ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

Р2 - 11554

Н.Ф.Трускова

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ $O(4) \otimes O(2,2)$

1978

P2 - 11554

Н.Ф.Трускова

ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧИ ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ $O(4) \otimes O(2,2)$

Направлено в ЯФ

Трускова Н.Ф. Р2 - 11554

Элементарные решения задачи двух центров квантовой механики и представления группы $O(4) \otimes O(2,2)$

Показано, что найденные в работе /1/ простые аналитические решения задачи двух центров, умноженные на $\exp(im\beta)$, реализуют собой специальный базис вырожденного неканонического представления группы $O(4) \otimes O(2,2)$.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Truskova N.F. P2 - 11554

Elementary Solutions of the Two-Centre Problem in Quantum Mechanics and the Representations of $O(4) \otimes O(2,2)$ Group

It is shown that the exact analytical solutions of the two-centre problem in quantum mechanics multiplied to $\exp(im\beta)$ realize a special basis of noncanonical representation of $O(4) \otimes O(2,2)$ group.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

ВВЕДЕНИЕ

В работе /1/ было показано, что в некоторых частных случаях задача о связанных состояниях частицы в поле двух кулоновских центров с зарядами Z_1, $Z_2/Z_1>0$, $Z_2 < Z_1$ / имеет простые аналитические решения. Необходимым условием этого является совпадение водородоподобных энергетических уровней, соответствующих зарядам (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2):

$$E_{\pm} = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z_1+Z_2}{n_1}\right)^2 = -\frac{1}{2}\left(\frac{Z_1-Z_2}{n_2}\right)^2, \quad n_1, n_2 = 1,2\ldots \qquad /1/$$

Энергия системы E в таком случае равна:

$$E = E_{\pm} \quad . \qquad /2/$$

При этом решением соответствующей системы уравнений /2,3/:

$$[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{R^2E}{2}(\xi^2-1) + R(Z_1+Z_2)\xi + \lambda - \frac{m^2}{\xi^2-1}]\Pi(\xi;R)=0, \qquad /3а/$$

$$[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{R^2E}{2}(1-\eta^2) - R(Z_1-Z_2)\eta -$$

$$-\lambda - \frac{m^2}{1-\eta^2}]\Xi(\eta;R)=0, \qquad /3б/$$

$$[\frac{\partial^2}{\partial a^2} + m^2]W(a)=0, \qquad /3в/$$

$$+1 \le \xi < \infty, \quad -1 \le \eta \le +1, \quad 0 \le \alpha \le 2\pi,$$

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

являются функции

$$\Psi(\vec{r};R) = \text{const}\,\Pi(\xi;R)\,\Xi(\eta;R)\,e^{im\alpha}, \qquad /4/$$

где $\Pi(\xi;R)$, $\Xi(\eta;R)$ выражаются через усеченные ряды /1,2/. Константа разделения λ и межцентровое расстояние R, при которых функция $\Psi(\vec{r};R)$ имеет такой простой вид, находятся исходя из равенства нулю двух определителей порядка $n_1 - |m|$ и $n_2 - |m|$.

В данной работе рассматривается неканоническое представление группы, являющейся прямым произведением групп вращений $O(4)$ и $O(2,2)$. Показано, что в специальном случае определение собственных функций полного набора коммутирующих операторов в этой группе приводит к необходимости решать систему уравнений /3/. При этом собственные значения диагональных операторов таковы, что из всех возможных решений системы /3/ можно выбрать решения, удовлетворяющие условию /1/ и, следовательно, имеющие простой аналитический вид /4/. Функция, представляющая собой произведение функций /4/ на $\exp(im\beta)$, реализует собой базис вырожденного неканонического представления группы $O(4) \otimes O(2,2)$.

В отличие от групповой трактовки решений задачи двух центров с помощью групп $\mathcal{P}(3) \otimes \mathcal{P}(2,1)$, $\mathcal{P}(5,1)$, $\mathcal{P}(4,2)$ и пр. /4/ в данном рассмотрении оператор, соответствующий энергии E, является c-числом. В этом смысле такой подход аналогичен описанию водородоподобного атома с помощью группы $O(4)$ /5/.

Название "неканоническое представление" употребляется в данной работе, как и в работах /4,6/, для мало изученных представлений, в которых не все операторы из полного набора наблюдаемых являются инвариантами подгрупп рассматриваемой группы.

