19

ПОТЕНЦИАЛ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА И КУЛОНОВСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ — ДВА ПРИМЕРА «СЛУЧАЙНОГО» ВЫРОЖДЕНИЯ

При анализе роли симметрии в квантовой механике центральное место занимало вырождение энергетических спектров как следствие наличия группы симметрии у гамильтониана, описывающего исследуемую систему. Но, как говорилось в гл. 5, § 3, полностью объяснить вырождение можно лишь на основе полной группы симметрии системы. Всегда может оказаться, что вырождение возникло случайно или привнесено искусственно. Например, изменяя какой-либо числовой параметр гамильтониана, можно добиться, чтобы два уровня энергии слились в один. Такое вырождение обычно называют случайным. Если же «случайное» вырождение проявляется систематически, т. е. затрагивает не один, а много уровней, то, как правило, это указывает на то, что вырождение не случайное, но обусловлено не известным нам преобразованием, относительно которого инвариантна система. Эта новая симметрия расширяет ранее известную группу симметрии системы. В такой ситуации термином «случайное» вырождение, строго говоря, не следовало бы пользоваться. В данной главе мы рассмотрим два примера [1] такого «случайного» вырождения, которое в свете сказанного не случайно, а обязано своим происхождением наличию более широкой, чем кажется на первый взгляд, группы симметрии системы. Оба примера относятся к движению одной частицы в сферически-симметричном потенциале, а потому должно быть обычное $(2l+1)$-кратное вырождение, обусловленное сферической симметрией системы (гл. 7, § 5; гл. 8, § 1). В случае потенциалов $V(\mathbf{r})$ общего вида этим исчерпывается все вырождение, имеющееся в системе. Но в двух частных случаях, когда $V(\mathbf{r}) \sim \mathbf{r}^2$ и когда $V(\mathbf{r}) \sim \mathbf{r}^{-1}$, решения уравнения Шредингера обнаруживают дополнительное проявляющееся системати-

чески вырождение. Эти два случая, хорошо известные как потенциал гармонического осциллятора и кулоновский потенциал, играют в физике важную роль. Потенциалом гармонического осциллятора описывают малые отклонения системы от положения равновесия; кроме того, он используется как первое приближение при описании движения нуклонов в ядре относительно центра масс ядра. Кулоновский потенциал применяется для описания движения электрона в атоме водорода. Мы увидим, что для гармонического осциллятора группой симметрии является группа U_3, а для атома водорода—группа $\mathcal{R}_4$. Обе эти группы содержат в качестве подгруппы группу вращений $\mathcal{R}_3$. Обобщив полученные результаты, мы покажем, что группой симметрии n-мерного гармонического осциллятора является группа U_n.

§ 1. ТРЕХМЕРНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР, ОДНОЧАСТИЧНЫЙ СЛУЧАЙ

Потенциал гармонического осциллятора принято записывать в виде $V(r)={}^1/_2 M\omega^2 r^2$, где $\omega/2\pi$—классическая частота колебаний частицы с массой M. В квантовой механике нам нужно решать уравнение Шредингера

$$\left(-\hbar^2\nabla^2/2M+\frac{1}{2}M\omega^2 r^2\right)\psi(r,\ \theta,\ \varphi)=E\psi(r,\ \theta,\ \varphi).$$

Для удобства будем измерять энергию в единицах $\hbar\omega$, а длину—в единицах $b=(\hbar/M\omega^2)^{1/2}$; величину b назовем параметром длины осциллятора. В этих единицах уравнение Шредингера принимает вид ${}^1/_2(-\nabla^2+r^2)\psi=E\psi$, а гамильтониан дается выражением

$$\mathsf{H}=\frac{1}{2}(-\nabla^2+r^2). \tag{19.1}$$

Гамильтониан (19.1), очевидно, сферически-симметричен, что находит выражение в перестановочных соотношениях $[\mathsf{H},\ \mathsf{L}_q]=0$, где $q=x,\ y,\ z$, а $\mathsf{L}_z=-i(x\,\partial/\partial y-y\,\partial/\partial x)$ и т. д.—инфинитезимальные операторы вращений (гл. 5, § 6; гл. 8, § 2). Мы построим набор из десяти операторов, коммутирующих с гамильтонианом (19.1), и покажем, что они являются инфинитезимальными операторами группы U_3. Начнем с того, что определим три

