21

АКАДЕМИЯ НАУК СССР

ЖУРНАЛ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ И ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 44

(Отдельный оттиск)

6

МОСКВА · 1963

Журнал экспериментальной и теоретической физики

Т. 44 *1963* *Вып. 6*

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ ГРУППЫ СИММЕТРИИ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ. АНИЗОТРОПНЫЙ ОСЦИЛЛЯТОР

Ю. Н. Демков

Обычное определение группы симметрии как группы унитарных операторов, коммутирующих с гамильтонианом, является недостаточным. Вводятся понятия максимальной, минимальной, неполной и избыточной групп симметрии. Дается рецепт построения минимальной группы симметрии. Для этого достаточно подобрать группу с нужными размерностями неприводимых представлений. В качестве примера решена задача, поставленная Яухом и Хиллом, — найдена группа симметрии анизотропного осциллятора.

1. Различные типы групп симметрии

Группой симметрии квантово-механической системы можно называть группу унитарных операторов, коммутирующих с H—оператором энергии системы. Однако такое определение является недостаточным и нуждается в уточнениях.

Действительно, назовем максимальной группой симметрии S группу всех таких унитарных операторов. Тогда легко убедиться, что эта группа является «слишком общей» и поэтому не представляет интереса. В простейшем случае, когда все уровни энергии E_n не вырождены и нумеруются индексом n, всякий унитарный оператор U, коммутирующий с H, будет диагонален в энергетическом представлении, его матричные элементы будут иметь вид $U_{nn'} = \delta_{nn'} \exp(i\alpha_n)$ и, таким образом, максимальная группа симметрии изоморфна прямому произведению однопараметрических циклических (одномерных унитарных) групп — по одной на каждый уровень энергии системы.

Если уровни энергии вырождены, причем кратность вырождения уровня E_n равна λ_n, то матрица U в энергетическом представлении имеет квазидиагональный вид, по диагонали стоят унитарные матрицы U_n размерности λ_n, и максимальная группа изоморфна прямому произведению унитарных групп размерности λ_n, осуществляющих независимые унитарные преобразования в подпространствах собственных функций, соответствующих данному уровню энергии:

$$S = U_1 \times U_2 \times \ldots \times U_n \times \ldots .$$

Из сказанного видно, что группа S имеет тривиальный характер и ни в какой мере не «объясняет», а только «описывает» вырождение. Из всей совокупности неприводимых представлений максимальной группы лишь малая часть реализуется в квантово-механической системе.

В самом деле, неприводимыми представлениями прямого произведения групп будут прямые произведения неприводимых представлений групп-сомножителей. Следовательно, каждому уровню энергии соответствует весьма специальный вид неприводимого представления группы S, когда для всех групп-сомножителей, кроме одной, выбирается единичное представление, а для одной унитарной группы, соответствующей данному уровню энергии, выбирается представление самими унитарными матрицами. Всем остальным представлениям максимальной группы не соответствует ни один уровень энергии системы. Такие группы, которые содержат «лишние» представления, можно назвать избыточными. Мы видим, что максимальная группа является «весьма» избыточной. Примером избыточной группы является также группа четырехмерных вращений Фока [1] по отношению к дискретной части спектра водорода: представления четырехмерной группы вращения имеют размерность $(2l+1)(2l'+1)$, где l, l' — целые или полуцелые числа, а в атоме водорода осуществляется только случай $l = l'$ (четырехмерные сферические функции).

Обычно, когда говорят о группе симметрии системы, то имеют в виду некоторую подгруппу максимальной группы S. Назовем минимальной полной или просто минимальной группой симметрии Σ такую подгруппу S, при которой 1) каждому неприводимому представлению этой группы соответствует по крайней мере один уровень энергии системы; 2) всякая подгруппа группы Σ уже не объясняет полностью вырождения всех уровней, по крайней мере одному уровню энергии соответствует приводимое представление подгруппы, т. е. всякая подгруппа группы Σ является неполной группой симметрии. Примером неполной группы симметрии является группа вращений по отношению к атому водорода.

Так, например, с этой точки зрения n-мерная унитарная группа, определенная в ряде работ [2, 3] для n-мерного изотропного осциллятора, не будет минимальной: минимальной же будет n-мерная унимодулярная унитарная группа.

