Министерство высшего и среднего специального образования РСФСР
Куйбышевский государственный университет

А. В. Горохов

МЕТОДЫ ТЕОРИИ ГРУПП В ЗАДАЧАХ КВАНТОВОЙ ФИЗИКИ

Учебное пособие к спецкурсам

Часть I

Куйбышев 1977

ВВЕДЕНИЕ

Методы теории групп находят широкое применение во многих разделах современной теоретической физики при установлении общих свойств рассматриваемых физических систем. Так, содержание специальной теории относительности тесно связано со свойствами группы преобразований пространства-времени Минковского. Особенно полезными методы теории групп и их представлений оказались в квантовой физике. Однако до недавнего времени в физике использовалось сравнительно небольшое число групп, например, таких как группа вращений, точечные и кристаллографические группы в трехмерном пространстве, группы перестановок (в теории атомов, молекул, твердых тел) и группа Пуанкаре (в релятивистской квантовой теории поля).

Новый интерес к теоретико-групповым методам и их применению в физике был стимулирован работами Гелл-Манна и Неемана, в которых представления группы $SU(3)$ были с успехом использованы для классификации адронов. В результате дальнейших обобщений возникло новое направление - метод групп динамической симметрии. Под группой динамической симметрии (употребляется также более удачное название "группа, порождающая состояния") понимают группу, унитарное неприводимое представление которой действует в гильбертовом пространстве всех состояний системы. Для большинства интересных систем гамильтониан имеет бесконечное число неэквивалентных собственных векторов, поэтому группа динамической симметрии является, как правило, некомпактной. При этом оказалось, что на язык теории групп можно перевести такие важные задачи, как расчет энергетического спектра, вероятностей переходов, построение векторов состояний системы и т.п. Важный вклад в развитие метода динамических симметрий внесли советские ученые (Я.И.Грановский, Ю.Н.Демков, И.А.Малкин, В.И.Манько, А.М.Переломов, В.С.Попов, Ю.Б.Румер, Ю.Л.Шелепин и др.).

К настоящему времени по динамическим симметриям и их применению к решению конкретных задач имеется обширная литература. По некоторым разделам теории есть обзорные работы (из них самыми доступными являются обзор [33] и сборники статей [25 , 47 , 54]). Учебная литература на русском языке по данным вопросам пока отсутствует.

В предлагаемом учебном пособии рассмотрены некоторые аспекты применения метода теории групп динамической симметрии в нерелятивистской квантовой физике. Учебное пособие написано на основе части курса лекций, который автор читает на физическом факультете КГУ с 1971 года.

Первая часть пособия состоит из четырех параграфов. В §1 вводятся основные идеи и определения теории групп и алгебр Ли, необходимые в дальнейшем.

В § 2 приведен обзор (дираковского) формализма квантовой механики и рассмотрены общие вопросы описания принципов симметрии. В качестве примера изучена галилеевская инвариантность и проведена классификация элементарных нерелятивистских квантовых систем.

Материал §§ 1,2 является хорошо известным и приведен в учебном пособии для того, чтобы сделать содержание более замкнутым и ввести читателя в круг исследуемых задач.

В § 3 сформулированы основные идеи метода динамических симметрий и рассмотрены примеры построения групп динамической симметрии в случае гармонического осциллятора и атома водорода. Отмечена связь метода групп динамических симметрий и когерентных состояний квантовых систем.

В § 4 рассмотрены квантовые системы с эквидистантным спектром. На примере гармонического осциллятора показано, что группу динамической симметрии можно искать в виде подгруппы группы канонических преобразований классического аналога квантовой системы. Показано также, что задачу о расчете вибронных переходов по многоатомной молекуле и анализ некоторых нестационарных систем (нестационарного сингулярного осциллятора) можно полностью выполнить с помощью теоретико-групповых методов.

В каждом параграфе имеются задачи, которые требуют обязательного решения, так как их содержание активно используется в тексте.

Автор глубоко благодарен профессору А.Д.Ершову, по предложению которого написано это учебное пособие, профессорам Я.И.Грановскому, М.А.Ковнеру и доценту А.А.Бирюкову за полезные обсуждения и С.Ю. Пичугину за помощь в проведении некоторых расчетов.

§ I. ГРУППЫ И АЛГЕБРЫ ЛИ

Приведем в сжатой форме необходимые для дальнейшего определения идеи теории представлений групп (и алгебр) Ли. Подробное изложение затрагиваемых здесь вопросов можно найти в книгах [I-I0].

Iа) Группа Ли и однородные пространства

Группой G называется множество элементов $g_1, g_2, \ldots$, на котором определен закон композиции $G \times G \to G$ (умножение), согласно правилу $(g_1, g_2 \in G) \longrightarrow g_1 \cdot g_2 \in G$, удовлетворяющий аксиомам:

I. $g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3) = (g_1 \cdot g_2) \cdot g_3$ (ассоциативность) для любых $g_1, g_2, g_3 \in G$.

2. Существует "единичный" элемент e (или I) такой, что $e \cdot g = g \cdot e = g$, $g \in G$.

3. Для каждого $g \in G$ существует обратный элемент g^{-1}: $g^{-1} \cdot g = g \cdot g^{-1} = e$.

Если для всех $g_1, g_2 \in G$ выполняется соотношение $g_1 \cdot g_2 = g_2 \cdot g_1$, то группа называется коммутативной (или абелевой). $H \subset G$ называется подгруппой группы G, если $g_1 g_2 \in H$, для всех $g_1, g_2 \in H$, $g^{-1} \in H$, для $g \in H$.

Подгруппа называется инвариантной подгруппой (или нормальным делителем), если $g h g^{-1} \in H$ для $g \in G$, $h \in H$.

Множество элементов gH (т.е. множество всех элементов gh, $g \in G$ и фиксирован, а h пробегает подгруппу H) называется левым смежным классом; аналогично множество Hg называется правым смежным классом. Если H - инвариантная подгруппа, то её правые и левые смежные классы совпадают, и в множестве всех смежных классов можно ввести структуру группы, которая называется фактор-группой G по подгруппе H и обозначается G/H. Группа G при этом называется расширением группы H.

Если инвариантная подгруппа H абелева, то её обычно называют центром группы G.

Рассмотрим теперь взаимные отображения групп.

Изоморфизм. Говорят, что группы G и G' изоморфны, если имеется взаимнооднозначное соответствие между элементами G и G'.
$g_1 \cdot g_2 \longleftrightarrow g_1' g_2'$, если $g_1 \longleftrightarrow g_1'$; $g_2 \longleftrightarrow g_2'$.

Изоморфные группы отличаются только названием элементов.

Гомоморфизм. Это много-однозначное отображение группы G на G', сохраняющее отображение. Изоморфизм группы G на себя называется автоморфизмом. Принято различать внутренние автоморфизмы (отображения вида: $g \leftrightarrow g_0^{-1} g g_0$). Все другие автоморфизмы называются внешними.

<u>Задача I</u>. Показать, что все автоморфизмы группы G образуют группу $Aut\, G$, называемую группой автоморфизмов группы G.

Пусть задан гомоморфизм $G \xrightarrow{f} G'$. Множество элементов C группы G, отображающихся в единицу e' группы G', называется ядром гомоморфизма: $C = \ker f$.

<u>Задача 2</u>. Показать, что ядро гомоморфизма G на G' есть инвариантная подгруппа группы G.

<u>Прямое произведение</u>. Говорят, что группа G является прямым произведением групп G' и G'' ($G = G' \otimes G''$), если её элементами являются упорядоченные пары $g = (g', g'')$ с законом умножения :

$$(g_1', g_1'')(g_2', g_2'') = (g_1' \cdot g_2', \ g_1'' \cdot g_2'').$$

Прямое произведение двух произвольных групп всегда можно определить. Если же одна из групп $\mathcal{A}$ есть группа автоморфизмов группы Γ, то для Γ и $\mathcal{A}$ можно определить их полупрямое произведение $\Gamma \boxtimes \mathcal{A}$. Пусть $\mathcal{A} \subset Aut(\Gamma)$, $\gamma \in \Gamma$, $A \in \mathcal{A}$; $A(\gamma)$ есть образ элемента γ при автоморфизме A.

Рассмотрим упорядоченные пары (γ, A) с законом умножения $(\gamma_1, A_1)(\gamma_2, A_2) = (\gamma_1 \cdot A_1(\gamma_2), \ A_1 A_2)$.

Множество таких пар и образует полупрямое произведение.

<u>Простые</u> и <u>полупростые</u> группы. Простые группы не имеют нетривиальных инвариантных подгрупп. Полупростые группы не имеют абелевых инвариантных подгрупп.

<u>Накрывающая группа</u>. Пусть Z_1 подгруппа центра Z группы G. Рассмотрим фактор-группу $\Gamma = G/Z_1$; говорят, что G является накрывающей группой группы Γ.

Пусть $\mathcal{M}$ некоторое пространство; преобразованием пространства называется взаимнооднозначное отображение $\mathcal{M}$ на себя. Если x точка пространства $\mathcal{M}$ ($x \in \mathcal{M}$), а g преобразование $\mathcal{M}$ ($\mathcal{M} \xrightarrow{g} \mathcal{M}$), обозначим через $g \cdot x$ образ точки x ($x \xrightarrow{g} g \cdot x$). В множестве всех преобразований легко ввести структуру группы, называемой <u>группой преобразований</u> пространства $\mathcal{M}$. В дальнейшем мы будем интересоваться тем случаем, когда G группа Ли, $\mathcal{M}$ - дифференцируемое многообразие[ж)] [5,6] и действие G в $\mathcal{M}$ определено (в локальных координатах) дифференцируемыми функциями (для определения

ж) Напомним, что многообразием (или n - многообразием) называется множество, окрестность каждой точки которого гомеоморфна открытому шару евклидова пространства R_n.

группы Ли достаточно потребовать, чтобы множество элементов G, на котором определена структура абстрактной группы, было одновременно дифференцируемым многообразием и чтобы групповые операции были дифференцируемыми в локальных координатах).

Пусть x точка пространства $\mathcal{M}$. Множество всех элементов $g \in G$, оставляющих точку x неподвижной, т.е. удовлетворяющих соотношению $g \cdot x = x$, образует подгруппу $G^x \subset G$, называемую <u>стационарной подгруппой</u> точки x.

Множество всех точек $\mathcal{M}$, получаемых в результате действия всех элементов группы G на фиксированную точку $x \in \mathcal{M}$, называется <u>орбитой</u> группы G и обозначается Gx. Говорят, что G действует <u>транзитивно</u> на $\mathcal{M}$ (или что $\mathcal{M}$ однородное пространство группы G), если $G \cdot x = \mathcal{M}$, для любой (фиксированной) точки $x \in \mathcal{M}$. Очевидно, что G действует транзитивно на каждой орбите.

Если $G \cdot x \neq \mathcal{M}$, то говорят что G действует <u>интранзитивно</u>.

В том случае, когда $\mathcal{M}$ однородное пространство группы G, то его можно полностью восстановить, зная G и G^x для одной точки x из $\mathcal{M}$. Пусть H подгруппа группы G, обозначим $H \backslash G$ множество всех левых классов смежности. Группу G при этом можно рассматривать как группу преобразований на $H \backslash G$: $g_0 \in G$, действуя на класс gH, переводит его в класс $g_0 g H$. Заметим, что однородное пространство $\mathcal{M} = Gx$ можно отождествить с пространством $G^x \backslash G$: так как $g G^x x = gx$, то тем самым каждой точке пространства $\mathcal{M}$: $x' = g \cdot x$ ставится во взаимнооднозначное соответствие левый класс смежности $g G^x$

<u>Задача 3.</u> Показать, что отождествление однородного пространства $\mathcal{M}$ с <u>фактор-пространством</u> $G^x \backslash G$ не зависит от выбора точки x.

Кратко остановимся на одном примере, важном в физических приложениях. Пусть $\mathcal{M}_{1,3}$ пространство Минковского (пространство четыре-векторов $x = (x^0, x^1, x^2, x^3)$ специальной теории относительности со скалярным произведением:

$$(x \cdot y) = x^0 y^0 - x^1 y^1 - x^2 y^2 - x^3 y^3. \qquad \text{(I)}$$

Линейное преобразование $x' = \Lambda x + a$, сохраняющее квадрат четыре-интервала $(x-y, x-y)$ между событиями x и y, образует группу Пуанкаре $\mathcal{P}$.

Матрицы Λ образуют подгруппу группы $\mathcal{P}$ – однородную группу Лоренца $\mathcal{L}$. Трансляции a порождают четырехмерную абелеву группу трансляций T_4.

Задача 4. Показать, что пространство Минковского

$$\mathcal{M}_{1,3} = \mathcal{Z} \setminus \mathcal{P}. \qquad (2)$$

Задача 5. Показать, что группа Пуанкаре является полупрямым произведением,

$$\mathcal{P} = T_4 \boxtimes \mathcal{Z}. \qquad (3)$$

Задача 6. Пусть $\bar{C}$ – замкнутая комплексная плоскость. Рассмотреть в $\bar{C}$ дробнолинейные преобразования:

а) $\quad z \longrightarrow \dfrac{\alpha z + \beta}{-\bar{\beta} z + \bar{\alpha}}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1;$

б) $\quad z \longrightarrow \dfrac{\alpha z + \beta}{\bar{\beta} z + \bar{\alpha}}, \quad |\alpha|^2 - |\beta|^2 = 1.$

Проверить, что а),б) определяют группы преобразований: а) группу $SU(2)$, б) группу $SU(1,1)$ (см.далее § I).

Построить в $\mathbb{C}$ орбиты этих групп.

Вернемся к обсуждению свойств групп Ли. Из приведенного ранее определения следует, что группы Ли являются частным случаем топологических групп (на абстрактном множестве G определены структура а) группы и б) дифференцируемого n-многообразия и, следовательно, топологического пространства).

В зависимости от устройства группы G как топологического пространства вводятся определение связной или несвязной, компактной или некомпактной группы.

Две группы Ли G и G' называются локально изоморфными, если существует такое гомеоморфное отображение их окрестностей единицы, что если произведение $g_1 g_2$ элементов окрестности также лежит в этой окрестности, то ему соответствует элемент $g_1' \cdot g_2'$ второй окрестности, причем g_1' и g_2' соответствуют g_1 и g_2.

Оказывается (см. подробнее в [2]), что среди всех групп Ли, локально изоморфных между собой, имеется одна максимальная группа, которую называют универсальной накрывающей группой, и все локально изоморфные группы являются её фактор-группами по её дискретному центру. Универсальная накрывающая группа обладает тем важным свойством, что всякую замкнутую кривую можно с помощью непрерывной деформации кривой в группе стянуть в точку (односвязность).

Задача 7. Показать, что группа $SU(2)$ – универсальная накрывающая группы $SO(3)$, причем

$$SO(3) = SU(2)/Z_2. \qquad (4)$$

$SU(2)$ – группа 2×2 унитарных, унимодулярных матриц $\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{I}$, $\det U = 1$; Z_2 – центр в группе $SU(2)$, состоящий из матриц $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$; $SO(3)$ – группа 3 x 3 ортогональных, унимодулярных вещественных матриц $R^T R = I$, $\det R = 1$. Конструкция (4) находит применение в квантовой теории углового момента (спина).

Важным примером групп Ли являются группы $GL(V)$ линейных преобразований линейного векторного пространства V

$$\vec{x}\,' = \hat{\Lambda}\vec{x}, \tag{5}$$

где $\hat{\Lambda}$ - обратимый линейный оператор.

