ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА

Р2 - 11988

Н.Ф.Трускова

ПЕРЕСЕЧЕНИЯ ТЕРМОВ В ЗАДАЧЕ ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП $O(2,2)\oplus O(2,2)$, $O(3,1)\oplus O(3,1)$

1978

P2 - 11988

Н.Ф.Трускова

ПЕРЕСЕЧЕНИЯ ТЕРМОВ В ЗАДАЧЕ ДВУХ ЦЕНТРОВ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ И ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП $O(2,2)\oplus O(2,2)$, $O(3,1)\oplus O(3,1)$

Направлено в ЯФ

Трускова Н.Ф. P2 - 11988

Пересечения термов в задаче двух центров квантовой механики и представления групп $O(2,2) \otimes O(2,2)$, $O(3,1) \otimes O(3,1)$

В работе показано, что решение в евклидовом пространстве задачи о движении частицы в поле двух кулоновских центров эквивалентно совместному решению в псевдоевклидовом пространстве двух одноцентровых кулоновских задач и соответствует при этом задаче теории представлений групп $O(2,2) \otimes O(2,2)$, $O(3,1) \otimes O(3,1)$, $\mathcal{P}(2,1) \otimes \mathcal{P}(2,1)$. В случае дискретного спектра решения, соответствующие пересекающимся термам, принадлежат представлениям с одинаковыми значениями операторов Казимира группы $O(2,2) \otimes O(2,2)$. Условие взаимности для функций непрерывного спектра и рекуррентные соотношения между двухцентровыми интегралами являются следствием рассматриваемых в работе групповых свойств решений задачи двух центров.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Truskova N.F. P2 - 11988

Crossing of the Potential Curves in the Two-Centre Problem in Quantum Mechanics and Representations of $O(2,2) \otimes O(2,2)$, $O(3,1) \otimes O(3,1)$ Groups

It is shown that solution in Euclidean space of the problem of particle motion in the field of two Coulomb centres is equivalent to the joint solution in pseudoeuclidean space of two one-centre Coulomb problems and corresponds to the problem of representation theory for $O(2,2) \otimes O(2,2)$, $O(3,1) \otimes O(3,1)$, $\mathcal{P}(2,1) \otimes \mathcal{P}(2,1)$ groups. For discrete spectrum, the solutions corresponding to crossing potential curves belong to representations with equal values of Casimir operators of $O(2,2) \otimes O(2,2)$ group. The reciprocity condition for continuous spectrum functions and recurrent relations between two-centre integrals are the consequences of group properties of the two-centre problem solutions considered.

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

Решения уравнения Шредингера с одним и двумя кулоновскими центрами представляют собой наиболее важные случаи решений этого уравнения. Собственные функции одноцентровой кулоновской задачи являются волновыми функциями нерелятивистского водородоподобного атома, а собственные функции двухцентровой кулоновской задачи - волновыми функциями нерелятивистской двухатомной молекулы.

Групповые свойства, спектр собственных значений и собственные функции задачи с одним кулоновским центром в настоящее время изучены основательно. В частности, известно, что решения этой задачи можно поставить в соответствие определенным представлениям групп $O(4)$ /1,2/, $O(3,1)$ /2,3/, $O(4,2)$ /3,4/. При этом состояния дискретного спектра задачи соответствуют представлениям группы $O(4)$ /1,2/, а состояния непрерывного спектра - представлениям группы $O(3,1)$ /2,3/. Рассмотрение группы $O(4,2)$ позволяет описывать состояния дискретного и непрерывного спектров одноцентровой задачи в пределах унитарных и неунитарных представлений одной группы /3/.

Следствием групповых свойств решений задачи с одним кулоновским центром является прежде всего вырожденность значений энергии. При этом оператор, соответствующий энергии E, является c-числом. Собственные значения этого оператора определяются значениями операторов Казимира рассматриваемых групп. Рекуррентные соотношения между интегралами дискретного спектра[5,6] и между интегралами непрерывного спектра[7,8] также являются следствием групповых свойств решений этой задачи.

В отличие от одноцентровой задача с двумя кулоновскими центрами /задача двух центров квантовой механики/ исследована еще недостаточно. После разделения переменных в уравнении Шредингера

$$E_j \Psi_j(\vec{r}) = [-\frac{1}{2}(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}+\frac{\partial^2}{\partial z^2}) - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}]\Psi_j(\vec{r}) \qquad /1/$$

в сфероидальной системе координат она сводится к нахождению собственных значений и ограниченных собственных функций системы уравнений[9,10]:

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

$$+\lambda_j - \frac{m^2}{\xi^2-1}]\Pi_j(\xi;R)=0, \qquad /2а/$$

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

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

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

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

$$|\Pi_j(+1;R)| < \infty, \quad |\Pi_j(\infty;R)| < \infty, \quad |\Xi_j(\pm 1;R)| < \infty .$$

Здесь Z_1, Z_2 - заряды ядер; R - расстояние между ядрами; $E_j = E_j(R)$ - энергия системы; $\lambda_j = \lambda_j(R)$ - константа разделения. Система единиц: $\hbar = m_e = e = 1$.

Решения системы /2/ при произвольных значениях R, Z_1, Z_2 в настоящее время получены только численно с помощью ЭВМ[9,10,11,12].

Вырожденность значений энергии в двухатомной молекуле /пересечение термов $E_j(R)$ при некоторых значениях межъядерного расстояния R/ известна давно[13]. Существование в этом случае некоторой дополнительной симметрии, связанной с "дополнительным" коммутирующим с энергией E оператором константы разделения λ, обсуждалось многими авторами[6,9,14-16], однако соответствующая группа симметрии, аналогичная группе $O(4)$ для атома водорода, найдена не была. Очевидная же инвариантность уравнения /1/ относительно вращений в плоскости xy к каким-либо соотношениям для значений энергии не приводит.

Было замечено, что уравнение /2а/ совпадает с уравнением для радиальной функции водородоподобного атома с зарядом (Z_1+Z_2) в сфероидальной системе координат, а уравнение /2б/ - с уравнением для угловой функции водородоподобного атома с зарядом (Z_1-Z_2) в сфероидальной системе координат[9,17]. При совпадении энергии системы $E_j(R)$ с энергиями водородоподобных атомов с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) решения задачи /2/ могут выражаться через решения двух одноцентровых задач[18].

В связи с этим казалось бы естественным в качестве группы симметрии задачи /2/ рассмотреть группу, являющуюся прямым произведением двух групп $O(4)$, соответствующих двум водородоподобным атомам с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2). Однако, как было показано в работе[19], рассмотрение соответствующего представления в группе $O(4)\otimes O(4)$ приводит лишь к весьма ограниченному классу решений задачи /2/, а именно к решениям, представляющим собой только часть всех элементарных решений этой задачи. Все же элементарные решения задачи /2/ можно описывать с помощью базисов неканонических представлений группы $O(4)\otimes O(2,2)$[19].

В данной работе решения задачи двух центров квантовой механики рассматриваются как базисы неканонических представлений групп $O(2,2)\otimes O(2,2)$, $O(3,1)\otimes O(3,1)$, $\mathcal{P}(2,1)\otimes\mathcal{P}(2,1)$, $O(4,2)\otimes O(4,2)$. Показано, что уравнения

/2а/ и /2б/ совпадают также с уравнениями для радиальной и угловой функций "комплексных атомов", т.е. "атомов", волновые функции которых являются решениями уравнения Шредингера в неевклидовом комплексном пространстве в системе координат гиперболоида вращения. Эти волновые функции при $E_j < 0$ реализуют собой специальный базис группы $O(2,2)$, которая является комплексным расширением группы $O(4)$. Рассмотрение базиса в группе $O(2,2) \otimes O(2,2)$, являющейся комплексным расширением группы $O(4) \otimes O(4)$, приводит к решению задачи /2/. Операторы Казимира в группах $O(2,2)$ имеют по сравнению с операторами Казимира в группах $O(4)$ более широкий спектр значений [20], поэтому при $E_j < 0$ все решения задачи /2/ реализуют собой специальные базисы вырожденных неканонических представлений группы $O(2,2) \otimes O(2,2)$. Решения, соответствующие пересекающимся термам, принадлежат представлениям с одинаковыми значениями операторов Казимира группы $O(2,2) \otimes O(2,2)$. Возможность пересечения термов, имеющих равные значения m /термов одинаковой симметрии/, естественным образом следует из данного группового рассмотрения.

В случае сплошного спектра $(E_j = \frac{k^2}{2} > 0)$ рассмотрение комплексных величин $\epsilon = \sqrt{-2E_j}$ приводит к комплексным операторам $\mathcal{A}_i$, A_i в группах $O(2,2)$. Это, в свою очередь, приводит к рассмотрению группы $O(3,1) \otimes O(3,1)$, а также к условию взаимности для двухцентровых функций сплошного спектра, аналогичному при $Z_1 \neq Z_2$ условию взаимности для функций дискретного спектра [18]. Если $Z_1 = Z_2$, то полученное условие взаимности переходит в условие, при котором фаза рассеяния на конечном диполе равна нулю.

