1953 ВЕСТНИК ЛЕНИНГРАДСКОГО УНИВЕРСИТЕТА № 11

Ю. Н. Демков

ГРУППА СИММЕТРИИ ИЗОТРОПНОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

1. Дадим предварительно краткий обзор тех положений теории групп, которые будут использованы в данной статье. При этом мы не стремимся к полной математической строгости в целях большей простоты изложения.

Рассмотрим задачу об отыскании собственных значений и собственных функций эрмитовского оператора H

$$H\psi_i = E_i\,\psi_i\,. \tag{1}$$

Если имеются унитарные операторы $U_1,\ U_2, \ldots,\ U_n$, коммутирующие с H, то они порождают унитарную группу, относительно которой оператор H инвариантен. Элементами этой группы будут всевозможные произведения операторов U_k. Если U_k коммутируют между собой, то соответствующая группа — абелева, представления ее одномерны и из наличия ее не вытекает вырождение собственных значений оператора H. Чтобы группа была неабелевой, необходимо и достаточно, чтобы по крайней мере два оператора U_i и U_k не коммутировали между собой. В этом случае имеется хотя бы одно неприводимое представление, размерность которого больше единицы, и, следовательно, эта группа приводит к вырождению собственных значений H.[1] Группа, порождаемая унитарными операторами U_k, конечна или, в крайнем случае, может быть счетной.

Иначе обстоит дело, если с оператором H коммутируют эрмитовские операторы $L_1,\ L_2, \ldots,\ L_n$. В этом случае можно построить непрерывную группу унитарных операторов, зависящую от n-параметров. Если операторы L_k коммутативны, то построение этой группы элементарно. Элементы ее будут иметь вид

$$U(\alpha_1,\ \alpha_2, \ldots,\ \alpha_n) = e^{i\sum\limits_{k=1}^{n}\alpha_k L_k}. \tag{2}$$

Вся группа опять-таки абелева и не приводит к вырождению собственных значений. Если L_k не коммутируют, то построение группы

[1] Предполагается, что множество собственных функций обладает свойством полноты. Это условие всегда выполняется для реальных квантово-механических операторов.

значительно сложнее. Во всяком случае, из нее можно выделить однопараметрические подгруппы

$$U_k(\alpha_k) = e^{i\alpha_k L_k}. \tag{3}$$

В теории непрерывных групп важную роль играет рассмотрение бесконечно малых преобразований, соответствующих малым α_k. Если пренебречь квадратами малых $\delta\alpha_k$, то в случае коммутирующих L_k оператор этого преобразования будет иметь вид

$$1 + i\sum_{k=1}^{n} \delta\alpha_k L_k. \tag{4}$$

Можно показать, что и в общем случае он будет иметь такой же вид и некоммутативность L_k скажется только на членах, пропорциональных произведениям $\delta\alpha_i \cdot \delta\alpha_k$. Исследование этих членов показывает, что операторы L_k должны удовлетворять дополнительному условию

$$L_i L_j - L_j L_i = [L_i, L_j] = \sum_{k=1}^{n} c_{ij}^k L_k. \tag{5}$$

Величины c_{ij}^k называются структурными постоянными, а операторы L_k — инфинитезимальными операторами данной непрерывной группы. Инфинитезимальные операторы полностью определяют непрерывную группу, а структурные постоянные c_{ij}^k — все ее алгебраические свойства[1] — вид и размерность ее представлений, подгруппы и т. п. Например, все свойства группы вращений можно получить из явного вида ее инфинитезимальных операторов

$$M_x = -ih\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \quad M_y = -ih\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right),$$
$$M_z = -ih\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \tag{6}$$

Алгебраические свойства этой группы получатся из соотношений типа (5)

$$[M_x, M_y] = ihM_z, \quad [M_y, M_z] = ihM_x, \quad [M_z, M_x] = ihM_y, \tag{7}$$

Из них обычно и исходят в конкретных выводах, даже не упоминая о группе вращений.

2. Каждому унитарному представлению нашей унитарной группы соответствует некоторое множество собственных значений и собственных функций оператора H, причем кратность вырождения равна размерности представления. Если нам заранее известна группа или, что то же, ее инфинитезимальные операторы, коммутирующие с H, то

[1] Строго говоря, структурными постоянными определяются свойства локально-компактной группы лишь в некоторой конечной окрестности единичного элемента. Однако в физических приложениях именно эти свойства и являются, как правило, существенными.

с помощью разнообразных и подробно разработанных методов мы можем найти ее представления, а следовательно и кратность вырождения различных собственных значений оператора H.

Таким образом, каждой неабелевой группе, относительно которой оператор H симметричен, соответствует вырождение его собственных значений.