Изоморфизм группы Ли некоторой подгруппы $GL(V)$ называется точным линейным представлением, а группа Ли - линейно представимой. Оказывается, что всякая группа Ли локально изоморфна некоторой линейно представимой группе (теорема Адо). Приведем примеры (и обозначения) так называемых классических групп: $GL(n,R)$ и $GL(n,C)$ - группы всех обратимых $n\times n$ вещественных и комплексных матриц, соответственно $SL(n,R)$ и $SL(n,C)$ являются их инвариантными подгруппами матриц с определителем равным единице. $O(n,R)$ - подгруппа группы $GL(n,R)$, состоящая из ортогональных матриц. $O(n,C)$ является такой же подгруппой группы $GL(n,C)$. $SO(n,R) = SL(n,R)\cap O(n,R)$ - группа n-мерных вращений. Аналогично $SO(n,C) = SL(n,C)\cap O(n,C)$. $Sp(n,C)$ является подгруппой $SL(2n,C)$, сохраняющей невырожденную кососимметричную форму. $U(n)$ - унитарная подгруппа $GL(n,C)$. $SU(n) = U(n)\cap SL(n,C)$. Все группы, за исключением $O(n,R)$, являются связными. Все полупростые, за исключением групп $GL(n,R)$, $GL(n,C)$ и $U(n)$.
Группы $U(n)$, $SU(n)$, $O(n,R)$, $SO(n,R)$ - компактные, остальные группы являются некомпактными (локально компактными, т.е. имеющими компактную окрестность для любого элемента).

Задача 8. Проверить сделанные утверждения о классических группах.

1б). Алгебра Ли

Оказывается, что изучение групп Ли в значительной мере сводится к гораздо более простому объекту - алгебрам Ли.

Пусть G - группа Ли. Однопараметрической подгруппой в G называется отображение $t \to g(t)$, устанавливающее гомоморфизм между G и аддитивной группой вещественных чисел, т.е.

$$g(t'+t'') = g(t')\,g(t''). \tag{6}$$

Введем определение представления группы G. Линейным представлением группы G в пространстве V называется её гомоморфизм в некоторую подгруппу группы $GL(V)$, т.е. каждому элементу $g\in G$

ставится в соответствие линейное преобразование $\hat{T}(g)$:

$$\hat{T}(g)\, v = u \ , \qquad u, v \in V.$$

Размерность пространства V называется тогда размерностью представления (для многих приложений V может быть и бесконечномерным). Предполагается, что V топологическое векторное пространство, т.е. в нем определено понятие предела. Это позволяет ввести производную $dv(t)/dt$ кривой $t \to v(t)$ в V

$$\frac{dv}{dt} = \lim_{\Delta t \to 0} \left(v(t+\Delta t) - v(t) \right) / \Delta t.$$

Пусть $\hat{T}$ линейное представление G в V, $t \to g(t)$ – однопараметрическая подгруппа группы G. Линейное преобразование $\hat{A}: V \to V$ называется <u>инфинитезимальным генератором</u> однопараметрической группы $t \to \hat{T}(g(t))$ линейного преобразования, если

$$\hat{A}(v) = \frac{d}{dt} T(g(t))(v)\Big|_{t=0} = \lim_{t \to 0} \frac{T(g(t))v - v}{t}. \qquad (7)$$

Будем предполагать, что каждая однопараметрическая подгруппа G имеет инфинитезимальный генератор (если V конечномерно и если G действует на V как группа преобразований, то это условие выполняется). Обратно, если $\hat{A}$ инфинитезимальный оператор, то он порождает однопараметрическую подгруппу ("орбиту" элемента $v \in V$): $t \to \hat{T}(g(t))v = v(t)$, удовлетворяющую линейному дифференциальному уравнению:

$$\frac{d\, v(t)}{dt} = \hat{A}\left(v(t) \right) , \qquad v(0) = v. \qquad (8)$$

Если (8) имеет единственное решение, то

$$v(t) = \underline{exp}\,(t\hat{A})(v), \qquad (9)$$

где

$$exp(t\hat{A})(v) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(t\hat{A})^n (v)}{n!}. \qquad (10)$$

Заметим, что в случае бесконечномерного пространства V может возникнуть проблема с областью определения инфинитезимального генератора $\hat{A}$, т.е. $\hat{A}$ может быть неограниченным оператором.

Рассмотрим множество всех однопараметрических подгрупп $\{g(t)\}$, в пространстве V в соответствии с (7) им будет отвечать множество всех инфинитезимальных операторов $\{\hat{A}\}$. Покажем, что в $\{\hat{A}\}$ (которое по сути дела является касательным пространством к единице группы операторов $\hat{T}(g)$) можно естественно ввести структуру алгебры Ли. Алгебру Ли, отвечающую группе G, будем обозначать $\underset{\sim}{G}$.

<u>Вещественной</u> (<u>комплексной</u>) <u>алгеброй Ли</u> $\underset{\sim}{G}$, называется множество (элементы которого будем обозначать большими буквами A, B,

$X, Y, \dots$) удовлетворяющее следующим условием:

I. $\underset{\sim}{G}$ является конечномерным, вещественным (комплексным) векторным пространством.

2. Для любой пары элементов определена билинейная операция

$$(X, Y) \to [X, Y] \in \underset{\sim}{G} \quad , \quad \underset{\sim}{G} \times \underset{\sim}{G} \to \underset{\sim}{G},$$

называемая скобкой Ли (или коммутатором), удовлетворяющим соотношениям;

$$[X, Y] = -[Y, X]; \tag{II}$$

$$[X, \alpha Y + \beta Z] = \alpha[X, Y] + \beta[X, Z] \; ; \alpha, \beta \in \mathbb{R}. (\alpha, \beta \in \mathbb{C}); \tag{I2}$$

$$[X, [Y, Z]] + [Z, [X, Y]] + [Y, [Z, X]] = 0. \tag{I3}$$

Итак, если в множестве инфинитезимальных генераторов ввести скобку Ли в виде коммутатора $(\hat{A}, \hat{B}) \to [\hat{A}, \hat{B}] = \hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}$, то оно превращается в алгебру Ли. Какое отношение коммутатор имеет к однопараметрическим подгруппам?

Рассмотрим инфинитезимальные операторы $\hat{A}$ и $\hat{B}$ и введем четыре однопараметрические подгруппы:

$$\hat{T}(g_1(t)) = \exp t\hat{A} \; ; \; \hat{T}(g_2(t)) = \exp t\hat{B} \; ; \; \hat{T}(g_3(t)) = \exp(t(\hat{A}+\hat{B})); \; \hat{T}(g_4(t)) = \exp(t[\hat{A}, \hat{B}]) \tag{I4}$$

и выясним как однопараметрические подгруппы $g_3(t)$ и $g_4(t)$ связаны с $g_1(t)$ и $g_2(t)$. Для этого нам нужны будут следующие соотношения:

<u>Задача 9.</u> Пусть $\hat{A}$ линейный оператор $V \xrightarrow{\hat{A}} V$, показать, что

$$\exp t\hat{A} = \lim_{n\to\infty} \left(\hat{I} + \frac{t\hat{A}}{n}\right)^n. \tag{I5}$$

<u>Задача I0.</u> Если $\hat{A}$ и $\hat{B}$ - линейные операторы в V, то показать, что выполняются соотношения [6] ;

$$\exp(t(\hat{A}+\hat{B})) = \lim_{n\to\infty} \left[\exp\left(\frac{t\hat{A}}{n}\right) \exp\left(\frac{t\hat{B}}{n}\right)\right]^n; \tag{I6}$$

$$\exp(t[\hat{A}, \hat{B}]) = \lim_{n\to\infty} \left[\exp\left(\frac{\sqrt{|t|}\hat{A}}{n}\right) \exp\left(\frac{\sqrt{|t|}\hat{B}}{n}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{|t|}\hat{A}}{n}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{|t|}\hat{B}}{n}\right)\right]^{n^2}; \tag{I7}$$

$$\left(\sqrt{|t|} \equiv +\sqrt{|t|} \cdot \operatorname{sgn}(t)\right).$$

Соотношения (I6),(I7) представляют собой формулы, связывающие алгебры Ли и группы Ли.

Алгебра Ли $\underset{\sim}{G}$ группы Ли G определяется системой однопараметрических подгрупп группы G. Алгебраические операции, необходимые для введения структуры алгебры Ли, можно ввести следующим образом.

Если $t \to g(t)$ однопараметрическая подгруппа, то произведение числа α и однопараметрической подгруппы $g(t)$ есть однопараметрическая подгруппа $t \to g(\alpha t)$.

Если $t \to g_1(t)$ и $t \to g_2(t)$ однопараметрические подгруппы, то "сумма" этих подгрупп является однопараметрической подгруппой $t \to g_3(t)$:

$$g_3(t) = \lim_{n\to\infty} \left[g_1\left(\frac{t}{n}\right) g_2\left(\frac{t}{n}\right)\right]^n . \qquad (18)$$

"Коммутатором" подгрупп $g_1(t)$ и $g_2(t)$ является однопараметрическая подгруппа $g_4(t)$, "определенная" по формуле,

$$g_4(t) = \lim_{n\to\infty} \left[g_1\left(\frac{\sqrt{|t|}}{n}\right) g_2\left(\frac{\sqrt{|t|}}{n}\right) g_1\left(-\frac{\sqrt{|t|}}{n}\right) g_2\left(-\frac{\sqrt{|t|}}{n}\right)\right]^{n^2} . \qquad (19)$$

Формулы (18) и (19) представляют основу для "интуитивного" введения понятия алгебры Ли для абстрактной группы Ли (строгий подход см. в [5, 6, 9]). Для записи однопараметрических подгрупп будем также использовать символ $exp(tA)$, если A - генератор однопараметрической подгруппы. Пусть $g_1(t) = exp(tA)$, $g_2(t) = exp(tB)$, определим $A+B$, $[A,B]$, так что

$$exp(t(A+B)) = g_3(t) , \qquad exp(t[A,B]) = g_4(t),$$

т.е. $[A,B]$ - определяет закон умножения однопараметрических подгрупп. Заметим, что скобка Ли $[A,B]$ в общем случае не является коммутатором, т.е. представление её в виде $AB-BA$ может не иметь смысла. Для матричных групп $[A,B]$ совпадает с обычным коммутатором.

Пусть $\hat{T}$ - линейное представление группы G операторами в V. Каждой однопараметрической подгруппе $t \to exp(tA) = g(t)$ соответствует однопараметрическая подгруппа в представлении, т.е.

$$\hat{T}(exp(tA))(v) = exp(t\hat{A})(v) \qquad , v \in V .$$

Пусть $\hat{A} = \hat{\tau}(A)$. Рассмотрим $\hat{\tau}$ как отображение $\underset{\sim}{G} \to$ (алгебру Ли линейных операторов, действующих в V). Имеют место соотношения:

$$\hat{\tau}(A+B) = \hat{\tau}(A) + \hat{\tau}(B);$$

$$\hat{\tau}([A,B]) = [\hat{\tau}(A), \hat{\tau}(B)] ,$$

т.е. отображение $\hat{\tau}$ задает линейное представление алгебры Ли $\underset{\sim}{G}$. Рассмотрим снова группу G преобразований многообразия $\mathcal{M}$

и введем на $\mathcal{M}$ пространство функций $x \to f(x) \in \mathcal{F}(\mathcal{M})$.

Определим в $\mathcal{F}(\mathcal{M})$ линейное представление $\hat{T}$ группы G
$g \to \hat{T}(g)$: $[\hat{T}(g)f](x) = f(g^{-1}\cdot x)$.

Пусть $\hat{\tau}$ определяет инфинитезимальный генератор однопараметрической подгруппы $g(t)$ для линейного преобразования на $\mathcal{F}(\mathcal{M})$

$$[\hat{\tau}(A)f](x) \equiv \hat{A} f(x) = \frac{d}{dt} f(\exp(-tA)x)\Big|_{t=0}; \qquad (20)$$

$$[\hat{\tau}(A) f_1 \cdot f_2](x) = f_2\, \hat{\tau}(A)(f_1) + f_1\, \hat{\tau}(A)(f_2). \qquad (21)$$

Оператор $\hat{\tau}(A)$, определенный формулой (20), называют также <u>производной Ли</u>.

Приведем некоторые определения для алгебр Ли $\underset{\sim}{G}$. Поскольку $\underset{\sim}{G}$ является линейным векторным пространством, то в множестве генераторов можно выбрать базис $A_1, \dots, A_n$. Поскольку коммутатор $[A_i, A_j]$, $(i,j=1,\dots,n)$ снова принадлежит $\underset{\sim}{G}$, то мы имеем

$$[A_i, A_j] = C_{ij}^{k} A_k . \qquad (22)$$

В (22) по индексу k подразумевается суммирование от 1 до n. C_{ij}^k - коэффициенты разложения, которые называют <u>структурными постоянными</u>.

Задание структурных постоянных полностью определят алгебру Ли.

<u>Задача 11.</u> Найти соотношения для C_{ij}^k, вытекающие из анти - коммутативности скобки Ли и тождества Якоби (13).

Алгебра Ли называется абелевой или коммутативной, если $[X,Y]=0$ для любых $X, Y \in \underset{\sim}{G}$ (если все $C_{ij}^k \equiv 0$).

Подпространство $\underset{\sim}{H}$ называется подалгеброй $\underset{\sim}{G}$, если $[\underset{\sim}{H},\underset{\sim}{H}] \subset \underset{\sim}{H}$ (т.е. если для любых $X, Y \in \underset{\sim}{H}$, $[X,Y] \in \underset{\sim}{H}$).

Подалгебра $\underset{\sim}{H}$ называется <u>идеалом</u> алгебры $\underset{\sim}{G}$, если $[\underset{\sim}{H}, \underset{\sim}{G}] \subset \underset{\sim}{H}$.

Алгебра Ли $\underset{\sim}{G}$ называется (полупростой) простой, если она не содержит нетривиального, т.е. отличного от 0 и $\underset{\sim}{G}$ (коммутативного) идеала. Линейное пространство $\underset{\sim}{G}' = [\underset{\sim}{G}, \underset{\sim}{G}]$, натянутое на все коммутаторы в $\underset{\sim}{G}$, является идеалом в $\underset{\sim}{G}$, т.к. $[\underset{\sim}{G}', \underset{\sim}{G}] \subset [\underset{\sim}{G}, \underset{\sim}{G}] = \underset{\sim}{G}'$.

Рассмотрим серию $\underset{\sim}{G} \supset \underset{\sim}{G}' \supset \underset{\sim}{G}'' \supset \dots \supset \underset{\sim}{G}^{(k)}$, где $\underset{\sim}{G}^{(k)} = [\underset{\sim}{G}^{(k-1)}, \underset{\sim}{G}^{(k-1)}]$. Если существует число k_0 такое, что для всех $k \geq k_0$ $\underset{\sim}{G}^{(k)} = 0$, то $\underset{\sim}{G}$ называется <u>разрешимой</u> алгеброй Ли. Аналогичная конструкция приводит к определению <u>нильпотентных</u> алгебр Ли. Пусть по определению $\underset{\sim}{G}_0 \equiv \underset{\sim}{G}$, $\underset{\sim}{G}_k = [\underset{\sim}{G}_{k-1}, \underset{\sim}{G}]$, каждое $\underset{\sim}{G}_k$ вновь является идеалом в $\underset{\sim}{G}$. Алгебра $\underset{\sim}{G}$ нильпотентна, если существует такое k_0, что $\underset{\sim}{G}_k = 0$ для всех $k > k_0$.

Каждой алгебре над полем R отвечает алгебра (той же размерности) над полем C. Пусть $\{\hat{A}_\kappa\}$ – базис вещественной алгебры $\underset{\sim}{G}$. Тогда все комплексные линейные комбинации генераторов A_κ образуют комплексное векторное пространство той же (комплексной) размерности. Такая алгебра $\underset{\sim}{G}^c$ называется комплексным расширением алгебры $\underset{\sim}{G}$, если определить (для вещественных чисел a, b, a' и b'):

$$[(a+ib)A_\kappa, (a'+ib')A_e] = \{(aa'-bb')+i(ab'+a'b)\}\cdot[A_\kappa, A_e].$$

$\underset{\sim}{G}$ – называется вещественной реализацией $\underset{\sim}{G}^c$. Могут существовать неэквивалентные вещественные алгебры Ли с изоморфными комплексными расширениями.

<u>Задача I2</u>. Пусть H замкнутая подгруппа в группе G; показать, что алгебра $\underset{\sim}{H}$ является подалгеброй алгебры Ли $\underset{\sim}{G}$.

Обратного соответствия, вообще говоря, нет.

<u>Задача I3</u>. Показать, что локально изоморфные группы имеют совпадающие алгебры Ли.

Следовательно, алгебра Ли $\underset{\sim}{G}$ определяет группу G только с точностью до локального изоморфизма.