БАЗИС В ГРУППЕ $O(4) \otimes O(2,2)$

Используя пространство координат x_i с метрикой

$$x_i x_i = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2, \qquad /5/$$

введем операторы

$$L_1 = -i\left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_2}\right) + i\epsilon x_2,$$

$$L_2 = -i\left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_3}\right) - i\epsilon x_1,$$

$$L_3 = -i\left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}\right),$$

$$A_1 = \frac{1}{r}\left[\frac{i}{2}(L_3 x_2 + x_2 L_3 - L_2 x_3 - x_3 L_2) + \frac{b}{\epsilon} x_1\right],$$

$$A_2 = \frac{1}{r}\left[\frac{i}{2}(L_1 x_3 + x_3 L_1 - L_3 x_1 - x_1 L_3) + \frac{b}{\epsilon} x_2\right],$$

$$A_3 = \frac{1}{r}\left[\frac{i}{2}(L_2 x_1 + x_1 L_2 - L_1 x_2 - x_2 L_1) + \frac{b}{\epsilon} x_3\right]. \qquad /6/$$

Здесь ϵ, b - некоторые постоянные; $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$; A_i можно записать также в виде

$$\vec{A} = \frac{i}{r}\left(\frac{[\vec{L} \times \vec{x}]}{2} - \frac{[\vec{x} \times \vec{L}]}{2} + \frac{b\vec{x}}{i\epsilon}\right). \qquad /7/$$

Дифференциальные операторы /6/ действуют в пространстве некоторых функций $\phi(\vec{x})$. Непосредственным вычислением можно убедиться, что операторы L_i, A_i удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[L_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} L_k, \quad [A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} L_k, \quad [A_i, L_j] = i\epsilon_{ijk} A_k,$$

$$i, j, k = 1, 2, 3. \qquad /8/$$

ϵ_{ijk} - полностью антисимметричный тензор. Из соотношений /8/ следует, что операторы /6/ являются генераторами алгебры Ли группы вращений 4-мерного евклидового пространства $O(4)$ /7,8/.

Так как все операторы /6/ коммутируют с r, можно положить

$$\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2} \equiv \frac{R}{2} = \mathrm{Const}.$$

Аналогичным образом, используя пространство координат y_i с метрикой

$$y_i y_i = -y_1^2 - y_2^2 + y_3^2, \qquad /9/$$

введем дифференциальные операторы, действующие на функции $\Phi(\vec{y})$:

$$\mathcal{L}_1 = -i\left(y_2\frac{\partial}{\partial y_3} + y_3\frac{\partial}{\partial y_2}\right) - i\epsilon y_2,$$

$$\mathcal{L}_2 = -i\left(y_3\frac{\partial}{\partial y_1} + y_1\frac{\partial}{\partial y_3}\right) - i\epsilon y_1,$$

$$\mathcal{L}_3 = -i\left(y_1\frac{\partial}{\partial y_2} - y_2\frac{\partial}{\partial y_1}\right),$$

$$\mathcal{A}_1 = \frac{1}{\rho}\left[\frac{i}{2}\left(-\mathcal{L}_3 y_2 - y_2\mathcal{L}_3 - \mathcal{L}_2 y_3 - y_3\mathcal{L}_2\right) + \frac{\tilde{b}}{\epsilon} y_1\right], \qquad /10/$$

$$\mathcal{A}_2 = \frac{1}{\rho}\left[\frac{i}{2}\left(\mathcal{L}_1 y_3 + y_3\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_3 y_1 - y_1\mathcal{L}_3\right) - \frac{\tilde{b}}{\epsilon} y_2\right],$$

$$\mathcal{A}_3 = \frac{1}{\rho}\left[\frac{i}{2}\left(-\mathcal{L}_2 y_1 - y_1\mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_1 y_2 - y_2\mathcal{L}_1\right) + \frac{\tilde{b}}{\epsilon} y_3\right].$$

ϵ, $\tilde{b}$ - постоянные; $\rho \equiv \sqrt{-y_1^2 - y_2^2 + y_3^2}$.

Операторы /10/ удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[\mathcal{L}_i, \mathcal{L}_j] = i\tilde{\epsilon}_{ijk}\mathcal{L}_k, \qquad [\mathcal{A}_i, \mathcal{L}_j] = i\tilde{\epsilon}_{ijk}\mathcal{A}_k,$$

$$[\mathcal{A}_i, \mathcal{A}_j] = i\tilde{\epsilon}_{ijk}\mathcal{L}_k, \quad i,j,k = 1,2,3; \qquad /11/$$

где

$$\tilde{\epsilon}_{ijk} = \epsilon_{ij\ell} g_{\ell k}, \quad g_{\ell k} = \begin{cases} 0, & \text{если } \ell \neq k, \\ -1, & \text{если } \ell = k = 1,2, \\ +1, & \text{если } \ell = k = 3, \end{cases}$$

и, следовательно, являются генераторами алгебры Ли группы вращений $O(2,2)$ /8/.