оператора a_x, a_y, a_z и три соответствующих эрмитово-сопряженных оператора $\mathsf{a}_x^\dagger$, $\mathsf{a}_y^\dagger$, $\mathsf{a}_z^\dagger$:

$$\mathsf{a}_x=(x+\partial/\partial x)/\sqrt{2},\quad \mathsf{a}_y=(y+\partial/\partial y)/\sqrt{2},\quad \mathsf{a}_z=(z+\partial/\partial z)/\sqrt{2},$$
$$\mathsf{a}_x^\dagger=(x-\partial/\partial x)/\sqrt{2},\quad \mathsf{a}_y^\dagger=(y-\partial/\partial y)/\sqrt{2},\quad \mathsf{a}_z^\dagger=(z-\partial/\partial z)/\sqrt{2}. \tag{19.2}$$

(Напомним, что оператор $p_x=-i\hbar\partial/\partial x$ эрмитов и, следовательно, оператором, эрмитово-сопряженным по отношению к оператору $\partial/\partial x$, является оператор $-\partial/\partial x$.) Нетрудно убедиться, что выполняются следующие перестановочные соотношения:

$$[\mathsf{a}_q,\ \mathsf{a}_{q'}]=[\mathsf{a}_q^\dagger,\ \mathsf{a}_{q'}^\dagger]=0,\quad [\mathsf{a}_q,\ \mathsf{a}_{q'}^\dagger]=\delta_{qq'}, \tag{19.3}$$

$$[\mathsf{a}_q,\ \mathsf{H}]=\mathsf{a}_q,\quad [\mathsf{a}_q^\dagger,\ \mathsf{H}]=-\mathsf{a}_q^\dagger. \tag{19.4}$$

[При выводе соотношений (19.4) мы учли явный вид гамильтониана.] Гамильтониан (19.1) можно также записать в виде

$$\mathsf{H}=\sum_q\left(\mathsf{a}_q^\dagger\mathsf{a}_q+\frac{1}{2}\right). \tag{19.5}$$

Эти алгебраические соотношения часто используются в учебниках квантовой механики при решении уравнения Шредингера для гармонического осциллятора. Дело в том, что из соотношений (19.4) следует, что если ψ—собственная функция гамильтониана, отвечающая энергии E, то функции $\mathsf{a}_q\psi$ тоже собственные и отвечают энергии $E-1$. Другими словами, операторы a_q уменьшают, а операторы $\mathsf{a}_q^\dagger$ увеличивают энергию на единицу. Волновая функция ψ_0 низшего энергетического уровня должна удовлетворять условию $\mathsf{a}_q\psi_0=0$, так что низшее собственное значение гамильтониана (19.5) равно $^3/_2$. С учетом явного вида операторов a_q это условие сводится к простым дифференциальным уравнениям для функции ψ_0, решение которых, с точностью до нормировки, имеет вид $\psi_0=\exp(-{}^1/_2\,r^2)$. Возбужденные состояния отвечают целочисленным (с точностью до общего слагаемого $^3/_2$) энергиям, а волновыми функциями возбужденного уровня с номером N являются функции вида

$$(\mathsf{a}_x^\dagger)^{N_x}(\mathsf{a}_y^\dagger)^{N_y}(\mathsf{a}_z^\dagger)^{N_z}\psi_0, \tag{19.6}$$

где N_x, N_y и N_z—целые числа, такие, что $N_x+N_y+N_z=N$. В частности, при $N=1$ имеет место трехкратное вырождение, а при $N-2$—шестикратное; в общем случае вырождение имеет кратность $(N+1)(N+2)/2$. Возможные значения чисел N_x, N_y и N_z при малых N приведены в табл. 19.1. Сразу же видно, что это вырождение не есть ожидаемое $(2l+1)$-кратное вырождение. Следовательно, в данном случае вырождение должно быть результатом объединения некоторых $(2l+1)$-кратно вырожденных уровней. Соответствующие значения l приве-

Таблица 19.1

N	1	2	3
N_x N_y N_z	1 0 0 0 1 0 0 0 1	2 0 0 1 1 0 0 2 0 1 0 1 0 0 2 0 1 1	3 0 0 2 2 1 1 0 0 1 0 3 0 1 0 2 0 2 1 1 0 0 3 0 1 0 2 1 2 1
l	1	2, 0	3, 1

дены в последней строке табл. 19.1. Чтобы установить, каким образом получены эти значения величины l, заметим, что при вращениях операторы $\mathbf{a}_q$ преобразуются по представлению $\mathbf{D}^{(1)}$ группы $\mathcal{R}_3$. Поэтому, так как состояние ψ_0 сферически-симметрично, возбужденные состояния (19.6) с данным N будут преобразовываться по симметризованному произведению представлений, содержащему N сомножителей: $\mathbf{D}^{(1)}\otimes\mathbf{D}^{(1)}\ldots\otimes\mathbf{D}^{(1)}$ (приложение 3, § 1). Появление в данном случае симметризованного произведения вызвано тем, что все операторы $\mathbf{a}_q^\dagger$ коммутируют между собой. В рассматриваемом нами одночастичном случае антисимметрии неоткуда взяться. Формулы приложения 3, § 1 для характеров симметризованных произведений вместе с формулой (7.42) для характеров представлений группы $\mathcal{R}_3$ приводят к разложению симметризованных произведений, которым и определяются значения величины l, приведенные в табл. 19.1.