Рассмотрим теперь примеры инфинитезимальных операторов некоторых групп преобразования в n – мерном евклидовом пространстве (в декартовых координатах). (Используем обозначение $\frac{\partial}{\partial x_i} = \partial_i$).

<u>Группа $SO(n)$</u>

$$\vec{x}' = \hat{R}\vec{x}, \quad \hat{R} \in SO(n), \quad \hat{R}^T\hat{R} = \hat{I}, \quad \det R = 1.$$

Инфинитезимальными операторами (в пространстве скалярных функций $f(\vec{x})$) являются дифференциальные операторы:

$$\hat{L}_{ij} = x_i\partial_j - x_j\partial_i, \quad i,j = 1,\dots,n. \tag{23}$$

<u>Евклидова группа</u> $E_n = T_n \boxtimes SO(n)$, $\vec{x}' = \hat{R}\vec{x} + \vec{a}$.

Генераторы: $\partial_\kappa, \quad \hat{L}_{ij}, \quad i,j,\kappa = 1,\dots,n.$ (24)

<u>Группа</u> $GL(n,R) = SL(n,R) \otimes \mathcal{D}$.

$$\vec{x}' = \hat{\Lambda}\vec{x}, \quad \det\hat{\Lambda} \neq 0.$$

$\mathcal{D}$ – группа "дилатаций": $\vec{x}' = \rho\vec{x}$, $0 < \rho < \infty$.

Генераторы: $x_i\partial_\kappa$ (Группу дилатации порождает оператор $\vec{x}\cdot\vec{\partial}$).

Группа $SL(n,R)$: $\vec{x}' = \hat{\Lambda}\vec{x}$, $\det\hat{\Lambda} = 1$.

Генераторы: $x_i \partial_k - \frac{1}{n}\delta_{ik}(\vec{x}\cdot\vec{\partial})$. (25)

Аффинная группа $T_n \circledS GL(n,R)$ $\vec{x}' = \hat{\Lambda}\vec{x} + \vec{a}$, $\det\hat{\Lambda} \neq 0$.

Генераторы: ∂_k, $x_j \partial_k$. (26)

Группа проективных преобразований $\approx SL(n+1, R)$

Генераторы: ∂_k, $x_j \partial_k$, $x_j(\vec{x}\cdot\vec{\partial})$. (27)

Конформная группа $C_n \approx SO(n+1, 1)$

Группа $SO(p,q)$ определяется как группа "вращений" псевдоевклидова пространства с метрикой

$$x^1 y^1 + \dots + x^p y^p - x^{p+1} y^{p+1} - \dots - x^{p+q} y^{p+q},$$

т.е. матриц, удовлетворяющих условиям:

$$\hat{\Lambda}^T \hat{g} \hat{\Lambda} = \hat{g}, \quad \text{где } \hat{g} = \begin{pmatrix} \overbrace{1 \; \ddots \; 1}^{p} & 0 \\ 0 & \underbrace{-1 \; \ddots \; -1}_{q} \end{pmatrix} \text{ – метрический тензор.}$$

Группа C_n конформных преобразований евклидова пространства локально изоморфна $SO(n+1,1)$ и определяется формулами:

$$\vec{x}' = \hat{R}\vec{x} + \vec{a}, \quad \hat{R}^T\hat{R} = I, \quad \det\hat{R} = 1.$$

$$\vec{x}' = \rho\cdot\vec{x}.$$

$$\vec{x}' = \frac{\vec{x} - (\vec{x})^2\cdot\vec{b}}{1 - 2\vec{x}\cdot\vec{b} + \vec{b}^2}$$ – специальное конформное преобразование.

Генераторы C_n имеют вид

$$\partial_k, \quad \hat{L}_{jk}, \quad \vec{x}\cdot\vec{\partial}, \quad \vec{x}^2\partial_k - 2x_k(\vec{x}\cdot\vec{\partial}). \qquad (28)$$

Задача 14. Проверить соотношения (23) – (28).

В заключение математического введения остановимся на некоторых определениях теории представлений групп Ли.

1в). Представления групп (и алгебр Ли)

Пусть G – группа Ли, $g \to \hat{T}(g)$ – линейный оператор, действующий в пространстве V. Рассмотрим случай, когда V – гильбертово пространство (т.е. полное линейное векторное пространство со скалярным произведением (u, v)).

Если операторы $\hat{T}(g)$ сохраняют в V скалярное произведение, т.е.

$$(\hat{T}(g)u,\ \hat{T}(g)v) = (u, v)$$

для всех $g \in G$, то $\hat{T}(g)$ называется <u>унитарным</u>.

<u>Задача 15.</u> Показать, что инфинитезимальный генератор $\hat{A}$ унитарного оператора $t \to \hat{T}(g(t))$, определенный по формуле (7) является <u>антиэрмитовым</u>, т.е.

$$(v, \hat{A}u) = -(u, \hat{A}v). \tag{29}$$

Два представления T и T', действующих в пространствах V и V', называются эквивалентными, если существует обратимый оператор $\hat{S}$ из V в V' такой, что при любом $g \in G$

$$\hat{S}\hat{T}(g) = \hat{T}'(g)\hat{S} \quad \text{или} \quad \hat{T}'(g) = \hat{S}\hat{T}(g)\hat{S}^{-1}. \tag{30}$$

Подпространство V_0 пространства V называется инвариантным относительно представления $T(g)$, действующего в V, если $\hat{T}(g)V_0 \subset V_0$ при всех $g \in G$. Подпространство V_1 называется <u>инвариантным дополнением</u> нетривиального инвариантного подпространства V_0. (Тривиальные инвариантные подпространства составляют $\emptyset$ и V), если оно инвариантно и если V можно представить в виде прямой суммы: $V = V_0 \oplus V_1$,

(т.е. если любой элемент $v \in V$ может быть представлен в виде упорядоченной пары $v = (v_0, v_1)$, $v_0 \in V_0$, $v_1 \in V_1$, так что

$$\lambda \cdot v + \mu \cdot u = (\lambda v_0 + \mu u_0,\ \lambda v_1 + \mu \cdot u_1).$$

Представление $T(g)$ в V называется <u>приводимым</u>, если V содержит нетривиальное инвариантное подпространство. В противном случае $T(g)$ называется <u>неприводимым</u>. $T(g)$ называется <u>вполне приводимым</u>, если оно приводимо и если всякое его нетривиальное инвариантное подпространство имеет инвариантное ортогональное дополнение.

Критерий неприводимости представления дает лемма Шура [2]: (приведем формулировку леммы Шура в случае унитарного представления в гильбертовом пространстве).

Пусть представление $T(g)$ является унитарным в пространстве V

т.е. для любого $g \in G$ выполняется соотношение $\hat{T}^{+}(g) = \hat{T}(g^{-1})$ (+ обозначает эрмитовое сопряжение), тогда $\hat{T}(g)$ неприводимо в том случае, когда любой ограниченный линейный оператор , коммутирующий со всеми операторами представления, кратен единичному оператору.

Операторы $\hat{C}$ перестановочные со всеми операторами представления группы чрезвычайно важны в приложениях.

Задача I6. Показать, что оператор $\hat{C}$ коммутирует со всеми инфинитезимальными генераторами, т.е. $[\hat{C}, \hat{A}] = 0$ для всех $\hat{A} \in \hat{\tau}(G)$ В физических приложениях важную роль играют такие инвариантные операторы, которые построены в виде полиномов из инфинитезимальных генераторов группы. Такие инвариантные операторы называются операторами Казимира группы G .

Iг). Группы $SU(2)$ и $SU(1,1)$

В заключение данного параграфа опишем представления часто встречающихся в физических приложениях групп (и алгебр) Ли

$$SU(2) \quad \text{и} \quad SU(1,1) \approx SO(2,1) \approx SO(2,R) \approx Sp(2,R).$$

Группы $SU(2)$ и $SU(1,1)$ являются линейными группами матриц 2×2 , действующими в (двумерном) комплексном пространстве спиноров (двухкомпонентных комплексных объектов),

$$\xi = \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} , \quad \xi_\alpha \in \mathbb{C} , \quad \alpha = 1, 2.$$

Группа $SU(2)$:

$$\xi' = \hat{U}\xi , \quad \hat{U}^{+}\hat{U} = \hat{I} , \quad \det \hat{U} = 1.$$

Группа $SU(1,1)$:

$$\xi' = \hat{h}\xi , \quad \hat{h}^{+}\hat{\sigma}_3\hat{h} = \hat{\sigma}_3 , \det \hat{h} = 1 , \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Алгебры Ли указанных групп устроены следующим образом:

$$SU(2) : \quad [L_j , L_k] = \epsilon_{jkl} L_l , \quad (j,k,l = 1,2,3), \tag{3I}$$

$$\epsilon_{312} = \epsilon_{231} = \epsilon_{123} = 1 , \quad \epsilon_{jkk} = \epsilon_{jjk} = 0 , \ \epsilon_{jkl} = -\epsilon_{kjl} = -\epsilon_{jlk}$$

$$SU(1,1) : [M_1, M_2] = -M_3 , [M_3, M_1] = M_2 , [M_2, M_3] = M_1 . \tag{32}$$

Группы $SU(2)$ и $SU(1,1)$ являются различными вещественными реализациями группы $SL(2,C)$, рассматриваемой над C [3] .

Группа $SU(2)$ – односвязна. Группа $SU(1,1)$ является бесконечносвязной, её универсальную накрывающую обозначают $\widetilde{SU(1,1)}$. С другой стороны группа $SU(2)$ дважды накрывает группу вращений $SO(3)$. Группа $SU(1,1)$ также является дважды накрывающей для трехмерной группы Лоренца $SO(2,1)$. Локальный изоморфизм групп $SU(1,1)\approx SO(2,1)\approx \approx SL(2,R)\approx Sp(2,R)$ в пространствах большей размерности не имеет места. Группа $SU(2)$ – компактна, $SU(1,1)$ – некомпактна. Поэтому все неприводимые унитарные представления группы $SU(2)$ конечномерны, группы $SU(1,1)$ бесконечномерны (за исключением одномерного представления). Удобно определять базисы в алгебрах $su(2)$ и $su(1,1)$ так, чтобы матричные элементы генераторов были устроены одинаково в представлениях обоих алгебр. Введем, так называемые, "повышающие" и "понижающие" операторы:

для $su(2)$: $$\hat{J}_+ = -i\hat{L}_1 + \hat{L}_2\ ,\quad \hat{J}_- = -i\hat{L}_1 - \hat{L}_2,\quad \hat{J}_3 = i\hat{L}_3 \qquad (33)$$

для $su(1,1)$: $$\hat{J}_+ = \hat{M}_1 + i\hat{M}_2\ ;\quad \hat{J}_- = \hat{M}_1 - i\hat{M}_2\ ,\quad \hat{J}_3 = i\hat{M}_2. \qquad (33)$$

Коммутационные соотношения для $su(2)$ и $su(1,1)$ тогда имеют совпадающий вид:

$$[\hat{J}_3, \hat{J}_\pm] = \pm \hat{J}_\pm\ ,\qquad [\hat{J}_+, \hat{J}_-] = 2\hat{J}_3\ . \qquad (35)$$

Однако условия того, чтобы представления групп $SU(2)$ и $SU(1,1)$ были унитарными, различны.

Для $SU(2)$: $$\hat{J}_3^+ = \hat{J}_3\ ,\quad (\hat{J}_+)^+ = \hat{J}_-\ . \qquad (36)$$

Для $SU(1,1)$: $$\hat{J}_3^+ = \hat{J}_3\ ,\quad (\hat{J}_+)^+ = -\hat{J}_-\ . \qquad (37)$$

Оператор Казимира в этих случаях имеет вид:

$$\hat{C} \equiv \hat{J}^2 = \hat{J}_3^2 + \tfrac{1}{2}(\hat{J}_+\hat{J}_- + \hat{J}_-\hat{J}_+) = \hat{J}_3(\hat{J}_3 + I) + \hat{J}_-\hat{J}_+ \qquad (38)$$

Введем канонический базис в пространстве представления (образованный из одновременных собственных векторов операторов $\hat{J}^2$ и $\hat{J}_3$):

$$\hat{J}^2\,|j,m\rangle = j(j+1)\,|j,m\rangle,$$
$$\hat{J}_3\,|j,m\rangle = m\,|j,m\rangle, \qquad (39)$$
$$|j,m\rangle \equiv v_{jm} \in \mathcal{H}(\hat{T}(g)),\quad g\in SU(2),\ (SU(1,1)).$$

Матричные элементы операторов $\hat{J}_\pm$ имеют вид

$$\hat{J}_\pm |j,m\rangle = [(j\mp m)(j\pm m+1)]^{1/2}|j,m\pm 1\rangle. \qquad (40)$$

Числа j и m нумерующие представления и базисные векторы представления, пробегают различные значения для $SU(2)$ и $SU(1,1)$.

Для унитарного неприводимого представления группы $SU(2)$ [3, I4] :

$$j=0,\ \tfrac{1}{2},\ 1,\ \tfrac{3}{2},\ \dots, \qquad m=-j,\ -j+1,\ \dots,\ j-1,\ j. \qquad (41)$$

Для унитарных неприводимых представлений группы $SU(1,1)$ [3] имеются следующие серии:

I) Дискретная (положительная) серия:

$$j=0,\ \tfrac{1}{2},\ 1,\ \tfrac{3}{2},\ \dots, \qquad m=j+1,\ j+2,\ \dots \qquad (42)$$

2) Дискретная (отрицательная) серия

$$j=0,\ \tfrac{1}{2},\ 1,\ \tfrac{3}{2},\ \dots, \qquad m=-j-1,\ -j-2,\ \dots \qquad (43)$$

3) Первая непрерывная главная серия:

$$j=-\tfrac{1}{2}+i\rho,\ \rho \text{ - веществ},\ m=0,\ \pm 1,\ \pm 2,\dots \qquad (44)$$

4) Вторая непрерывная главная серия:

$$j=-\tfrac{1}{2}+i\rho,\ \rho \text{ - вещественное},\ m=\pm\tfrac{1}{2},\ \pm\tfrac{3}{2},\dots \qquad (45)$$

5) Непрерывная дополнительная серия:

$$-1<j<0, \quad m=0, \qquad m=0,\ \pm 1,\ \pm 2,\dots \qquad (46)$$

Кратко рассмотрим матричные элементы операторов конечного поворота.

В случае группы $SU(2)$:

$$\mathcal{D}^j_{mn}(\varphi,\theta,\psi)=\langle j,n|\, e^{-i\varphi J_3}\, e^{-i\theta J_2}\, e^{-i\psi J_3}\,|j,m\rangle = \qquad (47)$$

$$= e^{-i(m\psi-n\varphi)}\, d^j_{mn}(\theta).$$

Здесь $\mathcal{D}^j_{mn}$ - хорошо известные $\mathcal{D}$ - функции Вигнера [3,I3]

$$d^j_{mn}(\theta)=N^j_{mn}\times\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^{m-n}\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{m+n} F\left(-j+m;\, j+m+1;\, m-n+1;\, \sin^2\frac{\theta}{2}\right). \qquad (48)$$

$$N^j_{mn} = \frac{i^{m-n}}{(m-n)!}\left(\frac{\Gamma(j+1+m)\,\Gamma(j+1-n)}{\Gamma(j+1-m)\,\Gamma(j+1+n)}\right)^{\frac{1}{2}}. \qquad (49)$$

Переходя к положительной дискретной серии группы $SU(1,1)$, заменим m и n на числа μ и ν - являющихся собственными значениями оператора J_3 (в представлении $SU(1,1)$) и, подставляя $\theta \to i\beta$ (аналитическое продолжение), находим матричный элемент гиперболического поворота:

$$(\varphi \to \alpha \,, \; \psi \to \gamma)$$

$$T^{j}_{\mu\nu}(\alpha,\beta,\gamma) = \langle j,\mu | e^{-i\alpha J_3} e^{-i\beta J_2} e^{-i\gamma J_3} | j,\nu\rangle = \tag{50}$$

$$= e^{i(\mu\alpha - \nu\cdot\gamma)} \, \Delta^{j}_{\mu\nu}(\beta) \,,$$

$$\Delta^{j}_{\mu\nu}(\beta) = N^{j}_{\mu\nu} \cdot (i)^{\mu-\nu} \left(sh\,\frac{\beta}{2}\right)^{\mu-\nu} \left(ch\,\frac{\beta}{2}\right)^{\mu+\nu} \cdot F\left(-j+\mu, j+\mu+1; \mu-\nu+1; -sh^2\frac{\beta}{2}\right).$$

§ 2. КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКИЙ ФОРМАЛИЗМ И ПРИНЦИПЫ СИММЕТРИИ

2а). Постулаты квантовой теории

В традиционной формулировке квантовой механики, принадлежащей П.Дираку [II] , делается предположение о том, что вся информация о физической системе в момент времени t содержится в функции состояния $|\Psi(t)\rangle$. Говорят, что такая функция описывает "чистые" состояния системы. Предполагается также, что множество функций состояния является линейным пространством. А именно, если $|\Psi_1(t)\rangle$ и $|\Psi_2(t)\rangle$ два возможных состояния, то и любая линейная комбинация:

$$\alpha_1 |\Psi_1(t)\rangle + \alpha_2 |\Psi_2(t)\rangle, \tag{I}$$

где $\alpha_1, \alpha_2 \in \mathbb{C}$, также описывает некоторое состояние системы.