При $E_j = \frac{k^2}{2} = 0$ решения задачи двух центров можно описывать с помощью представлений группы $\mathcal{P}(2,1) \otimes \mathcal{P}(2,1)$.

Вместо базисов в группах $O(2,2) \otimes O(2,2)$ и $O(3,1) \otimes O(3,1)$ можно рассматривать также базис в группе $O(4,2) \otimes O(4,2)$ и получить соответствие между представлениями этой

группы и решениями задачи /2/ как в случае непрерывного, так и в случае дискретного спектров.

Во всех этих рассмотрениях операторы, соответствующие энергии E_j, являются с-числами и коммутируют со всеми генераторами рассматриваемых в работе групп. Собственные значения этих операторов выражаются через значения операторов Казимира упоминаемых групп. В этом смысле такой подход аналогичен описанию решений задачи с одним кулоновским центром с помощью соответствующих представлений групп $O(4)$ [1,2], $O(3,1)$ [2,3], $O(4,2)$ [3] и отличается от описания решений задачи /2/ с помощью неканонических представлений групп $\mathcal{P}(3) \otimes \mathcal{P}(2,1)$, $\mathcal{P}(5,1)$, $\mathcal{P}(4,2)$ [21], хотя и не противоречит последнему.

Полученные в работе рекуррентные соотношения между интегралами дискретного спектра, соответствующие пересекающимся или совпадающим при всех R термам, и между интегралами непрерывного спектра при $E_i = E_j = \frac{k}{2} > 0$ также являются следствием рассмотренных в работе групповых свойств решений задачи /2/.

БАЗИС В ГРУППЕ $O(2,2) \otimes O(2,2)$

Используя пространство координат x_i с метрикой

$$\vec{x}^2 \equiv g_{ik} x_i x_k = -x_1^2 - x_2^2 + x_3^2, \qquad /3/$$

введем операторы

$$\mathcal{L}_1 = -i\left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} + x_3 \frac{\partial}{\partial x_2}\right), \quad \mathcal{L}_2 = -i\left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_1 \frac{\partial}{\partial x_3}\right),$$

$$\mathcal{L}_3 = -i\left(x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_1}\right),$$

$$\mathcal{A}_1 = \frac{1}{\epsilon_1}\left[\frac{1}{2}(-\mathcal{L}_3 \mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_2 \mathcal{L}_3 + \mathcal{L}_2 \mathcal{P}_3 + \mathcal{P}_3 \mathcal{L}_2) - \frac{a x_1}{r}\right], \qquad /4/$$

$$\mathcal{A}_2 = \frac{1}{\epsilon_1}[\frac{1}{2}(-\mathcal{L}_1\mathcal{P}_3 - \mathcal{P}_3\mathcal{L}_1 - \mathcal{L}_3\mathcal{P}_1 - \mathcal{P}_1\mathcal{L}_3) + \frac{ax_2}{r}],$$

$$\mathcal{A}_3 = \frac{1}{\epsilon_1}[\frac{1}{2}(-\mathcal{L}_2\mathcal{P}_1 - \mathcal{P}_1\mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_1\mathcal{P}_2 - \mathcal{P}_2\mathcal{L}_1) - \frac{ax_3}{r}],$$

где $r = \sqrt{-x_1^2 - x_2^2 + x_3^2}$; $\mathcal{P}_j = -i\frac{\partial}{\partial x_j}$, $j=1,2,3$; a, ϵ_1 - постоянные.

С помощью непосредственного вычисления можно убедиться, что операторы /4/ удовлетворяют коммутационным соотношениям

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

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

$$\tilde{\epsilon}_{ijk} = \epsilon_{ij\ell}\, g_{\ell k}; \quad \ell, i, j, k = 1,2,3. \qquad /5/$$

ϵ_{ijk} - полностью антисимметричный тензор. При этом оператор

$$\hat{E}_1 = -\frac{1}{2}(-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}) - \frac{a}{r} \qquad /6/$$

коммутирует со всеми операторами /4/ и равен

$$\hat{E}_1 = -\epsilon_1^2/2 = \mathrm{Const}. \qquad /7/$$

Уравнение

$$-\epsilon_1^2/2\, \Psi(\vec{x}) = [-\frac{1}{2}(-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}) - \frac{a}{r}]\Psi(\vec{x})$$

представляет собой продолженное в комплексную область по переменным x_1, x_2 уравнение Шредингера для волновых функций водородоподобного атома с зарядом a и энергией $-\epsilon_1^2/2$.

Из соотношений /5/ следует, что операторы /4/ являются генераторами алгебры Ли группы вращений $O(2,2)$[20]. $\mathcal{L}_i$, $\mathcal{A}_i$ представляют собой комплексное продолжение соответственно момента L_i и вектора Лапласа-Ленца A_i, являющихся генераторами алгебры Ли группы $O(4)$, соответствующей водородоподобному атому с зарядом a [1,2].

Используя пространство координат y_i с метрикой

$$y^2 = g_{ik}y_i y_k = -y_1^2 - y_2^2 + y_3^2, \qquad /8/$$

введем также операторы:

$$L_1 = -i(y_2\frac{\partial}{\partial y_3} + y_3\frac{\partial}{\partial y_2}), \quad L_2 = -i(y_3\frac{\partial}{\partial y_1} + y_1\frac{\partial}{\partial y_3}),$$

$$L_3 = -i(y_1\frac{\partial}{\partial y_2} - y_2\frac{\partial}{\partial y_1}),$$

$$A_1 = \frac{1}{\epsilon_2}[\frac{1}{2}(-L_3P_2 - P_2L_3 + L_2P_3 + P_3L_2) - \frac{by_1}{\rho}],$$

$$A_2 = \frac{1}{\epsilon_2}[\frac{1}{2}(-L_1P_3 - P_3L_1 - L_3P_1 - P_1L_3) + \frac{by_2}{\rho}],$$

$$A_3 = \frac{1}{\epsilon_2}[\frac{1}{2}(-L_2P_1 - P_1L_2 - L_1P_2 - P_2L_1) - \frac{by_3}{\rho}], \qquad /9/$$

где $\rho = \sqrt{-y_1^2 - y_2^2 + y_3^2}$, $P_j = -i\frac{\partial}{\partial y_j}$, $j=1,2,3$; b, ϵ_2 - постоянные.

Операторы /9/ удовлетворяют коммутационным соотношениям /5/ с заменой $L_i \to \mathcal{L}_i$, $A_i \to \mathcal{A}_i$ и, таким образом, подобно операторам /4/ являются генераторами алгебры Ли группы вращений $O(2,2)$. При этом оператор

$$\hat{E}_2 = -\frac{1}{2}(-\frac{\partial^2}{\partial y_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial y_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_3^2}) - \frac{b}{\rho} \qquad /10/$$

коммутирует со всеми операторами /9/ и равен

$$\hat{E}_2 = -\epsilon_2^2/2 = \text{Const}. \qquad /11/$$

Рассмотрим теперь группу, являющуюся прямым произведением двух групп $O(2,2)$ с генераторами /4/ и /9/ соответственно. Выберем в этой группе набор диагональных взаимно коммутирующих операторов следующим образом:

$$\hat{C}_1 = \frac{1}{2}(\vec{\mathcal{P}}^2 - \vec{\mathcal{A}}^2); \qquad \hat{C}_2 = (\vec{\mathcal{P}}\vec{\mathcal{A}}); \qquad /12а/$$

$$\hat{C}_3 = \frac{1}{2}(\vec{L}^2 - \vec{A}^2); \qquad \hat{C}_4 = (\vec{L}\vec{A}); \qquad /12б/$$

$$\mathcal{P}_3; \; L_3; \qquad /12в/$$

$$\hat{\lambda}_1 = \vec{\mathcal{P}}^2 - \epsilon_1 R \mathcal{A}_3; \qquad /12г/$$

$$\hat{\lambda}_2 = \vec{L}^2 - \epsilon_2 R A_3. \qquad /12д/$$

Здесь R - постоянная, $0 \le R < \infty$. Операторы $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$, $\hat{C}_3$, $\hat{C}_4$ являются операторами Казимира обеих групп $O(2,2)$; $\mathcal{P}_3$, L_3 - инварианты однопараметрических подгрупп; $\hat{\lambda}_1$, $\hat{\lambda}_2$ - неканонические диагональные операторы.

Набор операторов /12/ является полным набором диагональных операторов в $O(2,2) \otimes O(2,2)$, который определяет собственные функции $\Psi(\vec{x},\vec{y})$.

