объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р2-82-667

Н.Ф.Трускова

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ НЕКОМПАКТНЫХ ГРУПП И ШТУРМОВСКИЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Направлено в журнал "Ядерная физика"

1982

1. ВВЕДЕНИЕ

Нерелятивистскую задачу о движении электрона с заданной энергией $E<0$ в поле одного кулоновского центра с зарядом Z /задачу о водородоподобном атоме/ можно решать как задачу Штурма-Лиувилля на собственные значения и собственные функции дифференциального оператора, соответствующего заряду Z. Такие решения рассматривались В.А.Фоком /1/. Они отвечают квантованию заряда Z и в отличие от решений этой задачи в обычной /шредингеровской/ постановке имеют только дискретный спектр собственных значений. Система таких собственных функций замкнута, и разложения по ней, включающие в себя только дискретный спектр, удобно использовать при решении различных задач атомной и молекулярной физики.

С групповой точки зрения соответствующий заряду Z оператор неканоническим образом выражается через генераторы группы O(4), а его собственные значения - через значения оператора Казимира этой группы. Следствием этого являются, в частности, соотношения между собственными функциями рассматриваемого оператора и между интегралами по этим функциям /1/.

Нерелятивистская задача о движении электрона в поле двух кулоновских центров, расположенных на фиксированном расстоянии друг от друга /задача двух центров квантовой механики/, также может быть решена несколькими способами. В сфероидальной системе координат она сводится к решению системы уравнений /2-4/

$$[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{R^2E}{2}(\xi^2-1) + RZ^+\xi + \lambda - \frac{m^2}{\xi^2-1}]\Pi(\xi)=0, \quad /1.а/$$

$$[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{R^2E}{2}(1-\eta^2) + RZ^-\eta - \lambda - \frac{m^2}{1-\eta^2}]\Xi(\eta)=0, \quad /1.б/$$

$$[\frac{\partial^2}{\partial a^2} + m^2]W(a) = 0,$$

$$+1 \le \xi < \infty, \quad -1 \le \eta \le +1, \quad 0 \le a \le 2\pi, \quad /1.в/$$

$$|\Pi(+1)| < \infty, \quad |\Pi(\infty)| < \infty, \quad |\Xi(\pm 1)| < \infty .$$

Здесь E - энергия электрона, λ - константа разделения, m - магнитное квантовое число; $Z^+ = Z_1 + Z_2$; $Z^- = Z_2 - Z_1$; Z_1, Z_2 - заряды кулоновских центров, R - расстояние между ними. Система единиц: $\hbar = m_e = e = 1$.

Если заданы параметры $R \geq 0$, $Z^+ \geq 0$, $Z^- \geq 0$, систему уравнений /1/ можно решать, вычисляя собственные значения $E = E_j(R, Z^+, Z^-)$, $\lambda = \lambda_j(R, Z^+, Z^-)$ и собственные функции $\Pi(\xi) = \Pi_j(\xi; R, Z^+, Z^-)$, $\Xi(\eta) = \Xi_j(\eta; R, Z^+, Z^-)$. Такие решения соответствуют шредингеровской постановке задачи /1/. Значения энергии E при этом имеют дискретный и непрерывный спектры. Разложение по системе собственных функций задачи /1/ в этом случае также включает в себя как дискретный, так и непрерывный спектры. Решения такого типа получены в настоящее время на ЭВМ многими авторами [3-6]. Групповые свойства этих решений рассматривались в работах [7-10].

Вместе с тем задачу /1/ можно решать, задавая параметры $E < 0$, $R \geq 0$, $Z^- \geq 0$ и вычисляя собственные значения $Z^+ = Z_j^{St}(R, E, Z^-)$, $\lambda = \lambda_j^{St}(R, E, Z^-)$ и собственные функции $\Pi(\xi) = \Pi_j^{St}(\xi; R, E, Z^-)$, $\Xi(\eta) = \Xi_j^{St}(\eta; R, E, Z^-)$. Решение системы /1.а/-/1.б/ в этом случае сводится к решению двух задач Штурма-Лиувилля и отвечает квантованию заряда Z^+ в задаче /1/. Такие решения, названные штурмовскими решениями задачи двух центров [11-13], содержат только дискретный спектр собственных значений. Разложение по системе таких собственных функций также содержит только дискретный спектр, в связи с чем их применение, например при расчете электронных состояний молекулярного иона водорода [11-13], представляет значительный интерес.

Другие применения штурмовских решений задачи /1/, а также некоторые связанные с ними вычисления приведены в [11-13]. В [14] изложен алгоритм вычисления этих решений на ЭВМ при $0 \leq R < \infty$ и различных E, Z^- и приведены полученные с помощью этого алгоритма собственные значения $Z_j^{St}(R, E, Z^-)$, $\lambda_j^{St}(R, E, Z^-)$ для всех состояний с главным квантовым числом $N \leq 4$ при различном выборе величин E, Z^-.

В работе рассматриваются групповые свойства штурмовских решений задачи двух центров. Показано, что аналогично шредингеровским эти решения также можно поставить в соответствие неканоническим базисам вырожденных унитарных представлений группы $\mathcal{P}(3) \times \mathcal{P}(2,1)$ или более широких некомпактных групп.