Для любых состояний $|\Psi(t)\rangle$ и $|\varphi(t)\rangle$ вводится скалярное произведение $\langle\Psi(t)|\varphi(t)\rangle$, удовлетворяющее соотношениям:

а) $\qquad \langle\Psi|\varphi\rangle = \overline{\langle\varphi|\Psi\rangle}$

б) $\langle\Psi|\Psi\rangle \geqslant 0$, причем равенство нулю имеет место только для $|\Psi\rangle \equiv 0$.

в) $\langle\Psi|\alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2\rangle = \alpha_1\langle\Psi|\varphi_1\rangle + \alpha_2\langle\Psi|\varphi_2\rangle$,

$$\left(|\alpha_1\varphi_1 + \alpha_2\varphi_2\rangle \equiv \alpha_1|\varphi_1\rangle + \alpha_2|\varphi_2\rangle \right).$$

Итак, множество всех возможных состояний образует векторное пространство, которое предполагается сепарабельным гильбертовым пространством $\mathcal{H}$ [I4] . Существование скалярного произведения позволяет ввести норму состояния

$$\| \Psi \| = +\sqrt{\langle \psi | \psi \rangle}. \qquad (3)$$

Реальные физические состояния могут описывать только векторы $|\psi\rangle$ с конечной нормой, т.е. $\langle \psi|\psi\rangle < \infty$. Физические величины (наблюдаемые) в квантовой механике изображаются самосопряженными операторами, действующими в пространстве $\mathcal{H}$ ($\hat{A}$ -называется самосопряженным оператором, если $\langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle = \overline{\langle \psi|A|\psi\rangle}$ более строгое определение см. в [I4,I6]). Векторы состояния $|\psi\rangle$ описывают систему вероятностным образом. Вероятность $W_\psi(a)$ обнаружить собственное значение a физической величины $\hat{A}$ в состоянии, описываемом вектором $|\psi\rangle$, нормированном на единицу, дается формулой

$$W_\psi(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2. \qquad (4)$$

Здесь $|a\rangle$ - собственный вектор оператора $\hat{A}$, отвечающий (невырожденному) собственному значению a, т.е. $\hat{A}|a\rangle = a|a\rangle$, (если собственное значение a вырождено, то в формуле (4) необходимо провести суммирование по набору всех ортонормированных собственных векторов оператора $\hat{A}$, отвечающих собственному значению a).

Сумма вероятностей всех возможных результатов измерения наблюдаемой $\hat{A}$ равна единице

$$\sum_a W_\psi(a) = \sum_a |\langle a|\psi\rangle|^2 = 1 \qquad (5)$$

Вследствие вероятностной интерпретации два вектора $|\psi\rangle$ и $\alpha|\psi\rangle$ описывают одно и то же физическое состояние, т.к. вектор $|\psi\rangle$ должен быть нормирован на единицу. Следовательно, состояние системы взаимнооднозначно определяется единичным лучем, т.е. множеством векторов, удовлетворяющих условию $\langle \psi|\psi\rangle = 1$ и отличающихся фазовым множителем

$$|\psi'\rangle = e^{i\xi}|\psi\rangle \quad , \ \xi \in R$$

Следует отметить, что состояния, отождествленные с единичными лучами, нельзя складывать, принцип суперпозиции имеет место только для ненормированных векторов в $\mathcal{H}$.

Если система находится в состоянии $|\psi\rangle$, то для наблюдаемой $\hat{A}$ имеет смысл лишь среднее значение $\langle \hat{A}\rangle$

$$\langle \hat{A}\rangle = \langle \psi|\hat{A}|\psi\rangle. \qquad (6)$$

В квантовой механике постулируется, что для любой физической системы всегда можно выполнить набор одновременных измерений, не нарушающих друг друга и результаты которых однозначно определяют состояние системы. Можно показать, что измерения двух наблюдаемых совместимы тогда и только тогда, когда соответствующие им операторы коммутируют, т.е.

$$[\hat{A}_1, \hat{A}_2]|\psi\rangle \equiv (\hat{A}_1\hat{A}_2 - \hat{A}_2\hat{A}_1)|\psi\rangle = 0. \tag{7}$$

Набор независимых коммутирующих операторов называется полным набором наблюдаемых. Если операторы $\hat{C}_1, \dots, \hat{C}_n$ образуют полный набор, то по определению любому конкретному набору их собственных значений отвечает лишь один общий собственный вектор (с точностью до нормировки и фазы). Множество всех таких линейно независимых векторов образует удобный ортогональный базис в гильбертовом пространстве. В таком базисе любой вектор $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ можно рассматривать как вектор-столбец, строки которого являются скалярными произведениями $\langle c_1, \dots c_n|\psi\rangle$, называемыми волновой функцией системы в представлении $\hat{C}_1, \hat{C}_2, \dots, \hat{C}_n$. Они имеют смысл амплитуд вероятности обнаружить в состоянии $|\psi\rangle$ значения $c_1, \dots, c_n$ для наблюдаемых $\hat{C}_1, \dots \hat{C}_n$.

Перечисленные постулаты квантовой механики, строго говоря, справедливы только в том случае, когда все наблюдаемые имеют дискретный набор собственных значений.(Дискретный спектр). Однако большинство интересных в физике операторов могут иметь и непрерывный спектр. Простейшим примером является спектр оператора проекции импульса $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ для свободной частицы. Рассмотрим для простоты одномерный случай. Гильбертовым пространством здесь является пространство функций $\mathcal{L}_2(-\infty, \infty)$ со скалярным произведением:

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, \overline{\psi}(x)\, \varphi(x). \tag{8}$$

Легко видеть, что решением уравнения $\hat{p}_x|p_x\rangle = p_x|p_x\rangle$ является функция $\psi_{p_x}(x) = \langle x|p_x\rangle = Const\, e^{\frac{i p_x \cdot x}{\hbar}}$, которая не принадлежит $\mathcal{L}_2(-\infty,\infty)$, т.к. её нельзя нормировать на единицу. В большинстве физических работ по квантовой механике состояния из непрерывного спектра принято нормировать на δ-функцию Дирака:

$$\langle p|p'\rangle = \delta(p-p'). \tag{10}$$

Корректное обоснование такого приема дает понятие оснащенного гильбертова пространства [I4 - I6], однако изложение этого формализма не входит в цели настоящего учебного пособия.

Принципы квантовой механики, изложенные до сих пор, можно назвать "квантовой кинематикой". Сформулируем теперь квантовый динамический постулат: Эволюция вектора состояния во времени задается унитарным оператором $\hat{U}(t,t_0)$:

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \tag{11}$$

Оператор эволюции удовлетворяет соотношениям:

$$\hat{U}(t_0,t_0)=\hat{I}\,,\qquad \hat{U}^+(t,t_0)\hat{U}(t,t_0)=\hat{U}(t,t_0)\hat{U}^+(t,t_0)=\hat{I} \tag{12}$$

и, следовательно, сохраняет скалярное произведение

$$\langle\Psi(t)|\Psi(t)\rangle = \langle\Psi(t_0)|\Psi(t_0)\rangle.$$

Пусть $t = t_0 + \Delta t$, где $|\Delta t| \ll 1$.

Тогда с точностью до первого порядка по Δt можно написать:

$$\hat{U}(t_0+\Delta t, t_0) = \hat{I} + \frac{\partial \hat{U}}{\partial t}\Big|_{t=t_0}\Delta t + \dots = \tag{13}$$

$$= \hat{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0)\cdot\Delta t + \cdots$$

Соотношение (11) можно записать в виде:

$$\frac{|\Psi(t_0+\Delta t)\rangle - |\Psi(t_0)\rangle}{\Delta t} = -\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t_0)|\Psi(t_0)\rangle. \tag{14}$$

В пределе $\Delta t \to 0$ получаем уравнение Шредингера:

$$i\hbar\frac{\partial|\Psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\Psi(t)\rangle. \tag{15}$$

Оператор $\hat{H}(t)$ служит генератором преобразования сдвигов системы по времени и называется гамильтонианом. В квантовой механике гамильтониан играет центральную роль. В стационарном случае, когда $\hat{H}$ не зависит от времени, его собственные значения определяют энергетический спектр системы.

Подставляя (11) в уравнение (15) получим, что

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0)\,,\quad \hat{U}(t_0,t_0)=\hat{I}. \tag{16}$$

В стационарном случае решение операторного уравнения (16) имеет вид:

$$\hat{U}(t,t_0) \equiv \hat{U}(t-t_0) = exp\left[-\frac{i}{\hbar}(t-t_0)\hat{H}\right]. \tag{17}$$

В приведенной формулировке предполагается, что наблюдаемые, такие как импульс, положение, угловой момент и т.п. описываются операторами, не зависящими от времени. Такой способ описания называется картиной Шредингера. Даже если оператор $\hat{A}$ не зависит от времени, то его средние $\langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle$ в общем случае от времени зависят.

Говорят, что наблюдаемая $\hat{C}$ сохраняется или является интегралом движения, если

$$\frac{d}{dt} \langle \psi(t) | \hat{C} | \psi(t) \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi(t_0) | \hat{U}^+(t,t_0)\, \hat{C}\, \hat{U}(t,t_0) | \psi(t_0) \rangle \tag{18}$$

для любого $|\psi(t_0)\rangle \in \mathcal{H}$.

Выполняя дифференцирование с использованием соотношения (16), получаем, что интеграл движения должен удовлетворять операторному уравнению

$$\frac{d\hat{C}}{dt} = \frac{\partial \hat{C}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{C}] = 0. \tag{19}$$

Если оператор $\hat{C}$ от времени явно не зависит, т.е. $\frac{\partial \hat{C}}{\partial t} = 0$, то он сохраняется тогда и только тогда, когда

$$[\hat{H}, \hat{C}] = 0. \tag{20}$$

(т.е. $\hat{H}$ и $\hat{C}$ входят в один полный набор наблюдаемых). Из (20) следует, что

$$[\hat{U}(t,t_0), \hat{C}] = 0. \tag{21}$$

Если $|\psi(t_0)\rangle$ - собственный вектор оператора $\hat{C}$: $\hat{C}|\psi(t_0)\rangle = c|\psi(t_0)\rangle$, то из (21) следует, что и вектор $|\psi(t)\rangle$ является собственным для $\hat{C}$, притом с тем же собственным значением.

Зависимость средних от времени может быть отнесена также и к операторам. Описание, в котором векторы состояния считаются фиксированными во времени, а операторы изменяются со временем по закону

$$\hat{A}_H(t) = \hat{U}^+(t,t_0) \hat{A}(t_0) \hat{U}(t,t_0) , \tag{22}$$

где $\hat{U}(t,t_0)$ - оператор эволюции, называется картиной Гайзенберга.

Если же гамильтониан системы можно представить в виде суммы

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}'(t), \tag{23}$$

где $\hat{H}_0$ - гамильтониан "свободной" системы, а $\hat{H}'(t)$ - взаимодействие, то часто используется картина взаимодействия (см. [II-I3]).

2б). Квантование [5,I8,I9]

До сих пор ничего не было сказано о том, по какому правилу операторы в $\mathcal{H}$ должны ставиться в соответствие физическим величинам. Следует отметить, что наблюдаемые определены с точностью до унитарного преобразования векторов состояния и операторов, сохраняющего средние значения $\langle \hat{A} \rangle$:

$$|\psi\rangle \to \hat{V}|\psi\rangle \;, \quad \hat{A} \to \hat{V}\hat{A}\hat{V}^+ \tag{24}$$
$$\hat{V}\hat{V}^+ = \hat{V}^+\hat{V} = \hat{I}$$

Поэтому соотношения между операторами более важны, чем их явный вид. Мы уже видели, что выяснение возможности одновременного измерения операторов $\hat{A}_1$ и $\hat{A}_2$ требует введения в линейном пространстве всех наблюдаемых билинейной операции - коммутатора. Отсюда ясно, что множество всех наблюдаемых в квантовой теории является (вообще говоря, бесконечномерной) алгеброй Ли со скобкой Ли, представленной коммутатором. Этот факт и используется в переходе от классической механики к механике квантовой.

Рассмотрим классическую систему, состояние которой описывается точкой в $2n$-мерном фазовом пространстве Ω . Точки в Ω задаются обобщенными координатами $(q_1,\dots,q_n) = q$ и обобщенными импульсами $(p_1,\dots,p_n) = p$. Классическая наблюдаемая является вещественно-значной функцией $(q,p) \to f(q,p)$. Такая наблюдаемая порождает однопараметрическую группу преобразований в Ω . Орбита этой группы является решением "уравнения Гамильтона" :

$$\frac{dq}{dt} = \frac{\partial f}{\partial p}(q(t), p(t)), \quad \frac{dp}{dt} = -\frac{\partial f}{\partial q}(q(t), p(t)) \tag{25}$$

(чтобы решение уравнений (25) существовало при всех t необходимо, чтобы функция $f(q,p)$ была "хорошей") и образует одномерную подгруппу группы всех канонических преобразований в Ω , т.е. оставляет инвариантной дифференциальную форму [I7]

$$\omega^2 = \sum_{k=1}^{n} dp_k \wedge dq_k, \tag{26}$$

а также элемент объема $\omega^{2n} = dp_1 \wedge dp_2 \wedge \ldots \wedge dp_n \wedge dq_1 \wedge \ldots \wedge dq_n$ фазового пространства. Обратное также верно: однопараметрическая группа канонических преобразований определяет в соответствии с (I.7.) некоторую классическую наблюдаемую. Тем самым, отображение между классическими наблюдаемыми и инфинитезимальными генераторами группы канонических преобразований взаимнооднозначно. Если $f = const$, то она порождает тождественное преобразование. Введем в множестве классических наблюдаемых структуру алгебры Ли. Для этого рассмотрим изменение наблюдаемой $f_2(q,p)$ "вдоль" группы генерируемой $f_1(q,p)$:

$$\frac{d}{dt} f_2(q(t), p(t)) = \frac{\partial f_2}{\partial p}\frac{dp}{dt} + \frac{\partial f_2}{\partial q}\frac{dq}{dt} = \tag{26}$$
$$= \left(\frac{\partial f_1}{\partial q}\cdot\frac{\partial f_2}{\partial p} - \frac{\partial f_1}{\partial p}\frac{\partial f_2}{\partial q}\right)(p(t), q(t)) = \{f_1, f_2\}(p(t), q(t)).$$

Здесь мы использовали уравнение (25) и ввели скобку Пуассона $\{f_1, f_2\}$ двух наблюдаемых :

$$\{f_1, f_2\} = \frac{\partial f_1}{\partial q}\frac{\partial f_2}{\partial p} - \frac{\partial f_1}{\partial p}\frac{\partial f_2}{\partial q} = \sum_{k=1}^{n}\left(\frac{\partial f_1}{\partial q_k}\cdot\frac{\partial f_2}{\partial p_k} - \frac{\partial f_1}{\partial p_k}\cdot\frac{\partial f_2}{\partial q_k}\right). \tag{27}$$

Легко проверить, что скобка Пуассона удовлетворяет всем свойствам скобки Ли. Предположим теперь, что при переходе к квантовой механике коммутационные соотношения между физическими величинами сохраняются в следующем смысле: пусть $\hat{F}$ - квантовомеханический оператор, отвечающий классической наблюдаемой $f(q,p)$, $\hbar$ - постоянная Планка. Тогда должно выполняться соотношение

$$f_1 \longrightarrow \hat{F}_1, \quad f_2 \longrightarrow \hat{F}_2.$$
$$\{f_1, f_2\} \longrightarrow \{f_1, f_2\}^{\wedge} = i\hbar\,[\hat{F}_1, \hat{F}_2]. \tag{28}$$

Последнее означает, что соответствие $f \to \hat{\tau}(f) = -\frac{i}{\hbar}\hat{F}$ является операторным представлением алгебры Ли классических наблюдаемых. Рассмотрим простейший случай одномерной классической системы. Предположим, что классические наблюдаемые содержат q, p и 1 . Они образуют замкнутую трехмерную (нильпотентную) алгебру Ли $\underset{\sim}{W_1}$:

$$\{q, p\} = 1, \quad \{q, 1\} = \{p, 1\} = 0. \tag{29}$$

Предположим, далее, что $\hat{\tau}(p) = -\frac{i}{\hbar}\hat{P}$, $\hat{\tau}(q) = -\frac{i}{\hbar}\hat{Q}$, $\hat{\tau}(1) = -\frac{i}{\hbar}\hat{Z}$ является неприводимым представлением этой алгебры анти-эрмитовыми операторами в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$. Заметим, что 1

образует центр алгебры W_1, следовательно $-\frac{i}{\hbar}Z$ отличается на константу от единичного оператора (лемма Шура), причем константа должна быть чисто мнимой. Следовательно, Z можно отождествить с оператором единицы $Z=\hat{I}$, тогда для операторов $\hat{Q}$ и $\hat{P}$ имеем

$$[\hat{Q},\hat{P}]=i\hbar\hat{I}. \tag{30}$$

Теорема Стоуна – фон Неймана [20,2I] утверждает, что неприводимое унитарное представление группы Гайзенберга-Вейля W_1 определено единственным образом (с точностью до унитарного преобразования, эквивалентности) выбором константы $\hbar$.