Указанные условия, определяющие минимальную группу симметрии, очевидно, достаточны для того, чтобы объяснить вырождение. Однако группа симметрии определяется при этом, вообще говоря, неоднозначно, иногда можно построить несколько минимальных групп, причем эти группы операторов будут неизоморфны, т. е. будут отличаться не только унитарным преобразованием. Это особенно легко проследить на примере, когда кратность вырождения всех уровней конечна и когда, следовательно, минимальная группа содержит конечное число элементов. Для однозначного определения необходимы дополнительные условия, связанные с более детальным описанием системы, например требование локальности преобразований группы в координатном, импульсном или другом пространствах, т. е., например, требование, чтобы операторы группы имели вид

$$U\psi(x, y, z) = C(x, y, z)\psi[f_1(x, y, z), \quad f_2(x, y, z), \quad f_3(x, y, z)].$$

Этому требованию удовлетворяют вращения, отражения, трансляции, различные преобразования подобия, т. е. почти все операторы симметрии, используемые обычно в физике.

Из всех этих рассуждений вытекает, например, следующий способ построения минимальной полной группы симметрии системы.

1. Определяем кратности вырождений уровней энергии системы.

2. Подыскиваем такую группу, в которой встречались бы неприводимые унитарные представления именно такой размерности и никакие другие. Эта часть задачи решается, вообще говоря, неоднозначно.

3. Строим унитарные (или инфинитезимальные эрмитовские, если группа непрерывна) операторы, каждый из которых осуществляет в подпространстве данного уровня энергии унитарное преобразование по неприводимому представлению соответствующей размерности. Эта часть задачи решается однозначно, с точностью до общего унитарного преобразования всех операторов.

4. Выражаем эти операторы через канонические переменные, переходя от энергетического к интересующему нас представлению.

Конечно, такая постановка задачи, когда известны уровни энергии и волновые функции и неизвестны свойства симметрии системы, является в большинстве случаев искусственной. Симметрию системы обычно гораздо легче установить, чем решить уравнение Шредингера. То, что это не всегда так, показывают примеры атома водорода и изотропного осциллятора.

Покажем теперь, что, используя приведенную здесь, казалось бы, тривиальную схему, удается решить задачу о группе симметрии анизотропного осциллятора с соизмеримыми частотами. Попытки решить эту задачу делались неоднократно (см., например, [2]).

2. Анизотропный осциллятор

Рассмотрим анизотропный осциллятор с отношением частот 1 : 2. Воспользуемся системой единиц, в которой $\hbar = m = \omega_1 = 1$, $\omega_2 = 2$. Оператор энергии имеет тогда вид

$$H = \tfrac{1}{2}(p_1^2 + p_2^2 + x_1^2 + 4x_2^2).$$

Волновые функции системы $\psi_{n_1 n_2} = \psi_{n_1}(x_1)\,\psi_{n_2}(x_2)$ определяются двумя квантовыми числами n_1 и n_2, принимающими значения $0, 1, 2, \ldots$, а энергия равна

$$E = n_1 + 2n_2 + {}^3/_2 = n + {}^3/_2; \quad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Легко видеть, что первые два уровня невырождены, следующим двум соответствуют по две волновые функции, следующим двум — по три и т. д. Уровню с квантовым числом n соответствует $[n/2] + 1$ функций $\psi_{n,0}$, $\psi_{n-2,1}, \ldots, \psi_{n-2k,k} \ldots$, (знак [ ] означает здесь целую часть числа).

Хорошо известна группа, имеющая представления такой размерности. Это двумерная унитарная унимодулярная группа, которая является накрывающей группой по отношению к группе вращений.

Инфинитезимальные операторы этой группы можно выбрать обычным образом:

$$L_\pm = L_1 \pm iL_2, \quad L_3, \quad L_i L_j - L_j L_i = iL_k,$$

где i, j, k — циклическая перестановка чисел 1, 2, 3. Если представление имеет размерность $2l + 1$ (l — целое или полуцелое), то можно выбрать такие базисные векторы, которые удовлетворяют равенствам

$$L_3 \varphi_m = m\varphi_m, \quad m = -l, -l + 1, \ldots, l;$$

$$L_- \varphi_m = \alpha_{lm}\varphi_{m-1}, \qquad L_+\varphi_{m-1} = \alpha_{lm}\varphi_m, \; \alpha_{lm} = \sqrt{(l + m)(l - m + 1)}.$$

Считая теперь, что совокупность функций $\psi_{n,0}, \psi_{n-2,1}, \ldots$ образует такой базис, причем первая функция соответствует наименьшему значению m, а последняя — наибольшему, получаем

$$l = [n/2]/2, \qquad m = n_2 - l.$$

Таким образом, мы определили операторы L, задав их действие на любую из функций $\psi_{n_1 n_2}$.