Наборы взаимно коммутирующих операторов, определяющие выбранные базисы в упомянутых группах, диагональны на системах штурмовских решений задачи /1/. Они отличаются от аналогичных наборов [8], диагональных на системах шредингеровских решений той же задачи. Вследствие этого полученная в работе линейная алгебра интегралов по двухцентровым штурмовским функциям отличается от представленной в [15] алгебры интегралов по двухцентровым шредингеровским функциям. Эти алгебры совпадают между собой лишь при частных значениях параметров. Наличие обеих алгебр приводит к существенному упрощению вычислений интегралов и матричных элементов задачи двух центров.

2. ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГРУППЫ $\mathcal{P}(3) \times \mathcal{P}(2,1)$

Рассмотрим, как в работе [8], группу $\mathcal{P}(3) \times \mathcal{P}(2,1)$, являющуюся прямым произведением групп $\mathcal{P}(3)$ и $\mathcal{P}(2,1)$.

Напомним, что группа $\mathcal{P}(3)$ /известная также как группа Галилея $E(3)$ / состоит из сдвигов и вращений евклидового пространства координат y_i с метрикой

$$y_i y_i = y_1^2 + y_2^2 + y_3^2, \quad i = 1,2,3. \qquad /2/$$

Группа $\mathcal{P}(2,1)$ /группа Пуанкаре трехмерного пространства, обозначаемая также через $E(2,1)$ / состоит из сдвигов и вращений псевдоевклидового пространства координат y_μ с метрикой

$$y_\mu y_\mu = y_4^2 + y_5^2 - y_6^2, \quad \mu = 4,5,6. \qquad /3/$$

Инфинитезимальные генераторы $\mathcal{P}(3)$:

$$x_j = -i\frac{\partial}{\partial y_j}, \quad \mathfrak{L}_{jk} = -i\left(y_j \frac{\partial}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial}{\partial y_j}\right), \quad j, k = 1,2,3, \qquad /4/$$

и $\mathcal{P}(2,1)$:

$$x_\mu = -i\frac{\partial}{\partial y_\mu}, \quad \mu = 4,5,6, \quad \mathfrak{L}_{46} = -i\left(y_4 \frac{\partial}{\partial y_6} + y_6 \frac{\partial}{\partial y_4}\right),$$

$$\mathfrak{L}_{56} = -i\left(y_5 \frac{\partial}{\partial y_6} + y_6 \frac{\partial}{\partial y_5}\right), \qquad /5/$$

$$\mathfrak{L}_{45} = -i\left(y_4 \frac{\partial}{\partial y_5} - y_5 \frac{\partial}{\partial y_4}\right)$$

удовлетворяют известным коммутационным соотношениям. Они действуют на функции $f_j(\vec{y})$, которые зависят от выбора полного набора диагональных операторов в $\mathcal{P}(3) \times \mathcal{P}(2,1)$. Здесь j - набор собственных значений этих операторов.

Заметим, что в выбранном представлении функции $f_j(\vec{y})$ являются скалярами. В общем случае генераторы /4/, /5/ могут иметь спиновую часть, а $f_j(\vec{y})$ могут быть соответственно спинорами, векторами, тензорами.

С помощью фурье-преобразования

$$f_j(\vec{y}) = \int \exp(-i\vec{x}\vec{y})\, \Psi_j(\vec{x})\, d\vec{x} \qquad /6/$$

перейдем к x-представлению и выберем диагональными следующие коммутирующие между собой операторы:

$$\hat{C}_1 = x_i x_i; \quad \hat{C}_2 = x_i x_i \vec{L}^2 - x_i x_j \mathcal{L}_{ik} \mathcal{L}_{jk};$$

$$\hat{C}_3 = x_\mu x_\mu; \quad \hat{C}_4 = x_\mu x_\mu \vec{M}^2 - x_\nu x_\sigma \mathcal{L}_{\nu\mu} \mathcal{L}_{\sigma\mu};$$

$$\mathcal{L}_{12}; \ \mathcal{L}_{45}; \qquad /7/$$

$$\hat{\lambda} = -\vec{L}^2 + 2\epsilon(x_1^2 + x_2^2) + 2bx_3;$$

$$\hat{Z} = -\frac{1}{2x_6}(-\vec{M}^2 - \vec{L}^2 + 2\epsilon(x_6^2 - x_3^2) + 2bx_3).$$

Здесь

$$\vec{L}^2 = \mathcal{L}_{12}^2 + \mathcal{L}_{23}^2 + \mathcal{L}_{31}^2, \qquad \vec{M}^2 = \mathcal{L}_{46}^2 + \mathcal{L}_{56}^2 - \mathcal{L}_{45}^2.$$

ϵ, b - некоторые константы. По значкам i, j, k подразумевается суммирование в соответствии с метрикой /2/, а по значкам ν, , μ, σ - в соответствии с метрикой /3/.