Введем в пространстве x_i систему координат

$$x_1 = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(\nu^2-1)}\cos\alpha, \quad x_2 = \frac{R}{2}\sqrt{(\xi^2-1)(\nu^2-1)}\sin\alpha,$$

$$x_3 = \frac{R}{2}(\xi\nu + 1)$$

$$+1 \le \xi < \infty, \quad +1 \le \nu < \infty, \quad 0 \le \alpha \le 2\pi. \qquad /13а/$$

а в пространстве y_i - систему координат

$$y_1 = \frac{R}{2}\sqrt{(1-\eta^2)(1-\mu^2)}\cos\beta, \quad y_2 = \frac{R}{2}\sqrt{(1-\eta^2)(1-\mu^2)}\sin\beta,$$

$$y_3 = \frac{R}{2}(\eta\mu + 1)$$

$$-1 \le \eta \le +1, \quad -1 \le \mu \le +1, \quad 0 \le \beta \le 2\pi. \qquad /13б/$$

Поверхности, на которых ξ или ν /η или μ/ постоянны, являются гиперболоидами /эллипсоидами/ вращений:

$$\frac{(x_1^2 + x_2^2)}{\frac{R^2}{4}(\xi^2-1)} - \frac{(x_3 - \frac{R}{2})^2}{\frac{R^2}{4}\xi^2} = -1, \quad \frac{(x_1^2 + x_2^2)}{\frac{R^2}{4}(\nu^2-1)} - \frac{(x_3 - \frac{R}{2})^2}{\frac{R^2}{4}\nu^2} = -1,$$

$$\frac{(y_1^2 + y_2^2)}{\frac{R^2}{4}(1-\eta^2)} + \frac{(y_3 - \frac{R}{2})^2}{\frac{R^2}{4}\eta^2} = 1, \quad \frac{(y_1^2 + y_2^2)}{\frac{R^2}{4}(1-\mu^2)} + \frac{(y_3 - \frac{R}{2})^2}{\frac{R^2}{4}\mu^2} = 1.$$

Операторы /12/ в системе координат /13/ имеют вид:

$$\hat{C}_1 = \frac{1}{2}(-1 + \frac{a^2}{\epsilon_1^2}); \qquad \hat{C}_2 = 0; \qquad /14а/$$

$$\hat{C}_3 = \frac{1}{2}(-1 + \frac{b^2}{\epsilon_2^2}); \qquad \hat{C}_4 = 0; \qquad /14б/$$

$$\mathcal{P}_3 = -\frac{\partial}{\partial\alpha}; \quad L_3 = -i\frac{\partial}{\partial\beta}; \qquad /14в/$$

$$\hat{\lambda}_1 = -\frac{(\xi^2-1)}{(\xi^2-\nu^2)}\left[(\nu^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\nu^2} + 2\nu\frac{\partial}{\partial\nu} + aR\nu + \frac{1}{\nu^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\right] + \qquad /14г/$$

$$+\frac{(\nu^2-1)}{(\xi^2-\nu^2)}\left[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+aR\,\xi+\frac{1}{\xi^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\right];$$

$$\hat\lambda_2=\frac{(1-\eta^2)}{(\mu^2-\eta^2)}\left[(1-\mu^2)\frac{\partial^2}{\partial\mu^2}-2\mu\frac{\partial}{\partial\mu}-bR\mu+\frac{1}{1-\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\right]- \qquad /14д/$$

$$-\frac{(1-\mu^2)}{(\mu^2-\eta^2)}\left[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}-bR\eta+\frac{1}{1-\eta^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\right].$$

Поскольку $\hat C_2=\hat C_4=0$, рассматриваемое нами представление - вырожденное.

Из теории групп известно, что группа $O(2,2)$ локально - изоморфна прямому произведению двух групп, каждая из которых изоморфна группе $O(2,1)$. Операторы Казимира группы $O(2,2)$ линейно выражаются через операторы Казимира двух групп $O(2,1)$. Таким образом, операторы $\hat C_1$, $\hat C_2$, $\hat C_3$, $\hat C_4$ в общем случае могут быть равны [20,22]

$$\hat C_1=\Phi_1(\Phi_1+1)+\tilde\Phi_1(\tilde\Phi_1+1),\quad \hat C_2=\Phi_1(\Phi_1+1)-\tilde\Phi_1(\tilde\Phi_1+1), \qquad /15а/$$

$$\hat C_3=\Phi_2(\Phi_2+1)+\tilde\Phi_2(\tilde\Phi_2+1),\quad \hat C_4=\Phi_2(\Phi_2+1)-\tilde\Phi_2(\tilde\Phi_2+1). \qquad /15б/$$

Здесь Φ_1, $\tilde\Phi_1$, Φ_2, $\tilde\Phi_2$ - вещественные неположительные числа.

Сравнивая /14а-14б/ и /15а-15б/, получаем:

$$\epsilon_1^2=\frac{a^2}{(2\Phi_1+1)^2},\quad \Phi_1=\tilde\Phi_1;\quad \epsilon_2^2=\frac{b^2}{(2\Phi_2+1)^2},\quad \Phi_2=\tilde\Phi_2;\ a,b\neq 0. \qquad /16/$$

Если $a=0$ /или $b=0$ /, то $\Phi_1=\tilde\Phi_1=-\frac{1}{2}$/или $\Phi_2=\tilde\Phi_2=-\frac{1}{2}$/, а ϵ_1 /или ϵ_2/ не зависят от Φ_1 /или от Φ_2 /.

Найдем теперь функции $\Psi_j(\vec x,\vec y)=\Psi_j(R,\xi,\nu,\eta,\mu,\alpha,\beta)$, являющиеся собственными функциями операторов /12/ в системе координат /13/. Поскольку операторы /6/ и /10/ коммутируют со всеми операторами /4/ и /9/, а, следовательно, и со всеми операторами /12/, то собственные функции операторов /12/ являются также собственными функциями операторов /6/ и /10/. Операторы /6/ и /10/ в системе координат /13/ выглядят следующим образом:

$$\hat E_1=-\frac{2}{R^2(\xi^2-\nu^2)}\left[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+aR\xi+\frac{1}{\xi^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}-\right.$$

$$\left.-(\nu^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\nu^2}-2\nu\frac{\partial}{\partial\nu}-aR\nu-\frac{1}{\nu^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\right], \qquad /17а/$$

$$\hat E_2=-\frac{2}{R^2(\mu^2-\eta^2)}\left[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}-bR\eta+\frac{1}{1-\eta^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}-\right.$$

$$\left.-(1-\mu^2)\frac{\partial^2}{\partial\mu^2}+2\mu\frac{\partial}{\partial\mu}+bR\mu-\frac{1}{1-\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}\right]. \qquad /17б/$$

Обозначим собственные значения $\hat{\mathcal{P}}_3$, L_3 через m_1, m_2, а собственные значения $\hat\lambda_1$, $\hat\lambda_2$ - через λ_1,λ_2. Операторы $\hat E_1$, $\hat E_2$ согласно /7/ и /11/ имеют собственные значения соответственно $-\epsilon_1^2/2$ и $-\epsilon_2^2/2$.

Умножим /17а/ на $\frac{R^2}{2}(\xi^2-1)$ и сложим с /14г/. Затем умножим /17а/ на $\frac{R^2}{2}(\nu^2-1)$ и также сложим с /14г/.

Получаем:

$$\hat\lambda_1+\frac{R^2}{2}(\xi^2-1)\hat E_1=-\left[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}+aR\xi+\frac{1}{\xi^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}\right], \qquad /18а/$$

$$\hat{\lambda}_1 + \frac{R^2}{2}(\nu^2-1)\hat{E}_1 = -[(\nu^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\nu^2} + 2\nu\frac{\partial}{\partial\nu} + aR\nu + \frac{1}{\nu^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}]. \qquad /18б/$$

Аналогично умножим /17б/ на $\frac{R^2}{2}(\eta^2-1)$ /и затем на $\frac{R^2}{2}(\mu^2-1)$ / и сложим результат с /14д/. Это дает:

$$\hat{\lambda}_2 - \frac{R^2}{2}(1-\eta^2)\hat{E}_2 = [(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} - bR\eta + \frac{1}{1-\eta^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}], \qquad /19а/$$

$$\hat{\lambda}_2 - \frac{R^2}{2}(1-\mu^2)\hat{E}_2 = [(1-\mu^2)\frac{\partial^2}{\partial\mu^2} - 2\mu\frac{\partial}{\partial\mu} - bR\mu + \frac{1}{1-\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}]. \qquad /19б/$$

Таким образом получаем, что нахождение ограниченных собственных функций полного набора диагональных операторов /12/ в системе координат /13/ эквивалентно совместному решению системы уравнений

$$-i\frac{\partial}{\partial\alpha}\Psi_j = m_1\Psi_j, \qquad /20а/$$

$$-i\frac{\partial}{\partial\beta}\Psi_j = m_2\Psi_j, \qquad /20б/$$

$$\lambda_1\Psi_j = -[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} - \frac{R^2\epsilon_1^2}{4}(\xi^2-1) + aR\xi + \frac{1}{\xi^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}]\Psi_j, \qquad /20в/$$

$$\lambda_1\Psi_j = -[(\nu^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\nu^2} + 2\nu\frac{\partial}{\partial\nu} - \frac{R^2\epsilon_1^2}{4}(\nu^2-1) + aR\nu + \frac{1}{\nu^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}]\Psi_j, \qquad /20г/$$

$$\lambda_2\Psi_j = [(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} - \frac{R^2\epsilon_2^2}{4}(1-\eta^2) - bR\eta + \frac{1}{1-\eta^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}]\Psi_j, \qquad /20д/$$

$$\lambda_2\Psi_j = [(1-\mu^2)\frac{\partial^2}{\partial\mu^2} - 2\mu\frac{\partial}{\partial\mu} - \frac{R^2\epsilon_2^2}{4}(1-\mu^2) - bR\mu + \frac{1}{1-\mu^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}]\Psi_j; \qquad /20е/$$

$$\Psi_j \equiv \Psi_j(R,\xi,\nu,\eta,\mu,\alpha,\beta), \quad |\Psi_j(R,\xi,\nu,\eta,\mu,\alpha,\beta)| < \infty,$$

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

$$-1 \le \eta \le +1, \quad -1 \le \mu \le +1, \quad 0 \le \beta \le 2\pi.$$

При этом должны выполняться соотношения /16/.