Для того чтобы явно выразить $L_\pm$, L_3 через канонические переменные, введем операторы поглощения и рождения квантов:

$$b_1 = 2^{-1/2}(x_1 + ip_1), \quad b_1^+ = 2^{-1/2}(x_1 - ip_1);$$

$$b_2 = x_2 + ip_2/2, \quad b_2^+ = x_2 - ip_2/2,$$

действие которых на волновые функции определяется равенствами

$$b_k\psi_{n_k} = \sqrt{n_k}\,\psi_{n_k-1}, \quad b_k^+\psi_{n_k-1} = \sqrt{n_k}\,\psi_{n_k}, \quad b_k^+ b_k\psi_{n_k} = n_k\psi_{n_k}, \quad k = 1, 2.$$

Используя все эти формулы, получаем для четных n

$$L'_+ = 2^{-1/2} b_1 (b_1^+ b_1)^{-1/2} b_1 b_2^+; \qquad L'_- = 2^{-1/2} b_1^+ (b_1^+ b_1)^{-1/2} b_1^+ b_2;$$

$$L'_3 = (2b_2^+ b_2 - b_1^+ b_1) / 4;$$

и для нечетных n

$$L''_+ = 2^{-1/2} b_1 (b_1 b_1^+)^{-1/2} b_1 b_2^+; \qquad L''_- = 2^{-1/2} b_1^+ (b_1 b_1^+)^{-1/2} b_1^+ b_2;$$

$$L''_3 = (2b_2 b_2^+ - b_1 b_1^+) / 4.$$

Используя оператор проектирования для состояний с четными n

$$P = \cos^2 \frac{\pi}{2} (b_1^+ b_1),$$

можно написать в общем виде для каждой из пар L'_+, L''_+; L'_-, L''_-; L'_3, L''_3

$$L = L' \cos^2 \frac{\pi}{2} (b_1^+ b_1) + L'' \sin^2 \frac{\pi}{2} (b_1^+ b_1).$$

Из самого способа построения видно, что эти операторы коммутируют с H и удовлетворяют нужным перестановочным соотношениям.

В классическом приближении величины L' и L'' совпадают, поскольку они отличаются только последовательностью сомножителей, и мы приходим к классическим интегралам движения для этой системы, которые были получены в работе Хилла и Яуха [2]. Авторы пытались обобщить полученный результат на квантовую область, но это им не удалось, по-видимому, потому, что они не рассматривали раздельно четных и нечетных n.

Мы показали, таким образом, что вырождение в анизотропном осцилляторе можно объяснить с помощью двумерной унитарной унимодулярной группы. То, что эта же группа объясняет вырождение для изотропного осциллятора, было показано ранее [2, 3].

Рассмотренный здесь простейший пример можно обобщить на случай любого рационального отношения частот и на случай осциллятора с любым числом N степеней свободы. В последнем случае минимальной группой симметрии будет N-мерная унитарная унимодулярная группа.

Более подробно анизотропный осциллятор и, в частности, случай любого рационального отношения частот ω_1/ω_2 будет рассмотрен в статье Л. А. Илькаевой, направляемой в журнал «Вестник Ленинградского университета».

Ленинградский государственный университет

Поступила в редакцию 4 января 1963 г.

Литература

[1] В. А. Фок. Zs. f. Phys., 98, 145, 1935.
[2] E. L. Hill, J. M. Jauch. Phys. Rev., 57, 641, 1940.
[3] Ю. Н. Демков. Вестник ЛГУ, *11*, 127, 1953; ЖЭТФ, 26, 757, 1954; 36, 88, 1959. C. A. Baker. Phys. Rev., 103, 1119, 1956. С. П. Аллилуев. ЖЭТФ, 33, 200, 1957.

DETERMINATION OF THE SYMMETRY GROUP OF A QUANTUM SYSTEM. ANISOTROPIC OSCILLATOR

Yu. N. Demkov

The usual definition of the symmetry group as a group of unitary operators which commute with the hamiltonian is insufficient. Concepts of maximal, minimal, incomplete and excessive symmetry groups are introduced. A procedure for setting up the minimal symmetry group is proposed. For this purpose it is sufficient to choose a group with the required dimensions of irreducible representations. As an illustration the problem posed by Jauch and Hill is solved: the symmetry group of an anisotropic oscillator is determined.