2в). Принципы симметрии

В предыдущем пункте мы видели, что алгебры Ли (а вместе с ними и группы Ли) играют фундаментальную роль как в классической, так и в квантовой механике, определяя структуру множества наблюдаемых и их эволюцию во времени (см. соотношения (27),(I9)).Выясним теперь, что язык теории представлений групп является естественной основой для формулировки принципов симметрии.

Операцией симметрии квантовой физической системы можно назвать соответствие, согласно которому каждому физически реализуемому состоянию $|\psi\rangle$ сопоставляется другое состояние $|\psi'\rangle$, такое, что все вероятности переходов сохраняются,

$$|\langle\varphi'|\psi'\rangle|^2=|\langle\varphi|\psi\rangle|^2. \tag{3I}$$

Предположим, что отображение $|\psi\rangle\to|\psi'\rangle$ взаимно однозначно, т.е. когда $|\psi\rangle$ пробегает все физически реализуемые состояния, то $|\psi'\rangle$ делает то же, если $|\psi\rangle$ и $|\varphi\rangle$ также неэквивалентны. Легко увидеть, что все такие соответствия, удовлетворяющие (3I) описываются унитарными или антиунитарными операторами (оператор $\hat{V}$ называется антиунитарным, если

$$\langle\varphi|\hat{V}^+\hat{V}|\psi\rangle=\langle\psi|\varphi\rangle=\langle\overline{\varphi|\psi}\rangle). \tag{32}$$

Примером симметрии, описываемой антиунитарным оператором,является операция обращения времени [22] . Рассмотрение таких принципов симметрии не входит в цели данного пособия.

Пусть $\hat{U}(g')$ и $U(g'')$ два (унитарных) оператора описывающих симметрию системы, т.е.

$$\hat{\mathcal{U}}(g')|\psi\rangle = |\psi'\rangle \quad , \quad \hat{\mathcal{U}}(g'')|\psi'\rangle = |\psi''\rangle .$$

Предположим, что существует оператор $\hat{\mathcal{U}}(g''\cdot g')$ такой, что $\hat{\mathcal{U}}(g''g')|\psi\rangle = |\psi''\rangle$.

Так как состояние в квантовой механике задается лучем в гильбертовом пространстве, то в общем случае мы имеем закон композиции

$$\hat{\mathcal{U}}(g'')\,\hat{\mathcal{U}}(g') = \exp[i\xi(g'',g')]\,\hat{\mathcal{U}}(g''\cdot g'), \tag{33}$$

где $\xi(g'',g')$ - вещественная функция не абстрактной группе G. Абстрактную группу G можно назвать тогда "группой симметрии" физической системы.

Видно, что в квантовой механике возникают проективные унитарные представления "группы симметрии". Непрерывные проективные унитарные представления конечных групп и групп Ли хорошо изучены. Например, для группы $SO(3,R)$ эти проективные представления находятся во взаимнооднозначном соответствии с неприводимыми унитарными представлениями её накрывающей $SU(2)$. Элементы пространства, в котором действует представление группы $SU(2)$ называются спинорами.

Аналогично связана теория проективных представлений группы Лоренца $\mathcal{L} = SO(3,1)$ и унитарных представлений группы $SL(2,C)$.

В таком, предельно широком смысле любая физическая система обладает "группой симметрии" изоморфной группе автоморфизмов гильбертова пространства $\mathcal{H}$: $Aut(\mathcal{H})$. Ясно, что не все унитарные и антиунитарные операторы имеют равную физическую значимость. Так, часть унитарных операторов описывает просто переход от одного базиса в $\mathcal{H}$ к другому.

Наиболее важны в физике симметрии, связанные с формулировкой принципа относительности, утверждающего существование привилегированного класса (<u>инерциальных</u>) систем отсчета, все физические процессы в которых протекают одинаковым образом.

Хорошо известным примером является требование релятивистской инвариантности относительно группы Пуанкаре - группы движений пространства-времени Минковского (см. задачу I). В нерелятивистской физике аналогичную роль играет требование инвариантности относительно группы Галилея. Группы симметрии такого типа можно на - звать <u>кинематическими</u> группами. Требование симметрии относительно группы кинематической инвариантности $\mathcal{G}$ накладывает очень силь -

ные ограничения на физическую систему, а построение представлений $\mathcal{G}$ может служить основой квантования, т.е. построения квантового аналога классической системы. В частности, классификация неприводимых проективных представлений $\mathcal{G}$ эквивалентна (с некоторыми ограничениями - принцип спектральности [16]) описанию всех возможных элементарных систем (или частиц). При этом под "элементарной частицей" понимают физическую систему, множество векторов, состояния которой образует пространство, в котором действует неприводимое проективное представление группы $\mathcal{G}$.

По теории представлений группы Пуанкаре и вопросам релятивистской квантовой теории имеется обширная и доступная литература [16, 23-28] , поэтому мы кратко остановимся на следствиях галилеевской инвариантности [12, 28-32] .

2г). Галилеевская инвариантность и нерелятивистские элементарные системы

Мы уже отмечали, что в релятивистском случае группа Пуанкаре появляется как группа геометрической симметрии, являясь группой движения пространства-времени Минковского.

В нерелятивистском случае ситуация резко отличается. Геометрическим многообразием здесь является трехмерное евклидово пространство R_3 , группой движения которого является евклидова группа $E(3)=T_3 \boxtimes SO(3)$. Требование инвариантности относительно данной группы не позволяет сформулировать какую-либо динамику. Поэтому вводят время t как дополнительную кинематическую переменную, переходя от трехмерного пространства R_3 к прямому произведению $R_3 \times R_1$ (такая конструкция является отражением того факта, что в нерелятивистской физике нет конечной универсальной скорости и время абсолютно). Заметим, также, что на прямом произведении $R_3 \times R_1$ метрика не вводится (масштабы измерения расстояний в R_3 и временных интервалов в R_1 никак не связаны между собой. В специальной теории относительности существование конечной и универсальной скорости света позволяет ввести единую метрику на всем пространстве-времени).

Принцип относительности Галилея можно сформулировать как постулат эквивалентности класса инерциальных систем отчета, причем правило перехода от одной инерциальной системы отсчета $(\vec{x}, t)$ к другой $(\vec{x}', t')$ дается преобразованиями Галилея:

$$\vec{x}\,' = \hat{R}\,\vec{x} + \vec{V}t + \vec{a} \quad , \qquad t' = t + \tau. \tag{34}$$

Элементом группы Галилея $\mathcal{G}_3$ служит упорядоченное множество $g = (\tau, \vec{a}, \vec{V}, \hat{R})$, здесь $\hat{R} \in SO(3)$, $\vec{V}, \vec{a}, \tau$ – порождают группы трансляций T_3^{V}, T_3^{a} и T_1^{τ} соответственно. Легко проверить, что закон умножения в группе Галилея имеет вид

$$\begin{aligned} g_1 \cdot g_2 &= (\tau_1, \vec{a}_1, \vec{V}_1, \hat{R}_1)(\tau_2, \vec{a}_2, \vec{V}_2, \hat{R}_2) = \\ &= (\tau_1 + \tau_2,\ \vec{a}_1 + \vec{V}_1\tau_2 + \hat{R}_1\vec{a}_2,\ \vec{V}_1 + \hat{R}_1\vec{V}_2,\ \hat{R}_1 R_2). \end{aligned} \tag{35}$$

Группа Галилея имеет структуру

$$\mathcal{G}_3 = \{T_1^{\tau} \otimes T_3^{a}\} \boxminus \{T_3^{V} \boxminus SO(3)\}. \tag{36}$$

Заметим, что группа $\mathcal{G}_3$ не является геометрической группой движений пространства $R_3 \times R_1$. Выпишем алгебру Ли группы $\mathcal{G}_3$. Для этого удобно преобразования (34) записать в матричной форме (матрицами 5 x 5)

$$\begin{pmatrix} \vec{x}\,' \\ t' \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \hat{R} & \vec{V} & \vec{a} \\ 0 & 1 & \tau \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \vec{x} \\ t \\ 1 \end{pmatrix} \tag{34'}$$

$\vec{J}$ – эрмитовый генератор группы $SO(3)$, $\vec{K}$ – генератор специального галилеевского преобразования (галилеевского буста), $\vec{P}$ – генератор трехмерных евклидовых трансляций, H – генератор временных сдвигов. (Все являются матрицами 5 x 5).

<u>Задача I7.</u> Проверить, что коммутационные алгебры Ли $\mathcal{G}_3$ имеют вид

$$[J_k, J_l] = i\epsilon_{kln} J_n$$

$$[J_k, K_l] = i\epsilon_{kln} K_n \tag{37а}$$

$$\tag{37б}$$

$$[J_k, P_l] - i\epsilon_{kln} P_n \tag{37в}$$

$$[K_l, H] = iP_l \tag{37г}$$

$$[J_k, H] = [K_j, K_l] = [P_j, P_l] = [P_j, \hat{H}] = 0 \tag{37д}$$

$$j, k, l - (1,2,3)$$

$$[K_j, P_l] = 0. \tag{37е}$$

Здесь ϵ_{jkl} – антисимметричный по всем индексам тензор Леви-Чивита.

Согласно общим принципам квантовой механики в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ должно реализоваться проективное представление группы симметрии.

В случае группы Пуанкаре проективные представления (как было показано в знаменитой работе Е.Вигнера [29]) сводятся к унитарным представлениям её универсальной накрывающей группы - группы $T_4 \boxtimes SL(2,C)$ (имеет место соотношение $\mathcal{L} \equiv SO(3,1) = SL(2,C)/Z_2$ и группа $SL(2,C)$ - односвязна).

Для операторов проективного представления группы Пуанкаре фазовой множитель $exp(i\xi(g,g')) = \pm 1$.

Группа Галилея $\mathcal{G}$ "патологична" в том смысле, что её проективные представления не эквивалентны унитарным представлениям её универсальной накрывающей, т.е. для группы Галилея фазовый множитель нельзя сделать пробегающим некоторое конечное (или дискретное) множество значений.

Вигнером и Инёню [30] было установлено, что для формулировки квантовой механики необходимо расширить группу $\mathcal{G}_3$ (см.§ I).

Рассмотрим (чтобы сделать более наглядными выкладки) одномерную группу Галилея, т.е. группу преобразований

$$\begin{aligned} x' &= x + vt + a; \\ t' &= t + \tau; \\ g &= (\tau, a, v); \end{aligned} \tag{38}$$

$$g' \cdot g = (\tau', a', v') \cdot (\tau, a, v) = (\tau' + \tau,\ a' + a + v'\tau,\ v' + v).$$

Каждому элементу $g = (\tau, a, v)$ поставим в соответствие 3 x 3 матрицу

$$g = (\tau, a, v) = \begin{pmatrix} 1 & v & a \\ 0 & 1 & \tau \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{39}$$

Одномерная группа Галилея $\mathcal{G}_1$ является трехпараметрической и не абелевой, т.к.

$$(\tau, 0, 0)\cdot(0, 0, v) \neq (0, 0, v)(\tau, 0, 0). \tag{40}$$

Генераторы H, P и K имеют вид

$$\hat{H} = i\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P = -i\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad K = i\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \tag{4I}$$

$$g(\tau, a, v) = \exp(-i\tau H)\exp(iaP)\exp(-ivK). \tag{42}$$

$$[H, P] = 0, \quad [K, P] = 0, \quad [K, H] = iP. \tag{43}$$

Ясно, что (43) частный случай коммутационных соотношений (37).

Рассмотрим проективное представление группы $\mathcal{G}_1$

$$\mathcal{U}(g')\,\mathcal{U}(g) = \exp[i\xi(g', g)]\cdot\mathcal{U}(g'g), \tag{44}$$

т.к. здесь $\xi(g', g)$ – непрерывная функция на группе, Сделаем замену:

$$\mathcal{U}(g) = e^{-i\theta}\,\widetilde{\mathcal{U}}(\theta, g), \tag{45}$$

$$\widetilde{\mathcal{U}}(\theta, g) = e^{i\theta}\,\mathcal{U}(g).$$

Из (44) получаем закон умножения для унитарных операторов $\widetilde{\mathcal{U}}(\theta, g)$.

$$\widetilde{\mathcal{U}}(\theta', g')\,\widetilde{\mathcal{U}}(\theta, g) = \widetilde{\mathcal{U}}(\theta' + \theta + \xi(g', g),\ g'\cdot g). \tag{46}$$

Операторы $\widetilde{\mathcal{U}}(\theta, g)$ можно рассматривать как унитарное представление четырехпараметрической группы $\widetilde{\mathcal{G}}_1$ с элементами (θ, g), (θ – вещественное число, а $g \in \mathcal{G}_1$) и с законом композиции

$$(\theta', g')\cdot(\theta, g) = (\theta' + \theta + \xi(g', g),\ g'\cdot g). \tag{47}$$

Группа $\widetilde{\mathcal{G}}_1$ называется <u>центральным расширением</u> группы $\mathcal{G}_1$. Для завершения процедуры расширения необходимо вычислить функцию $\xi(g', g)$. Обозначим генераторы расширенной группы $\widetilde{\mathcal{G}}_1$: H, P, K, Z; здесь H, P, K имеют прежний смысл, а Z – генератор фазового преобразования. Наиболее общая структура коммутационных соотношений четырехмерной алгебры Ли такова:

$$[H, P] = i\lambda Z, \quad [K, P] = i\mu Z, \tag{48}$$

$$[K, H] = i(P + \nu Z).$$

λ, μ, ν - вещественные числа. Генератор Z коммутирует с H, P и K и поэтому может модифицировать только правые части коммутационных соотношений (43) (группа $\tilde{\mathcal{G}}_1 = T_1^{\theta} \boxminus \mathcal{G}_1$). Перераспределение $P \to P + \nu Z$ исключает параметр ν. λ может появиться только в одномерном случае (так как в трехмерном случае H и Z скалярные операторы, $\vec{P}$ - вектор). В одномерном случае $\lambda = 0$ из-за аргументов, связанных с требованием, чтобы оператор обращения времени и инверсионное пространство являлись автоморфизмами алгебры расширенной группы Галилея. При операции $t \to -t$; $H \to H$, $P \to -P$, $Z \to Z$ (здесь нет оснований для изменения знака), поэтому $\lambda = 0$, чтобы коммутатор остался инвариантным. Параметр μ исключить нельзя. Коммутационные соотношения

$$[H, P] = [K, H] = 0 \quad , [K, P] = i\mu Z \tag{48'}$$

допускают реализацию матрицами 4 x 4:

$$H = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$
$$K = \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i\mu & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \tag{49}$$

Экспоненцируя алгебру операторов (49) получим:

$$\tilde{g} \equiv (\theta, g) = \exp(-i\theta Z)\exp(-i\tau H)\exp(iaP)\exp(-ivK) =$$
$$= \begin{pmatrix} 1 & v & a & 0 \\ 0 & 1 & \tau & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \mu v & \frac{\mu v^2}{2} & \theta & 1 \end{pmatrix}. \tag{50}$$

Непосредственным перемножением матриц $\tilde{g}'$ и $\tilde{g}$ можно убедиться, что закон умножения в группе $\tilde{\mathcal{G}}_1$ выглядит следующим образом:

$$(\theta'; \tau', a', v') \cdot (\theta; \tau, a, v) =$$
$$= (\theta' + \theta + \mu v' a + \tfrac{1}{2}\mu v'^2 \tau;\ \tau' + \tau,\ a' + a + v'\tau,\ v' + v). \tag{51}$$

Задача 18. Проверить соотношения (43),(48),(50),(51).