Как видим, переменные ξ, ν, η, μ, α, β в уравнениях /20/ разделяются. Уравнения /20а/, /20в/, /20г/ являются уравнениями для волновых функций водородоподобного атома с зарядом a в псевдоевклидовом пространстве /3/ в системе координат /13а/, а уравнения /20б/, /20д/, /20е/ - уравнениями для волновых функций водородоподобного атома с зарядом b в псевдоевклидовом пространстве /8/ в системе координат /13б/. Уравнения /20в/ и /20г/ совпадают между собой при замене $\xi \to \nu$, $\xi \in [+1, \infty)$, а уравнения /20д/ и /20е/ - при замене $\eta \to \mu$, $\eta \in [-1, +1]$. Таким образом, функции $\Psi_j(R,\xi,\nu,\eta,\mu,\alpha,\beta)$ можно представить в виде

$$\Psi_j(R,\xi,\nu,\eta,\mu,\alpha,\beta) = \mathrm{const}\, F_j(\xi;R) F_j(\nu;R) \Phi_j(\eta;R) \Phi_j(\mu;R) \times e^{im_1\alpha} e^{im_2\beta}. \qquad /21/$$

В частном случае при

$$\epsilon_1^2=\epsilon_2^2=\epsilon^2, \quad \lambda_1=\lambda_2=\lambda, \quad m_1=m_2=m \qquad /22/$$

для нахождения функций $F_j(\xi;R)$, $\Phi_j(\eta;R)$ необходимо решить уравнения

$$[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2}+2\xi\frac{\partial}{\partial\xi}-\frac{R^2\epsilon^2}{4}(\xi^2-1)+aR\xi+\lambda -$$

$$-\frac{m^2}{\xi^2-1}]F_j(\xi;R)=0, \qquad /23a/$$

$$[(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2}-2\eta\frac{\partial}{\partial\eta}-\frac{R^2\epsilon^2}{4}(1-\eta^2)-bR\eta-\lambda-$$

$$-\frac{m^2}{1-\eta^2}]\Phi_j(\eta;R)=0, \qquad /23б/$$

$$+1\le\xi<\infty, \quad -1\le\eta\le+1, \quad |F_j(\xi;R)|<\infty,$$

$$|\Phi_j(\eta;R)|<\infty.$$

Уравнения /23/ при

$$a\equiv(Z_1+Z_2), \quad b\equiv(Z_1-Z_2), \quad \frac{\epsilon^2}{2}\equiv-E_j, \quad \lambda\equiv\lambda_j \qquad /24/$$

совпадают с уравнениями /2а/-/2б/, и, следовательно, задача нахождения в группе $O(2,2)\otimes O(2,2)$ собственных функций полного набора коммутирующих операторов /12/ в системе координат /13/ сводится к задаче, которая эквивалентна задаче двух центров квантовой механики /2/. При $E_j<0$ решениями системы /23/ являются соответственно радиальная и угловая функции дискретного спектра задачи двух центров[9,10] :

$$F_j(\xi;R)=\Pi_j(\xi;R), \quad \Phi_j(\eta;R)=\Xi_j(\eta;R).$$

Функции $\Psi_j(R,\xi,\nu,\eta,\mu,a,\beta)$, являющиеся собственными функциями операторов /14/, при этом равны:

$$\Psi_j(R,\xi,\nu,\eta,\mu,a,\beta)=\mathrm{const}\,\Pi_j(\xi;R)\Pi_j(\nu;R)\Xi_j(\eta;R)\times$$

$$\times\Xi_j(\mu;R)e^{ima}e^{im\beta}. \qquad /25/$$

Функции /25/ представляют собой произведение решений в евклидовом пространстве двух одинаковых двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 и с энергиями $E_j=-\epsilon^2/2<0$. Одновременно они являются произведением решений в псевдоевклидовом пространстве двух одноцентровых задач с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) соответственно и с энергиями $E_j=-\epsilon^2/2<0$. При этом функции /25/ реализуют собой базис вырожденного неканонического представления группы $O(2,2)\otimes O(2,2)$.

Значения энергии $E_j=-\epsilon^2/2<0$ определяются значениями операторов Казимира $\hat{C}_1$, $\hat{C}_3$ и согласно /16/, /22/, /24/ равны:

$$E_j=-\frac{(Z_1+Z_2)^2}{2(2\Phi_1+1)^2}=-\frac{(Z_1-Z_2)^2}{2(2\Phi_2+1)^2}; \quad \Phi_1,\Phi_2\neq-\frac{1}{2};$$

$$|Z_1|-|Z_2|\neq0. \qquad /26/$$

Φ_1, Φ_2 - вещественные неположительные числа. Если $(Z_1+Z_2)=0$ /или $(Z_1-Z_2=0)$/, то $E_j=-(Z_1-Z_2)^2/2(2\Phi_2+1)^2$ /или $E_j=-(Z_1-Z_2)^2/2(2\Phi_1+1)^2$/.

В частном случае, когда $(2\Phi_1+1)^2=n_1^2$, $(2\Phi_2+1)^2=n_2^2$ $(n_1, n_2=1,2,3\ldots)$, решения задачи /2/ могут иметь простой аналитический вид[18].

При данном Φ_1 /или Φ_2 /, т.е. при данном E_j, операторы $\hat{\lambda}_1$, $\hat{\lambda}_2$, $\hat{\mathcal{L}}_3$, L_3 могут иметь, вообще говоря, несколько собственных значений $\lambda_1=\lambda_2=\lambda$, $m_1=m_2=m$. Это соответствует случаям пересечения термов в задаче двух центров /2/. Представления, характеризуемые одинаковыми собственными значениями операторов $\hat{C}_1$, $\hat{C}_3$, $\hat{\mathcal{L}}_3$, L_3, могут различаться собственными значениями $\lambda_1=\lambda_2=\lambda$. Таким образом, возможность пересечения термов $E_j(R)$ при одинаковых значениях m является естественной в данном групповом рассмотрении.

Заметим, что факт пересечения термов одинаковой симметрии в двухатомной молекуле /термов с одинаковыми m / обсуждался многими авторами /6,9,14-16/ в связи с общей теоремой Неймана-Вигнера о пересечениях термов квантовых систем /23/. Согласно /23/ термы квантовой системы, зависящие от непрерывного параметра и имеющие одинаковую пространственную симметрию /например, термы с одинаковыми магнитными квантовыми числами m / могут пересекаться только в том случае, если система обладает некоторой дополнительной симметрией по сравнению с пространственной.

Как показано выше, термы одинаковой пространственной симметрии в задаче /2/, т.е. термы, имеющие равные значения m, могут пересекаться, поскольку такая дополнительная симметрия в этом случае существует и связана с существованием группы симметрии $O(2,2) \otimes O(2,2)$.

Напомним, что пересечение термов кристаллической решетки, имеющих одинаковую пространственную симметрию, также можно объяснить существованием некоторой дополнительной симметрии /24/.

Из соотношений /26/ следует, что если решения двух двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 и $Z_1, -Z_2$ $(|Z_1|-|Z_2| \neq 0)$ и с энергиями E_j^+ и E_j^- соответственно $(E_j^+, E_j^- < 0)$ принадлежат представлениям группы $O(2,2) \otimes O(2,2)$, имеющим одинаковые значения Φ_1, то энергии E_j^+ и E_j^- в этом случае связаны равенством

$$E_j^+ = \frac{(Z_1+Z_2)^2}{(Z_1-Z_2)^2} E_j^- . \qquad /27/$$

Если же существуют решения двух двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 и $Z_1, -Z_2$ $(|Z_1|-|Z_2| \neq 0)$, имеющие равные энергии $E_j^+ = E_j^- = E$, то эти решения принадлежат представлениям группы $O(2,2) \otimes O(2,2)$, характеризуемым числами Φ_1^+ и Φ_1^- соответственно, которые связаны равенством

$$\frac{(Z_1+Z_2)^2}{2(2\Phi_1^+ +1)^2} = \frac{(Z_1-Z_2)^2}{2(2\Phi_1^- +1)^2} . \qquad /28/$$

Таким образом, все решения задачи /2/ при $E_j < 0$ можно поставить в соответствие представлениям группы $O(2,2) \otimes O(2,2)$. Напомним, что все элементарные решения этой задачи при $E_j < 0$ можно поставить в соответствие также представлениям группы $O(4) \otimes O(2,2)$ /19/, а часть элементарных решений этой задачи - представлениям группы $O(4) \otimes O(4)$ /19/.

