рых равны $N+1$, вырождены соответственно величине углового момента $^1/_2N$, т. е. степень вырождения равна $2(^1/_2N)+1=N+1$. Пара операторов $\mathbf{a}_x^\dagger$ и $\mathbf{a}_y^\dagger$ преобразуется в этом случае по представлению $\mathbf{D}^{(1/2)}$ группы SU_2.

§ 4. ГРУППА СИММЕТРИИ КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Гамильтониан, описывающий движение частицы с зарядом $-e$ в кулоновском потенциале e/r, например электрона в атоме водорода, равен (гл. 8, § 5)

$$\mathsf{H}=\frac{p^2}{2M}-\frac{e^2}{r}=\hbar^2\frac{\nabla^2}{2M}-\frac{e^2}{r}. \tag{19.13}$$

Если измерять длину в единицах $\hbar^2/Me^2$ (боровский радиус), а энергию в единицах $e^4/2\hbar^2=Rh$, где R — постоянная Ридберга, то гамильтониан (19.13) принимает вид

$$\mathsf{H}=-\left(\nabla^2+\frac{2}{r}\right). \tag{19.14}$$

Уравнение Шредингера, как обычно, имеет вид $\mathsf{H}\psi=E\psi$, где E — энергия, а ψ — волновая функция. Хорошо известно, что в случае гамильтониана (19.14) уровни энергии задаются целыми числами $n=1, 2, 3, \ldots$; соответствующие энергии равны $-n^{-2}$, и при данном n угловой момент l принимает значения $0, 1, 2, 3, \ldots, (n-1)$. Таким образом, имеется более сильное вырождение, нежели соответствующее сферической симметрии.

Будучи сферически-симметричным, гамильтониан (19.14) коммутирует с тремя инфинитезимальными операторами L_q группы $\mathcal{R}_3$. Кроме того, путем алгебраических выкладок можно показать, что гамильтониан H коммутирует также с тремя компонентами векторного оператора

$$\mathbf{A}=\frac{1}{2}\{(\nabla\times(\mathbf{r}\times\nabla))-((\mathbf{r}\times\nabla)\times\nabla)\}+\mathbf{r}/r. \tag{19.15}$$

Перейдя к физическим операторам, данное выражение можно переписать в виде

$$\mathbf{A}=-[\{(\mathbf{p}\times\mathbf{L})-(\mathbf{L}\times\mathbf{p})\}/2M-e^2\mathbf{r}/r]/e^2.$$

Выражение в квадратных скобках называется вектором Рунге—Ленца. Известно, что в классической задаче

о движении в кулоновском потенциале этот вектор является интегралом движения. Три дополнительных эрмитовых оператора симметрии A_q вместе с операторами L_q могут, в принципе, составлять набор инфинитезимальных операторов некоторой непрерывной группы, содержащей подгруппу $\mathcal{R}_3$. Поэтому мы рассмотрим перестановочные соотношения между шестью операторами A_q и L_q с целью выяснить, являются ли они соотношениями вида (7.7) и совпадают ли в нашем случае структурные константы со структурными константами какой-либо хорошо известной группы Ли.

Поскольку операторы A_q — это компоненты вектора, их перестановочные соотношения с инфинитезимальными операторами вращения имеют вид [(гл. 7, § 4, п. Е, а также формула (7.26)]

$$[\mathsf{L}_x, \mathsf{A}_x]=0, \ [\mathsf{L}_x, \mathsf{A}_y]=i\mathsf{A}_z, \ [\mathsf{L}_x, \mathsf{A}_z]=-i\mathsf{A}_y \text{ и т. д.} \tag{19.16}$$

Перестановочные соотношения между операторами A_q и $\mathsf{A}_{q'}$ можно получить из определения (19.15):

$$[\mathsf{A}_x, \mathsf{A}_y]=\left(\nabla^2+\frac{2}{r}\right)\left(x\frac{\partial}{\partial y}-y\frac{\partial}{\partial x}\right)=-i\mathsf{H}\mathsf{L}_z \text{ и т. д.} \tag{19.17}$$