Операторы $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$ являются операторами Казимира группы $\mathcal{P}(3)$, а $\hat{C}_3$, $\hat{C}_4$ - операторы Казимира группы $\mathcal{P}(2,1)$. Непосредственным вычислением можно убедиться, что $\hat{C}_2 = 0$, $\hat{C}_4 = 0$, т.е. что рассматриваемое представление - вырожденное. $\mathcal{L}_{12}$, $\mathcal{L}_{45}$ - инварианты однопараметрических подгрупп вращений в $\mathcal{P}(3)$ и $\mathcal{P}(2,1)$ соответственно. $\hat{\lambda}$, $\hat{Z}$ - неканонические диагональные операторы. $\hat{Z}$ можно записать также в виде

$$\hat{Z} = -\frac{1}{2x_6}(-\vec{M}^2 + 2\epsilon(x_6^2 - \hat{C}_1) + \hat{\lambda}).$$

Операторы /7/ представляют собой полный набор диагональных операторов в $\mathcal{P}(3)\times\mathcal{P}(2,1)$, определяющий собственные функции $\Psi_j(\vec{x})$.

Введем в $\mathbf{x}$-пространстве следующую систему координат:

$$x_1 = \frac{R}{2}\sqrt{1-\eta^2}\cos\alpha, \qquad x_4 = \frac{R}{2}\sqrt{\xi^2-1}\cos\beta,$$

$$x_2 = \frac{R}{2}\sqrt{1-\eta^2}\sin\alpha, \qquad x_5 = \frac{R}{2}\sqrt{\xi^2-1}\sin\beta, \qquad /8/$$

$$x_3 = \frac{R}{2}\eta, \qquad x_6 = \frac{R}{2}\xi,$$

где

$$0 \le R < \infty, \quad -1 \le \eta \le +1, \quad +1 \le \xi < \infty,$$

$$0 \le \alpha < 2\pi, \quad 0 \le \beta \le 2\pi. \qquad /9/$$

Операторы /7/ в такой системе имеют вид

$$\hat{C}_1 = \frac{R^2}{4}; \quad \hat{C}_2 = 0; \quad \hat{C}_3 = -\frac{R^2}{4}; \quad \hat{C}_4 = 0;$$

$$\mathcal{L}_{12} = -i\frac{\partial}{\partial\alpha}; \quad \mathcal{L}_{45} = -i\frac{\partial}{\partial\beta}; \qquad /10/$$

$$\hat{\lambda} = [(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{R^2\epsilon}{2}(1-\eta^2) + Rb\eta + \frac{1}{(1-\eta^2)}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}];$$

$$\hat{Z} = -\frac{1}{R\xi}[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{R^2\epsilon}{2}(\xi^2-1) + \hat{\lambda} + \frac{1}{(\xi^2-1)}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}].$$

Функции $\Psi_j(\vec{x}) = \Psi_j(R,\xi,\eta,\alpha,\beta)$, являющиеся собственными функциями полного набора /10/, можно представить в виде

$$\Psi_j(R,\xi,\eta,\alpha,\beta) = N_j(R)F_j(\xi;R)\Phi_j(\eta;R)e^{\pm im\alpha \pm im'\beta}, \qquad /11/$$

где m, m' - собственные значения операторов $\mathcal{L}_{12}$, $\mathcal{L}_{45}$ соответственно, $N_j(R)$ - нормировочный множитель. Функции $F_j(\xi;R)$, $\Phi_j(\eta;R)$ удовлетворяют уравнениям

$$/12.a/$$

$$[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{R^2\epsilon}{2}(\xi^2-1) + R\xi Z_j + \lambda_j - \frac{(m')^2}{\xi^2-1}]F_j(\xi;R) = 0,$$

$$[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{R^2\epsilon}{2}(1-\eta^2) + Rb\eta - \lambda_j - \frac{m^2}{1-\eta^2}]\Phi_j(\eta;R) = 0,$$

$$/12.б/$$

Здесь λ_j, Z_j - собственные значения операторов $\hat{\lambda}$, $\hat{Z}$.

При $m=m'$, $\epsilon=E$, $b=Z^-$ система уравнений /12/ совпадает с системой /1.a/-/1.б/. Следовательно, нахождение при заданных $R \ge 0$, $\epsilon < 0$, $b \ge 0$ собственных значений и ограниченных в области /9/ собственных функций полного набора операторов /10/ в случае совпадающих собственных значений $\mathcal{L}_{12}$ и $\mathcal{L}_{45}$ эквивалентно нахождению штурмовских решений задачи /1/. При этом собственные функции набора /10/, реализующие неканонический базис вырожденного представления группы $\mathcal{P}(3)\times\mathcal{P}(2,1)$, с точностью до нормировки равны произведению штурмовских функций $\Pi_j^{St}(\xi;R,E,Z^-)\Xi_j^{St}(\eta;R,E,Z^-)$ на $\exp(\pm im\alpha \pm im\beta)$.

Операторы /10/ эрмитовы в скалярном произведении

$$\langle\Psi_i|\Psi_j\rangle = \int_\Omega \Psi_i^*\Psi_j \, d\Omega, \qquad /13/$$

где Ω соответствует области /9/, а $d\Omega = \xi\, d\xi\, d\eta\, d\alpha\, d\beta$. Таким образом, отвечающее набору /10/ представление - унитарное.

Переменная R, через которую выражаются операторы Казимира группы $\mathcal{P}(3)\times\mathcal{P}(2,1)$, равна в задаче двух центров расстоянию между кулоновскими центрами. Константа ϵ соответствует энергии E, а константа b - заряду Z^-.