БАЗИС В ГРУППЕ $O(3,1) \otimes O(3,1)$

Рассмотрим теперь случай, когда $E_j = \frac{k^2}{2} > 0$. Положим $\epsilon_1 = ik_1$, $\epsilon_2 = ik_2$ и, пользуясь выражениями /4/ и /9/, перейдем к операторам

$$\mathfrak{M}_1 = -i\mathfrak{A}_2, \quad \mathfrak{M}_2 = -i\mathfrak{A}_1, \quad \mathfrak{M}_3 = \mathfrak{L}_3,$$
$$\mathfrak{N}_1 = \mathfrak{L}_2, \quad \mathfrak{N}_2 = \mathfrak{L}_1, \quad \mathfrak{N}_3 = i\mathfrak{A}_3, \qquad /29/$$

а также к операторам

$$M_1 = -iA_2, \quad M_2 = -iA_1, \quad M_3 = L_3,$$
$$N_1 = L_2, \quad N_2 = L_1, \quad N_3 = iA_3 . \qquad /30/$$

С помощью непосредственного вычисления можно убедиться, что операторы /29/ /и независимо операторы /30// удовлетворяют коммутационным соотношениям для генераторов группы Лоренца $O(3,1)$ /25/. При этом операторы /6/ и /10/ коммутируют со всеми операторами /29/ и /30/ и равны:

$$E_1 = \frac{k_1^2}{2} = \mathrm{Const}, \quad E_2 = \frac{k_2^2}{2} = \mathrm{Const} . \qquad /31/$$

Рассмотрим группу, которая является прямым произведением двух групп $O(3,1)$ с генераторами /29/ и /30/ соответственно. Выбор полного набора коммутирующих операторов в этой группе, аналогичного набору /12/, и нахождение собственных функций этого набора в системе координат /13/ приводят, как и в предыдущем случае, к задаче, которая эквивалентна задаче /2/.

При этом $E_j = \frac{k^2}{2} > 0$. **Функции**

$$\Psi_j^c(k;R,\xi,\nu,\eta,\mu,\alpha,\beta) = \mathrm{Const}\, \Pi_j^c(\xi,k;R)\Pi_j^c(\nu,k;R) \times$$

$$\times \Xi_j^c(\eta,k;R)\Xi_j^c(\mu,k;R)e^{im\alpha}e^{im\beta}, \qquad /32/$$

где $\Pi_j^c(\xi,k;R)$, $\Xi_j^c(\eta,k;R)$ - соответственно радиальная и угловая функции непрерывного спектра задачи двух центров [9,10] - реализуют собой базис вырожденного неканонического представления группы $O(3,1)\otimes O(3,1)$. Аналогично функциям дискретного спектра /25/ функции /32/ представляют собой произведение решений в евклидовом пространстве двух одинаковых двухцентровых задач с равными положительными энергиями и с зарядами Z_1, Z_2 и одновременно являются произведением решений в псевдоевклидовом пространстве двух одноцентровых задач с равными положительными энергиями и с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) соответственно.

Сравнение значений $\hat{C}_1$, $\hat{C}_2$, $\hat{C}_3$, $\hat{C}_4$ со значениями операторов Казимира группы Лоренца $O(3,1)$[25] приводит к равенству:

$$E_j = \frac{(Z_1+Z_2)^2}{2\rho_1^2} = \frac{(Z_1-Z_2)^2}{2\rho_2^2}, \qquad |Z_1|-|Z_2| \neq 0, \qquad /33/$$

где ρ_1, ρ_2 - действительные числа. При этом реализуются представления основных серий групп Лоренца $O(3,1)$[25]. Если $(Z_1+Z_2)=0$ /или $(Z_1-Z_2=0$ /, то

$\rho_1=0$, $E_j=(Z_1-Z_2)^2/2\rho_2^2$ /или $\rho_2=0$, $E_j=(Z_1+Z_2)^2/2\rho_1^2$/.

Аналогично случаю дискретного спектра из соотношений /33/ следует: если существуют решения двух двухцентровых задач с положительными энергиями $E_j^+=(k^+)^2/2>0$ и $E_j^-=(k^-)^2/2>0$ и с зарядами Z_1, Z_2 и Z_1, $-Z_2$ $(|Z_1|-|Z_2|\neq 0)$ и если эти решения соответствуют представлениям группы $O(3,1)\otimes O(3,1)$, имеющим равные значения ρ_1, то энергии $E_j^+=\frac{(k^+)^2}{2}>0$ и $E_j^-=\frac{(k^-)^2}{2}>0$ связаны равенством

$$E_j^+ = \frac{(Z_1+Z_2)^2}{(Z_1-Z_2)^2}E_j^- . \qquad /34/$$

Если же существуют решения двух двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 и $Z_1, -Z_2$, имеющие равные положительные энергии $E_j^+=E_j^-=E$, то эти решения принадлежат таким представлениям группы $O(3,1)\otimes O(3,1)$, которые характеризуются числами ρ_1^+ и ρ_1^- соответственно. При этом ρ_1^+, ρ_1^- удовлетворяют равенству

$$(Z_1+Z_2)^2/2(\rho_1^+)^2 = (Z_1-Z_2)^2/2(\rho_1^-)^2. \qquad /35/$$

Заметим, что к группе $O(3,1)\otimes O(3,1)$, уравнениям /2/ и соотношениями /33/можно также прийти, рассматривая в обычном евклидовом пространстве два водородоподобных атома с положительными энергиями и с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2). При этом функция $\Psi^c(\vec{r}_1,\vec{r}_2;R)$, равная произведению волновых функций двух водородоподобных атомов/соответственно с энергиями $E^+=\frac{(k_1)^2}{2}$, $E^-=\frac{(k_2)^2}{2}$, константами разделения λ^+, λ^- и магнитными квантовыми числами m, m' /, в евклидовом пространстве в сфероидальной системе координат

$$\Psi^c(\vec{r}_1,\vec{r}_2;R) = \mathrm{Const}\,\Pi^{c+}(\xi_1,k_1;R)\Xi^{c+}(\eta_1,k_1;R)e^{im\alpha} \times$$

$$\times \Pi^{c-}(\xi_2,k_2;R)\Xi^{c-}(\eta_2,k_2;R)e^{im'\beta} \qquad /36/$$

реализует собой базис вырожденного неканонического представления группы $O(3,1)\otimes O(3,1)$. Функции $\Pi^{c+}(\xi_1,k_1;R)$, $\Xi^{c+}(\eta_1,k_1;R)$ переходят одна в другую при замене $\xi_1\leftrightarrow\eta_1$, $\xi_1\in[-1,\infty)$, а функции $\Pi^{c-}(\xi_2,k_2;R)$, $\Xi^{c-}(\eta_2,k_2;R)$ переходят одна в другую при замене $\xi_2\leftrightarrow\eta_2$, $\xi_2\in[-1,\infty)$. Если $\lambda^+=\lambda^-=\lambda_j$, $E^+=E^-=E_j=\frac{k^2}{2}$, $m=m'$, функции $\Pi^{c+}(\xi,k;R)$, $\Xi^{c-}(\eta,k;R)$ удовлетворяют соответственно уравнениям /2а/, /2б/, а функции $\Pi^{c-}(\xi,k;R)$, $\Xi^{c+}(\eta,k;R)$ - соответственно уравнениям /2а/, /2б/ с заменой $Z_2 \to -Z_2$. Функция $\Psi^c(\vec{r}_1,\vec{r}_2,R)$, представляющая собой произведение решений в евклидовом пространстве двух одноцентровых задач с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2), одновременно является произведением регулярных в области $-1 \le \xi, \eta < \infty$ решений двух двухцентровых задач: одной - с зарядами Z_1, Z_2 и другой - с зарядами Z_1, $-Z_2$.

Отсюда следует условие взаимности для функций непрерывного спектра, аналогичное условию взаимности для функций дискретного спектра [18]: если существуют решения задачи двух центров с положительными энергиями и с зарядами Z_1, Z_2, совпадающие с решениями одноцентровых задач /угловая двухцентровая функция совпадает с угловой одноцентровой функцией с зарядом (Z_1-Z_2), а радиальная двухцентровая функция совпадает с радиальной одноцентровой функцией с зарядом (Z_1+Z_2)/, то с необходимостью при том же расстоянии R и той же энергии $E_j = \frac{k^2}{2} > 0$ существуют решения задачи двух центров с зарядами Z_1, $-Z_2$, также совпадающие с решениями одноцентровых задач /при этом угловая двухцентровая функция совпадает с угловой одноцентровой функцией с зарядом (Z_1+Z_2), а радиальная двухцентровая функция совпадает с радиальной одноцентровой функцией с зарядом (Z_1-Z_2)/.

