15

ИНСТИТУТ
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ СОАН СССР

ИЯФ 63 - 72

Б.Г.Конопельченко

ДИНАМИЧЕСКАЯ ГРУППА АТОМА ВОДОРОДА

Новосибирск

1972

Б.Г.Конопельченко

ДИНАМИЧЕСКАЯ ГРУППА АТОМА ВОДОРОДА

А Н Н О Т А Ц И Я

Рассмотрена связь между волновыми функциями дискретного и непрерывного спектра атома водорода и собственными функциями генераторов группы $SO/2,1/$. Показано, что весь спектр атома водорода, как дискретный, так и непрерывный содержится в одном унитарном бесконечномерном неприводимом представлении группы $SO/2,4/$.

B.G.KONOPELCHENKO

DYNAMICAL GROUP OF THE HYDROGEN ATOM

ABSTRACT

Relations between the wave functions of discrete and continuous spectrum of the hydrogen atom and the eigen-functions of generators of the group $SO(2,1)$ are considered.

It is shown that both the discrete and the continuous spectrum of the hydrogen atom are contained in the unitary infinite-dimensional irreducible representations of the group $SO(2,4)$.

Как было показано в работах /1,2/, спектр атома водорода может быть найден из групповых соображений с привлечением алгебры $SO/2,1/$. В работах /3,4/ рассматривалась также связь между волновыми функциями атома водорода и собственными функциями генераторов группы $SO/2,1/$. Однако, в результате использования реализаций алгебры $SO/2,1/$, не связанных непосредственно с атомом водорода, простой связи между волновыми функциями и базисными функциями представлений алгебры $SO/2,1/$ получено не было.

В работе /5/ было показано, что дискретный спектр атома водорода содержится в неприводимом бесконечномерном представлении группы $SO/2,4/$.

В настоящей работе волновые функции дискретного и непрерывного спектра выражены через собственные функции генераторов группы $SO/2,1/$, в реализации тесно связанной с атомом водорода /раздел 1/. В разделе II показано, что как дискретный, так и непрерывный спектры атома водорода содержатся в одном унитарном бесконечномерном неприводимом представлении группы $SO/2,4/$. Рассматривается также связь между алгеброй, порождающей спектр / $SO/2,1/$/, фоковскими алгебрами / $SO/4/$ и $SO/1,3/$/ и алгеброй динамической группы ($SO/2,4/$) раздел III/.

I

Рассмотрим уравнение Шредингера для нерелятивистского атома водорода:

$$\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{\alpha}{r}-E\right)\Psi(\vec{r})=0 \tag{1.1}$$

Следуя работам /1,2/ преобразуем его к виду

$$\left[N_3\left(\eta-\frac{1}{2}\right)-N_1\left(\eta+\frac{1}{2}\right)+\alpha\right]\Psi(\vec{r})=0 \tag{1.2}$$

где $\eta=\frac{E}{m}$.

Операторы

$$N_1=\frac{1}{2}(r\vec{p}^{\,2}-r),$$

$$N_2=\vec{r}\vec{p}-i$$

$$N_3=\frac{1}{2}(r\vec{p}^{\,2}+r).$$

образуют базис алгебры $SO/2,1/$ -

$$[N_1, N_2] = -iN_3, \quad [N_2, N_3] = iN_1, \quad [N_3, N_1] = iN_2$$

Оператор Казимира равен

$$Q = -N_1^2 - N_2^2 + N_3^2 = \ell(\ell+1)$$

где ℓ -орбитальный момент.

Нетрудно убедиться, что уравнение /1,2/ инвариантно относительно преобразований

$$\psi'(\vec{r}') = e^{i\alpha_i N_i + i\beta_i M_i} \psi(\vec{r}) \qquad (i,k = 1,2,3)$$

$$N_k' = e^{i\alpha_i N_i + i\beta_i M_i} N_k e^{-i\alpha_i N_i - i\beta_i M_i} \tag{1.3}$$

где M_i -генераторы группы трехмерных вращений ($[N_i, M_k] = 0$), α_i, β_i -параметры преобразований.

Следовательно, совокупность решений уравнения /1,2/ образует пространство представления группы $SO/2,1/ \otimes SO/3/$.

