Максимальна та мінімальна групи симетрії атома водню

С.А. ВЛАДІМІРОВ, В.І. ФУЩИЧ

Using the representation in which the hydrogen atom Hamiltonian is diagonal, the maximal and minimal symmetry groups of the Schrödinger equation are found. The maximal group contains any finite-dimensional Lee group as a subgroup. The minimal group which determines the spectrum degeneracy, is $SU(2)$ group.

Дослідження прихованих або додаткових симетрій різних рівнянь теоретичної фізики привертає увагу багатьох дослідників [1–11]. В [10] показано, що для знаходження групи інваріантності того чи іншого рівняння найбільш доцільно розв'язувати цю задачу в такому зображенні, де оператор рівняння є діагональним. Саме ця ідея і використовується для рівняння Шредінгера. В цій роботі з'ясовується питання, наскільки істотні теоретико-групові властивості сукупності операторів, які комутують з оператором Гамільтона системи. Виявилось, що максимальна група симетрії занадто широка (вона, наприклад, для атома водню містить в собі будь-яку скінченну групу Лі), а мінімальна група, яка визначає кратність спектра, є універсальною для багатьох систем — це група $SU(2)$.

Показано, що групу D_4 для атома водню виділяє умова, щоб вона як група перетворень у просторі станів містила в собі групу обертань тривимірного простору, що діє також у просторі станів.

§ 1. Максимальна група симетрії

Розглянемо питання про симетрію атома водню

$$\left(-\frac{1}{2}\nabla^2 - \frac{1}{r}\right)\psi = E\psi. \tag{1}$$

Нас цікавлять оператори, які комутують з гамільтоніаном H, тому найбільш зручно перейти до енергетичного зображення. Оскільки мова іде про атом водню, то природно за базис вибрати і власні функції рівняння (1) ψ_{nlm}, які відповідають зв'язаним станам. Ці функції утворюють повну систему в просторі квадратично інтегровних функцій. Надалі будемо вважати, що всі оператори діють у тому ж просторі. Тоді оператор Гамільтона має вигляд

$$H_{nlm}^{n'l'm'} = E_n \delta_n^{n'} \delta_l^{l'} \delta_m^{m'}, \qquad E_n = -\frac{1}{2n^2}. \tag{2}$$

Лінійний оператор V, що комутує з (2), має такі матричні елементи:

$$V_{nlm}^{n'l'm'} = \delta_n^{n'} v_{lm}^{l'm'}. \tag{3}$$

Тут $v_{lm}^{l'm'}$ — довільні комплексні числа, які при фіксованому n утворюють матрицю розмірності n^2 (розмірність матриці дорівнює кратності власного значення E_n). Усі такі невироджені матриці утворюють групу $GL(n^2, C)$. Звідси випливає, що група

Український фізичний журнал, 1976, **21**, № 9, С. 1460–1462.

інваріантності G_L рівняння (1) містить в собі групи $GL(n^2, C)$ при $n = 1, 2, \ldots$, а отже, і будь-яку скінченно-вимірну групу лінійних перетворень. Звідси, згідно з [12], випливає, що будь-яка скінченна група Лі може відігравати роль групи G_L системи (1).

Довільне перетворення симетрії квантової системи, як показано в [13], описується унітарним чи антиунітарним оператором. Обмежуючи групу G_L умовою унітарності, одержуємо групу симетрії рівняння (1):

$$G_S = \underset{n=1,2,\ldots}{\otimes} U(n^2), \tag{4}$$

де $U(n^2)$ — унітарна група в n^2-вимірному комплексному просторі. Рівняння (1) інваріантне відносно комплексного спряження σ, яке не входить до G_L. Доповнивши групу (4) оператором σ, одержимо максимальну групу симетрії рівняння (1):

$$G_L^{\max} = [\underset{n=1,2,\ldots}{\otimes} U(n^2)] \otimes G_\sigma, \qquad G_\sigma = \{1, \sigma\}. \tag{5}$$

Аналогічно для довільного гамільтоніана у випадку дискретного спектра маємо

$$G_S^{\max} = [\underset{n=1,2,\ldots}{\otimes} U(N_n)] \otimes G_\sigma, \tag{6}$$

N_n — кратність виродження власного значення E_n. Для нерелятивістського атома водню $N_n = n^2$, для релятивістського $N_n = 4n - 2$, для довільного обертально-інваріантного рівняння $N_n = 2n - 1$ і т.д.