Набор операторов /10/ отличается от рассматриваемого в [8] в группе $\mathcal{P}(3)\times\mathcal{P}(2,1)$ полного набора взаимно коммутирующих операторов, диагональных на системах шредингеровских решений задачи /1/. В частности, оператор λ в /10/ выражается через генераторы одной только инвариантной подгруппы $\mathcal{P}(3)$. В отличие от него оператор $\hat{\lambda}$, входящий в набор операторов [8], диагональных на системах шредингеровских решений, состоит из генераторов обеих подгрупп $\mathcal{P}(3)$ и $\mathcal{P}(2,1)$. Это находит отражение в том, что в отличие от шредингеровских штурмовские собственные значения $\lambda_j^{St}(R,E,Z^-)$ и собственные функции $\Xi_j^{St}(\eta;R,E,Z^-)$ зависят только от двух квантовых чисел L, m /или от двух собственных значений λ_j, m/ и не зависят от главного квантового числа N /или от собственного значения Z_j/.

Одним из следствий изложенной групповой интерпретации штурмовских решений задачи /1/ является то, что матричные элементы генераторов /4/, /5/ в рассматриваемом неканоническом базисе сводятся к интегралам по двухцентровым штурмовским функциям. Эти интегралы содержат полиномы по ξ, η, $\sqrt{\xi^2-1}$, $\sqrt{1-\eta^2}$ и производные $\partial/\partial\xi$, $\partial/\partial\eta$.

При необходимости определять также интегралы по штурмовским функциям, содержащие производные по R, можно аналогично работе [8] расширить обсуждаемую здесь полупростую группу $\mathcal{P}(3)\times\mathcal{P}(2,1)$ до простых групп $\mathcal{P}(5,1)$, $\mathcal{P}(4,2)$ или до соответствующих им конформных групп. Рассматривая в этих группах вырожденные унитарные представления, аналогичные приведенному выше, и выбирая полные наборы диагональных операторов, подобные набору /10/, придем к необходимости решать те же уравнения /12/, что и в изложенном здесь случае. Возникающие при этом дополнительные диагональные операторы в силу вырожденности представлений к каким-либо новым соотношениям не приводят. Соответствующие же матричные элементы генераторов этих групп выражаются через интегралы по штурмовским функциям задачи /1/, причем некоторые из этих интегралов содержат первую и вторую производные по R.

4. АЛГЕБРА ИНТЕГРАЛОВ

Введем следующие обозначения для интегралов по радиальным штурмовским функциям:

$$\mathcal{A}^{\ell} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} \Pi_j\, d\xi, \qquad \mathcal{A}^{\ell}_{\mu} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} (\xi^2-1)^{\mu} \Pi_j\, d\xi,$$

$$\hat{\mathcal{A}}^{\ell} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} \frac{\partial}{\partial\xi} \Pi_j\, d\xi, \qquad \hat{\mathcal{A}}^{\ell}_{\mu} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} (\xi^2-1)^{\mu} \frac{\partial}{\partial\xi} \Pi_j\, d\xi,$$

$${}^{1}\mathcal{A}^{\ell} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} \frac{\partial}{\partial R} \Pi_j\, d\xi, \qquad {}^{1}\mathcal{A}^{\ell}_{\mu} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} (\xi^2-1)^{\mu} \frac{\partial}{\partial R} \Pi_j\, d\xi,$$

$${}^{1}\hat{\mathcal{A}}^{\ell}_{\mu} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} (\xi^2-1)^{\mu} \frac{\partial}{\partial\xi} \frac{\partial}{\partial R} \Pi_j\, d\xi, \qquad {}^{n}\mathcal{A}^{\ell}_{\mu} = \int_1^{\infty} \Pi_i \xi^{\ell} (\xi^2-1)^{\mu} \frac{\partial^n}{\partial R^n} \Pi_j\, d\xi.$$

$$\ell = 0,1,2,\ldots, \quad \mu = \begin{cases} -1/2,\ 1/2,\ 3/2,\ldots, & \text{если } m = m' \pm 1, \\ -1,\ 0,1,2,\ldots, & \text{если } m = m',\ m' \pm 2, \end{cases}$$

$$\Pi_i \equiv \Pi_i^{St}(\xi;R,E,Z^-), \quad \Pi_j \equiv \Pi_j^{St}(\xi;R,E,Z^-), \quad n = 2,3,\ldots$$

$$j \equiv N,L,m, \quad i \equiv N', L', m'.$$

Интегралы по угловым штурмовским функциям имеют тот же вид с заменой:

$$\mathcal{A} \to \mathcal{B}, \quad \xi \to \eta, \quad \int_1^{\infty} d\xi \to \int_{-1}^{+1} d\eta, \quad \Pi_i \to \Xi_i, \quad \Pi_j \to \Xi_j,$$

где

$$\Xi_i \equiv \Xi_i^{St}(\eta;R,E,Z^-), \quad \Xi_j \equiv \Xi_j^{St}(\eta;R,E,Z^-).$$

Для получения соотношений между этими интегралами воспользуемся установленной выше диагональностью операторов /10/ на системе функций

$$\Psi_j(R,\xi,\eta,\alpha,\beta) = N_j(R)\, \Pi_j^{St}(\xi;R,E,Z^-)\, \Xi_j^{St}(\eta;R,E,Z^-)\, e^{\pm im\alpha \pm im\beta}. \qquad /14/$$