Рассмотрим частный случай преобразования /1,3/ - гиперболический тильт (см.приложение):

$$\psi'(\vec{r}') = e^{i\theta N_2} \psi(r),$$

$$N_1' = ch\theta N_1 - sh\theta N_3$$

$$N_2' = N_2$$

$$N_3' = -sh\theta N_1 + ch\theta N_3$$

$$\vec{r}' = e^{\theta} \vec{r}, \quad \vec{p}' = e^{-\theta} \vec{p}.$$

Выражая N_1, N_3 через N_1', N_3' получаем

$$\left[\left(\eta e^{-\theta}-\frac{1}{2}e^{\theta}\right)N_3'-\left(\eta e^{-\theta}+\frac{1}{2}e^{\theta}\right)N_1'+\alpha\right]\psi(\vec{r})=0 \tag{1.4}$$

Как известно, при $e^{\theta}=\sqrt{-2\eta}$ мы получаем дискретный спектр $\eta=-\frac{\alpha^2}{2n^2}$, где

$$N_3'(\vec{r}\,')\,\psi_n(\vec{r})=n\,\psi_n(\vec{r}) \tag{1.5}$$

а при $e^{\theta}=\sqrt{2\eta}$ -непрерывный: $\eta=\frac{\alpha^2}{2\nu^2}$

$$N_1'(\vec{r}\,')\,\psi_\nu(\vec{r})=\nu\,\psi_\nu(\vec{r}) \tag{1.6}$$

Выразим волновые функции $\psi_n(\vec{r})$ дискретного спектра через собственные функции оператора N_3 и волновые функции непрерывного спектра $\psi_\nu(\vec{r})$ -через собственные функции оператора N_1.

В силу сферической симметрии

$$\vec{M}^2\psi(\vec{r})=l(l+1)\,\psi(\vec{r})$$

$$\psi_{nlm}(\vec{r})=R_{nl}(\vec{r})\cdot Y_{lm}(\theta,\varphi)$$

и уравнения /1,5/, /1,6/ в сферических координатах принимают вид:

дискретный спектр:

$$r'^2\frac{\partial^2}{\partial r'^2}R_{nl}(r)+2r'\frac{\partial}{\partial r'}R_{nl}(r)+\left[-r'^2+2nr'-l(l+1)\right]R_{nl}(r)=0 \tag{1.7}$$

где $r' = \frac{r}{n}$

непрерывный спектр:

$$r'^2 \frac{\partial^2}{\partial r'^2} R_{\nu e}(r) + 2r' \frac{\partial}{\partial r'} R_{\nu e}(r) + \left[r'^2 + 2\nu r' - e(e+1)\right] R_{\nu e}(r) = 0$$

(1.8)

где $r' = \frac{r}{\nu}$

Собственные функции $\Phi^3_{en}(\vec{r})$ оператора N_3 также факторизуются $\Phi^3_{en}(\vec{r}) = Q^3_{en}(r) \cdot Y_e(\theta, \varphi)$ и функции $Q^3_{en}(r)$ определяются из уравнения

$$r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} Q^3_{en}(r) + 2r \frac{\partial}{\partial r} Q^3_{en}(r) + \left[-r^2 + 2nr - e(e+1)\right] Q^3_{en}(r) = 0$$

(1.9)

Аналогично для собственных функций $\Phi^1_{e\nu}(\vec{r}) = Q^1_{e\nu}(r) \cdot Y_e(\theta, \varphi)$ оператора N_1 имеем

$$r^2 \frac{\partial^2}{\partial r^2} Q^1_{e\nu}(r) + 2r \frac{\partial}{\partial r} Q^1_{e\nu}(r) + \left[r^2 + 2\nu r - e(e+1)\right] Q^1_{e\nu}(r) = 0$$

(1.10)

Сравнивая /1,7/ и /1.8 с /1.9/ и /1.10/ получаем

$$R_{ne}(r) = Q^3_{en}\left(\frac{r}{n}\right), \quad R_{\nu e}(r) = Q^1_{e\nu}\left(\frac{r}{\nu}\right). \qquad (1.11)$$

Решение уравнения /1.9/ имеет вид

$$\overset{3}{Q}_{en}(r) = C_{en}\cdot(2r)^{e}e^{-r}F(-n+e+1, 2e+2, 2r) =$$

$$= C'_{en}\cdot(2r)^{e}e^{-r}L^{2e+1}_{n-e-1}(2r)$$

где $F(\alpha, \beta, x)$ -вырожденная гипергеометрическая функция, $L^{\gamma}_{\delta}(x)$ -обобщенные многочлены Лагерра, C_{en}, C'_{en} -нормировочные константы.