Обратное утверждение: каждому вырождению собственных значений соответствует неабелева группа симметрии оператора H — тоже справедливо, и формально эту группу нетрудно построить. Это будет группа одновременных вращений в подпространствах собственных функций, соответствующих вырожденным уровням. Однако мы не имеем рецепта для построения этой группы в явном виде, и, таким образом, это утверждение имеет лишь принципиальное значение.

Первой (и единственной) задачей, которая была исследована с этой точки зрения, явилась решенная В. А. Фоком [1] задача о „случайном" вырождении по квантовому числу l уровней энергии частицы в кулоновом поле $U = -\frac{e^2}{r}$.

Путем перехода к стереографической проекции в пространстве импульсов удалось показать, что вырождение по l связано с группой, которая для дискретного спектра отрицательных уровней энергии изоморфна с четырехмерной группой вращений.

Решение этой задачи позволило упростить различные расчеты, относящиеся к атому водорода, и, таким образом, представляло не только принципиальный, но и практический интерес.

3. Существует еще одно центральное поле, в котором уровни энергии частицы имеют дополнительное вырождение, — это поле изотропного осциллятора $U = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2$. Уровни энергии изотропного осциллятора зависят только от одного квантового числа

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) h\omega, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{8}$$

и каждому уровню, как легко подсчитать, соответствуют $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ собственных функций. Таким образом, имеется добавочное вырождение, помимо вырождения по квантовому числу m, которое обусловлено симметрией вращения.

Для того чтобы ответить на вопрос, с какой группой связано это вырождение, напишем уравнение Шредингера для изотропного осциллятора

$$\left(-\frac{h^2}{2m} \Delta + \frac{m\omega^2}{2} r^2\right)\psi = E\psi. \tag{9}$$

Переходя, как обычно, к системе единиц, в которой

$$h = m = \omega = 1, \tag{10}$$

имеем

$$(-\Delta + r^2)\psi = 2E\psi. \tag{11}$$

Соответствующее одномерное уравнение имеет вид

$$(p_x^2 + x^2)\psi(x) = 2E_x\psi(x). \tag{12}$$

Как известно, переход к импульсному представлению не меняет это уравнение. Отсюда видно, что оператор Φ_x, определенный следующим образом

$$\varphi(x) = \Phi_x \psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-ixx'} \psi(x')\, dx', \tag{13}$$

коммутирует с оператором $H = -\Delta + r^2$.

Поскольку задача сферически симметрична, мы можем утверждать, что существует множество коммутирующих с H унитарных операторов Φ_{n°,[1] представляющих собой одномерные преобразования Фурье вдоль оси, определяемой ортом n°. Вместе с операторами группы вращения эти операторы, а также всевозможные их произведения, образуют группу, относительно которой инвариантен наш оператор энергии. Обозначим эту группу Φ.

4. Найдем теперь инфинитезимальные операторы этой группы, а также структурные постоянные.

Прежде всего, такими операторами будут M_x, M_y, M_z, так как группа вращений является подгруппой группы Φ.

Для того чтобы получить другие инфинитезимальные операторы, произведем следующее бесконечно малое преобразование. Сначала осуществим преобразование Фурье относительно оси $x - \Phi_x$, затем — поворот вокруг оси z на угол $\delta\varphi - T_z(\delta\varphi)$ и, наконец, обратное преобразование Фурье Φ_x^{-1}. Пренебрегая высшими степенями $\delta\varphi$, имеем

$$T_z(\delta\varphi)\,\varphi(x,\ y,\ z) = \varphi(x + y\delta\varphi,\quad y - x\delta\varphi,\quad z), \tag{14}$$

отсюда

$$\Phi_x^{-1}\, T_z(\delta\varphi)\, \Phi_x \psi(x,\ y,\ z) =$$

$$= \frac{1}{2\pi} \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{ixx'}\, dx' \int\limits_{-\infty}^{+\infty} e^{-i(x' + y\delta\varphi)x''} \psi(x'',\ y - x'\delta\varphi,\ z)\, dx''. \tag{15}$$

Разлагая в ряд и отбрасывая все члены, пропорциональные $\delta\varphi^2$ и выше, имеем после простых преобразований

$$\Phi_x^{-1}\, T_z(\delta\varphi)\, \Phi_x \psi(x,\ y,\ z) =$$

$$= \left[1 - i\left(-\frac{\partial^2}{\partial x \partial y} + xy\right)\right] \psi(x,\ y,\ z) =$$

$$= [1 - i(p_x p_y + xy)]\, \psi(x,\ y,\ z). \tag{16}$$

Производя циклическую перестановку, имеем, таким образом, еще три инфинитезимальных оператора:

$$N_x = p_y p_z + yz; \quad N_y = p_z p_x + zx; \quad N_z = p_x p_y + xy. \tag{17}$$

Легко убедиться и непосредственной проверкой, что они коммутируют с H.