Таким образом, последний коммутатор не записывается в форме (7.7), т. е. в виде суммы операторов симметрии L_q и $\mathsf{A}_{q'}$. В выражение (19.17) входит также гамильтониан H. Но поскольку H коммутирует с $\mathbf{A}$ и $\mathbf{L}$, мы можем включить множитель $-\mathsf{H}$ в определение этих операторов, положив $\mathbf{A}'=(-\mathsf{H})^{-1/2}\mathbf{A}$, так что

$$[\mathsf{A}'_x, \mathsf{A}'_y]=i\mathsf{L}_z \text{ и т. д.} \tag{19.17a}$$

Наличие множителя $(-\mathsf{H})$, а не H в определении оператора $\mathbf{A}'$ оказывается удобным при рассмотрении связанных состояний, энергии которых отрицательны. В этом случае оператор $\mathbf{A}'$ эрмитов. Но при положительных энергиях он становится антиэрмитовым. Таким образом, в случае отрицательных энергий операторы $\mathbf{L}$ и $\mathbf{A}'$ задают унитарные преобразования вида $\exp\{-i(\mathbf{a}\cdot\mathbf{L})-i(\mathbf{c}\cdot\mathbf{L})\}$, где $\mathbf{a}$ и $\mathbf{c}$ — действительные векторные параметры. Соответствующие шесть инфинитезимальных операторов равны компонентам векторов $-i\mathbf{L}$ и $-i\mathbf{A}'$. Знак минус введен для того, чтобы параметры вращения $\mathbf{a}$ совпадали с определенными ранее параметрами (гл. 7, § 4, п А). Теперь

мы покажем, что перестановочные соотношения (19.16) и (19.17) совпадают с перестановочными соотношениями для группы $\mathcal{R}_4$.

А. Группы $\mathcal{R}_4$ и $\mathcal{L}$

Четырехмерная группа вращений определяется как множество действительных ортогональных 4×4-матриц с определителем, равным $+1$. Если R — такая матрица, то мы можем написать $\mathsf{R}=1+\mathsf{M}$, где элементы матрицы M малы в случае, когда матрица R близка к единичной. Условие ортогональности $\mathsf{R}^\dagger\mathsf{R}=1$ приводит при малых M к соотношению $\mathsf{M}^\dagger+\mathsf{M}=0$, т. е. инфинитезимальный оператор M является кососимметричным и может быть записан в виде

$$\mathsf{M}=\begin{pmatrix} 0 & -a_z & a_y & c_x \\ a_z & 0 & -a_x & c_y \\ -a_y & a_x & 0 & c_z \\ -c_x & -c_y & -c_z & 0 \end{pmatrix}=\sum_q (a_q\mathsf{X}_q+c_q\mathsf{Z}_q). \quad (19.18)$$

Соотношением (19.18) определяются шесть независимых инфинитезимальных операторов X_q, Z_q. Обозначения X_q совпадают с обозначениями, использованными в гл. 7, § 4, п. А для группы $\mathcal{R}_3$, отражая тот факт, что при $c_q=0$ мы приходим к подгруппе $\mathcal{R}_3$ группы $\mathcal{R}_4$. Перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов (19.18) следуют из их определения:

$$\begin{gathered}[\mathsf{X}_x,\ \mathsf{X}_y]=\mathsf{X}_z \text{ и т. д.}\\ [\mathsf{X}_x,\ \mathsf{Z}_x]=0,\ [\mathsf{X}_x,\ \mathsf{Z}_y]=\mathsf{Z}_z,\ [\mathsf{X}_x,\ \mathsf{Z}_z]=-\mathsf{Z}_y \text{ и т. д.},\\ [\mathsf{Z}_x,\ \mathsf{Z}_y]=\mathsf{X}_z \text{ и т. д.}\end{gathered} \quad (19.19)$$

(остальные коммутаторы получаются путем циклической перестановки индексов). Как показывает сравнение с формулами (19.16) и (19.17а), операторы $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Z}$ удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и инфинитезимальные операторы симметрии $-i\mathbf{L}$ и $-i\mathbf{A}'$.