§ 2. Мінімальна група симетрії

Дослідимо питання про "зменшення" групи, яка забезпечує наявну кратність спектра оператора H. Нехай G_S — група симетрії гамільтоніана H, T_ψ — її зображення у просторі хвильових функцій, $\{T_{li}\}$ — сукупність усіх незвідних зображень з розмірністю l_i групи G_S, які входять в T_ψ. Тоді, згідно з [13], можна стверджувати, що H має власні значення, кратність яких не менша за l_i. Звідси випливає, що групою симетрії оператора H, яка забезпечує необхідну кратність виродження спектра, може бути така група G_E, серед незвідних зображень якої є зображення розмірності l_i при всіх i. Ці вимоги задовольняє група $SU(2)$, яка має незвідні зображення будь-якої цілої та скінченної розмірності $m_i = 2s_i + 1$. Оскільки l_i — ціле, рівняння

$$m_i = 2s_i + 1 = l_1 \tag{7}$$

завжди розв'язується в цілих або півцілих s_i.

Покажемо, що $SU(2)$ є мінімальною за розмірністю групою серед груп G_E. Одновимірна група Лі є абелевою і не може задавати кратність спектра H. Єдина група Лі з G розмірністю, що дорівнює двом, розв'язується [14] і, отже, її незвідні зображення одновимірні. Серед груп Лі з розмірністю, що дорівнює трьом, нам підходить лише група $SU(2)$, оскільки інші групи або розв'язні, або не мають унітарних зображень потрібної розмірності. Для атома водню $l_i = l^2$ і з (7) маємо

$$s_i = \frac{1}{2}(i^2 - 1), \qquad i = 1, 2, \ldots, \tag{8}$$

$$T_\psi = \sum_{i=1,2,\ldots} \otimes T_{s_i}. \tag{9}$$

Таким чином, для довільного рівняння Шредінгера, зв'язані стани якого утворюють базис і кратності різних власних значень не збігаються і скінченні, кратність спектра можна пояснити, виходячи з групи $SU(2)$.

§ 3. Група O_4

З результатів § 1 та § 2 випливає, що теоретико-групові властивості сукупності операторів, які комутують з оператором H, дуже слабо пов'язані з фізичними властивостями системи.

З'ясуємо умови, які виділяють групу O_4 з усіх інших груп симетрії рівняння Шредінгера для атома водню. Зафіксуємо зображення групи обертань фізичного простору в просторі станів атома водню. Тоді підпростір власних функцій ψ_{nlm}, які відносяться до власного значення E_n, утворює звідне зображення T_n групи SO_3.

Розкладаючи T_n на незвідні компоненти, бачимо, що до нього входять по одному разу незвідні зображення групи SO_3 з вагою $0, 1, 2, \ldots, n-1$.

Простим підрахунком можна показати, що серед класичних груп малих розмірностей лише O_4 має при довільному n незвідні зображення розмірності n^2, які, будучи розкладеними по підгрупі SO_3, містять у собі вагу $0, 1, 2, \ldots, n-1$. Таким чином, можна сказати, що використання групи O_4 у випадку атома водню тісно пов'язане з тим, як діє група обертань тривимірного фізичного простору в просторі станів квантової системи.

1. Fok V.A., *Zs. Phys.*, 1936, **98**, 145.
2. Добронравов Ю.А., *Вестник ЛГУ*, 1957, № 10, 5.
3. Аллилуев С.П., *ЖЭТФ*, 1958, **33**, 200.
4. HiII F.M., Jauch J.M., *Phys. Rev.*, 1950, **57**, 641.
5. Демков Ю.М., *Вестник ЛГУ*, 1953, № 11.
6. Переломов А.М., Попов В.С., *ДАН СССР*, 1968, **181**, 320.
7. Малкин И.А., Манько В.И., *Письма в ЖЭТФ*, 1968, **7**, 105.
8. Малкин И.А., Манько В.И., *ЖЭТФ*, 1968, **55**, 287.
9. Малкин И.А., Манько В.И., *Ядерная физика*, 1968, **8**, 1264.
10. Фущич В.И., *ТМФ*, 1971, **7**, № 1, 3–12.
11. Аронсон Э.Б., Малкин И.А., Манько В.И., Физика злементарних частиц й атомного ядра, М., Атомиздат, т. 5, 1974, С. 122.
12. Адо И., О представлении конечных непрерывных групп с помощью линейиых подстановок, *Изв. ФМО, Казань*, 1934/35, **7**, 3.
13. Вигнер Е., Теория групп, М., ИЛ, 1961.
14. Джекобсон Н., Алгебры Ли, М., Мир, 1964.