В отличие от случая дискретного спектра [18] условие взаимности для функций непрерывного спектра применимо также, когда $Z_1 = Z_2$. При этом, если имеются решения задачи двух центров с зарядами $Z_1 = Z_2 = Z$ такие, что радиальная двухцентровая функция непрерывного спектра совпадает с радиальной одноцентровой функцией непрерывного спектра с зарядом $2Z$, а угловая двухцентровая функция при этом совпадает с вытянутой угловой сфероидальной функцией [9,26], то при тех же R и $E_j = k^2/2 > 0$ имеются решения задачи для конечного диполя $(Z_1 = Z, Z_2 = -Z)$ такие, что угловая функция конечного диполя совпадает с угловой одноцентровой функцией непрерывного спектра с зарядом $2Z$, а радиальная функция конечного диполя совпадает с вытянутой радиальной сфероидальной функцией /в.р.с.ф./ [9,26] и имеет, как и в.р.с.ф., не зависящую от R и от k^2 фазу рассеяния, равную нулю.

Связь между фазами рассеяния двухцентровой задачи с зарядами Z_1, Z_2 и одноцентровой задачи с зарядом (Z_1+Z_2) исследована в работе [27]. Там, в частности для $p\sigma$ -состояний, приведены графики константы разделения $\lambda_{10}(k;R)$ задачи двух центров с зарядами $Z_1 = Z_2 = 1$ и константы разделения $\lambda^+_{10}(k;R)$ одноцентровой задачи с зарядом $Z = 2$. На линии пересечения $\lambda_{10}(k;R) = \lambda^+_{10}(k;R)$ фазы рассеяния в обеих задачах должны совпадать между собой. Согласно установленному выше условию взаимности на этой же линии пересечения, т.е. при тех же R, k^2, фаза рассеяния на конечном диполе $\Lambda_{10}(k;R)$ $(Z_1 = 1, Z_2 = -1)$ должна совпадать с фазой в.р.с.ф., т.е. должна в этом случае равняться нулю.

Решения типа /3б/, регулярные в области $[-1,\infty)$, естественно, не исчерпывают собой всех решений задачи двух центров при $E_j = \frac{k^2}{2} > 0$. Как показано выше, для получения всех решений этой задачи при $E_j = \frac{k^2}{2} > 0$ необходимо рассматривать решения двух одноцентровых задач с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) в псевдоевклидовых пространствах /3/ и /8/. При этом ограниченные на интервале $[-1,+1]$ решения угловых уравнений в евклидовом и псевдоевклидовом пространствах совпадают между собой. Радиальные же решения в псевдоевклидовом пространстве $\Pi^c_j(\xi,k;R)$, регулярные в области $[1,\infty)$, отличаются от радиальных решений $\Pi^{c+}_j(\xi,k;R)$ в евклидовом пространстве и в области $[-1,+1)$ не обязательно регулярны.

Как и для обычного водородоподобного атома в евклидовом пространстве, случай, когда $E_j = \frac{k^2}{2} = 0$, требует в задаче двух центров специального рассмотрения. Переопределяя для этого операторы /4/ и /9/ таким образом, чтобы в генераторах $\mathfrak{A}_i$, A_i не было множителей

$\frac{1}{\epsilon_1}$, $\frac{1}{\epsilon_2}$, и вычисляя коммутационные соотношения между этими операторами с учетом того, что $\hat{E}_1 = \hat{E}_2 = 0$, получим алгебру генераторов группы, являющейся прямым произведением двух групп движений трехмерных пространств $\mathcal{P}(2,1) \otimes \mathcal{P}(2,1)$. Рассмотрение полного набора коммутирующих операторов в этой группе, аналогичного набору /12/,и нахождение собственных функций этого набора в системе координат /13/, как и в предыдущих случаях, приводят к задаче, которая эквивалентна задаче двух центров квантовой механики /2/. При этом $E_j = \frac{k^2}{2} = 0$.

Перейдем теперь к некоторым следствиям рассмотренных в работе групповых свойств решений задачи /2/.

СООТНОШЕНИЯ МЕЖДУ ИНТЕГРАЛАМИ ПРИ $E_i = E_j$

Аналогично[19] генераторы групп $O(2,2) \otimes O(2,2)$, $O(3,1) \otimes O(3,1)$, $\mathcal{P}(2,1) \otimes \mathcal{P}(2,1)$ можно записать не в "р-представлении", как в данной работе, а в "х-представлении". Выбирая при этом полный набор диагональных операторов, соответствующий набору /12/, и определяя собственные функции этого набора в гиперболической системе координат[19], можно также прийти к соотношениям /26/ и /33/ и к задаче, которая эквивалентна задаче /2/.

Подобно тому, как водородоподобный атом в евклидовом /а также и псевдоевклидовом/ пространстве можно описывать с помощью представлений группы $O(4,2)$[3], в "х-представлении" вместо генераторов групп $O(2,2) \otimes O(2,2)$ и $O(3,1) \otimes O(3,1)$ можно также рассматривать генераторы группы $O(4,2) \otimes O(4,2)$. Выбирая в этой группе полный набор диагональных операторов, аналогичный набору /12/, можно прийти, как и в предыдущих случаях, к задаче, которая эквивалентна задаче двух центров /2/.

"х-представление" удобно, например, в тех случаях, когда требуется выразить величины вида $\xi^n, \xi^n(\xi^2-1)^{\frac{\ell}{2}}$, $\xi^n(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{\partial}{\partial R}, \eta^n, \eta^n(1-\eta^2)^{\frac{\ell}{2}}\frac{\partial}{\partial\eta}\frac{\partial}{\partial R}, \ldots$ и т.п. /ξ, η - переменные в уравнениях /2/, R - расстояние между зарядами Z_1 и Z_2 / в терминах генераторов рассматриваемых в работе групп. При этом операторы, соответствующие энергии E как в "р-представлении", так и в "х-представлении", являются с-числами и потому коммутируют со всеми генераторами упоминаемых здесь групп. Операторы, соответствующие константе разделения λ, в обоих представлениях можно записать в виде

$$\hat{\lambda} = -[(\xi^2-1)\frac{\partial^2}{\partial\xi^2} + 2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{R^2E}{2}(\xi^2-1) + a\xi + \frac{1}{\xi^2-1}\frac{\partial^2}{\partial\alpha^2}], \quad /37/$$

а также в виде

$$\hat{\lambda} = [(1-\eta^2)\frac{\partial^2}{\partial\eta^2} - 2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{R^2E}{2}(1-\eta^2) + b\eta + \frac{1}{1-\eta^2}\frac{\partial^2}{\partial\beta^2}], \quad /38/$$

где

$a = R(Z_1+Z_2)$, $b = R(Z_1-Z_2)$, E – энергия.

Операторы $\mathfrak{L}_3$ и L_3 при этом имеют вид

$$\mathfrak{L}_3 = -i\frac{\partial}{\partial\alpha}, \qquad L_3 = -i\frac{\partial}{\partial\beta}. \quad /39/$$

Введем, как и в работе[28], следующие обозначения для двухцентровых интегралов:

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

$$^nA^\ell_\mu = \int_1^\infty d\xi\, \Pi_i\, \xi^\ell(\xi^2-1)^\mu \frac{\partial^n}{\partial R^n}\Pi_j;$$

/40/

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

$$A^\ell \equiv A^\ell_0, \quad {}^1A^\ell \equiv {}^1A^\ell_0, \quad \ell, n = 0,1,2\ldots;\ \mu = -\frac{1}{2}, 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots .$$

Интегралы по переменной η имеют тот же внд с заменой:

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

Здесь i, j - наборы сферических квантовых чисел; Π_i, Π_j, Ξ_i, Ξ_j - соответственно радиальные и угловые функции задачи двух центров.

Для состояний дискретного спектра $i \equiv N', L', m'$; $j \equiv N, L, m$;

$$\Pi_i \equiv \Pi_i(\xi;R), \quad \Pi_j \equiv \Pi_j(\xi;R), \quad \Xi_i \equiv \Xi_i(\eta;R), \quad \Xi_j \equiv \Xi_j(\eta;R).$$

Для состояний непрерывного спектра $i \equiv L', m'$;

$j \equiv L, m$;

$$\Pi_i \equiv \Pi_i^c(\xi,k;R), \quad \Pi_j \equiv \Pi_j^c(\xi,k;R), \quad \Xi_i \equiv \Xi_i^c(\eta,k;R),$$

$$\Xi_j \equiv \Xi_j^c(\eta,k;R).$$

Рассмотрим коммутаторы:

$$[-\hat{\lambda}, \xi^n] = 2n[(\xi^2-1)(\xi^{n-1}\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{(n-1)}{2}\xi^{n-2}) + \xi^n], \qquad /41/$$

$$[-\hat{\lambda}, \xi^n(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}] = -2[(n+1)\xi^{n+1} - n\xi^{n-1}]\,\hat{\lambda} +$$

$$+ n\xi^{n-2}[(n+1)\xi^2 - (n-1)](\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi} +$$

$$+ 2n\xi^{n-1}m^2 - 2(\xi^2-1)(\frac{R^2E}{2})[(n+2)\xi^{n+1} - n\xi^{n-1}] -$$

$$- a[(2n+3)\xi^{n+2} - (2n+1)\xi^n], \quad n = 0,1,2,\ldots \qquad /42/$$

При вычислении коммутаторов /41/, /42/, а также при вычислении всех последующих коммутаторов в этой работе мы учитываем то обстоятельство, что в отличие от [21,28] в данном групповом подходе энергия E является c -числом. Таким образом, здесь мы рассматриваем только такие i- , j -состояния, которые соответствуют пересекающимся или совпадающим при всех R термам, т.е. для которых в случае дискретного спектра $E_i = E_j = E < 0$, в случае непрерывного спектра $E_i = E_j = E = \frac{k^2}{2} > 0$ $(\frac{\partial}{\partial R}(\frac{k^2}{2}) = 0)$.