Рассмотрим коммутатор

$$[R\hat{Z}, \eta^n] = -\frac{1}{\xi}[\hat{\lambda}, \eta^n], \quad n = 1,2,\ldots. \qquad /15/$$

Умножим это выражение на $\Psi_i(R,\xi,\eta,\alpha,\beta)\, d\Omega$ и проинтегрируем по области /9/. С учетом эрмитовости операторов $\hat{Z}$, $\hat{\lambda}$ в скалярном произведении /13/ получаем при $i \neq j$, $m = m'$:

$$\delta\mathcal{A}^{1}\mathcal{B}^{n} = -\kappa\mathcal{A}^{0}\mathcal{B}^{n}. \qquad /16/$$

где

$$\delta = R(Z_i - Z_j), \quad \kappa = \lambda_i - \lambda_j ,$$

$$Z_i \equiv Z_i^{St}(R, E, Z^-), \quad \lambda_i \equiv \lambda_i^{St}(R, E, Z^-), \qquad /17/$$

$$Z_j \equiv Z_j^{St}(R, E, Z^-), \quad \lambda_j \equiv \lambda_j^{St}(R, E, Z^-) .$$

При $\mathcal{B}^n \neq 0$ имеем

$$\delta \mathcal{A}^1 + \kappa \mathcal{A}^0 = 0. \qquad /18/$$

Аналогичное интегрирование коммутатора

$$[R\hat{Z}, \eta^n e^{i\Delta m\beta}] = -\frac{e^{i\Delta m\beta}}{\xi}[\hat{\lambda}, \eta^n] - \frac{\eta^n e^{i\Delta m\beta}}{\xi(\xi^2 - 1)}(2i\Delta m\frac{\partial}{\partial\beta} - (\Delta m)^2)$$

приводит к более общему соотношению, справедливому при $i \neq j$, $\Delta m = m' - m$, $m \neq m'$:

$$\delta\mathcal{A}^1 + \kappa\mathcal{A}^0 + (m^2 - m'^2)\mathcal{A}^0_{-1} = 0. \qquad /19/$$

Вычисляя коммутаторы

$$[R\hat{Z}, \xi^n \eta^\ell], \quad [R\hat{Z}, \xi^n\eta^\ell(\xi^2 - 1)\frac{\partial}{\partial\xi}]$$

при n, $\ell = 0,1,2,\dots$ и интегрируя, приходим к соотношениям, выполняющимся в случае $i \neq j$, $m = m'$:

$$\frac{\delta}{2}\mathcal{A}^{n+1} + \frac{1}{2}(\kappa + n(n+1))\mathcal{A}^n - \frac{n(n-1)}{2}\mathcal{A}^{n-2} + n\hat{\mathcal{A}}_1^{n-1} = 0, \qquad /20/$$

$$\delta\hat{\mathcal{A}}_1^{n+1} = -(n(n+1) + \kappa)\hat{\mathcal{A}}_1^n + n(n-1)\hat{\mathcal{A}}_1^{n-2} + R^2E(n+2)\mathcal{A}^{n+3} +$$

$$+ (2n+3)RZ_j\mathcal{A}^{n+2} + 2(n+1)(\lambda_j - R^2E)\mathcal{A}^{n+1} - (2n+1)RZ_j\mathcal{A}^n - \qquad /21/$$

$$- 2(nm^2 + n\lambda_j - \frac{R^2En}{2})\mathcal{A}^{n-1}, \qquad n = 0,1,2,\dots .$$

Подставляя выражения для $\hat{\mathcal{A}}_1^{n+1}$, $\hat{\mathcal{A}}_1^n$, $\hat{\mathcal{A}}_1^{n-2}$ из /20/ в /21/, получаем рекуррентные соотношения для интегралов $\mathcal{A}^n$ при $i \neq j$, $m = m'$:

$$(R^2E(n+2) + \frac{\delta^2}{2(n+2)})\mathcal{A}^{n+3} + \frac{(2n+3)}{2}(RZ_i + RZ_j + \frac{\kappa\delta}{(n+1)(n+2)})\mathcal{A}^{n+2} +$$

$$+ (\lambda_i + \lambda_j - 2R^2E + \frac{\kappa^2}{2(n+1)^2} + \frac{n(n+2)}{2})(n+1)\mathcal{A}^{n+1} - \frac{(2n+1)}{2}R(Z_i + Z_j)\mathcal{A}^n - \qquad /22/$$

$$-n(2m^2 - R^2E + \lambda_i + \lambda_j + n^2)\mathcal{A}^{n-1} + \frac{n(n-1)(n-2)}{2}\mathcal{A}^{n-3} = 0, \qquad n = 0,1,2\dots$$

В случае $i = j$ аналогично имеем

$$-R^2E(n+2)\mathcal{A}^{n+3} = (2n+3)RZ_j\mathcal{A}^{n+2} + (n+1)(2\lambda_j - 2R^2E + \frac{n(n+2)}{2})\mathcal{A}^{n+1} -$$

$$-(2n+1)RZ_j\mathcal{A}^n - n(2m^2 - R^2E + 2\lambda_j + n^2)\mathcal{A}^{n-1} + \frac{n(n-1)(n-2)}{2}\mathcal{A}^{n-3}, \qquad /23/$$

$n = 0,1,2\dots$

Заметим, что если $RZ_j = a$, $E = E_j$, то соотношения /23/ совпадают с соответствующими рекуррентными соотношениями /32/ работы [15] для интегралов по шредингеровским функциям задачи /1/.