Из уравнения (51) и (47) видно, что

$$\xi(g',g) \equiv \xi_\mu(g',g) = \mu\left(\tfrac{1}{2}\tau\cdot v'^2 + a\cdot v'\right) . \tag{52}$$

- однопараметрическое семейство, нумеруемое вещественным параметром μ . Аналогичные, но более громоздкие выкладки в трехмерном случае дают центральное расширение $\mathcal{G}_3 \to \widetilde{\mathcal{G}}_3$ (где $\widetilde{\mathcal{G}}_3$ - 11 - параметрическая группа)

$$\widetilde{\mathcal{G}}_3 = \left\{ T_1^{\theta} \otimes \left(T_3^{a} \otimes T_1^{\tau}\right)\right\} \boxminus \left(T_3^{V} \boxminus SU(2)\right).$$

(Группа $SU(2)$ появилась из-за того, что необходимо рассматривать центральное расширение накрывающей группы). Функция $\xi(g',g)$ в трехмерном случае имеет вид:

$$\xi_\mu(g',g) = \mu\left(\tfrac{1}{2}\tau(\vec{v}')^2 + (\vec{v}'\cdot\hat{R}'\vec{a})\right) \tag{52'}$$

Коммутационные соотношения алгебры Ли группы $\widetilde{\mathcal{G}}_3$ аналогичны (37), в которых выражение (37е) заменено на

$$[K_j, P_e] = i\mu\,\delta_{je}\,Z. \tag{53}$$

Задача 19. Проверить, что операторы

$$\mathcal{V} = -\frac{1}{2\mu}\vec{P}^2 + H \quad \text{и} \quad \vec{S}^2 = \sum_{k=1}^{3} S_k^2 , \tag{54}$$

$$S_k = J_k + \frac{1}{\mu}\epsilon_{kej} P_e K_j \tag{55}$$

коммутируют со всеми генераторами алгебры $\widetilde{\mathcal{G}}_3$ и, следовательно, являются её операторами Казимира.

Сделаем подстановку $X_j = \frac{1}{\mu} K_j$, (56)

имеем $\vec{S} = \vec{J} + [\vec{P}\times\vec{X}]$. (55')

Унитарное представление группы $\widetilde{\mathcal{G}}_3$ нумеруется:

1) вещественным числом μ , 2) произвольным вещественным числом $\mathcal{V}$ и 3) целым или полуцелым неотрицательным числом $s = 0, +\frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$. Оператор $\hat{\vec{S}}^2 = \hat{S}_1^2 + \hat{S}_2^2 + \hat{S}_3^2$ является одновременно оператором Казимира группы $SU(2)$ с генераторами $\hat{S}_1, \hat{S}_2, \hat{S}_3$.

Рассмотрим теперь физическую интерпретацию полученных соотношений.

Введем объединение $\bigcup_t \mathcal{H}_t$ гильбертовых пространств $\mathcal{H}_t$, функций $\psi_\sigma(\vec{x},t)$, где $\sigma=-s,\dots,+s$; t - параметр, имеющий смысл времени, $\vec{x}$ - координатный вектор

$$\langle\psi|\varphi\rangle = \sum_{\sigma=-s}^{s} \int_{R_3} d\vec{x}\; \overline{\psi_\sigma}(\vec{x},t)\,\varphi_\sigma(\vec{x},t) \qquad (56)$$

Вектор $\vec{x}$ можно рассматривать как непрерывный спектр оператора $\hat{\vec{X}}$. В пространстве функций $\psi(\vec{x},t)$ представление генераторов алгебры $\widetilde{\mathcal{G}_3}$ имеет вид

$$\left.\begin{aligned} \hat{J}_k &= -i\epsilon_{kej}\,x_e\partial_j - \hat{\Sigma}_k \\ \hat{P}_k &= -i\partial_k \\ \hat{K}_e &= \mu x_e - it\partial_e \\ \hat{H} &= i\partial_t, \qquad \hat{Z} = \hat{I} \ \text{- единичный оператор} \end{aligned}\right\} \qquad (57)$$

Мы положили $\hbar = 1$, $\hat{\Sigma}_k$ - спиновые матрицы (в случае $s=\frac{1}{2}$, совпадающие с матрицами Паули,

$\frac{1}{2}\hat{\sigma}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&1\\1&0\end{pmatrix}$, $\frac{1}{2}\hat{\sigma}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0&-i\\i&0\end{pmatrix}$, $\frac{1}{2}\hat{\sigma}_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1&0\\0&-1\end{pmatrix}$).

Квантовое число s имеет смысл спинового квантового числа. Заметим также, что $[\hat{X}_j, \hat{P}_e] = i\delta_{je}\hat{I}$, последнее согласуется с правилами квантования по Гайзенбергу. Это позволяет интерпретировать оператор $\vec{P}$ - как оператор импульса, а генератор галилеевских бустов $\vec{X} = \frac{1}{\mu}\vec{K}$ - как оператор положения (координаты).

Вспомним, что в классической механике уравнение движения для координаты имеет вид

$$\dot{x}_e = v_e = \{H, x_e\},$$

где H - функция Гамильтона.

Определим квантовомеханический оператор скорости:

$$\hat{V}_e = i[\hat{H}, \hat{X}_e], \qquad (58)$$

а так как $[\hat{H}, \hat{K}_e] = -i\hat{P}_e$, то

$$\hat{V}_e = \frac{1}{\mu}\hat{P}_e. \qquad (58')$$

Кроме того, мы видим, что $\hat{V}_e = \dot{\hat{X}}_e$, следовательно:

$$\dot{\hat{X}}_e = i[\hat{H}, \hat{X}_e]. \tag{59}$$

Соотношения (59) и (58') позволяют интерпретировать генератор сдвигов по времени $\hat{H}$ как гамильтониан, вещественный параметр μ как массу частицы (случай $\mu=0$ требует специального обсуждения [31]). Теперь ясно также, что оператор Казимира $\hat{\mathcal{V}} = \hat{H} - \frac{\hat{\vec{P}}^2}{2\mu}$ имеет смысл внутренней энергии. $\hat{\mathcal{V}}$ играет нетривиальную роль только для составных систем. Рассмотрим свободную бесспиновую частицу (т.е. $s=0$, $\mathcal{V}=0$). Оператор Казимира группы $E(3)$ есть $\hat{\vec{P}}^2$. В собственной системе отсчета частицы

$$\vec{P}^2 = 0. \tag{60}$$

В случае $\widetilde{\mathcal{G}}_3$ имеем

$$\frac{\vec{P}^2}{2\mu} - E = 0, \tag{61}$$

где E – собственное значение оператора $\hat{H}$. Уравнение (60) характеризует одно возможное состояние, тогда как из (61) следует существование семейства состояний с произвольными энергиями $0 \leq E < \infty$.

Отметим, что в случае групп $E(3)$ и $\mathcal{G}_3$ (в отличие от $\widetilde{\mathcal{G}}_3$) нельзя определить спин частицы, точнее он не появляется естественным образом, т.к. оператором Казимира является оператор $\vec{J}\cdot\vec{P}$, а не $\vec{S}^2$.

Уравнение Шредингера также можно вывести. Для свободной частицы

$$\hat{\mathcal{V}}\ \psi(\vec{x},t) = 0, \tag{62}$$

откуда

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(\vec{x},t) = -\frac{1}{2\mu}\vec{\nabla}^2\psi(\vec{x},t). \tag{62'}$$

Представим $\psi(\vec{x},t) = \varphi_E(\vec{x})e^{-iEt}$, получаем стационарное уравнение Шредингера

$$\left(\frac{1}{2\mu}\vec{\nabla}^2 + E\right)\varphi_E(\vec{x}) = 0. \tag{63}$$

Здесь E появляется как константа разделения и (63) является уравнением на собственные значения в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}(R_3)$. Разделение переменных влечет за собой потерю гилилеевской инвариантности. В самом деле $\vec{\nabla}^2 \sim \vec{P}^2$ - оператору Казимира группы $E(3)$ и уравнение (63) связано с представлениями только этой группы. Последнее, однако, не приводит к потере физической информации, так как вместо представлений группы $E(3)$ с $\vec{P}^2=0$ мы должны использовать представления с $\vec{P}^2 = 2\mu E$.

Итак, требование галилеевской инвариантности и переход к унитарным представлениям расширенной группы $\tilde{G}_3$ полностью определяет динамику свободных частиц и дает классификацию всех нерелятивистских элементарных систем, которые различаются квантовыми числами μ, s (и V для составных систем).

Остановимся в заключении на правиле суперотбора по массе в нерелятивистской квантовой механике. Правилами суперотбора в квантовой теории называют ограничения на принцип суперпозиции физических векторов состояния. Такие ограничения возникают в том случае, когда в множестве всех наблюдаемых имеется хотя бы один оператор коммутирующей со всеми наблюдаемыми (и, следовательно, входящий в любой полный набор) и имеющий спектр собственных значений, состоящий более чем из одной точки.

Суперпозиции физических векторов состояний, относящихся к различным собственным значениям такого оператора,не имеют смысла. Хорошо известным примером является правило суперотбора связанное с сохранением зарядов (электрического, барионного и т.п.) [16,23,27].

В нерелятивистской квантовой механике появляется еще правило суперотбора по массе, т.к. оператор μZ перестановочен и всеми наблюдаемый, а μ - произвольный вещественный параметр (для реализующихся в природе частиц $0 \leq \mu < \infty$).

§ 3. ДИНАМИЧЕСКАЯ СИММЕТРИЯ И ИНТЕГРАЛЫ ДВИЖЕНИЯ

3а). Интегралы движения и симметрии уравнения Шредингера

Для физиков более привычным является такой подход, в котором главную роль играют (дифференциальные) уравнения. Хотя в предыдущем параграфе на примере нерелятивистской квантовой механики было показано, что постулирование принципа относительности (и связанной с ним группы симметрии) полностью заменяет уравнение Шредингера, чаще всего физическое исследование начинается именно с записи уравнений движения. В этом параграфе мы (основываясь на работах [33–38 , 47a]) рассмотрим вопрос о том, что можно понимать под симметрией уравнения.

Пусть $\mathcal{H}$ - гильбертово пространство, $|\psi\rangle$ - его элемент. Рассмотрим уравнение

$$\hat{L}\,|\psi\rangle = 0, \tag{I}$$

где $\hat{L}$ некоторый линейный (дифференциальный) оператор, при этом нас будут интересовать случаи:

$$\hat{L} = i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}; \tag{2}$$

$$\hat{L} = E - \hat{H}. \tag{3}$$

$\hat{H}$ - гамильтониан квантовой системы. Будем рассматривать случай (2) как более общий.

Пусть $\hat{\mathcal{U}}(g)$ - унитарный оператор, действующий в пространстве решений уравнения,

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi\rangle = \hat{H}\,|\psi\rangle. \tag{I'}$$

Если $|\psi(t)\rangle$ некоторое решение, то $\hat{\mathcal{U}}(g)|\psi(t)\rangle$ также некоторое решение, т.е.

$$\frac{i\,\partial}{\partial t}\left(\hat{\mathcal{U}}(g)|\psi(t)\rangle\right) = \hat{H}\,\hat{\mathcal{U}}(g)|\psi(t)\rangle. \tag{4}$$

Пользуясь тем, что $|\psi(t)\rangle$ - произвольное решение, получаем операторное уравнение для $\hat{\mathcal{U}}(g)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathcal{U}}(g) + i[\hat{H}, \hat{\mathcal{U}}(g)] = 0. \tag{5}$$

Последнее означает (см. уравнение (2.20)), что операторы $\hat{\mathcal{U}}(g)$ группы симметрии G_c $(g \in G)$ являются сохраняющимися величинами. В частности,

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\,\hat{\mathcal{U}}(g)\,|\psi(t)\rangle = 0.$$

Если группа G дискретная (как в физике молекул и твердого тела), то с унитарным оператором $\hat{\mathcal{U}}(g)$ можно связать наблюдаемые $\hat{A}(g)$ и $\hat{B}(g)$:

$$\hat{\mathcal{U}}(g) = \hat{A}(g) + i\,\hat{B}(g), \tag{6}$$

где $\hat{A}^{+} = \hat{A}$, $\hat{B}^{+} = \hat{B}$.

Операторы $\hat{A}(g)$ и $\hat{B}(g)$ будут очевидно сохраняющимися.

Если группа G является группой Ли, то линейно-независимые интегралы движения, представленные самосопряженными операторами можно получить, переходя от группы Ли к алгебре Ли $\underset{\sim}{G}$, т.е.построив операторы

$$\hat{A}_\kappa |\psi\rangle = -i\frac{\partial}{\partial\tau_\kappa}\hat{\mathcal{U}}(g(\dots,\tau_\kappa,\dots))|\psi\rangle\Big|_{\dots\tau_\kappa=0\dots} \qquad (7)$$

Из (5) следует аналогичное уравнение и для оператора $\hat{A}_\kappa$:

$$\frac{d\hat{A}_\kappa}{dt} + i[\hat{H}, \hat{A}_\kappa] = 0, \qquad (8)$$

т.е. $\hat{A}_\kappa$ – также интеграл движения.

Между интегралами движения и свойствами симметрии уравнения (I') имеется тесная связь.

Имея в виду, что алгебра Ли однозначно определяет односвязную группу Ли (универсальную накрывающую всех локально изоморфных групп Ли), будем работать с (самосопряженными) инфинитезимальными генераторами операторов $\mathcal{U}(g)$.

Получим важное для дальнейшего соотношение. Пусть $\hat{A}_\kappa$ – интеграл движения, тогда

$$\frac{d}{dt}\langle\psi(t)|\hat{A}_\kappa|\psi(t)\rangle = 0,$$

откуда имеем, что

$$\langle\dot{\psi}(t)|A_\kappa|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\dot{A}_\kappa|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\hat{A}_\kappa|\dot{\psi}(t)\rangle = 0. \qquad (9)$$

Так как $|\dot{\psi}(t)\rangle = -i\hat{H}|\psi(t)\rangle$, то из (9) имеем:

$$i\langle\psi(t)|\hat{H}\hat{A}_\kappa|\psi(t)\rangle + \langle\psi(t)|\dot{A}_\kappa|\psi(t)\rangle + (-i)\langle\psi(t)|\hat{A}_\kappa\hat{H}|\psi(t)\rangle = 0. \qquad (10)$$

Если $\hat{H}^+ = \hat{H}$, то

$$\langle\psi(t)|\left\{\frac{\partial A_\kappa}{\partial t} + i[\hat{H}, \hat{A}_\kappa]\right|\psi(t)\rangle = 0. \qquad (11)$$

Для выполнения (II) достаточно потребовать, чтобы

$$[(i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}), \hat{A}_\kappa]|\psi(t)\rangle = 0 \qquad (12)$$

В алгебре (вообще говоря, бесконечномерной) всех операторов $\{\hat{A}_\kappa\}$ полезно выделить две важные подалгебры $\underset{\sim}{G_0}$ и $\underset{\sim}{G}$.