Итак, на уровне инфинитезимальных операторов мы можем отождествить группу симметрии для связанных состояний нашей системы с группой $\mathcal{R}_4$. Чтобы показать, что и конечные операторы симметрии можно привести во взаимно-однозначное соответствие с элементами группы

$\mathscr{R}_4$ (установить изоморфизм групп), необходимо более детальное изучение области изменения параметров. ($\mathscr{R}_4$-инвариантность гамильтониана H можно доказать, отобразив вектор импульса $\mathbf{p}$ в точку, лежащую на единичной сфере в четырехмерном пространстве, с координатами

$$\xi = 2p_0p_x/(p_0^2+p^2),\ \eta = 2p_0p_y/(p_0^2+p^2),$$
$$\zeta = 2p_0p_z/(p_0^2+p^2),\ \chi = (p_0^2-p^2)/(p_0^2+p^2),$$

где $p_0 = (-E)^{-1/2}$. Если уравнение Шредингера записать как интегральное уравнение в импульсном пространстве, то оно будет инвариантным по отношению к вращениям в четырехмерном пространстве с координатами ξ, η, ζ, χ.)

Для состояний с положительной энергией удобнее ввести вместо оператора $\mathbf{A}'$ оператор $\mathbf{A}'' = (\mathsf{H})^{-1/2}\mathbf{A}$. Оператор $\mathbf{A}''$ эрмитов, а перестановочные соотношения (19.17а) принимают для него вид

$$[\mathsf{A}''_x, \mathsf{A}''_y] = -i\mathsf{L}_z \quad \text{и т. д.} \tag{19.17б}$$

Перестановочные соотношения между инфинитезимальными операторами симметрии $-i\mathbf{L}$ и $-i\mathbf{A}''$ теперь отличаются от перестановочных соотношений (19.19) для группы $\mathscr{R}_4$. Но они совпадают с перестановочными соотношениями для группы Лоренца $\mathscr{L}$. Это и понятно, поскольку группа Лоренца является четырехмерной группой вращений для метрики с измененным знаком одного из слагаемых — в нашем случае это соответствует изменению знака H.

Б. Классификация состояний в кулоновском потенциале

Из общей теории следует, что, имея в своем распоряжении группу симметрии, мы можем классифицировать уровни энергии по неприводимым представлениям этой группы. Таким образом, мы приходим к задаче классификации неприводимых представлений группы $\mathscr{R}_4$. Эта задача решается очень просто, нужно лишь воспользоваться наличием локального изоморфизма между группами $\mathscr{R}_4$ и $\mathscr{R}_3 \times \mathscr{R}_3$. В самом деле, введем новые инфинитезимальные операторы $\mathbf{F}$ и $\mathbf{G}$: $\mathbf{F} = {}^1/_2(\mathbf{X}+\mathbf{Z})$, $\mathbf{G} = {}^1/_2(\mathbf{X}-\mathbf{Z})$, что эквивалентно переходу в формуле (19.18) к параметрам $(\mathbf{a}+\mathbf{c})$ и $(\mathbf{a}-\mathbf{c})$. Тогда в силу соотношений (19.19)

имеем

$$[\mathsf{F}_x, \mathsf{F}_y] = \mathsf{F}_z, \quad [\mathsf{G}_x, \mathsf{G}_y] = \mathsf{G}_z \quad \text{и т. д.} \tag{19.20}$$

Коммутаторы же операторов $\mathbf{F}$ с операторами $\mathbf{G}$ равны нулю. Это означает, что операторы $\mathbf{F}$ и $\mathbf{G}$ по отдельности удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и операторы $\mathbf{X}$, и, следовательно, задают две группы $\mathcal{R}_3$. Поскольку операторы $\mathbf{F}$ и $\mathbf{G}$ коммутируют между собой, вместе они задают группу $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$. Таким образом, мы установили изоморфизм групп $\mathcal{R}_4$ и $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$ на уровне инфинитезимальных операторов. Поэтому, зная, что представления группы $\mathcal{R}_3$, обозначаемые через $\mathsf{D}^{(j)}$, определяются индексом $j = 0, {}^1/_2, 1, {}^3/_2, \ldots$, мы можем заключить, что неприводимые представления группы $\mathcal{R}_4$ нумеруются парами индексов $j_1 j_2$ (относительно представлений прямого произведения групп см. гл. 4, § 21). Таким образом, неприводимые представления группы $\mathcal{R}_4$ обозначаются через $\mathsf{D}^{(j_1, j_2)}$, где индексы j_1 и j_2 относятся к двум $\mathcal{R}_3$-подгруппам. Операторы $(\mathbf{F}\cdot\mathbf{F})$ и $(\mathbf{G}\cdot\mathbf{G})$ — это операторы Казимира с собственными значениями $-j_1(j_1+1)$ и $-j_2(j_2+1)$ (гл. 7, § 5). Размерность представления $\mathsf{D}^{(j_1, j_2)}$ равна $(2j_1+1)(2j_2+1)$.