Вычисление коммутатора

$$[R\hat{Z}, \xi^n\eta^\ell\frac{\partial}{\partial R}].$$

и последующее интегрирование дают при $i = j$:

$$\mathcal{A}^1\frac{\partial}{\partial R}(RZ_j) + \mathcal{A}^\circ(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j - \frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2})) + \mathcal{A}^2\frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2}) = 0, \qquad /24.а/$$

$$+ \mathcal{A}^{n+1}\frac{\partial}{\partial R}(RZ_j) = 2[{}^1\hat{\mathcal{A}}_1^{n-1}n + \frac{n(n+1)}{2}{}^1\mathcal{A}^n - \frac{n(n-1)}{2}{}^1\mathcal{A}^{n-2}] -$$

$$- \mathcal{A}^{n+2}\frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2}) - \mathcal{A}^n(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j - \frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2})), \qquad n = 1,2,\dots \qquad /24.б/$$

и при $i \neq j$, $m = m'$:

$$\delta^1\mathcal{A}^1 - \mathcal{A}^1\frac{\partial}{\partial R}(RZ_j) = -\kappa{}^1\mathcal{A}^\circ + \mathcal{A}^2\frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2}) + \mathcal{A}^\circ(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j - \frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2})), \qquad /25.а/$$

$$\delta^1\mathcal{A}^{n+1} - \mathcal{A}^{n+1}\frac{\partial}{\partial R}(RZ_j) = -2[{}^1\hat{\mathcal{A}}_1^{n-1}n + \frac{(\kappa + n(n+1))}{2}{}^1\mathcal{A}^n - \frac{n(n-1)}{2}{}^1\mathcal{A}^{n-2}] +$$

$$+ \mathcal{A}^{n+2}\frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2}) + \mathcal{A}^n(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j - \frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2})), \qquad n = 0,1,2\dots \qquad /25.б/$$

Подобным образом вычисляя и интегрируя коммутаторы

$$[R\hat{Z}, \xi^{\nu}(\xi^2-1)^{\mu}\frac{\partial^{\ell}}{\partial R^{\ell}}], \quad [R\hat{Z}, \xi^{\nu}(\xi^2-1)^{\mu}\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{\partial^{\ell}}{\partial R^{\ell}}],$$

$$[R\hat{Z}, \xi^{\nu}e^{i\Delta m\beta}(\xi^2-1)^{\mu}], \quad [R\hat{Z}, \xi^{\nu}e^{i\Delta m\beta}(\xi^2-1)^{\mu}\frac{\partial}{\partial\xi}],$$

$$[R\hat{Z}, \xi^{\nu}e^{i\Delta m\beta}(\xi^2-1)^{\mu}\frac{\partial^{\ell}}{\partial R^{\ell}}], \quad [R\hat{Z}, \xi^{\nu}e^{i\Delta m\beta}(\xi^2-1)^{\mu}\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{\partial^{\ell}}{\partial R^{\ell}}],$$

где μ , ν - необязательно целые числа, $\ell = 0,1,2,...$ придем к соотношениям между интегралами $\mathcal{A}^{\nu}_{\mu}$, $\hat{\mathcal{A}}^{\nu}_{\mu}$, ${}^{\ell}\mathcal{A}^{\nu}_{\mu}$, ${}^{\ell}\hat{\mathcal{A}}^{\nu}_{\mu}$. Ввиду громоздкости эти выражения здесь не приводятся.

Для получения соотношений между угловыми интегралами $\mathcal{B}^n$ вычислим и проинтегрируем аналогично предыдущему коммутаторы вида

$$[\hat{\lambda}, \eta^n], \quad [\hat{\lambda}, \eta^n(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}].$$

При $i \neq j$, $m = m'$ получаем

$$\kappa\mathcal{B}^{\circ} = 0, \qquad /26.а/$$

$$-(\kappa+2)\mathcal{B}^1 = 2\hat{\mathcal{B}}^{\circ}_1, \qquad /26.б/$$

$$-(\kappa+n(n+1))\mathcal{B}^n + n(n-1)\mathcal{B}^{n-2} = 2n\hat{\mathcal{B}}^{n-1}_1, \quad n=2,3... \qquad /26.в/$$

$$-\kappa\hat{\mathcal{B}}^{\circ}_1 = -2R^2E\mathcal{B}^3 + 2(\lambda_j + 2R^2E)\mathcal{B}^1 + 3RZ^-\mathcal{B}^2 - RZ^-\mathcal{B}^{\circ}, \qquad /27.а/$$

$$-(\kappa+n(n+1))\hat{\mathcal{B}}^n_1 + n(n-1)\hat{\mathcal{B}}^{n-2}_1 = -R^2E(n+2)\mathcal{B}^{n+3} + (-2\lambda_j(n+1) +$$

$$+ 2R^2E(n+2))\mathcal{B}^{n+1} + n(2\lambda_j + 2m^2 - R^2E)\mathcal{B}^{n-1} + \qquad /27.б/$$