Переходя к операторам

$$J_1 = \frac{\mathcal{L}_1 - \mathcal{A}_1}{2}, \quad J_2 = \frac{\mathcal{L}_2 - \mathcal{A}_2}{2}, \quad J_3 = \frac{\mathcal{L}_3 - \mathcal{A}_3}{2}, \qquad /12/$$

$$I_1 = \frac{\mathcal{L}_1 + \mathcal{A}_1}{2}, \quad I_2 = \frac{\mathcal{L}_2 + \mathcal{A}_2}{2}, \quad I_3 = \frac{\mathcal{L}_3 + \mathcal{A}_3}{2},$$

непосредственным вычислением убеждаемся, что:

$$[J_i, J_j] = i\tilde{\epsilon}_{ijk} J_k, \quad [I_i, I_j] = i\tilde{\epsilon}_{ijk} I_k, \quad [J_i, I_j] = 0,$$

$$i,j,k = 1,2,3, \qquad /13/$$

т.е. что группа $O(2,2)$ локально-изоморфна прямому произведению двух групп, каждая из которых изоморфна группе $O(2,1)$ /напомним, что группа $O(4)$ локально-изоморфна прямому произведению двух групп, каждая из которых изоморфна группе $O(3)$ /8/ /.

Т.к. все операторы /10/ коммутируют с ρ, положим также

$$\sqrt{-y_1^2 - y_2^2 + y_3^2} \equiv \frac{R}{2} = \mathrm{Const}. \qquad /14/$$

Рассмотрим теперь группу, являющуюся прямым произведением групп $O(4)$ и $O(2,2)$ с генераторами /6/ и /10/ соответственно.

Выберем в этой группе набор диагональных взаимно коммутирующих операторов следующим образом:

$$\hat{C}_1 = \frac{(\vec{L}^2 + \vec{A}^2)}{2}, \quad \hat{C}_2 = (\vec{L}A), \qquad /15а/$$

$$\hat{C}_3 = \frac{1}{2}(-\mathcal{L}_1^2 - \mathcal{L}_2^2 + \mathcal{L}_3^2 - \mathcal{A}_1^2 - \mathcal{A}_2^2 + \mathcal{A}_3^2),$$

$$\hat{C}_4 = -\mathcal{L}_1\mathcal{A}_1 - \mathcal{L}_2\mathcal{A}_2 + \mathcal{L}_3\mathcal{A}_3, \qquad /15б/$$

$$L_3, \ \mathcal{L}_3, \qquad /15в/$$

$$\hat{\lambda}_1 = -(\vec{L}^2 + \in R A_3), \qquad /15г/$$

$$\hat{\lambda}_2 = -(-\mathcal{L}_1^2 - \mathcal{L}_2^2 + \mathcal{L}_3^2 + \in R \mathcal{A}_3); \qquad /15д/$$

где

$$\vec{L}^2 \equiv L_1^2 + L_2^2 + L_3^2, \quad (\vec{L}A) \equiv L_1A_1 + L_2A_2 + L_3A_3,$$

$$\vec{A}^2 \equiv A_1^2 + A_2^2 + A_3^2.$$

Операторы $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$ являются операторами Казимира группы $O(4)$; $\hat{C}_3$, $\hat{C}_4$ - операторами Казимира группы $O(2,2)$. L_3, $\mathcal{L}_3$ - инварианты однопараметрических подгрупп в $O(4)$ и $O(2,2)$ соответственно. $\hat{\lambda}_1$, $\hat{\lambda}_2$ - неканонические диагональные операторы.

Операторы /15/ образуют полный набор диагональных операторов в $O(4) \otimes O(2,2)$, определяющий собственные волновые функции $\Psi(\vec{x}, \vec{y})$.