Следовательно, радиальные волновые функции $R_{ne}(r)$ равны

$$R_{ne}(r) = C_{ne}\left(\frac{2r}{n}\right)^{e}e^{-\frac{r}{n}}F\left(-n+e+1, 2e+2, \frac{2r}{n}\right) =$$

$$= C'_{ne}\left(\frac{2r}{n}\right)^{e}\cdot e^{-\frac{r}{n}}\cdot L^{2e+1}_{n-e-1}\left(\frac{2r}{n}\right).$$

Такое же выражение получается и обычным методом /6/, где n - главное квантовое число.

Нетрудно проверить, что функции $\overset{3}{Q}_{en}(r)$ образуют базис унитарного бесконечномерного неприводимого представления группы $S0/2,1/$ принадлежащего $\mathcal{D}^{+}$ серии /2/ с

$$\varphi = -1-e, \quad (Q = \varphi(\varphi+1) = e(e+1)).$$

Скалярное произведение в этих представлениях определяется формулой

$$\int_0^\infty r^2dr\, \overset{3}{Q}_{e'n'}(r)\,\frac{1}{r}\,\overset{3}{Q}_{en}(r) = \delta_{e'e}\cdot\delta_{n'n}. \qquad (1.12)$$

Операторы N_i эрмитовы относительно скалярного произведения /1.12/, в то время как гамильтониан H, в соответствии с /1.1/ и /1.2/ эрмитов относительно скалярного произведения

$$\int_0^\infty r^2 dr\, R_{n'e'}(r)\, R_{ne}(r) = \delta_{n'n}\, \delta_{e'e}$$

Собственные функции оператора N_1, как следует из /1.10/ имеют вид

$$Q^1_{ev}(r) = C_{ev}\,(2r)^e e^{ir} F'(-iv+e+1, 2e+2, -2ir). \tag{1.13}$$

Следовательно, радиальная волновая функция непрерывного спектра равна

$$R_{ve}(r) = C_{ve}\left(\frac{2r}{v}\right)^e e^{\frac{ir}{v}} F'\left(-iv+e+1, 2e+2, -\frac{2ir}{v}\right). \tag{1.14}$$

Вводя "волновой спектр" $K = \frac{1}{\alpha}\sqrt{2h} = -\frac{1}{v}$, убеждаемся, что /1.14/ совпадает с выражением для радиальной волновой функции, получаемой в квантовой механике /6/.

Таким образом, мы показали, что волновые функции дискретного и непрерывного спектра атома водорода (также как и сам спектр) могут быть получены из групповых соображений с использованием алгебры $SO/2.1/$ x).

II

В этом разделе мы рассмотрим динамическую группу атома водорода. Для этих целей удобно перейти к фоковским переменным /8/. В этих переменных волновая функция дискретного спектра удовлетворяет уравнению /9/.

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial\xi_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial\xi_3^2} + \frac{\partial^2}{\partial\xi_4^2}\right)\Psi_n(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) = 0$$

---

x) Отметим, что для гармонического осциллятора операторы N_i имеют.

а волновая функция непрерывного спектра уравнению

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial\xi_1^2}-\frac{\partial^2}{\partial\xi_2^2}-\frac{\partial^2}{\partial\xi_3^2}+\frac{\partial^2}{\partial\xi_4^2}\right)\psi_\nu(\xi_1,\xi_2,\xi_3,\xi_4)=0$$

Как известно, максимальной группой симметрии уравнения

$$g_{ab}\frac{\partial^2}{\partial x^a\partial x^b}\psi(x)=0 \qquad (a,b=1,\dots,p+q)$$

где метрика g_{ab} содержит p плюсов и q минусов, является группа $SO(p+1,q+1)$

Следовательно, волновая функция $\psi_n(\xi)$ дискретного спектра преобразуется по неприводимому представлению E/1.5/ группы

вид /7/

$$N_1=\frac{1}{4}(\vec{P}^2-\vec{r}^2)$$

$$N_2=\frac{1}{2}\left(\vec{r}\vec{P}-\frac{3}{2}\right)$$

$$N_3=\frac{1}{4}(\vec{P}^2+\vec{r}^2)$$

Поскольку $H=2N_3$, то волновые функции гармонического осциллятора совпадают с собственными функциями оператора N_3.