I. В алгебру $\underset{\sim}{G_0}$ отнесем все те операторы $\hat{A}_\kappa$, которые тождественно коммутируют с $i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}$:

$$\left[\left(i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H} \right), \hat{A}_\kappa \right] = 0. \tag{I3}$$

Будем называть алгебру $\underset{\sim}{G_0}$ (и отвечающую ей группу G_0) алгеброй (группой) точной симметрии уравнения Шредингера (употребляются также названия алгебра инвариантности и алгебра "вырождения" энергетических уровней системы).

Для пояснения смысла названий перейдем к рассмотрению стационарной системы и представим

$$|\Psi(t)\rangle = |\varphi_E\rangle \cdot e^{-iEt}. \tag{I4}$$

Если операторы $\hat{A}_\kappa$ явно не зависят от времени, то

$$[\hat{H}, \hat{A}_\kappa] = 0. \tag{I5}$$

Следовательно, гамильтониан и все генераторы из $\underset{\sim}{G_0}$ имеют общий набор собственных векторов и все векторы, отвечающие фиксированному собственному значению E можно рассматривать в качестве базиса унитарного представления группы G_0. С другой стороны, перечисление всех неэквивалентных унитарных неприводимых представлений группы G_0 соответствует классификации всех возможных энергетических состояний, при этом размерность представления, очевидно, совпадает с кратностью вырождения энергетического уровня E мультиплета. Инвариантные операторы группы G_0 (в соответствии с леммой Шура) позволяют провести "нумерацию" линейно независимых векторов состояния в мультиплете, т.е. собственные значения операторов Казимира задают набор "спектроскопических" квантовых чисел.

2. Алгебру $\underset{\sim}{G}$ построим из тех операторов, которые коммутируют с оператором $i\frac{\partial}{\partial t} - \hat{H}$ лишь на наборе решений уравнения (I'). Такие операторы одно решение уравнения переводят в другое (в общем случае линейно-независимое) решение.

Еще раз рассмотрим стационарный случай. Пусть $|\varphi_E\rangle$ решение уравнения $(E - \hat{H})|\varphi_E\rangle = 0$, тогда

$$\hat{A}_\kappa |\varphi_E\rangle = \sum_{E'} C_{E'} |\varphi_{E'}\rangle, \tag{I6}$$

т.е. оператор $\hat{A}_K$ действует как оператор "сдвига" энергетического спектра гамильтониана, т.е. переводит состояние, принадлежащие одному уровню энергии, в состояние с другими энергиями.

Алгебру $\underset{\sim}{G}$ (группу G) будем называть алгеброй (группой) динамической симметрии [38, 36а, 42, 43] системы.

Для стационарных систем такие алгебры называют также алгебрами, генерирующими спектр [36б] и алгебрами неинвариантности [36в]. Для нестационарных систем, когда энергия не сохраняется, используется название: алгебра, генерирующая состояния.

Ясно, что имеет место включение: $\underset{\sim}{G}_c \subset \underset{\sim}{G}$, т.е. алгебра точной симметрии является подалгеброй алгебры динамической симметрии.

Алгебра $\underset{\sim}{G}_c$ для квантовой системы определена однозначно. В большинстве случаев (для связанных состояний) она является алгеброй Ли некоторой компактной группы ($SU(N)$ - для N-мерного осциллятора, $SO(4)$ - для атома водорода).

Алгебра $\underset{\sim}{G}$ определяется неоднозначно. Сформулируем некоторые требования к $\underset{\sim}{G}$, которые в простых случаях позволяют зафиксировать её. Прежде всего потребуем, чтобы в пространстве решений уравнения (I) реализовалось унитарное неприводимое представление группы G . Поскольку большинство интересных физических систем имеет бесконечный спектр, то группа G должна быть некомпактной (см. § I).

Полезно потребовать также, чтобы G_o была максимальной компактной подгруппой группы G . Последнее резко сужает набор возможных групп динамической симметрии.

Заметим, что с этой точки зрения группа Галилея $\widetilde{\mathcal{G}}_3$ является группой динамической симметрии свободной квантовой системы, т.к. генераторы галилеевских бустов $\vec{K}$ не коммутируют с гамильтонианом и тем самым изменяют энергию системы. Группой точной симметрии свободного уравнения Шредингера является группа $E(3)$.

В работах [39] было показано, что группу Галилея можно расширить до I5-параметрической группы, содержащей дополнительное преобразование

$$t \to \frac{t}{1+\alpha t}, \quad \vec{x} \to \frac{\vec{x} + t^2 \vec{\beta}}{(1+\alpha t)^2}, \qquad (44)$$

также являющейся динамической группой симметрии свободной системы.

Обсудим теперь задачу отыскания явного вида интегралов движения для стационарной системы. Рассмотрим оператор $\hat{A}_к$ вида

$$\hat{A}_к\left(x, \frac{\partial}{\partial x}, t\right) = \hat{B}\left(x, \frac{\partial}{\partial x}\right) f(t)$$

Функция $\hat{A}_к\left(|\varphi_n(x)\rangle e^{-iE_n t}\right)$ должна удовлетворять уравнению Шредингера при любых n

$$i\frac{\partial}{\partial t}\left(f(t)e^{-iE_n t}\right)\hat{B}|\varphi_n(x)\rangle = \hat{H}\,\hat{B}|\varphi_n(x)\rangle f(t)e^{-iE_n t}, \quad (45)$$

последнее уравнение можно переписать в виде:

$$\hat{H}\hat{B}|\varphi_n(x)\rangle = i\frac{\partial}{\partial t}\left[\ln f(t)e^{-iE_n t}\right]\hat{B}|\varphi_n(x)\rangle \quad (46)$$

(при условии, что $f(t) \neq 0$). Откуда видно, что функция $\hat{B}|\varphi_n(x)\rangle$, должна быть пропорциональна собственной функции $|\varphi_m(x)\rangle$ оператора $\hat{H}$ с собственным значением:

$$E_m = i\frac{\partial}{\partial t}\left[\ln f(t)e^{-iE_n t}\right], \quad (47)$$

откуда $f(t) = e^{-i(E_m - E_n)t}$.

Поскольку $f(t)$ не может зависеть от квантовых чисел m и n то $E_m - \hat{E}_n = \Delta E = const$. Заметим также, что оператор $\hat{B}(x, \frac{\partial}{\partial x})$ в этом случае будет совпадать с гайзенберговским оператором $\widetilde{A}_к = \hat{U}^{-1}A_к\hat{U}$, где $\mathcal{U}$ – оператор эволюции. Оператор $\widetilde{A}_к$ повышает или понижает значение энергии на постоянную величину ΔE. Это означает, что, по крайней мере, часть энергетического спектра эквидистантна.

Для систем с более сложным спектром необходимо использовать интегралы движения более сложной структуры.

Легко показать, что

$$[\hat{H}, \widetilde{A}_к] = \Delta E\,\widetilde{A}_к;$$

беря эрмитовое сопряжение, получим:

$$[\hat{H}, \widetilde{A}_к^+] = -\Delta E\,\widetilde{A}_к^+. \quad (48)$$

Исходя из тождества Якоби можно увидеть, что $[\hat{H},[\widetilde{A}_к, \widetilde{A}_к^+]] = 0$. Следовательно, $[\widetilde{A}_к, \widetilde{A}_к^+] = F_к(\hat{H}, \hat{C}_j)$, где $\hat{C}_j$ – генераторы группы точной симметрии (т.е. $[H, C_j] = 0$). Удается ли на таком пути сконструировать алгебру Ли-зависит от вида функции $F_к$.

В том случае, когда спектр гамильтониана $\hat{H}$ известен как функция главного квантового числа n можно применить следующий прием [37] : $\hat{H}$ и $i\frac{\partial}{\partial t}$ при действии на состояния $|\varphi_n(t)\rangle$ дает собственное значение E_n. Уравнение Шредингера преобразовывают к такому виду, чтобы оператор $i\frac{\partial}{\partial t}$ имел спектр, линейный по главному квантовому числу n. Если для нового уравнения удалось найти интегралы движения и группу динамической симметрии, то выполнив обратное преобразование можно найти интегралы движения и группу динамической симметрии для исходного уравнения. Оператор $\hat{\mathcal{D}}$, выполняющий такое отображение, можно найти, если

$$|\Psi(x,t)\rangle = \sum_n C_n \, |\varphi_n(t)\rangle \, e^{-iE_n t}$$

решение уравнения Шредингера, то функция

$$\hat{\mathcal{D}}\,|\Psi(x,t)\rangle = \sum_n C_n |\varphi_n(x)\rangle \, e^{-int}$$

должна быть решением преобразованного уравнения.

Задача 20. Показать, что оператор $\hat{\mathcal{D}}$ является оператором изменения масштаба времени и имеет вид

$$\hat{\mathcal{D}} = \exp\left[\ln\left(\hat{n}(\hat{H})/\hat{H}\right) t \frac{\partial}{\partial t}\right], \tag{49}$$

где

$$\hat{n}(\hat{H})\,|\varphi_n(x)\rangle = n\,|\varphi_n(x)\rangle. \tag{50}$$

Для построения оператора $\hat{n}(\hat{H})$ необходимо знать явную зависимость энергии E_n от главного квантового числа. В работах [37] этим методом были построены группы динамической симметрии гармонического осциллятора и двумерного и трехмерного атома водорода.

Построим, следуя [36a], (см. также обзор [33]) группу динамической симметрии гармонического осциллятора, описываемого гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2\mu} + \frac{1}{2}\mu\omega^2 x^2 = \hbar\omega\left(\hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\right), \tag{51}$$

где

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\mu\omega}\, x + \frac{i}{\sqrt{\mu\omega}}\,\hat{p}\right);$$

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}\left(\sqrt{\mu\omega}\, x - \frac{i}{\sqrt{\mu\omega}}\,\hat{p}\right), \quad [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

операторы рождения и уничтожения (см., например, [13]). Собственные векторы гамильтониана имеют вид

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^+)^n}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle, \tag{52}$$

где $\hat{a}|0\rangle = 0$ (т.е. $|0\rangle$ - вакуумный вектор).

Легко проверить, что

$$[\hat{H}, \hat{a}] = -\hbar\omega\hat{a}; \qquad (53)$$

$$[\hat{H}, \hat{a}^+] = \hbar\omega\hat{a}^+.$$

Рассмотрим операторы

$$\hat{\mathcal{M}}_+ = -\sqrt{\hat{a}^+\hat{a}}\;\hat{a}^+ \;; \quad \mathcal{M}_- = a\sqrt{\hat{a}^+a}\;;$$

$$\hat{\mathcal{M}}_0 = \hat{a}^+\hat{a} + \frac{1}{2}\;,$$

которые удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$[\hat{\mathcal{M}}_0, \hat{\mathcal{M}}_\pm] = \pm\hat{\mathcal{M}}_\pm \;; \quad [\hat{\mathcal{M}}_+, \hat{\mathcal{M}}_-] = 2\hat{\mathcal{M}}_0$$

и являются генераторами алгебры $SU(1,1)$.

Матричные элементы операторов $\mathcal{M}_0$, $\hat{\mathcal{M}}_\pm$:

$$\langle m|\hat{\mathcal{M}}_0|n\rangle = (n+\tfrac{1}{2})\,\delta_{mn}; \qquad (54)$$

$$\langle m|\hat{\mathcal{M}}_+|n\rangle = -(n+1)\,\delta_{m,n+1};$$

$$\langle m|\hat{\mathcal{M}}_-|n\rangle = n\cdot\delta_{m,n-1}.$$

Оператор Казимира $\hat{\mathcal{M}}_0(\mathcal{M}_0+1)+\hat{\mathcal{M}}_-\hat{\mathcal{M}}_+$ имеет собственное значение $-\frac{1}{4}$. Это говорит о том, что в пространстве решений гармонического осциллятора реализуется представление дискретной серии накрывающей группы $\widetilde{SU(1,1)}$. В принципе, если известна динамическая группа (или алгебра) квантовой системы, то её изучение полностью восполняет всю информацию, содержащуюся в уравнении Шредингера. Другими словами, квантовая механика может быть полностью сформулирована на языке теории групп.

Рассмотрим теперь построение групп точной и динамической симметрии на примере атома водорода.

3в). Атом водорода

Уравнение Шредингера для задачи Кеплера (атома водорода) имеет хорошо известный вид:

$$\hat{H}\,\psi^S(\vec{x}) \equiv \left(\frac{1}{2\mu}\hat{P}^2 - \frac{\alpha}{r}\right)\psi^S(\vec{x}) = E\,\psi^S(\vec{x}) \qquad (55)$$

Здесь $\alpha = -Ze^2$, $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$, E – энергия в системе центра масс. $\psi^S(\vec{x})$ – Шредингеровская волновая функция.

Известно, что очевидная группа симметрии уравнения (55) – группа трехмерных вращений, порождаемых операторами углового момента:

$$\hat{\vec{L}} = [\vec{X} \times \hat{\vec{P}}] \tag{56}$$

не объясняет "случайного" вырождения по ℓ энергетических уровней. В.Фоком и В.Баргманом (см. [40,41]) было показано, что группой точной симметрии атома водорода является группа $SO(4) \approx SO(3) \otimes SO(3)$, генераторами которой являются операторы (46) и так называемый вектор Рунге-Ленца $\hat{\vec{A}}$

$$\left(-\frac{\mu}{E}\right)^{\frac{1}{2}} \vec{A} = \vec{N} = \left[-\frac{\mu}{E}\right]^{\frac{1}{2}} \left\{ \frac{1}{2\mu} \left[\vec{L} \times \vec{P} - \vec{P} \times \vec{L} \right] + \frac{\alpha \vec{X}}{r} \right\}, \tag{57}$$

т.е. операторы $\vec{L}$ и $\vec{N}$ являются генераторами неприводимого представления группы $SO(4)$ для фиксированного значения энергии E (дискретного спектра).

<u>Задача 21</u>. Проверить, что

$$[\vec{L}, \hat{H}] = [\vec{N}, \hat{H}] = 0 . \tag{58}$$

Если вместо операторов $\vec{L}$ и $\vec{N}$ ввести их линейные комбинации

$$\vec{J}_1 = \frac{1}{2} (\vec{L} + \vec{N}) , \quad \vec{J}_2 = \frac{1}{2} (\vec{L} - \vec{N}), \tag{59}$$

то

$$[\vec{J}_1, \vec{J}_2] = 0 , \quad [\vec{J}_s, \vec{J}_s] = i \vec{J}_s , \quad s = 1,2.$$

Неприводимое представление группы $SO(4)$ фиксируется двумя квантовыми числами j_1 и j_2, задающими собственные значения операторов Казимира $\hat{J}_1^2$ и $\hat{J}_2^2$:

$$\hat{J}_s^2 \, \psi^S(\vec{x}) = j_s (j_s + 1) \psi^S(\vec{x}), \tag{60}$$

$$j_s = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots \qquad s = 1,2.$$

Так как

$$\vec{L}^2 + \vec{N}^2 = 2(\hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2) , \quad \vec{L} \cdot \vec{N} = \hat{J}_1^2 - \hat{J}_2^2 = 0, \tag{61}$$

то $j_1 = j_2 = j$. Кроме того, справедливо операторное тождество:

$$\hat{H} = -\frac{\mu \alpha^2}{2} \left(\vec{L}^2 + \vec{N}^2 + \hat{I} \right)^{-1} . \tag{62}$$

Для уровня энергии E_n получаем

$$E_n = -\frac{\mu\alpha^2}{2n^2}, \qquad n = 2j+1. \tag{63}$$

Таким образом, уровню энергии атома водорода с главным квантовым числом n отвечает неприводимое представление $\mathcal{D}^{\frac{n-1}{2}} \otimes \mathcal{D}^{\frac{n-1}{2}}$ группы $SO(4) \approx SO(3) \otimes SO(3)$, а его размерность (т.е. кратность вырождения уровней) равна $n^2 = (2j+1)^2$.

