ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

2 - 11268

Н.Ф.Трускова

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ НЕКОМПАКТНЫХ ГРУПП И ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1978

2 - 11268

Н.Ф.Трускова

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ НЕКОМПАКТНЫХ ГРУПП И ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Направлено в ЯФ

Трускова Н.Ф. 2 - 11268

Представления некомпактных групп и задача двух центров квантовой механики

Показано, что выбор определенного неканонического базиса в группе, являющейся прямым произведением двух групп движений трехмерных пространств $\mathcal{P}(3)\otimes\mathcal{P}(2,1)$, или в более широких группах движений шестимерного пространства $\mathcal{P}(5,1)\cdot\mathcal{P}(4,2)$ и пр. приводит к необходимости решать задачу, эквивалентную задаче двух центров квантовой механики. Следствием этого является полученная автором в работе [8] линейная алгебра двухцентровых интегралов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Truskova N.F. 2 - 11268

Representations of Noncompact Groups and the Two-Centre Problem in Quantum Mechanics

It is shown that the choice of a definite noncanonical basis in a group being a direct production of two groups of motion of 3-dimensional space $\mathcal{P}(3)\otimes\mathcal{P}(2,1)$ or in larger groups of motion in 6-dimensional space $\mathcal{P}(5,1),\mathcal{P}(4,2)$results in a necessity to solve the problem equivalent to the two-centre problem in quantum mechanics. The linear algebra of two-centre integrals is its consequence.

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

Известно, что задачу с одним кулоновским центром /водородоподобный атом/ можно решать как задачу теории представлений группы $O(4)$ [1,2] или более широких групп $O(4,1)$ [3] и $O(4,2)$ [4,5]. Волновые функции водородоподобного атома при этом реализуют собой специальный базис вырожденного представления группы $O(4)$ или упоминаемых более широких групп. Рекуррентные соотношения, связывающие между собой соответствующие радиальные интегралы $\langle r^n \rangle$ [6,7], являются следствием этих групповых свойств.

В работе показано, что для задачи с двумя кулоновскими центрами имеет место, вообще говоря, аналогичная ситуация. Эту задачу, например, для случая дискретного спектра $E_j < 0$, можно решать как задачу теории представлений определенных некомпактных групп, причем функция, являющаяся произведением радиальной и угловой двухцентровых функций на $\exp(i m\alpha + i m\beta)$, реализует собой базис вырожденного неканонического представления группы, являющейся прямым произведением двух групп движений трехмерных пространств $\mathcal{P}(3)\otimes\mathcal{P}(2,1)$ или более широких групп движений шестимерного пространства $\mathcal{P}(5,1)$, $\mathcal{P}(4,2)$ и пр.

В отличие от одноцентровой задачи, оператор $\hat{E}$, соответствующий оператору энергии, не является оператором Казимира рассматриваемых групп и потому не коммутирует со всеми генераторами этих групп. Оператор $\hat{E}$ и оператор $\hat{\lambda}$, который соответствует "дополнительному" коммутирующему с E оператору в задаче двух центров, имеющему собственные значения, равные константе разделения λ_j, входят в набор взаимно коммутирующих операторов, определяющих неканонический базис в рассматриваемых группах. Это связано с тем, что уравнение Шредингера с двумя кулоновскими центрами допускает разделение переменных только в одной системе координат /в отличие от задачи с одним кулоновским центром, где таких систем координат несколько/, а также с тем, что вырожденность значений энергии /пересечение термов при некоторых значениях межъядерного расстояния R / имеет место только тогда, когда не менее двух квантовых чисел из трех различаются, в то время как в одноцентровой задаче при данном значении главного квантового числа N энергия вырождена при всех возможных при этом значениях квантовых чисел ℓ, m.

Следствием рассмотренных в работе групповых свойств задачи двух центров является полученная в [8] линейная алгебра двухцентровых интегралов, которая представляет собой, по существу, реализованную в данном базисе алгебру матричных элементов выбранных неканонических представлений рассматриваемых групп.