Установив, что гармонический осциллятор обнаруживает большее вырождение, чем должно быть в силу одной

сферической симметрии, обратимся теперь к задаче отыскания большей группы симметрии для гармонического осциллятора. Из перестановочных соотношений (19.4) можно вывести, что при любых q и q' выполняется равенство $[\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}, \mathsf{H}]=0$. Его можно также получить, заметив, что оператор $\mathbf{a}_{q'}$ уменьшает, а оператор $\mathbf{a}_q^\dagger$ повышает собственное значение гамильтониана на единицу. Поэтому произведение $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$ не изменяет собственное значение гамильтониана и осуществляет преобразование в пределах векторных пространств, образованных наборами вырожденных собственных функций. Таким образом, мы имеем девять операторов $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$, коммутирующих с гамильтонианом. Используя их, мы можем образовать множество унитарных операторов симметрии вида

$$\mathsf{U}=\exp\left(\sum_{q,q'} c_{qq'}\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}\right),$$

где коэффициенты $c_{q'q}$ удовлетворяют условию антиэрмитовости $c_{q'q}^*=-c_{q'q}$. Этим условием ограничивается свобода выбора коэффициентов $c_{qq'}$, так что остается лишь произвол в выборе девяти действительных чисел. Таким образом, мы приходим к 9-параметрическому семейству унитарных преобразований, коммутирующих с гамильтонианом H. Чтобы показать, что на самом деле мы имеем дело с группой U_3, рассмотрим действие этих преобразований на операторы $\mathbf{a}_q^\dagger$:

$$(\mathbf{a}_s^\dagger)'=\mathsf{U}\mathbf{a}_s^\dagger\mathsf{U}^{-1}=\sum_{s'}(\exp \mathsf{C})_{s's}\,\mathbf{a}_{s'}^\dagger, \tag{19.7}$$

где через C обозначена матрица коэффициентов $c_{qq'}$. Чтобы получить этот результат, нужно воспользоваться операторным тождеством

$$e^{\mathsf{A}}\mathsf{B}e^{-\mathsf{A}}=\mathsf{B}+[\mathsf{A},\mathsf{B}]+\frac{1}{2!}[\mathsf{A},[\mathsf{A},\mathsf{B}]]+\frac{1}{3!}[\mathsf{A},[\mathsf{A},[\mathsf{A},\mathsf{B}]]]+\ldots$$

и соотношением

$$[\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'},\ \mathbf{a}_s^\dagger]=\delta_{q's}\mathbf{a}_q^\dagger,$$

следующим из формулы (19.3). Смысл формулы (19.7) в том, что ее правая часть, в которую входит антиэрмитова матрица C, представляет собой общий вид унитарного

преобразования в трехмерном пространстве операторов $\mathbf{a}_q^\dagger$. Таким образом, операторы U находятся во взаимно-однозначном соответствии с матрицами $\exp(\mathsf{C})$, образующими группу U_3. В этом смысле матрица оператора $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$ задается выражением

$$(\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'})_{ts} = \delta_{q's}\delta_{qt}.$$

Инфинитезимальными операторами преобразований симметрии являются девять независимых антиэрмитовых комбинаций операторов $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$, соответствующих девяти антиэрмитовым 3×3-матрицам из гл. 11, § 4. По некоторым причинам оказывается более удобным выбрать комбинации, являющиеся неприводимыми тензорными операторами по отношению к вращениям (гл. 7, § 4, п. Е). Так как операторы $\mathbf{a}_q^\dagger$ и $\mathbf{a}_q$ преобразуются при вращениях как векторы, т. е. по представлению $\mathsf{D}^{(1)}$, девять операторов $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$ преобразуются по произведению представлений $\mathsf{D}^{(1)} \otimes \mathsf{D}^{(1)} = \mathsf{D}^{(0)} \oplus \mathsf{D}^{(1)} \oplus \mathsf{D}^{(2)}$ [мы воспользовались формулой приведения (7.44)]. Инвариант, соответствующий представлению $\mathsf{D}^{(0)}$, по сути дела совпадает с гамильтонианом, так как из (19.5) следует, что $\sum\limits_q \mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_q = \mathsf{H} - \frac{3}{2}$. Векторные операторы, преобразующиеся по представлению $\mathsf{D}^{(1)}$, являются операторами углового момента, так как $\mathsf{L}_z = i\,(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x) = -i\,(\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_x)$, и т. д. Остальные пять независимых комбинаций можно представить в виде тензорного оператора второго ранга (квадрупольного), аналогичного сферическим гармоникам Y_q^2. В обычных обозначениях гл. 7, § 4, п. Е напишем