SO/1,5/, а волновая функция $\psi_\nu(\xi)$ непрерывного спектра - по неприводимому представлению E/2,4/ группы SO/2,4/ /10/.

Как показано в работе /11/, волновая функция дискретного спектра преобразуется по неприводимому представлению E/1,4/ группы SO/1,4/. Однако неприводимое представление E/1,4/ группы $SO(1,4)$ является также неприводимым представлением $E(1,5)$ группы $SO(1,5)$ и неприводимым представлением $E(2,4)$ группы $SO(2,4)$. Тем самым, неприводимое представление $E(1,5)$ является неприводимым представлением $E(2,4)$.

Таким образом, волновые функции как дискретного, так и непрерывного спектра принадлежат одному и тому же представлению группы $SO(2,4)$, а именно унитарному неприводимому представлению $E^{0}(2,4)$, принадлежащему абсолютно вырожденной серии /12/. Действительно можно показать, что представление $E^{0}(2,4)$ обладает следующими свойствами.

1) Представление $E^{0}(2,4)$ разлагается в прямую сумму неприводимых представлений группы $SO(4)$

$$E^{0}(2,4) = \sum_{n=1}^{\infty}{}_{\oplus}\, \mathcal{D}_{SO(4)}\left(\frac{n-1}{2}, \frac{n-1}{2}\right). \tag{2.1}$$

Поскольку волновые функции дискретного спектра с фиксированной энергией $E\ \left(E = -\frac{m\alpha^2}{2n^2}\right)$ преобразуются по представлению $\mathcal{D}_{SO(4)}\left(\frac{n-1}{2}, \frac{n-1}{2}\right)$ группы $SO(4)$ /9/, то из /2.1/ следует, что представление $E^{0}(2,4)$ содержит весь дискретный спектр /5/.

2) Представление $E^{0}(2,4)$ разлагается в прямой интеграл неприводимых представлений $\mathcal{D}(0,\nu)$ основной серии группы $SO(1,3)$

$$E^{0}(2,4) = \oplus\int_{0}^{\infty} d\mu(\nu)\, \mathcal{D}_{SO(1,3)}(0,\nu)$$

Волновые функции непрерывного спектра с фиксированной энергией $E\ \left(E = \frac{m\alpha^2}{2\nu^2}\right)$ преобразуются по неприводимому представлению $\mathcal{D}(0,\nu)$ группы $SO(1,3)$ /9/. Следовательно, представление $E^{0}(2,4)$ содержит весь непрерывный спектр атома водорода.

Генераторы L_{AB} /A,B =1,2,3,4,5,6/ группы $SO/2,4/$, являющейся динамической группой атома водорода /13,14/, удовлетворяют перестановочным соотношениям

$$[L_{AB}, L_{CD}] = i(g_{AD}L_{BC} + g_{BC}L_{AD} - g_{AC}L_{BD} - g_{BD}L_{AC}) \tag{3.1}$$

где g_{AB} =/-1,-1,-1,1,-1,1/.

Алгебра $SO/2.1/$, порождающая спектр, расположена в алгебре $SO/2,4/$ следующим образом

$$N_1 = L_{45}\ ,\ N_2 = L_{65}\ ,\ N_3 = L_{46}. \tag{3.2}$$

Из (3.1) и (3.2) следует, что генераторы группы $SO/2,4/$, коммутирующие с N_3, образуют алгебру $SO/4/$; коммутирующие с N_1 -алгебру $SO/1,3/$; одновременно коммутирующие с N_3 и N_1 – алгебру $SO/3/$.

Рассмотрим уравнение /1,2/. Совокупность операторов, коммутирующих с оператором $A = (\eta - \frac{1}{2})N_3 - (\eta + \frac{1}{2})N_1$ образуют алгебру $SO/3/$. Это отражает сферическую симметрию уравнения Шредингера (1,1). Для дискретного спектра $A = -\sqrt{-2\eta}\,N_3' + \alpha$ и, следовательно, группой симметрии дискретного спектра является группа $SO/4/$. В случае непрерывного спектра $A = \sqrt{2\eta}\,N_1' + \alpha$ и группой симметрии является группа $SO/1.3/$.