ЗАДАЧА ДВУХ ЦЕНТРОВ

Напомним, что для двух кулоновских центров /адиабатическое приближение в проблеме трех тел, взаимодействующих по закону Кулона/, решение уравнения Шредингера в сфероидальной системе координат сводится к нахождению собственных значений и ограниченных собственных функций системы уравнений [9,10]:

$$[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{R^2E_j}{2}(\xi^2-1)+a\xi-\lambda_j-\frac{m^2}{\xi^2-1}]F_j(\xi;R)=0 \qquad /1а/$$

$$[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+\frac{R^2E_j}{2}(1-\eta^2)+b\eta-\lambda_j-\frac{m^2}{1-\eta^2}]\Phi_j(\eta;R)=0 \qquad /1б/$$

$$[\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}+m^2]W_j(\alpha)=0 \qquad 1\le\xi<\infty,\quad -1\le\eta\le+1,\quad 0\le\alpha\le 2\pi.$$

Здесь R - расстояние между ядрами; λ_j - константа разделения; $a=R(Z_2+Z_1)$, $b=R(Z_2-Z_1)$; Z_1, Z_2 - заряды ядер. Система единиц: $\hbar=m_e=e=1$.

Для дискретного спектра $(E_j<0)$ решениями системы /1/, ограниченными в заданных областях, являются ортогональные между собой функции [9,10]:

$$\Psi_j(\vec{r};R)=N_j(R)F_j(\xi;R)\Phi_j(\eta;R)e^{im\alpha}, \qquad /2/$$

соответствующие собственным значениям $\lambda_j=\lambda_j(R)$, $E_j=E_j(R)$, $j=N,L,m$ - набор сферических квантовых чисел, соответствующий квантовым числам объединенного атома с зарядом (Z_1+Z_2). $N_j(R)$ - нормировочный множитель, который обычно выбирается так, чтобы

$$\int_\Omega d\Omega\,\Psi_i^*\Psi_j=\delta_{ij}$$

$$d\Omega=\frac{R^3}{8}(\xi^2-\eta^2)d\xi d\eta d\alpha\equiv\frac{R^3}{8}d\tau d\alpha. \qquad /3/$$

ГРУППЫ ДВИЖЕНИЙ

Рассмотрим группу, являющуюся прямым произведением двух групп движений трехмерных пространств $\mathcal{P}(3)\otimes\mathcal{P}(2,1)$.

Группа $\mathcal{P}(3)$ состоит из сдвигов и вращений пространства координат y_i с метрикой:

$$y_iy_i=y_1^2+y_2^2+y_3^2, \qquad /4/$$

а группа $\mathcal{P}(2,1)$ - из сдвигов и вращений пространства y_μ с метрикой:

$$y_\mu y_\mu=y_4^2+y_5^2-y_6^2. \qquad /5/$$

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

$$x_j = -i\frac{\partial}{\partial y_j}, \quad \mathcal{L}_{jk} = -i\left(y_j\frac{\partial}{\partial y_k} - y_k\frac{\partial}{\partial y_j}\right), \; j,k=1,2,3$$ /6/

и $\mathcal{P}(2,1)$:

$$x_\mu = -i\frac{\partial}{\partial y_\mu}, \quad \mu = 4,5,6$$

$$\mathcal{L}_{46} = -i\left(y_4\frac{\partial}{\partial y_6} + y_6\frac{\partial}{\partial y_4}\right)$$

$$\mathcal{L}_{56} = -i\left(y_5\frac{\partial}{\partial y_6} + y_6\frac{\partial}{\partial y_5}\right)$$

$$\mathcal{L}_{45} = -i\left(y_4\frac{\partial}{\partial y_5} - y_5\frac{\partial}{\partial y_4}\right)$$ /7/

удовлетворяют соотношениям структуры:

$$[x_i, x_j] = 0, \; [x_i, \mathcal{L}_{ij}] = i(\delta_{ik}x_j - \delta_{ij}x_k),$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i=j=1,2,3 \\ 0, & i\neq j \end{cases}$$

$$[\mathcal{L}_{12}, \mathcal{L}_{23}] = i\,\mathcal{L}_{31}, \; [\mathcal{L}_{31}, \mathcal{L}_{12}] = i\,\mathcal{L}_{23}, \; [\mathcal{L}_{23}, \mathcal{L}_{31}] = i\,\mathcal{L}_{12}$$

$$[x_\mu, x_\nu] = 0, \; [x_\sigma, \mathcal{L}_{\mu\nu}] = i(\delta_{\sigma\nu}x_\mu - \delta_{\sigma\mu}x_\nu),$$