Умножим /41/ и /42/ на $d\xi$ и вычислим интегралы от обеих сторон этих равенств. При $m = m'$, $E_i = E_j = E$ получаем:

$$\beta A^{\circ} = 0; \quad -(\beta+2)A^1 = 2\hat{A}_1^{\circ};$$

$$-[\beta + n(n+1)]A^n + n(n-1)A^{n-2} = 2n\hat{A}_1^{n-1}; \quad n = 2,3,\ldots \qquad /43/$$

$$-\beta\hat{A}_1 = -2R^2EA^3 + 2(-\lambda_j + 2R^2E)A^1 - 3aA^2 + aA^{\circ};$$

$$-[\beta + n(n+1)]\hat{A}_1^n + n(n-1)\hat{A}_1^{n-2} = -R^2E(n+2)A^{n+3} + [-2\lambda_j(n+1) +$$

$$+ 2R^2E(n+2)]A^{n+1} + n[2\lambda_j + 2m^2 - R^2E)A^{n-1} - a(2n+3)A^{n+2} +$$

$$+ a(2n+1)A^n; \quad n = 1,2,3,\ldots, \qquad /44/$$

где $\beta = \lambda_i - \lambda_j$.

Подставляя выражения для $\hat{A}_1^n$, $\hat{A}_1^{n-2}$ из /43/ в /44/, получаем в случае $i = j$

при $n = 0$: $2R^2EA^3 + 3aA^2 + 2[-R^2E + \lambda_j]A^1 - aA^{\circ} = 0;$ /45/

при $n = 1$: $[-4R^2E + 4\lambda_j + 3]A^2 + 3R^2EA^4 + 5aA^3 - 3aA^1 -$

$-(2\lambda_j + 1 + 2m^2 - R^2E)A^{\circ} = 0;$ /46/

при $n=2,3,\ldots$:

$$(n+1)\left[-2R^2E+2\lambda_j+\frac{n(n+2)}{2}\right]A^{n+1}-n(2\lambda_j+n^2+2m^2-R^2E)A^{n-1}+\frac{n(n-1)(n-2)}{2}A^{n-3}+R^2E(n+2)A^{n+3}+$$

$$+a(2n+3)A^{n+2}-a(2n+1)A^n=0. \qquad /47/$$

В случае $i\neq j$

при $n=0$:

$$2R^2EA^3+3aA^2+\left[\frac{\beta^2}{2}-2R^2E+\lambda_i+\lambda_j\right]A^1-aA^\circ=0; \qquad /48/$$

при $n=1$:

$$\left[\frac{\beta^2}{4}-4R^2E+2\lambda_i+2\lambda_j+3\right]A^2+3R^2EA^4+5aA^3-3aA^1-$$

$$-(\lambda_i+\lambda_j+1+2m^2-R^2E)A^\circ=0; \qquad /49/$$

при $n=2,3,\ldots$:

$$R^2E(n+2)A^{n+3}+a(2n+3)A^{n+2}+(n+1)\left[\frac{\beta^2}{2(n+1)^2}-2R^2E+\right.$$

$$\left.+\lambda_i+\lambda_j+\frac{n(n+2)}{2}\right]A^{n+1}-a(2n+1)A^n-$$

$$-n(\lambda_i+\lambda_j+n^2+2m^2-R^2E)A^{n-1}+\frac{n(n-1)(n-2)}{2}A^{n-3}=0. \qquad /50/$$

Соотношения /45/-/47/ совпадают с соотношениями /30/-/32/ работы[28], а соотношения /43/, /44/, /48/-/50/ соответственно - с соотношениями /17/, /25/, /27/-/29/ работы[28], если в последних положить $E_i=E_j=E$. Однако поскольку в отличие от работы[28] здесь при выводе соотношений /43/-/50/ нам не требовалось условие конечности рассматриваемых интегралов, то полученные соотношения /43/-/50/ справедливы при $m=m'$, $E_i=E_j=E$ не только для сходящихся интегра-

лов дискретного спектра, но и для интегралов непрерывного спектра, которые не обязательно конечны.

Аналогичным образом вычисляя коммутаторы $[\hat\lambda,\eta^n]$, $[\hat\lambda,\eta^n(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}]$ **и интегрируя, получим соотношения между интегралами по угловым переменным** η, **справедливые при** $m=m'$, $E_i=E_j=E$ **как для интегралов дискретного, так и для интегралов непрерывного спектров и в точности совпадающие с соотношениями /43/-/50/, если в последних произвести замену:**

$$A\to B,\quad a\to -b.$$

Вычисление коммутаторов $[-\hat\lambda,\xi^n\frac{\partial}{\partial R}]$, $[-\hat\lambda,\xi^n(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}\frac{\partial}{\partial R}]$ **и последующее интегрирование приводят при** $E_i=E_j=E$, $m=m'$ **к соотношениям**

$$-[\beta+n(n+1)]^1A^n+n(n-1)^1A^{n-2}+\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)(A^{n+2}-A^n)+$$

$$+\left(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j\right)A^n+\frac{a}{R}A^{n+1}=2n^1\hat A_1^{n-1}; \qquad /51/$$

$$-[\beta+n\cdot(n+1)]^1\hat A_1^n+n(n-1)^1\hat A_1^{n-2}=-R^2E(n+2)^1A^{n+3}+$$

$$+2(n+1)[R^2E-\lambda_j]^1A^{n+1}+n[2\lambda_j+2m^2-R^2E]^1A^{n-1}-$$

$$-a(2n+3)^1A^{n+2}+a(2n+1)^1A^n-2\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)(n+2)A^{n+3}+$$

$$+\left[-2\left(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j\right)(n+1)+4(n+1)\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)\right]A^{n+1}-\frac{a}{R}(2n+3)A^{n+2}+$$

$$+\frac{a}{R}(2n+1)A^n+2n\left[\left(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j\right)-\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)\right]A^{n-1}+$$

$$+\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)(\hat A_1^{n+2}-\hat A_1^n)-\frac{a}{R}\hat A_1^{n+1};\quad n=0,1,2\ldots \qquad /52/$$

Соотношения /51/ дают:

при $i=j$, $n=0$

$$\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)A^2+\left[\left(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j\right)-\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)\right]A^\circ+\frac{a}{R}A^1=0; \qquad /53/$$

при $i\neq j$, $n=0$

$$-\beta\,{}^1A^\circ+\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)A^2+\frac{a}{R}A^1=0. \qquad /54/$$

Подставляя выражения для ${}^1\hat{A}_1^n$, ${}^1\hat{A}_1^{n-2}$ **из /51/ и для** $\hat{A}_1^{n+2}$, $\hat{A}_1^{n+1}$, $\hat{A}_1^n$ **из /43/ в /52/ и приводя подобные члены, имеем:**

$$R^2E(n+2)\,{}^1A^{n+3}+a(2n+3)\,{}^1A^{n+2}+(n+1)\left[\frac{\beta^2}{2(n+1)^2}-2R^2E+\lambda_i+\lambda_j+\right.$$

$$\left.+\frac{n(n+2)}{2}\right]{}^1A^{n+1}-a(2n+1)\,{}^1A^n-n(\lambda_i+\lambda_j+n^2+2m^2-R^2E)\,{}^1A^{n-1}+$$

$$+\frac{n(n-1)(n-2)}{2}\,{}^1A^{n-3}=(n+2)\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)\left(\frac{\beta}{(n+1)(n+3)}-1\right)A^{n+3}-$$

$$-\frac{a}{R}\,\frac{(2n+3)}{2}\left(1-\frac{\beta}{(n+1)(n+2)}\right)A^{n+2}+$$

$$+\left[\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)(n+1)\left(2-\frac{\beta}{(n+1)^2}\right)-2(n+1)\left(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j\right)\right]A^{n+1}+$$

$$+\frac{a}{2R}(2n+1)A^n+n\left[2\left(\frac{\partial}{\partial R}\lambda_j\right)-\frac{\partial}{\partial R}\left(\frac{R^2E}{2}\right)\right]A^{n-1};\quad n=0,1,2,\ldots \qquad /55/$$

Соотношения /55/ справедливы для интегралов дискретного и непрерывного спектров при $m=m'$, $E_i=E_j=E$.

При этом $i\neq j$ или $i=j$ /в этом последнем случае в выражениях /55/ $\beta=\lambda_i-\lambda_j=0$ /. Слагаемые, пропорциональные $n, n-1, n-2$ в /55/, равны нулю при $n=0,1,2$ соответственно.