Таким образом, группа $SO/2.4/$ в совокупности с уравнением /1,2/ дает возможность полностью решить задачу об атоме водорода, т.е. найти спектр, волновые функции и определить дополнительную фоковскую симметрию.

Приложение

Тильтом является линейное преобразование базиса алгебры $SO(2,1)$ /2/, которое сохраняет перестановочные соотношения. В алгебре возможны два гиперболических тильта (вращения в плоскостях 1-3, 2-3) и один эллиптический (вращение в плоскости 1-2).

Поскольку преобразованные операторы N_i' удовлетворяют тем перестановочным соотношениям, что и N_i и

$$
\begin{aligned}
N_1' &= \frac{1}{2}\left(r'\vec{p}'^{\,2} - r'\right)\\
N_2' &= \vec{r}'\vec{p}' - i\\
N_3' &= \frac{1}{2}\left(r'\vec{p}'^{\,2} + r'\right)
\end{aligned}
\qquad (\Pi.1)
$$

то, очевидно, что преобразование $\vec{r} \to \vec{r}'$, $\vec{p} \to \vec{p}'$ является каноническим.

При вращении в плоскости 1-3

$$
\begin{aligned}
N_1' &= e^{i\theta N_2} N_1 e^{-i\theta N_2} = ch\theta N_1 - sh\theta N_3,\\
N_2' &= e^{i\theta N_2} N_2 e^{-i\theta N_2} = N_2,\\
N_3' &= e^{i\theta N_2} N_3 e^{-i\theta N_2} = -sh\theta N_1 + ch\theta N_3.
\end{aligned}
\qquad (\Pi.2)
$$

Из (П.1) и (П.2) следует

$$
\begin{aligned}
r'\vec{p}'^{\,2} - r' &= ch\theta(r\vec{p}^{\,2} - r) - sh\theta(r\vec{p}^{\,2} + r)\\
\vec{r}'\vec{p}' &= \vec{r}\vec{p}\\
r'\vec{p}'^{\,2} + r' &= -sh\theta(r\vec{p}^{\,2} - r) + ch\theta(r\vec{p}^{\,2} + r)
\end{aligned}
$$

отсюда получаем

$$\vec{r}\,' = e^{\theta}\vec{r}\,, \quad \vec{p}\,' = e^{-\theta}\vec{p}\,.$$

Соответствующие выражения для эллиптического и второго гиперболического тильта могут быть получены аналогично.

Литература

1. Y. Nambu, In. Proc. 1967 Intern. Conf. Particles and Fields, New York, (1967).

2. В.Ф.Дмитриев, Ю.Б.Румер, ТМФ, 5, 276 (1970).

3. L. Armstrong, Jr, J. Math. Phys., 12, 953(1971).

4. M. J. Cunnigham, J. Math. Phys., 13, 33(1972).

5. И.А.Малкин, В.И.Манько, ЯФ, 9, 184 (1969).

6. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Физматгиз. 1963.

7. P. Cordero, Lett. Nuovo Cim., 4, 164(1970).

8. V. A. Fock, Zs. Phys., 98, 145(1935).

9. А.М. Переломов, П.С. Попов, ЖЭТФ, 50, 179(1966)

10. M. Bander, C. Itzykson, Rev. Mod. Phys., 38, 330, 346 (1966).

11. A.O. Barut, P. Budini, C. Fronsdal, Proc. Roy. Soc., A 291, 106 (1966).

12. Tsu Yao, J. Math. Phys., 9, 1615(1968).

13. H. Kleinert, Fort. Phys., 16, 1 (1968)

14. P. Cordero, G. C. Ghirardi, Fort. Phys., 20, 105 (1972).

Ответственный за выпуск Б.Г.Конопельченко
Подписано к печати 6.1X-72г. МН 10483
Усл. 0,8 печ.л., тираж 200 экз. Бесплатно.
Заказ № 63 . ПРЕПРИНТ

Отпечатано на ротапринте в ИЯФ СО АН СССР, вг.