$$\delta_{\mu\nu} = \begin{cases} 1, & \mu=\nu=4,5 \\ -1, & \mu=\nu=6 \\ 0, & \mu\neq\nu \end{cases}$$

$$[\mathcal{L}_{46}, \mathcal{L}_{56}] = -i\,\mathcal{L}_{45}, \; [\mathcal{L}_{56}, \mathcal{L}_{45}] = i\,\mathcal{L}_{46},$$

$$[\mathcal{L}_{45}, \mathcal{L}_{46}] = i\,\mathcal{L}_{56}$$

$$[x_i, x_\mu] = 0, \; [\mathcal{L}_{ij}, \mathcal{L}_{\mu\nu}] = 0, \; [x_i, \mathcal{L}_{\mu\nu}] = 0,$$

$$[x_\mu, \mathcal{L}_{ij}] = 0 \quad \mu,\nu,\sigma = 4,5,6; \; i,j,k = 1,2,3.$$ /8/

Дифференциальные операторы /6-7/ действуют на функции $f_j(\vec{y})$, которые определяются выбором конкретного базиса j.

Предполагая, что соответствующие интегралы существуют, перейдем к x-представлению ($f_j(\vec{y}) = \int \exp(-i\vec{x}y)\Psi_j(\vec{x})dx'$) и выберем диагональными следующие коммутирующие между собой операторы:

$$\hat{C}_1 = x_1^2 + x_2^2 + x_3^2; \quad \hat{C}_2 = (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)\vec{L}^2 - x_i x_j \mathcal{L}_{ik}\mathcal{L}_{jk}$$

$$\hat{C}_3 = x_4^2 + x_5^2 - x_6^2; \quad \hat{C}_4 = (x_4^2 + x_5^2 - x_6^2)\vec{M}^2 - x_\nu x_\sigma \mathcal{L}_{\nu\mu}\mathcal{L}_{\sigma\mu}$$ /9a/

$$\mathcal{L}_{12}; \mathcal{L}_{45};$$ /9б/

$$\hat{E} = -\frac{1}{2(x_6^2 - x_3^2)}\left[-\vec{M}^2 + 2\bar{a}x_6 - \vec{L}^2 + 2\bar{b}x_3\right]$$ /9в/

$$\hat{\lambda} = \frac{(x_3^2 - \hat{C}_1)}{(x_6^2 - x_3^2)}[-\vec{M}^2 + 2\bar{a}x_6] + \frac{(x_6^2 - \hat{C}_1)}{(x_6^2 - x_3^2)}[-\vec{L}^2 + 2\bar{b}x_3], \qquad /9г/$$

где $\bar{a}$, $\bar{b}$ - некоторые постоянные; $\vec{L}^2 \equiv \mathcal{L}_{23}^2 + \mathcal{L}_{31}^2 + \mathcal{L}_{12}^2$; $\vec{M}^2 \equiv \mathcal{L}_{46}^2 + \mathcal{L}_{56}^2 - \mathcal{L}_{45}^2$, $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$, $\hat{C}_3$, $\hat{C}_4$ являются операторами Казимира $\mathcal{P}(3)$ и $\mathcal{P}(2,1)$.

Непосредственным вычислением можно убедиться, что

$$\hat{C}_2 = 0; \quad \hat{C}_4 = 0, \qquad /10/$$

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. $\hat{E}$, $\hat{\lambda}$ - неканонические диагональные операторы. $\hat{\lambda}$ можно записать также в виде:

$$\hat{\lambda} = [\vec{M}^2 + 2(\hat{C}_1 - x_6^2)\hat{E} - \bar{a}x_6] \qquad /11а/$$

$$\hat{\lambda} = [-\vec{L}^2 + 2(\hat{C}_1 - x_3^2)\hat{E} + \bar{b}x_3]. \qquad /11б/$$

Введем систему координат, в которой генераторы /6-7/, действующие /в x-представлении/ на функции $\Psi_j(\vec{x}) = \Psi_j(\xi, \eta, R, \alpha, \beta)$, имеют вид:

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

$$x_2 = \frac{R}{2}\sqrt{1-\eta^2}\sin\alpha \qquad 0 \le \alpha \le 2\pi, \quad 0 \le \beta \le 2\pi$$

$$x_3 = \frac{R}{2}\eta \qquad x_4 = \frac{R}{2}\sqrt{\xi^2 - 1}\cos\beta \qquad /12а/$$

$$x_5 = \frac{R}{2}\sqrt{\xi^2 - 1}\sin\beta \qquad x_6 = \frac{R}{2}\xi$$

$$\mathcal{L}_{23} = -i\left(\sqrt{1-\eta^2}\sin\alpha\frac{\partial}{\partial\eta} - \eta\frac{\cos\alpha}{\sqrt{1-\eta^2}}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)$$

$$\mathcal{L}_{31} = -i\left(-\sqrt{1-\eta^2}\cos\alpha\frac{\partial}{\partial\eta} - \eta\frac{\sin\alpha}{\sqrt{1-\eta^2}}\frac{\partial}{\partial\alpha}\right)$$

$$\mathcal{L}_{12} = -i\frac{\partial}{\partial\alpha}$$

$$\mathcal{L}_{46} = -i\left(\sqrt{\xi^2-1}\sin\beta\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\xi\cos\beta}{\sqrt{\xi^2-1}}\frac{\partial}{\partial\beta}\right)$$

$$\mathcal{L}_{56} = -i\left(\sqrt{\xi^2-1}\cos\beta\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{\xi\sin\beta}{\sqrt{\xi^2-1}}\frac{\partial}{\partial\beta}\right).$$

$$\mathcal{L}_{45} = -i\frac{\partial}{\partial\beta} \qquad /12б/$$

Как видим, генераторы $\mathcal{L}_{12}$, $\mathcal{L}_{45}$, входящие в набор взаимно коммутирующих операторов /9/, диагональны по переменным α, β. Следовательно, имеем:

$$-i\frac{\partial}{\partial\alpha}\Psi_j(\xi,\eta,R,\alpha,\beta) = m_j\Psi_j(\xi,\eta,R,\alpha,\beta)$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\beta}\Psi_j(\xi,\eta,R,\alpha,\beta) = \tilde{m}_j\Psi_j(\xi,\eta,R,\alpha,\beta), \qquad /13/$$

т.е. $\Psi_j(\xi,\eta,R,\alpha,\beta) = \phi_j(\xi,\eta,R)e^{im_j\alpha}e^{i\tilde{m}_j\beta}$, где m_j, $\tilde{m}_j$ - собственные значения операторов $\mathcal{L}_{12}, \mathcal{L}_{45}$, соответственно.

Остальные операторы /9а,9в,9г/ в системе координат /12а/ с учетом /13/ выглядят следующим образом:

$$\hat{C}_1 = \frac{R^2}{4};\quad \hat{C}_2 = 0;\quad \hat{C}_3 = -\frac{R^2}{4};\quad C_4 = 0 \qquad /14а/$$

$$\hat{E} = -\frac{2}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+a\xi-\frac{\tilde{m}_j^2}{\xi^2-1}\right] -$$

$$-\frac{2}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+b\eta-\frac{m_j^2}{1-\eta^2}\right] \qquad /14в/$$

$$\hat{\lambda} = -\frac{(1-\eta^2)}{(\xi^2-\eta^2)}\left[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+a\xi-\frac{\tilde{m}_j^2}{\xi^2-1}\right] +$$

$$+\frac{(\xi^2-1)}{(\xi^2-\eta^2)}\left[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+b\eta-\frac{m_j^2}{1-\eta^2}\right] \qquad /14г/$$

$b = \bar{b}\cdot R;\ a = \bar{a}\cdot R$.

/11а-11б/ при этом имеют вид:

$$\hat{\lambda} = -\left[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+(\xi^2-1)\frac{R^2\hat{E}}{2}+a\xi-\frac{\tilde{m}_j^2}{\xi^2-1}\right] \qquad /15а/$$

$$\hat{\lambda} = \left[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+(1-\eta^2)\frac{R^2\hat{E}}{2}+b\eta-\frac{m_j^2}{1-\eta^2}\right]. \qquad /15б/$$

Выражения /15а-15б/ можно также получить непосредственно из /14в-14г/. Переменные ξ, η в /15а-15б/ разделяются и, следовательно, функции $\Psi_j(\xi,\eta,R,\alpha,\beta)$ можно представить как

$$\Psi_j(\xi,\eta,R,\alpha,\beta) = N_j(R)F_j(\xi;R)\Phi_j(\eta;R)e^{im_j\alpha+i\tilde{m}_j\beta}. \qquad /16/$$