При изучении в § 1 гармонического осциллятора мы видели, что в одночастичном случае могут быть реализованы лишь некоторые из представлений группы SU_3. Подобная ситуация возникает и в кулоновской задаче. Причиной такого ограничения возможных типов представлений является равенство $(\mathbf{A}'\cdot\mathbf{L}) = (\mathbf{L}\cdot\mathbf{A}') = 0$, которое после алгебраических выкладок получается из определений операторов $\mathbf{A}'$ и $\mathbf{L}$. Это равенство приводит к тому, что операторы Казимира, построенные из операторов $-{}^1/_2 i(\mathbf{L} \pm \mathbf{A}')$, соответствующих операторам $\mathbf{F}$ и $\mathbf{G}$, совпадают с оператором $-{}^1/_4\{(\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}) + (\mathbf{A}'\cdot\mathbf{A}')\}$. Следовательно, единственно возможными представлениями являются представления с $j_1 = j_2$, т. е. представления $\mathsf{D}^{(jj)}$, где $j = 0, {}^1/_2, 1, {}^3/_2, \ldots$. Дальнейшие вычисления показывают, что операторы Казимира можно привести к еще более простому виду:

$$(\mathbf{F}\cdot\mathbf{F}) = (\mathbf{G}\cdot\mathbf{G}) = -{}^1/_4\{(\mathbf{L}\cdot\mathbf{L}) + (\mathbf{A}'\cdot\mathbf{A}')\} = {}^1/_4(1 + \mathsf{H}^{-1}).$$

В представлении $\mathsf{D}^{(jj)}$ этот оператор равен $-j(j+1)$, так что соответствующее значение энергии равно

$$E = \langle \mathsf{H} \rangle = -(2j+1)^{-2} \tag{19.21}$$

и этот уровень $(2j+1)^2$-кратно вырожден. В обычном изложении теории атома водорода принято, конечно, для обозначения энергетических уровней пользоваться целым числом $n=(2j+1)$. Значения $j=0, {}^1/_2, 1, {}^3/_2, \ldots$ соответствуют значениям $n=1, 2, 3, 4, \ldots$, и формула (19.21) сводится к более привычному выражению $E=-n^{-2}$ (в единицах энергии, введенных в начале § 4).

Чтобы определить, какие значения углового момента l соответствуют каждому уровню энергии, нам понадобится формула разложения представления $\mathsf{D}^{(j,j)}$ группы $\mathcal{R}_4$ на неприводимые при редукции на подгруппу физических вращений $\mathcal{R}_3$:

$$\mathsf{D}^{(jj)}=\sum_l c_l \mathsf{D}^{(l)}. \tag{19.22}$$

Заметим, что физическим вращениям соответствует оператор $\mathbf{X}=\mathbf{F}+\mathbf{G}$. Поэтому задача отыскания ненулевых коэффициентов ряда (19.22) сводится к задаче векторного сложения двух угловых моментов: $l=j+j$ (гл. 7, § 4, п. Г). Из формулы (7.44) следует, что $l=0, 1, 2, \ldots, 2j(=n-1)$; это известный результат теории атома водорода.

Относительно положительных энергий заметим, что, как мы видели в гл. 15, § 2, п. Д, группа Лоренца не имеет конечномерных унитарных представлений. Это согласуется с тем хорошо известным фактом, что положительным энергиям соответствует континуум состояний.

Методом, которым в § 2 было в случае группы симметрии U_3 осуществлено обобщение на многочастичные системы, можно воспользоваться также и в случае кулоновского потенциала и группы симметрии U_3. Но такое обобщение, по-видимому, не дает ничего существенного ни в одной из известных физических проблем.

ЛИТЕРАТУРА

Симметриям осцилляторного и кулоновского потенциалов в одночастичном случае посвящена работа:

1. *Jauch J. M., Hill E. L.*, Phys. Rev., 57, 641 (1940).

Обзор по вопросам использования симметрии гармонического осциллятора в многочастичных задачах ядерной физики дан в работе:

2. *Harvey M.*, Advances in Nuclear Physics, vol. 1, Plenum Press, New York, 1968.