Аналогичное вычисление коммутаторов $[\hat{\lambda},\eta^n\frac{\partial}{\partial R}]$, $[\hat{\lambda},\eta^n(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\frac{\partial}{\partial R}]$ и последующее интегрирование приводят при $m=m'$, $E_i=E_j=E$ к соотношениям между интегралами ${}^1B^n$, B^n, ${}^1\hat{B}_1^n$, которые совпадают с соотношениями /51/-/55/ при замене $A\to B$, $a\to -b$.

Подобным образом можно было бы рассматривать и более сложные коммутаторы, например, коммутаторы вида

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

$$[-\hat{\lambda},\xi^\nu(\xi^2-1)^\mu e^{i\Lambda m\alpha}],$$

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

$$[\hat{\lambda},\eta^\nu(1-\eta^2)^\mu e^{i\Lambda m\beta}], \qquad /56/$$

где μ, ν - не обязательно целые числа, $\ell=0,1,2\ldots$. Интегрирование этих соотношений приводит при $E_i=E_j=E$ к рекуррентным соотношениям между интегралами ${}^\ell A_\mu^\nu$, ${}^\ell\hat{A}_\mu^\nu$, ${}^\ell B_\mu^\nu$, ${}^\ell\hat{B}_\mu^\nu$ и пр. При этом соотношения между интегралами B, как обычно, совпадают с соотношениями между интегралами A с заменой: $A\to B$, $a\to -b$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе показано, что произведение решений в евклидовом пространстве двух одинаковых двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 эквивалентно произведению решений двух одноцентровых задач с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) в псевдоевклидовых пространствах /3/ и /8/.

При этом решения дискретного спектра одноцентровых задач соответствуют представлениям группы $O(2,2)$, а решения непрерывного спектра этих задач - представлениям группы $O(3,1)$. Произведение решений двух одинаковых двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 в случае дискретного спектра соответствует представлениям группы $O(2,2) \otimes O(2,2)$, а в случае непрерывного спектра - представлениям группы $O(3,1) \otimes O(3,1)$.

Вследствие симметрии между решениями одноцентровых задач с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) существует также симметрия между решениями двух двухцентровых задач с зарядами Z_1, Z_2 и Z_1, $-Z_2$ соответственно. Эта симметрия приводит в частном случае к условию взаимности для двухцентровых функций непрерывного спектра, которое аналогично при $Z_1 \neq Z_2$ условию взаимности для двухцентровых функций дискретного спектра.

Вместо групп $O(2,2) \otimes O(2,2)$ и $O(3,1) \otimes O(3,1)$ для классификации решений задачи /2/ можно применять и более широкие группы. Например, решения дискретного и непрерывного спектров этой задачи можно поставить в соответствие также представлениям группы $O(4,2) \otimes O(4,2)$

Подчеркнем еще раз, что во всех этих рассмотрениях энергия E является c-числом.

Групповые свойства решений задачи /2/ приводят в частном случае к соотношениям между двухцентровыми интегралами. Некоторые из полученных в работе соотношений совпадают при $E_i = E_j = E$ с соотношениями работы [28], однако в данном случае в отличие от [28] условие конечности рассматриваемых интегралов не требуется, и потому все полученные здесь соотношения справедливы не только для интегралов дискретного спектра, но и для интегралов непрерывного спектра, которые не все конечны. Все соотношения выполняются как при $a \neq b$, так и при $a = \pm b$, а также при $a, b = 0$ и не зависят от конкретных разложений для функций $\Pi_i, \Pi_j, \Xi_i, \Xi_j$.

Большинство полученных в работе соотношений между интегралами A, B при $E < 0$ и между интегралами B при $E > 0$ проверено численно с помощью программы [12]. При этом в случае $E > 0$ алгоритм вычисления интегралов B тот же самый, что и при $E < 0$ с заменой $p^2 \to -c^2$ $(p^2 = -\frac{R^2 E}{2})$.

Рекуррентные соотношения между радиальными интегралами при $Z_2 = 0$, $R = 0$ /водородоподобный атом в евклидовом пространстве в сферической системе координат/ для случая дискретного спектра можно найти в работах [5,6], а для непрерывного - в работах [7,8]. Интегралы по угловым переменным при этом сводятся к интегралам по произведениям полиномов Лежандра.

В заключение отметим, что решения задачи двух центров в псевдоевклидовом пространстве с метрикой /3/

$$E\,\tilde{\Psi}_j(\vec{x}) = \left[-\frac{1}{2}\left(-\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right) - \frac{Z_1}{r_1} - \frac{Z_2}{r_2}\right]\tilde{\Psi}_j(\vec{x}) \qquad /57/$$

также можно поставить в соответствие представлениям групп $O(2,2) \otimes O(2,2)$, $O(3,1) \otimes O(3,1)$, $\mathcal{P}(2,1) \otimes \mathcal{P}(2,1)$. При этом в отличие от задачи /2/ переменные в уравнении /57/ разделяются не в одной системе координат, как в уравнении /1/, а в двух: /13а/ и /13б/. Разделение переменных в уравнении /57/ в системе координат /13а/

$(r_1 = \frac{R}{2}(\xi + \nu)$, $r_2 = \frac{R}{2}(\xi - \nu))$ приводит к необходимости

совместного решения двух уравнений для радиальных кулоновских сфероидальных функций с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) и уравнения типа /2в/. Разделение же переменных в уравнении /57/ в системе координат /13б/

$(x_i, y_i, r_1 = \frac{R}{2}(\eta + \mu), r_2 = \frac{R}{2}(\eta - \mu))$ приводит к необходимости

совместного решения двух уравнений для угловых кулоновских сфероидальных функций с зарядами (Z_1+Z_2) и (Z_1-Z_2) и уравнения типа /2в/. Таким образом, решения в псевдоевклидовом пространстве задачи двух центров /57/ в системах координат /13а/ и /13б/ являются частным случаем решений в евклидовом пространстве в сфероидальной системе координат двух двухцентровых задач: в одной кулоновские центры имеют заряды Z_1, Z_2, в другой - заряды Z_1, $-Z_2$.

Автор выражает глубокую благодарность Я.А.Смородинскому, С.И.Виницкому, И.В.Комарову, Л.И.Пономареву, Л.Н.Сомову, А.Т.Филиппову за обсуждение различных вопросов задачи двух центров и ценные замечания.

ЛИТЕРАТУРА

1. Fock V.A. Zs.f. Phys., 1935, 98, p.145.
2. Englefield M.J. Group Theory and the Coulomb Problem. Wiley J., New York, 1972.
3. Bernăr M. Ann.Phys., 1973, 75, p.305.
4. Малкин И.А., Манько В.И. Письма в ЖЭТФ, 1965, 2, с.230.
5. Gordon W. Ann. d. Phys., 1929, 2, p.1031.
6. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. "Наука", М., 1963.
7. Trautmann D., Alder K. Helv. Phys. Acta, 1970, 43, p.363.
8. Alder K., Trautmann D. Ann. of Phys., 1971, 66, p.884-904.
9. Комаров В.И., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. "Наука", М., 1976.
10. Power J.D. Phil. Trans. Roy. Soc. Lond., 1973, A274, p.663.
11. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, P11-10207, Дубна, 1976.
12. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, 11-11218, Дубна, 1978.
13. Бете Г. Квантовая механика простейших систем. ОНТИ, М., 1934.
14. Герштейн С.С., Кривченков В.Д. ЖЭТФ, 1961, 40, 5, с.1491-1502.
15. Смирнов Б.М. Вестник МГУ, 1964, 3, с.38.
16. Аллилуев С.П., Матвеенко А.В. ЖЭТФ, 1966, 51, 6, с.1873-1879.
17. Wilson A.H. Proc. Soc. Lond., 1928, A118, p.617-635.
18. Демков Ю.Н. Письма в ЖЭТФ, 1968, 7, 3, с.101-104.
19. Трускова Н.Ф. ОИЯИ, P2-11554, Дубна, 1974.
20. Хамермеш М. Теория групп и ее применение к физическим проблемам. "Мир", М., 1966.
21. Трускова Н.Ф. ЯФ, 1978, 28, в.2/8/, с.565-572.
22. Barut A.O., Fronsdal C. Proc. Roy. Soc., 1965, 287, p.532.
23. Neuman J.V., Wigner E. Phys. Zs., 1929, 30, p.467 .
24. Herring C. Phys. Rev., 1937, 52, p.361; 1937, 52, p.365.
/Имеется русский перевод статей 23-24 в сборнике Нокс Р., Голд А. Симметрия в твердом теле. "Наука", М., 1970/.
25. Наймарк М.А. Линейные представления группы Лоренца. Физматгиз, М., 1958.
26. Фламмер К. Таблицы волновых сфероидальных функций. ВЦ АН СССР, М., 1962.

27. Абрамов Д.И. и др. ОИЯИ, P4-11729, Дубна, 1978.
28. Трускова Н.Ф. ЯФ, 1978, 28, в.3/9/, с.850-859.

Рукопись поступила в издательский отдел
30 октября 1978 года.