---

[1] Унитарность следует из теоремы замкнутости.

Составляя перестановочные соотношения между M_k N_k, получим полную систему инфинитезимальных операторов нашей группы. При этом получаем еще три новых оператора:

$$H_x = p_x^2 + x^2; \quad H_y = p_y^2 + y^2; \quad H_z = p_z^2 + z^2. \tag{18}$$

Перестановочные соотношения имеют следующий вид:

$$\begin{gathered}
[M_l, M_j] = iM_k, [N_l, N_j] = -iM_k, [H_l, H_j] = 0 \\
[M_l, N_l] = i(H_k - H_j), [M_l, H_l] = 0, [N_l, H_l] = 0 \\
[M_l, N_j] = -iN_k, [M_l, H_j] = -2iN_l, [N_l, H_j] = -2iM_l \\
[N_l, M_j] = -iN_k, [H_l, M_j] = -2iN_j, [H_l, N_j] = -2iM_j.
\end{gathered} \tag{19}$$

Здесь j, k, l — циклическая перестановка значков x, y, z.

Перестановочные соотношения между девятью операторами M_k, N_k, H_k не дают нам новых инфинитезимальных операторов. Отсюда следует, что эти операторы определяют непрерывную группу, зависящую от девяти параметров.

5. В обычной системе единиц операторы N_k будут иметь вид

$$N_x = \frac{p_y p_z}{m\omega h} + \frac{m\omega xy}{h}. \tag{20}$$

Очевидно, что этот интеграл должен существовать и в классической механике. Действительно,

$$\begin{gathered}
y = A \sin(\omega t + \alpha); \quad p_y = m\omega A \cos(\omega t + \alpha); \\
z = B \sin(\omega t + \beta); \quad p_z = m\omega B \cos(\omega t + \beta); \\
\frac{p_y p_z}{m\omega} + xym\omega = m\omega AB \cos(\alpha - \beta).
\end{gathered} \tag{21}$$

Существование этих интегралов в классической механике точно так же связано с группой касательных преобразований, относительно которой функция Гамильтона инвариантна. Эта группа получится из группы вращений добавлением касательного преобразования

$$x \to p_x, \; p_x \to -x. \tag{22}$$

6. Докажем теперь, что группа Φ обусловливает вырождение уровней энергии, имеющееся в изотропном вибраторе. Для этого выясним, как действуют M_i и N_i на собственную функцию оператора H

$$\psi_{n_1 n_2 n_3} = \psi_{n_1}(x)\psi_{n_2}(y)\psi_{n_3}(z) \quad (n = n_1 + n_2 + n_3).$$

Воспользовавшись известными рекуррентными формулами

$$\begin{gathered}
x\psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} + \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1}; \\
\frac{d}{dx}\psi_n(x) = \sqrt{\frac{n}{2}}\psi_{n-1} - \sqrt{\frac{n+1}{2}}\psi_{n+1},
\end{gathered} \tag{23}$$

получаем

$$M_z \psi_{n_1 n_2 n_3} = -i\sqrt{(n_1+1)\,n_2}\,\psi_{n_1+1\,n_2-1\,n_3} + i\sqrt{n_1(n_2+1)}\,\psi_{n_1-1\,n_2+1\,n_3};$$

$$N_z \psi_{n_1 n_2 n_3} = \sqrt{(n_1+1)\,n_2}\,\psi_{n_1+1\,n_2-1\,n_3} + \sqrt{n_1(n_1+1)}\,\psi_{n_1-1\,n_2+1\,n_3}. \quad (24)$$

Составляя операторы $N_z + iM_z$, $N_z - iM_z$, имеем

$$(N_z + iM_z)\,\psi_{n_1 n_2 n_3} = 2\sqrt{(n_1+1)\,n_2}\,\psi_{n_1+1\,n_2-1\,n_3};$$
$$(N_z - iM_z)\,\psi_{n_1 n_2 n_3} = 2\sqrt{n_1(n_2+1)}\,\psi_{n_1-1\,n_2+1\,n_3}. \quad (25)$$

Аналогичные соотношения получим для операторов

$$N_x \pm iM_x; \quad N_y \pm iM_y. \quad (26)$$

Действуя этими операторами на функцию $\psi_{n_1 n_2 n_3}$, мы можем получить любую функцию, относящуюся к данному уровню. Это и значит, что вырождение, имеющееся у изотропного осциллятора, обусловлено группой Φ. Отсюда же имеем, что представления Φ_n группы Φ, которые получатся, если за орты векторного пространства взять все функции $\psi_{n_1 n_2 n_3}$, удовлетворяющие условию $n = n_1 + n_2 + n_3$, являются неприводимыми. Рассуждения здесь в точности подобны тем, которые проводятся при доказательстве неприводимости группы вращения (см. напр. [2].