Введем теперь в пространстве x_i систему координат:

$$x_1 = \frac{R}{2}\sqrt{1-\eta^2}\cos\alpha, \qquad -1 \le \eta \le +1, \quad 0 \le \alpha \le 2\pi,$$

$$x_2 = \frac{R}{2}\sqrt{1-\eta^2}\sin\alpha, \qquad 0 \le R < \infty, \qquad /16/$$

$$x_3 = \frac{R}{2}\eta,$$

а в пространстве y_i систему координат:

$$y_1 = \frac{R}{2}\sqrt{\xi^2 - 1}\cos\beta,$$

$$y_2 = \frac{R}{2}\sqrt{\xi^2 - 1}\sin\beta, \quad +1 \le \xi < \infty, \quad 0 \le \beta \le 2\pi, \qquad /17/$$

$$y_3 = \frac{R}{2}\xi,$$

и выразим операторы /6/, /10/, /15/ в переменных R, ξ, η, α, β. Операторы /15/ при этом равны:

$$\hat{C}_1 = \frac{1}{2}(-1 + \frac{b^2}{\in^2}), \quad \hat{C}_2 = 0, \qquad /18а/$$

$$\hat{C}_3 = \frac{1}{2}(-1 + \frac{\tilde{b}^2}{\in^2}), \quad \hat{C}_4 = 0, \qquad /18б/$$

$$L_3 = -i\frac{\partial}{\partial\alpha}, \quad \mathcal{L}_3 = -i\frac{\partial}{\partial\beta}, \qquad /18в/$$

$$\hat{\lambda}_1 = [(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} - bR\eta - \frac{\in^2R^2}{4}(1-\eta^2) + \frac{1}{1-\eta^2}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}], \qquad /18г/$$

$$\hat{\lambda} = -[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \tilde{b}R\xi - \frac{\in^2R^2}{4}(\xi^2-1) + \frac{1}{\xi^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}]. \qquad /18д/$$

Равенство нулю операторов $\hat{C}_2$, $\hat{C}_4$ говорит о том, что рассматриваемое нами представление - вырожденное.

Из теории групп известно, что операторы Казимира $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$, характеризующие неприводимое представление группы $O(4)$, линейно выражаются через операторы Казимира двух групп $O(3)$ и в общем случае равны [7,8]:

$$\hat{C}_1 = k(k+1) + \ell(\ell+1), \quad \hat{C}_2 = k(k+1) - \ell(\ell+1), \quad \ell, k = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots \qquad /19/$$

Сравнивая /18а/ и /19/, получаем:

$$\in^2 = \frac{b^2}{(2k+1)^2}, \quad k = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots \qquad /20/$$

Операторы Казимира группы $O(2,2)$ линейно выражаются через операторы Казимира двух групп $O(2,1)$. Сравнивая выражения для операторов $\hat{C}_3$, $\hat{C}_4$ из /18б/ с соответствующими общими выражениями для операторов Казимира группы $O(2,2)$ [8,9] и требуя при этом выполнения соотношения /20/, получаем:

$$\epsilon^2 = \frac{b^2}{(2k+1)^2} = \frac{\tilde{b}^2}{(2\Phi+1)^2} . \qquad /21/$$

Φ - вещественное число, $\Phi < 0$.

Таким образом, видим, что при $b^2 = (Z_1 - Z_2)^2$, $\tilde{b}^2 = (Z_1 + Z_2)^2$, $-\frac{\epsilon^2}{2} = E$, $(2\Phi+1)^2 = n_1^2$, $(2k+1)^2 = n_2^2$ выполнение соотношений /21/ эквивалентно выполнению соотношений /1/ и /2/.

Найдем теперь функции $\Psi(\vec{x},\vec{y}) = \Psi(R,\xi,\eta,\alpha,\beta)$, являющиеся собственными функциями операторов /18/. Обозначая собственные значения L_3 и $\mathfrak{L}_3$ через m_1 и m_2, а собственные значения $\hat{\lambda}_1$, $\hat{\lambda}_2$ через λ_1, λ_2 соответственно, получаем, что при $m_1 = m_2 = m$, $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, $\tilde{b} = (Z_1 + Z_2)$, $b = (Z_1 - Z_2)$, $-\epsilon^2/2 = E$ нахождение собственных функций диагональных операторов /18/ эквивалентно совместному решению системы уравнений /3/ и уравнения

$$-i \frac{\partial}{\partial \beta} \Psi(R,\xi,\eta,\alpha,\beta) = m \Psi(R,\xi,\eta,\alpha,\beta) . \qquad /22/$$

При этом необходимо учитывать соотношения /21/. Как показано в работе [1], решение системы /3/ с учетом /1/ и /2/ имеет вид /4/. Следовательно, искомые функции $\Psi(R,\xi,\eta,\alpha,\beta)$ при