Для нахождения функций $F_j(\xi;R)$, $\Phi_j(\eta;R)$

необходимо решить уравнения:

$$\left[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{R^2E_j}{2}(\xi^2-1)+a\xi+\lambda_j-\frac{\tilde{m}_j^2}{\xi^2-1}\right]F_j(\xi;R)=0 \qquad /17/$$

$$\left[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}+\frac{R^2E_j}{2}(1-\eta^2)+b\eta-\lambda_j-\frac{m_j^2}{1-\eta^2}\right]\Phi_j(\eta;R)=0, \qquad /18/$$

где λ_j, E_j - собственные значения операторов $\hat{\lambda}$, $\hat{E}$, соответственно. $N_j(R)$ - нормировочный множитель.

Определение же при заданных a, b, R, m_j, $\tilde{m}_j$ всех возможных значений $E_j = E_j(R) < 0$, $\lambda_j = \lambda_j(R)$ и ограниченных в соответствующих областях функций $F_j(\xi;R)$, $\Phi_j(\eta;R)$ системы уравнений /17,18/ приводит при $m_j = \tilde{m}_j = m$ к задаче, полностью эквивалентной задаче двух центров квантовой механики /1/. При этом функции /16/, являющиеся решением /17,18/ и реализующие собой базис вырожденного неканонического представления рассматриваемой группы $\mathcal{P}(3)\otimes\mathcal{P}(2,1)$, равны двухцентровым функциям /2/, умноженным на $\exp(im\beta)$. Выражения /14 в,г/ для операторов $\hat{E}$ и $\hat{\lambda}$ совпадают при $m_j=\tilde{m}_j=m$ с выражениями для операторов энергии E и константы разделения λ в сфероидальной системе координат в задаче /1/ /10/. Переменная R, представляющая собой в системе координат /12а/ половину радиуса сферы / $x_1^2+x_2^2+x_3^2$ / /равную также $+\sqrt{x_6^2-x_4^2-x_5^2}$ / в задаче /1/, равна расстоянию между ядрами.

Вычисление матричных элементов генераторов /12/ в базисе /16/ сводится, как нетрудно видеть, к вычислению двухцентровых интегралов по ξ и аналогичных интегралов по η.

При необходимости рассматривать также двухцентровые интегралы, содержащие производные по R, можно расширить обсуждаемую здесь полупростую группу $\mathcal{P}(3)\otimes\mathcal{P}(2,1)$ до простой группы $\mathcal{P}(5,1)$, реализуемой движениями шестимерного пространства координат y_ν с метрикой:

$$y_\nu y_\nu = y_1^2+y_2^2+y_3^2+y_4^2+y_5^2-y_6^2. \qquad /19/$$

Дополнив набор генераторов /6,7/ генераторами

$$\mathcal{L}_{j4} = -i\left(y_j\frac{\partial}{\partial y_4}-y_4\frac{\partial}{\partial y_j}\right),\qquad j=1,2,3$$

$$\mathcal{L}_{j5} = -i\left(y_j\frac{\partial}{\partial y_5}-y_5\frac{\partial}{\partial y_j}\right)$$

$$\mathcal{L}_{j6} = -i\left(y_j\frac{\partial}{\partial y_6}+y_6\frac{\partial}{\partial y_j}\right), \qquad /20/$$

перейдем к x-представлению и выберем набор диагональных коммутирующих операторов, соответствующий набору /9/. Возникающие при этом в группе $\mathcal{P}(5,1)$ дополнительные диагональные операторы в силу вырожденности выбранного представления к каким-либо новым соотношениям не приводят.

