им. И.В.Курчатова

Поступила в редакцию
21 июля 1983 г.