$m_1 = m_2 = m$, $\lambda_1 = \lambda_2 = \lambda$, $-\frac{\epsilon^2}{2} = E$, $(2\Phi+1)^2 = n_1^2$, $(2k+1)^2 = n_2^2$, $\tilde{b} = (Z_1 + Z_2)$, $b = (Z_1 - Z_2)$ равны функциям /4/, умноженным на $\exp(im\beta)$:

$$\Psi(R,\xi,\eta,\alpha,\beta) = \mathrm{Const}\, \Pi(\xi;R)\, \Xi(\eta;R) e^{im\alpha} \cdot e^{im\beta} . \qquad /23/$$

Функции /23/ реализуют собой при этом базис вырожденного неканонического представления группы $O(4) \otimes O(2,2)$.

Если $\tilde{b} = b$ $(Z_2 = 0)$, функции /23/ равны волновым функциям водородоподобного атома в сфероидальной системе координат [2], умноженным на $\mathrm{Const} \cdot \exp(im\beta)$.

Заметим, что уравнения /3/ и соотношения /1/, /2/ можно также получить, рассматривая прямое произведение двух групп $O(4)$, соответствующих двум водородоподобным атомам с зарядами $(Z_1 + Z_2)$ и $(Z_1 - Z_2)$. В этом случае функция $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R)$, равная произведению волновых функций двух водородоподобных атомов /соответственно с энергиями E_+, E_-, константами разделения λ_+, λ_-, магнитными квантовыми числами m, m'/ в сфероидальной системе координат:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R) = \mathrm{Const}\, \Pi^{(+)}(\xi_1;R)\, \Xi^{(+)}(\eta_1;R) e^{im\alpha} \times$$

$$\times\, \Pi^{(-)}(\xi_2;R)\, \Xi^{(-)}(\eta_2;R) e^{im'\beta} , \qquad /24/$$

реализует собой базис вырожденного неканонического представления группы $O(4) \otimes O(4)$. Функции $\Pi^{(+)}(\xi_1;R)$, $\Xi^{(+)}(\eta_1;R)$ переходят друг в друга при замене $\xi_1 \leftrightarrow \eta_1$, $\xi_1 \in [-1,\infty)$, а функции $\Pi^{(-)}(\xi_2;R)$, $\Xi^{(-)}(\eta_2;R)$ переходят друг в друга при замене $\xi_2 \leftrightarrow \eta_2$, $\xi_2 \in [-1,\infty)$ [1,2]. Если $E_+ = E_- = E$, $\lambda_+ = \lambda_- = \lambda$, $m = m'$, функции $\Pi^{(+)}(\xi;R)$, $\Xi^{(-)}(\eta;R)$ удовлетворяют соответственно уравнениям /3а/, /3б/, а функции $\Pi^{(-)}(\xi;R)$, $\Xi^{(+)}(\eta;R)$ - соответственно уравнениям /3а/, /3б/ с заменой $Z_2 \to -Z_2$. При этом функция $\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2; R)$, являющаяся произведением решений двух одноцентровых задач с зарядами $(Z_1 + Z_2)$ и $(Z_1 - Z_2)$, одновременно является произведением элементарных решений двух двухцентровых задач: одной - с зарядами Z_1, Z_2 и другой - с зарядами $Z_1, -Z_2$. Однако, как было показано в работе [1], решения такого типа, регулярные в области $[-1,\infty)$, представляют собой только часть всех элементарных решений задачи двух центров квантовой механики.

В заключение благодарю Я.А.Смородинского за внимание к работе и ценные замечания, а также И.В.Комарова и Л.И.Пономарева за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Дёмков Ю.Н. Письма в ЖЭТФ, 1968, 7, 3, с.101-104.*
2. *Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.*
3. *Power J.D. Phil.Trans.Roy. Soc. Lond., 1973, A274, p.663.*
4. *Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р2-11268, Дубна, 1978.*
5. *Fock V.A. Zs. f.Phys., 1935, 98, p.145.*
6. *Лукач И., Смородинский Я.А. ОИЯИ, Р2-7465, Дубна, 1973.*
7. *Englefield M.J. Group Theory and the Coulomb Problem, New York, J.Wiley, 1972.*
8. *Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. "Мир", М., 1966.*
9. *Barut A.O., Fronsdal C. Proc.Roy. Soc., 1965, 287, p.532.*

Рукопись поступила в издательский отдел 6 мая 1978 года.