В системе координат /12а/ получим те же уравнения /17,18/, которые сводятся к задаче /1/ и решения которых в случае группы $\mathcal{P}(5,1)$ будут реализованы на конусе:

$$x_1^2+x_2^2+x_3^2+x_4^2+x_5^2-x_6^2=0. \qquad /21/$$

Генераторы /20/ в x-представлении в системе координат /12/ при этом имеют вид:

$$\mathcal{L}_{14} = -i\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\Big[\cos\alpha\cos\beta\Big(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big) - \frac{\cos\alpha\sin\beta}{(\xi^2-1)}\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\cos\beta\ \sin\alpha}{(1-\eta^2)}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\cos\alpha\cos\beta R\frac{\partial}{\partial R}\Big]$$

$$\mathcal{L}_{24} = -i\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\Big[\sin\alpha\cos\beta\Big(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big) - \frac{\sin\alpha\ \sin\beta}{(\xi^2-1)}\frac{\partial}{\partial\beta}-\frac{\cos\beta\cos\alpha}{(1-\eta^2)}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\cos\beta R\frac{\partial}{\partial R}\Big]$$

$$\mathcal{L}_{34} = -i\sqrt{(\xi^2-1)}\Big[\cos\beta\Big(\xi\eta\frac{\partial}{\partial\xi}-(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\Big)-\frac{\eta\sin\beta}{(\xi^2-1)}\frac{\partial}{\partial\beta} - \eta\cos\beta R\frac{\partial}{\partial R}\Big]$$

$$\mathcal{L}_{15} = -i\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\Big[\cos\alpha\sin\beta\Big(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\Big) + \frac{\cos\alpha\cos\beta}{(\xi^2-1)}\frac{\partial}{\partial\beta}+\frac{\sin\beta\sin\alpha}{(1-\eta^2)}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\cos\alpha\sin\beta\ R\frac{\partial}{\partial R}\Big]$$

$$\mathfrak{L}_{25} = -i\sqrt{(\xi^2-1)(1-\eta^2)}\,[\sin\alpha\sin\beta(\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+\eta\frac{\partial}{\partial\eta})+$$

$$+\frac{\sin\alpha\cos\beta}{(\xi^2-1)}\frac{\partial}{\partial\beta}-\frac{\sin\beta\cos\alpha}{(1-\eta^2)}\frac{\partial}{\partial\alpha}-\sin\alpha\sin\beta R\frac{\partial}{\partial R}].$$

$$\mathfrak{L}_{35} = -i\sqrt{(\xi^2-1)}\,[\sin\beta(\xi\eta\frac{\partial}{\partial\xi}-(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta})+$$

$$+\frac{\eta\cos\beta}{(\xi^2-1)}\frac{\partial}{\partial\beta}-\eta\sin\beta R\frac{\partial}{\partial R}]$$

$$\mathfrak{L}_{16} = -i\sqrt{1-\eta^2}\,[\cos\alpha(-(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}-\xi\eta\frac{\partial}{\partial\eta})-$$

$$-\frac{\xi\sin\alpha}{1-\eta^2}\frac{\partial}{\partial\alpha}+\xi\cos\alpha R\frac{\partial}{\partial R}]$$

$$\mathfrak{L}_{26} = -i\sqrt{1-\eta^2}\,[\sin\alpha(-(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}-\xi\eta\frac{\partial}{\partial\eta})+$$

$$+\frac{\xi\cos\alpha}{1-\eta^2}\frac{\partial}{\partial\alpha}+\xi\sin\alpha R\frac{\partial}{\partial R}]$$

$$\mathfrak{L}_{36} = -i[-\eta(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}+\xi(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}+\xi\eta R\frac{\partial}{\partial R}]. \quad /22/$$

Подобным образом рассматривая соответствующий базис в группе $\mathcal{P}(4,2)$ - группе движений шестимерного пространства координат с метрикой:

$$y_\mu y_\mu = y_1^2+y_2^2+y_3^2-y_4^2-y_5^2+y_6^2, \quad /23/$$

можно также прийти к задаче /1/.

Вычисляя инфинитезимальные генераторы этой группы

$$x_j = -i\frac{\partial}{\partial y_j}$$

$$L_{jk} = -i(y_j\frac{\partial}{\partial y_k}-y_k\frac{\partial}{\partial y_j})$$

$$L_{\mu k} = -i(y_\mu\frac{\partial}{\partial y_k}+y_k\frac{\partial}{\partial y_\mu})$$

$$L_{45} = -i(y_4\frac{\partial}{\partial y_5}-y_5\frac{\partial}{\partial y_4})$$

$$j,k = 1,2,3,6 \qquad \mu = 4,5 \quad /24/$$

в x -представлении в системе координат:

$$x_1 = \frac{R}{\sqrt{2}}\sqrt{1-\eta^2}\cos\alpha\cos\gamma$$

$$x_2 = \frac{R}{\sqrt{2}}\sqrt{1-\eta^2}\sin\alpha\cos\gamma \qquad 0\le R<\infty \qquad -1\le\eta\le+1$$

$$x_3 = \frac{R}{\sqrt{2}}\eta\cos\gamma \qquad 0\le\alpha\le 2\pi \qquad 0\le\gamma\le\frac{\pi}{2}$$

$$0\le\beta\le 2\pi$$

$$x_4 = \frac{R}{\sqrt{2}}\sqrt{\xi^2-1}\cos\beta\sin\gamma \qquad +1\le\xi<\infty$$

$$x_5 = \frac{R}{\sqrt{2}}\sqrt{\xi^2-1}\sin\beta\sin\gamma \qquad x_6 = \frac{R}{\sqrt{2}}\xi\sin\gamma, \quad /25/$$

получим, что L_{jk}, $j,k=1,2,3$, L_{56}, L_{46}, L_{45} будут иметь тот же вид, что и $\mathcal{L}_{jk}$, $j,k=1,2,3$, $\mathcal{L}_{56}, \mathcal{L}_{46}, \mathcal{L}_{45}$ в группе $\mathcal{P}(3) \otimes \mathcal{P}(2,1)$ в системе координат /12/.

Выбрав набор коммутирующих операторов, подобный набору /9/, при $\cos\gamma = \sin\gamma = \frac{1}{\sqrt{2}}$, $\frac{\partial}{\partial\gamma} = 0$ придем к задаче /1/.

Аналогичное рассмотрение более широких групп, например, конформных групп шестимерных пространств /19/, /23/ или группы, являющейся прямым произведением двух конформных групп пространств /4/ и /5/, приводит при выборе соответствующего набора коммутирующих операторов типа /9/ к задаче, которая эквивалентна задаче двух центров квантовой механики /1/. Вычисление же матричных элементов генераторов этих групп сводится к вычислению двухцентровых интегралов, причем некоторые из этих интегралов содержат первую и вторую производные по R.

Не останавливаясь здесь подробно на всех аспектах выбранных представлений упоминаемых в работе групп, заметим лишь, что все эти представления являются неканоническими представлениями в теории групп. Для группы трехмерных вращений неканонические представления впервые были рассмотрены в работе /11/ в связи с квантовой теорией несимметричного волчка.

Заметим также, что рассматриваемые группы $\mathcal{P}(3) \otimes \mathcal{P}(2,1)$, $\mathcal{P}(5,1)$, $\mathcal{P}(4,2)$ являются группами движений /сдвиги и вращения/ соответствующих пространств, а не группами вращений, как группы водородоподобного атома.

Полученная в /8/ линейная алгебра двухцентровых интегралов является следствием рассмотренных здесь групповых свойств задачи /1/. Соотношения ортогональности /3/, которым удовлетворяют функции /2/, представляют собой при $i \neq j$ частный случай этой алгебры.

В заключение благодарю Я.А.Смородинского, И.В.Комарова, Д.П.Желобенко, Л.И.Пономарева, А.Т.Филиппова, С.Ю.Славянова за весьма полезные обсуждения и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fock V.A. Zs.f. Phys., 1935, 98, p.145.
2. Englefield M.J., Wiley J. Group theory and the Coulomb problem, New York, 1972.
3. Barut A.O., Budini P., Fronsdal C. Proc.Roy.Soc.(Lond.),1966, A291, p.106.
4. *Малкин И.А., Манько В.И. Письма в ЖЭТФ, 1965, 2, с. 230.*
5. Barut A.O., Kleinert H. Phys.Rev., 1967, 156 N 5,p.1541.
6. Gordon W. Ann. d.Phys., 1929, 2, p.1031.
7. *Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика, Наука, М., 1963.*
8. *Трускова Н.Ф. ОИЯИ, Р2-11269, Дубна, 1978.*
9. Power J.D. Phil.Trans.Roy.Soc.Lond.,1973, A274,p.663.
10. *Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. Наука, М., 1976.*
11. *Лукач И., Смородинский Я.А. ОИЯИ, Р2-7465, Дубна, 1973.*

Рукопись поступила в издательский отдел
18 января 1978 года.