$$+ RZ^-(2n+3)\mathcal{B}^{n+2} - RZ^-(2n+1)\mathcal{B}^n, \quad n=1,2,3...$$

Подставим выражения для $\hat{\mathcal{B}}^n_1$, $\hat{\mathcal{B}}^{n-2}_1$ из /26/ в /27/. Находим

$$2R^2E\mathcal{B}^3 - 3RZ^-\mathcal{B}^2 + [\frac{\kappa^2}{2} - 2R^2E + \lambda_i + \lambda_j]\mathcal{B}^1 = 0,$$

$$[\frac{\kappa^2}{4} - 4R^2E + 2\lambda_i + 2\lambda_j + 3]\mathcal{B}^2 + 3R^2E\mathcal{B}^4 - 5RZ^-\mathcal{B}^3 + 3RZ^-\mathcal{B}^1 = 0,$$

$$R^2E(n+2)\mathcal{B}^{n+3} - RZ^-(2n+3)\mathcal{B}^{n+2} + (n+1)(\frac{\kappa^2}{2(n+1)^2} - 2R^2E +$$

$$+\lambda_i + \lambda_j + \frac{n(n+2)}{2})\mathcal{B}^{n+1} + RZ^-(2n+1)\mathcal{B}^n - n(\lambda_i+\lambda_j+n^2+2m^2-R^2E)\mathcal{B}^{n-1} +$$

$$+ \frac{n(n-1)(n-2)}{2}\mathcal{B}^{n-3} = 0, \quad n=2,3... \qquad /28/$$

В случае $i=j$ в соотношениях /26/-/28/ следует положить $\kappa = 0$.

Использование коммутатора $[\hat{\lambda}, \eta^n\frac{\partial}{\partial R}]$ приводит в случае $i \neq j$, $m = m'$ к соотношениям

$$-\kappa\,{}^1\mathcal{B}^{\circ} + \mathcal{B}^2\frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2}) - Z^-\mathcal{B}^1 = 0, \qquad /29.а/$$

$$-[\kappa + n(n+1)]\,{}^1\mathcal{B}^n + n(n-1)\,{}^1\mathcal{B}^{n-2} + (\mathcal{B}^{n+2} - \mathcal{B}^n)\frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2}) + \qquad /29.б/$$

$$+ \mathcal{B}^n\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j - Z^-\mathcal{B}^{n+1} = 2n\,{}^1\hat{\mathcal{B}}^{n-1}_1 \;,$$

а в случае $i=j$ к соотношениям

$$\frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2})\mathcal{B}^2 + [\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j - \frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2})]\mathcal{B}^{\circ} - Z^-\mathcal{B}^1 = 0, \qquad /30.а/$$

$$-n(n+1)\,{}^1\mathcal{B}^n + n(n-1)\,{}^1\mathcal{B}^{n-2} + \frac{\partial}{\partial R}(\frac{R^2E}{2})(\mathcal{B}^{n+2} - \mathcal{B}^n) + \qquad /30.б/$$

$$+ \mathcal{B}^n\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j - Z^-\mathcal{B}^{n+1} = 2n\,{}^1\hat{\mathcal{B}}^{n-1}_1 \;.$$

Вычисление и интегрирование коммутатора $[\hat{\lambda}, e^{i\Delta m\alpha}]$ дает при $i \neq j$, $\Delta m = m' - m$, $m \neq m'$:

$$\kappa\mathcal{B}^{\circ} - (m^2 - m'^2)\mathcal{B}^{\circ}_{-1} = 0. \qquad /31/$$

Соотношения /26/-/29/, /30.а/ совпадают соответственно с соотношениями /43/, /44/, /48/-/50/, /54/, /51/ работы [9], если в последних произвести замену $A \to \mathcal{B}$, $a \to -Z^-R$, $\beta \to \kappa$. Соотношение /31/ совпадает с соответствующим соотношением /44/ работы [15], если в последнем положить $a = 0$, $\beta = \kappa$. Таким образом, соотношения между угловыми интегралами по двухцентровым штурмовским функциям повторяют полученные в [9,15] соотношения между угловыми интегралами по двухцентровым шредингеровским функциям с совпадающими значениями энергии $E = E_i = E_j$. Это естественно, так как угловые интегралы по штурмовским функциям задачи /1/ не зависят от величины $Z_j^{St}(R,E,Z^-)$ и связывают функции с одинаковыми значениями энергии E.

5. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложенная в работе групповая интерпретация штурмовских решений задачи двух центров аналогична представленной в [8] групповой интерпретации шредингеровских решений этой задачи. В таком подходе двухцентровые штурмовские и шредингеровские функции соответствуют двум различным неканоническим базисам вырожденных унитарных представлений одной и той же группы $\mathcal{P}(3)\times\mathcal{P}(2,1)$ или групп $\mathcal{P}(5,1)$, $\mathcal{P}(4,2)$.

Полученные с помощью интегрирования соответствующих коммутаторов рекуррентные соотношения между интегралами по двухцентровым штурмовским функциям образуют линейную алгебру. Она состоит из суммы двух независимых различных подалгебр: одной - для радиальных интегралов и другой - для угловых. Обе подалгебры выполняются как при $E = E_0 = \text{const}$, так и при $E = \phi(R) \neq \text{const}$.