Операторы (25) и (26) вместе с операторами H_k можно принять в качестве новых неэрмитовых инфинитезимальных операторов группы Φ. Они могут быть выражены единой формулой

$$f_{lk} = (p_l\,p_k + x_l\,x_k) + i\,(x_l\,p_k - x_k\,p_l) = (p_l + ix_l)(p_k - ix_k) + \delta_{lk}. \quad (27)$$
$$(l,\ k = 1,\ 2,\ 3).$$

Отсюда видно, что f_{lk} образуют тензор второго ранга. Эти операторы увеличивают на единицу l-й значок функции $\psi_{n_1 n_2 n_3}$ и уменьшают на единицу k-й значок. Перестановочные соотношения для них можно тоже записать в симметричной форме

$$[f_{kl}\,f_{mn}] = 2\delta_{ml}\,f_{kn} - 2\delta_{kn}\,f_{ml}\ (k,\ l,\ m,\ n = 1,\ 2,\ 3).$$

7. Рассмотрим, наконец, вопрос о связи группы Φ с группой вращений. Что произойдет, если мы снимем симметрию Φ в системе, но сохраним сферическую симметрию (вводя, например, малое сферически симметричное возмущение)?

Очевидно, что при этом вырождение уровней частично снимается, соответственно тому, как представления Φ_n группы Φ разлагаются по представлениям D_j группы вращений. Для того чтобы найти это разложение, решим задачу об изотропном осцилляторе в сферических координатах. Обычным путем приходим к уравнению для радиальной функции

$$\left(-\frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{r^2} + r^2 - 2E\right) f(r) = 0 \quad f(0) = 0. \quad (28)$$

Заменяя функцию $f(r)$

$$f(r)=e^{-\frac{r^2}{2}}\varphi_{nl}(r) \tag{29}$$

и полагая $E=n+\frac{3}{2}$, имеем

$$\varphi''_{nl}-2r\varphi'_{nl}+\left[2n+2-\frac{l(l+1)}{r^2}\right]\varphi_{nl}=0. \tag{30}$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющее граничному условию в нуле, может быть выражено через вырожденную гипергеометрическую функцию

$$\varphi_{nl}(r)=r^{l+1}F\left(-\frac{n-l}{2},\quad l+\frac{3}{2},\quad r^2\right)=c_{ln}r^l H^{(l)}_{n+1}(r). \tag{31}$$

Граничное условие на бесконечности приводит к тому, что ряд должен обрываться, а для этого необходимо, чтобы $\frac{n-l}{2}$ было целым и положительным или нулем. Отсюда следует $l\leqslant n$ и, кроме того, n и l должны быть одинаковой четкости.

Таким образом, имеем общую формулу

$$\Phi_n=D_n+D_{n-2}+\ldots+\begin{cases}D_1 & n \text{ — нечетное;}\\ D_0 & n \text{ — четное.}\end{cases} \tag{32}$$

При фиксированном l множество полиномов $H^{(l)}_{n+1}(r)$ образует систему ортогональных полиномов на промежутке $(0,\infty)$ с весовым множителем $r^{2l}e^{-r^2}$. При $l=0$ $H^{(l)}_{n+1}(r)$ являются обыкновенными полиномами Эрмита. По аналогии с полиномами Лагерра, естественно назвать $H^{(l)}_{n+1}(r)$ обобщенными полиномами Эрмита.

Все эти рассуждения можно распространить на задачу о квантах света в пустоте, поскольку оператор Гамильтона для них тоже симметричен относительно координат и импульсов. Однако взаимодействие с зарядом нарушает эту симметрию. Попытки построить вполне симметричную теорию [3] не привели пока к сколько-нибудь интересным результатам. Возможно, что более подробное изучение рассмотренной здесь группы преобразований окажется полезным для исследований в этой области.

ЛИТЕРАТУРА

1. В. А. Фок. Z. s. f. Phys., 98, 145 (1935).
2. Б. Л. Ван-дер-Верден. Метод теории групп в квантовой механике, Харьков, (§ 17; см. так же дополнение) (1938).
3. M. Born. Rev. Mod. Phys., 21, 463 (1949).