$$\begin{aligned}
\mathsf{Q}_0^{(2)} &= 2\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_z - \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y,\\
\mathsf{Q}_1^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}}\,(-\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_y),\\
\mathsf{Q}_{-1}^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}}\,(\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_y), \qquad (19.8)\\
\mathsf{Q}_2^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}}\,(\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y + i\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y + i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_x),\\
\mathsf{Q}_{-2}^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}}\,(\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y - i\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y - i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_x).
\end{aligned}$$

Поскольку гамильтониан H имеет в качестве группы симметрии группу U_3, его собственные функции должны нумероваться соответственно неприводимым представлениям этой группы. Сначала заметим, что $U_3 = U_1 \times SU_3$ (гл. 10, § 4). В нашем случае инфинитезимальный оператор группы U_1 есть просто инвариант $\sum_q \mathsf{a}_q^\dagger \mathsf{a}_q = \mathsf{H} - {}^3/_2$, а остальные восемь операторов с нулевым следом (L_q и $\mathsf{Q}_p^{(2)}$) соответствуют группе SU_3. Таким образом, непри-

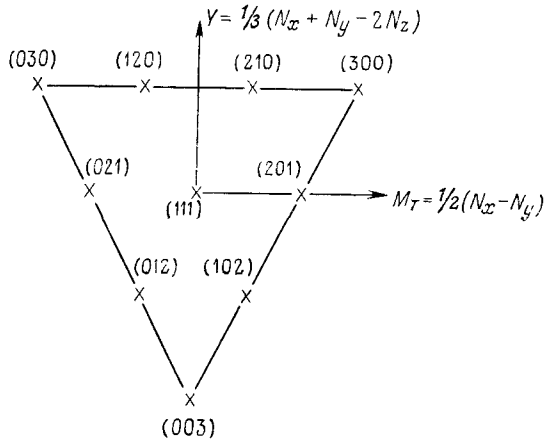

Рис. 19.1.

водимое представление группы U_1 задается величиной N, и нам остается идентифицировать представления группы SU_3, соответствующие каждому уровню энергии. Возвращаясь к описанию инфинитезимальных операторов группы SU_3 (гл. 11, § 6), мы видим, что с помощью матриц (11.2) можно связать оператор ${}^1/_3(\mathsf{a}_x^\dagger \mathsf{a}_x + \mathsf{a}_y^\dagger \mathsf{a}_y - 2\mathsf{a}_z^\dagger \mathsf{a}_z)$ с оператором Y, а оператор ${}^1/_2(\mathsf{a}_x^\dagger \mathsf{a}_x - \mathsf{a}_y^\dagger \mathsf{a}_y)$ — с T_z. Поэтому мы можем связать числа N_x, N_y и N_z, введенные выше, с числами Y и M_T, использовавшимися в гл. 11, соотношением

$$\frac{1}{3}(N_x + N_y - 2N_z) = Y, \quad \frac{1}{2}(N_x - N_y) = M_T. \qquad (19.9)$$

Тогда из рис. 11.6 явствует, что три собственные функции уровня с $N = 1$ принадлежат представлению (1 0),

уровня с $N=2$ — представлению (2 0), а уровня с $N=3$ — представлению (3 0). В качестве иллюстрации мы воспроизвели на рис. 19.1 весовую диаграмму с рис. 11.6 для представления $\mathsf{D}^{(3\ 0)}$. У каждой точки диаграммы указаны соответствующие значения (N_x, N_y, N_z). Так как произведения (19.6) симметричны относительно перестановок N сомножителей $\mathsf{a}_q^\dagger$ и потому (гл. 18, § 7) принадлежат представлению $[N]$ группы U_3, множество собственных функций гамильтониана, отвечающих энергии $N+{}^3/_2$, преобразуется по представлению (N 0) группы SU_3.