Частным случаем этих подалгебр являются соотношения /19/ и /31/. Записанные в виде

$$\int_1^\infty \left(\xi\delta + \kappa + \frac{m^2 - m'^2}{\xi^2 - 1}\right)\Pi_i \Pi_j \, d\xi = 0, \qquad /32/$$

$$\int_{-1}^{+1} \left(\kappa - \frac{m^2 - m'^2}{1 - \eta^2}\right)\Xi_i \Xi_j \, d\eta = 0, \qquad /33/$$

они представляют собой обобщение соотношений ортогональности для штурмовских функций на случай $m \neq m'$.

С помощью найденных подалгебр легко получить различные соотношения между матричными элементами задачи двух центров. Например, умножим /24.a/ на $\mathcal{B}^\circ$, а /30.a/ на $\mathcal{A}^\circ$ и вычтем одно выражение из другого. Получаем

$$\left(\frac{\partial}{\partial R} R Z_i\right) \langle i | \frac{R}{4}\left(\frac{1}{r_1} + \frac{1}{r_2}\right) | i \rangle - \frac{RZ^-}{4} \langle i | \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} | i \rangle = \langle i | 1 | i \rangle \frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2 E}{2}\right). \qquad /34/$$

Здесь

$$r_1 = \frac{R}{2}(\xi + \eta), \quad r_2 = \frac{R}{2}(\xi - \eta),$$

$$\langle i | \frac{1}{r_1} \pm \frac{1}{r_2} | i \rangle = \int_\Omega \Psi_i^* \left(\frac{1}{r_1} \pm \frac{1}{r_2}\right)\Psi_i \, d\tau, \quad \langle i | 1 | i \rangle = \int_\Omega \Psi_i^* \Psi_i \, d\tau,$$

$$d\tau = \frac{R^3}{8}(\xi^2 - \eta^2)\, d\xi \, d\eta \, d\alpha, \quad \Psi_j = \Pi_i^{St}(\xi; R, E, Z^-)\, \Xi_i^{St}(\eta; R, E, Z^-)\, e^{im\alpha}.$$

Соотношение /34/ представляет собой аналог теоремы Гельмана-Фейнмана [16] для случая штурмовских решений задачи /1/.

Подобным образом можно вывести и другие соотношения между матричными элементами этой задачи.

Соотношения между неполными интегралами по двухцентровым штурмовским функциям и между соответствующими неполными матричными элементами можно получить, если рассмотренные в разделе 4 коммутаторы, как в [17], проинтегрировать по ξ от y до ∞, а по η от x до $+1$, где $+1 \leq y < \infty$, $-1 < x < +1$, и учесть при этом неэрмитовость операторов $\hat{Z}$, $\hat{\lambda}$ в соответствующем неполном скалярном произведении. Полученные таким способом соотношения между неполными интегралами по двухцентровым штурмовским функциям линейны и неоднородны.

В заключение заметим, что предложенное в работе групповое описание штурмовских решений задачи двух центров не является единственным. Из всех возможных группа $\mathcal{P}(3)\times\mathcal{P}(2,1)$ в данном случае выбрана лишь как минимальная по числу параметров. Подобно шредингеровским [9], штурмовские решения задачи /1/ можно поставить также в соответствие неканоническим базисам унитарных представлений группы $O(2,2)\times O(2,2)$ или более широкой группы $O(4,2)\times O(4,2)$. В таком подходе вместо оператора $\hat{E}$, диагонального на системе шредингеровских решений, появляется диагональный на системе штурмовских решений оператор $\hat{Z}$, который в случае группы $O(2,2)\times O(2,2)$ выражается через соответствующий оператор Казимира. В остальном такая групповая интерпретация штурмовских решений задачи /1/ полностью аналогична представленной в [9] групповой интерпретации шредингеровских. Найденные с помощью этого подхода соотношения между интегралами по двухцентровым штурмовским функциям совпадают с полученными в данной работе.

Автор благодарит Я.А.Смородинского за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Фок В.А. Начала квантовой механики. "Наука", М., 1976.
2. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. "Наука", М., 1974.
3. Power J.D. Phil.Trans.Roy.Soc. London, 1973, A274, p.663.
4. Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
5. Madsen M.M., Peek J.M. Atomic Data, 1971, 2, p.171.
6. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р11-10207, Дубна, 1976.
7. Аллилуев С.П., Матвеенко А.В. ЖЭТФ, 1966, 51, с.1873.
8. Трускова Н.Ф. ЯФ, 1978, 28, с.558.
9. Трускова Н.Ф. ЯФ, 1979, 30, с.568.
10. Трускова Н.Ф. ЯФ, 1979, 29, с.243.
11. Шерстюк А.И. Оптика и спектроскопия, 1975, 38, с.1040.

12. Шерстюк А.И., Яковлева Н.С. Оптика и спектроскопия, 1976, 40, с.977; 1977, 43, с.843; 1978, 45, с.42.
13. Шерстюк А.И., Яковлева Н.С. ЖВМ и МФ, 1981, 21, с.113.
14. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р5-82-328, Дубна, 1982.
15. Трускова Н.Ф. ЯФ, 1978, 28, с.850.
16. Слэтэр Дж. Электронная структура молекул. "Мир", М., 1965.
17. Вукайлович Ф.Р., Трускова Н.Ф. ЯФ, 1980, 32, с.118.

Рукопись поступила в издательский отдел
14 сентября 1982 года.