Вопрос о том, какие значения углового момента возникают при данном N, с точки зрения теории представлений групп эквивалентен вопросу о редукции неприводимого представления группы SU_3 на ее подгруппу $\mathcal{R}_3$. Подчеркнем, что эта редукция отлична от редукции на подгруппу SU_2, о которой говорилось в гл. 8, § 5. Инфинитезимальными операторами физических вращений, образующих группу $\mathcal{R}_3$, являются операторы L_q [формула (19.7)], а инфинитезимальными операторами подгруппы SU_2, соответствующей плоскости xy, являются операторы

$$\mathsf{T}_+=\mathsf{a}_x^\dagger\mathsf{a}_y,\ \mathsf{T}_-=\mathsf{a}_y^\dagger\mathsf{a}_x,\ \mathsf{T}_z=\frac{1}{2}(\mathsf{a}_x^\dagger\mathsf{a}_x-\mathsf{a}_y^\dagger\mathsf{a}_y). \quad (19.10)$$

Ясно, что, например, оператор T_+ есть «повышающий оператор», который уменьшает величину N_y на единицу и увеличивает на единицу величину N_x и тем самым осуществляет сдвиг вправо на один узел решетки на диаграммах, подобных изображенной на рис. 19.1. Пользуясь соотношениями (19.3), легко показать, что операторы (19.10) удовлетворяют обычным перестановочным соотношениям (7.30) группы SU_2. Операторы (19.10) не имеют, конечно, никакого отношения к изоспину, но мы пользуемся теми же обозначениями, чтобы подчеркнуть математическую связь с изложенным в гл. 11. Оператор углового момента L_z можно теперь представить в виде

$$\begin{aligned}\mathsf{L}_z&=-i(\mathsf{a}_x^\dagger\mathsf{a}_y-\mathsf{a}_y^\dagger\mathsf{a}_x)=-i(\mathsf{T}_+-\mathsf{T}_-)=\\&=-i(\mathsf{T}_x+i\mathsf{T}_y-\mathsf{T}_x+i\mathsf{T}_y)=\\&=2\mathsf{T}_y.\end{aligned} \quad (19.11)$$

Поэтому набор собственных значений оператора L_z в пространстве представления $(\lambda\mu)$ группы SU_3 — такой же, как

и набор собственных значений оператора $2\mathsf{T}_y$, который должен совпадать с набором собственных значений оператора $2\mathsf{T}_z$, т. е. со значениями $M_T = {}^1/_2(N_x - N_y)$. Последние можно найти по диаграммам, подобным изображенной на рис. 19.1. Зная собственные значения оператора L_z, можно определить возможные значения величины l. Например, из рис. 19.1 следует, что в представлении (3 0) оператор L_z имеет следующие собственные значения: —3, —1, 1, 3, —2, 0, 2, —1, 1, 0, что приводит к значениям $l=3$ и $l=1$. В общем случае для представления (N 0) имеем $l=N$, $N-2$, $N-4$, ..., 1 или 0 — уже знакомый нам набор значений углового момента l для N-го энергетического уровня осциллятора.

§ 2. ТРЕХМЕРНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР, МНОГОЧАСТИЧНЫЙ СЛУЧАЙ

В предыдущем параграфе мы рассмотрели движение одной частицы в сферически-симметричном осцилляторном потенциале. Мы установили, что в такой системе имеется дополнительное вырождение по сравнению с $(2l+1)$-кратным вырождением в случае сферически-симметричного потенциала. Рассмотрим теперь систему частиц, движущихся в потенциале гармонического осциллятора и взаимодействующих между собой в соответствии с потенциалом вида $\sum\limits_{i<j} \mathsf{V}(r_{ij})$, который мы считаем малым возмущением. Такая система аналогична системе электронов в атоме (гл. 8, § 6). В гл. 8 мы пришли к выводу о наличии в многоэлектронном атоме LS-связи; сейчас же рассматривать спин нет необходимости. С теоретико-групповой точки зрения тот факт, что система обладает полным угловым моментом L, означает, что волновая функция системы преобразуется по представлению $\mathsf{D}^{(L)}$ группы $\mathcal{R}_3$ при вращениях системы как целого. Величина L является характеристикой, дополнительной к угловым моментам l отдельных частиц, задающим поведение волновой функции при вращениях, затрагивающих координаты отдельной частицы. Гамильтониан, содержащий взаимодействие вида $\sum\limits_{i<j} \mathsf{V}(r_{ij})$, инвариантен относительно группы $\mathcal{R}_3$ вращений системы как целого. Рас-