В случае сплошного спектра $E>0$ задача Кеплера имеет симметрию группы Лоренца (на состояниях рассеяния с фиксированной энергией реализуется унитарное неприводимое бесконечномерное представление $\mathcal{D}(0, \sqrt{\frac{2}{E}})$ главной серии группы $SO(3,1)$). Для состояний с $E=0$ имеет место симметрия однородной группы Галилея [40] .

Перейдем теперь к построению алгебры динамической симметрии атома водорода. Поскольку энергетический спектр атома водорода не эквивалентны , то не существует повышающих и понижающих операторов простой структуры.

В работах [45,46] указан метод построения повышающих и понижающих операторов, основанный на следующей процедуре: умножив уравнение (55) на " r " слева, получаем

$$\left(r\,\frac{\hat{p}^2}{2\mu} - \alpha - rE\right)\Psi = 0. \tag{64}$$

Можно показать, что

$$[\,r\hat{p}^2, r\,] = -2i\,(\vec{x}\cdot\vec{p} - i);$$
$$[\,\vec{x}\cdot\vec{p} - i, r\,] = -ir;$$
$$[\,\vec{x}\cdot\vec{p} - i,\ r\hat{p}^2] = i\,r\hat{p}^2.$$

<u>Задача 22.</u> Показать, что операторы

$$\hat{B}_1 = \tfrac{1}{2}(r\hat{p}^2 - r)\ ;\quad \hat{B}_2 = \vec{x}\cdot\vec{p} - i\ ;\quad \hat{B}_0 = \tfrac{1}{2}(r\hat{p}^2 + r)$$

удовлетворяют коммутационным соотношениям алгебры $SO(2,1) \approx SU(1,1)$, причем оператор $\hat{B}_0$ порождает компактную однопараметрическую подгруппу и имеет дискретный спектр, а $\hat{B}_1$ и $\hat{B}_2$ - некомпактные подгруппы гиперболических поворотов и имеют непрерывный спектр.

Дополнив операторы $\hat{B}_1, \hat{B}_2$ и $\hat{B}_0$ генераторами группы симметрии $\vec{L}$ и $\vec{A}$, можно убедиться [48] , что замкнутую алгебру образуют следующие I5 операторов $\hat{L}_{ab} = -\hat{L}_{ba}$ $(a, b = 1,\dots,6)$;

$$
\begin{aligned}
L_{ij} &= \epsilon_{ijk}[\vec{x}\times\vec{p}]_k = L_k \quad , i,j,k = 1,2,3; \\
L_{i4} &= -\tfrac{1}{2}x_i\hat{p}^2 + \hat{p}_i(\vec{x}\cdot\vec{p}) + \tfrac{1}{2}x_i = A_i; \\
L_{i5} &= -\tfrac{1}{2}x_i\hat{p}^2 + \hat{p}_i(\vec{x}\cdot\vec{p}) - \tfrac{1}{2}x_i; \\
L_{i6} &= -r\hat{p}_i; \\
\hat{L}_{45} &= \vec{x}\vec{p} - i = \hat{B}_2; \\
\hat{L}_{46} &= \tfrac{1}{2}(r\hat{p}^2 - r) = B_1 \ ; \quad \hat{L}_{56} = \tfrac{1}{2}(r\hat{p}^2 + r) = \hat{B}_0 .
\end{aligned} \tag{65}
$$

Операторы $\hat{L}_{ab}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$
\begin{aligned}
&[\hat{L}_{ab}, \hat{L}_{ac}] = -i g_{aa}\hat{L}_{bc}; \\
&g_{ab} = \begin{cases} -\delta_{ab} & , a,b = 1,\dots,4; \\ +\delta_{ab} & , a,b = 5,6 \end{cases}
\end{aligned} \tag{66}
$$

и являются генераторами унитарного неприводимого представления группы $SO(4,2)$(максимально вырожденный дискретной серии), которое удается связать с состояниями атома водорода. Из (65) и (66) ясно, что операторы $\hat{L}_{12} = \hat{L}_3$, $\hat{L}_{34} = A_3$ и $\hat{L}_{56} = \hat{B}_0$ образуют коммутативную подалгебру.

Рассмотрим базис $|n_1, n_2, m)$, построенный из собственных векторов этих трех операторов:

$$
\begin{aligned}
\hat{L}_{12}|n_1,n_2,m) &= m|n_1,n_2,m); \\
L_{34}|n_1,n_2,m) &= (n_1 - n_2)|n_1,n_2,m); \\
L_{56}|n_1,n_2,m) &= (n_1+n_2+m+1)|n_1,n_2,m) = n|n_1,n_2,m).
\end{aligned} \tag{67}
$$

<u>Задача 23.</u> Проверить, что в параболических координатах ξ, η, φ

$$
x_1 = \sqrt{\xi\eta}\cos\varphi \ ; \quad x_2 = \sqrt{\xi\eta}\sin\varphi;
$$

$$
x_3 = \tfrac{1}{2}(\xi - \eta) \ ; \quad r = \tfrac{1}{2}(\xi + \eta)
$$

векторы $|n_1, n_2, m)$ заданы в виде:

$$
\begin{aligned}
&\langle \xi,\eta,\varphi|n_1,n_2,m) = \psi^{G}_{n_1 n_2 m}(\xi,\eta,\varphi) = \\
&= N_{n_1 n_2 m}\, e^{im\varphi} e^{-\frac{1}{2}(\xi+\eta)} (\xi\eta)^{\frac{1}{2}|m|} F(-n_1, |m|+1; \xi)\, F(-n_2, |m|+1; \eta)
\end{aligned} \tag{68}
$$

$F(a,c;z)$ - вырожденная гипергеометрическая функция. Здесь $\psi^{G}_{n_1 n_2 m}$ - "групповые" состояния, нормированные следующим образом:

$$(n_1', n_2', m' | n_1 n_2 m) = \int d^3x \, \overline{\psi}^{G}_{n_1' n_2' m} \left[\frac{1}{r}\right] \psi^{G}_{n_1 n_2 m} = \delta_{n_1' n_1} \delta_{n_2' n_2} \delta_{m' m} \tag{69}$$

Показать, что нормировка с весом $\frac{1}{r}$ необходима для самосопряженности операторов из (65) и вычислить нормировочные множители $\mathcal{N}_{n_1 n_2 m}$..

<u>Задача 24</u>. Показать, что Шредингеровская волновая функция атома водорода в параболических координатах [41] $\psi^{S}_{n_1 n_2 m}$ и $\psi^{G}_{n_1 n_2 m}$ связаны соотношением

$$\psi^{S}_{n_1 n_2 m} = \frac{1}{\sqrt{n}} \left[\frac{1}{a_0 \cdot n}\right]^{\frac{1}{2}} e^{i\left[\ln \frac{1}{a_0 n}\right] \hat{L}_{45}} \psi^{G}_{n_1 n_2 m}. \tag{70}$$

Здесь $a_0 = \frac{1}{m\alpha}$ - боровский радиус [41].

Указание: Использовать тождество $e^{\ln a \, \vec{x} \cdot \vec{\nabla}} f(\vec{x}) = f(a\vec{x})$ и тот факт, что $\vec{x} \cdot \vec{\nabla} = i \vec{x} \vec{p} = i \hat{L}_{45} - 1$.

Матричные элементы некоторого оператора $\hat{F}$ по состояниям $\psi^{S}_{n_1 n_2 m}$ и $\psi^{G}_{n_1 n_2 m}$ связаны следующим образом:

$$\int \overline{\psi}^{S}_{n_1' n_2' m'} \hat{F} \psi^{S}_{n_1 n_2 m} d^3x = \frac{1}{a_0} \int \overline{\psi}^{G}_{n_1' n_2' m'} \frac{e^{-i\theta_{n'} \hat{L}_{45}}}{n'} \cdot r \hat{F} \times \frac{e^{i\theta_n \hat{L}_{45}}}{n} \psi^{G}_{n_1 n_2 m} d^3x = \tag{71}$$

$$= \frac{1}{a_0} \langle \widetilde{n_1', n_2', m'} | (\hat{L}_{56} - \hat{L}_{46}) \hat{F} | \widetilde{n_1, n_2, m} \rangle .$$

Здесь учтено, что $r = \hat{L}_{56} - \hat{L}_{46}$ и введены обозначения

$$|\widetilde{n_1, n_2, m}\rangle = \frac{1}{n} e^{i\theta_n \hat{L}_{45}} | n_1 n_2 m) \quad , \quad \theta_n = \ln\left(\frac{1}{a_0 n}\right).$$

В подходе, основанном на динамической группе $SO(4,2)$ можно описать как связанные состояния, так и непрерывный спектр задачи Кеплера. Перепишем уравнение (64) в виде

$$\left[\left(\frac{1}{2\mu} - E\right)\hat{L}_{56} + \left(\frac{1}{2\mu} + E\right)\hat{L}_{46} - \alpha\right]\psi^{S} = 0. \tag{64}$$

Рассмотрим поворот в плоскости (45):

$$e^{-i\theta L_{45}}\left[\left(\frac{1}{2\mu}-E\right)\hat{L}_{56}+\left(\frac{1}{2\mu}+E\right)\hat{L}_{46}-\alpha\right]e^{i\theta\hat{L}_{45}}e^{-i\theta L_{45}}\psi^{s}=$$

$$=\left\{\left[\left(\frac{1}{2\mu}-E\right)ch\,\theta+\left(\frac{1}{2\mu}+E\right)sh\,\theta\right]\hat{L}_{56}+\left[\left(\frac{1}{2\mu}+E\right)ch\,\theta+\right.\right.$$
$$\left.\left.+\left(\frac{1}{2\mu}-E\right)sh\,\theta\right]\hat{L}_{46}\right\}e^{-i\theta\hat{L}_{45}}\psi^{s}=0. \qquad (72)$$

Из (72) ясно, что выбором угла поворота θ можно обратить в нуль множители либо перед $\hat{L}_{45}$, либо перед $\hat{L}_{56}$.

Если $E<0$ (дискретный спектр), то выбирая $\theta=arcth\left(\frac{\frac{1}{2}\mu+E}{\frac{1}{2}\mu-E}\right)$, получаем из (72):

$$(-2\mu E)^{\frac{1}{2}}n=\mu\alpha\ ,\rightarrow E=-\frac{\alpha^{2}\mu}{2n^{2}}. \qquad (73)$$

Если $E>0$ (непрерывный спектр), то выбирая $\theta=arcth\left(\frac{E-\frac{1}{2}\mu}{E+\frac{1}{2}\mu}\right)$ и обозначая собственное значение оператора $\hat{L}_{46}$ через ν, получим

$$(2\mu E)^{\frac{1}{2}}\nu=\mu\cdot\alpha\longrightarrow E=\frac{\alpha^{2}\mu}{2\nu^{2}} \qquad (74)$$

Соотношения (73), (74) показывают, что алгебра $SO(2,1)$, порождаемая операторами $\hat{L}_{45},\hat{L}_{46},\hat{L}_{56}$ является алгеброй генерирующей спектр атома водорода.

Существование в алгебре (65) оператора дипольного момента $\vec{x}$ $(x_i=\hat{L}_{i4}+\hat{L}_{i5})$ позволило применить $SO(4,2)$ - группу для расчета целого ряда конкретных эффектов взаимодействия с внешним электромагнитным полем [38, 48]. Например, в работе Фронсдела [49] был рассчитан комптон-эффект на связанном электроне без использования дипольного приближения, однако ядру приписывалась бесконечная масса. $SO(2,1)$- симметрия радиального уравнения атома водорода была использована в работе [50] в задаче с кулоновской поляризации вакуума.

3в). Когерентные состояния квантовых систем

В работе [51] А.М.Переломовым была введена концепция "когерентных" состояний для унитарных неприводимых представлений группы Ли G , которая оказалась тесно связанной с методом групп динамической симметрии и проблемой квантования классических систем на однородном фазовом пространстве Ω (т.е., допускающем конечно-параметрическую группу канонических преобразований).

Рассмотрим неприводимое унитарное представление $\hat{T}(g)$

$$g \in G \to \hat{T}(g)|\psi(\xi)\rangle = |\psi(g^{-1}\xi)\rangle, \tag{75}$$

где $|\psi(\xi)\rangle \in \mathcal{H}$, $\{\xi \in \mathcal{M}\}$ – однородное пространство с группой преобразований G . Пусть $|\psi_0\rangle$ некоторый фиксированный вектор в $\mathcal{H}$, и

$$|\psi_g\rangle = \hat{T}(g)|\psi_0\rangle \quad , \; g \in G . \tag{76}$$

Два таких вектора $|\psi_{g_1}\rangle$ и $|\psi_{g_2}\rangle$ описывают одно и то же физическое состояние, если

$$|\psi_{g_1}\rangle = e^{i\alpha}|\psi_{g_2}\rangle , \qquad |e^{i\alpha}| = 1,$$

последнее может быть только в том случае, если

$$\hat{T}(g_2^{-1}\cdot g_1)|\psi_0\rangle = e^{i\alpha}|\psi_0\rangle .$$

Если $H \subset G$ и для любого $h \in H$

$$\hat{T}(h)|\psi_0\rangle = e^{i\alpha(h)}|\psi_0\rangle, \tag{77}$$

то H будем называть стационарной подгруппой состояния $|\psi_0\rangle$.

Ясно, что вектору $|\psi_g\rangle$ (с точностью до эквивалентности) можно поставить во взаимнооднозначное соответствие точку фактор-пространства $\mathcal{M} = H\backslash G$.

Системой когерентных состояний типа $[\hat{T}(g), |\psi_0\rangle]$ называется система $\{|\psi_g\rangle\}$, $|\psi_g\rangle = T(g)|\psi_0\rangle$, где g обегает всю группу G . Пусть H – стационарная подгруппа состояния $|\psi_0\rangle$. Тогда когерентное состояние $|\psi_g\rangle$ определяется точкой $x = x(g)$ фактор-пространства $H\backslash G$, соответствующей элементу g.

Будем использовать обозначение

$$|\psi_g\rangle = e^{i\alpha(g)}|x\rangle \quad , \; |\psi_0\rangle \equiv |0\rangle .$$

Легко убедиться в том, что если H – инвариантная подгруппа вектора $|0\rangle$, то $|0\rangle$ собственный вектор всех генераторов представления группы H .

Выпишем некоторые свойства когерентных состояний

$$|x\rangle = e^{-i\alpha(g)}\hat{T}(g)|0\rangle .$$

Подействуем на состояние $|x\rangle$ оператором $T(g')$.

$$\hat{T}(g')|x\rangle = e^{-i\alpha(g)}\hat{T}(g')\hat{T}(g)|0\rangle = \\ = e^{i\beta(g',g)}|x'\rangle, \tag{78}$$

где $x' = g'\cdot x$ определяется законом действия G на $H\backslash G$.
Здесь $\beta(g',g) = \alpha(g'g) - \alpha(g)$, причем $\beta(g',g) \equiv \beta(g',x)$.

Скалярное произведение двух когерентных состояний можно выразить через среднее значение оператора представления в состоянии $|0\rangle$

$$\langle x_1|x_2\rangle = e^{i[\alpha(g_1)-\alpha(g_2)]}\langle 0|\hat{T}(g_1^{-1}\cdot g_2)|0\rangle . \tag{79}$$

Задача 25. Показать, что множество всех когерентных состояний полно (имеет место "разложение единицы"):

$$\int\limits_{H\backslash G} d\mu(x)\,|x\rangle\langle x| = \hat{I}, \tag{80}$$

где $d\mu(x)$ – инвариантная мера на фактор-пространстве $H\backslash G$, т.е. $d\mu(g\cdot x) = d\mu(x)$, "нормированная" условием

$$\int\limits_{H\backslash G} |\langle 0|x\rangle|^2 d\mu(x) = 1$$

указание: использовать лемму Шура, т.е.

$$\hat{T}(g)\int d\mu(x)\,|x\rangle\langle x|\,\hat{T}(g^{-1}) = \int d\mu(x)\,|x\rangle\langle x| .$$

Произвольное состояние $|\psi\rangle$ можно разложить по когерентным:

$$|\psi\rangle = \int\limits_{H\backslash G} d\mu(x)\,\Psi(x)|x\rangle , \tag{81}$$

где $\Psi(x) = \langle x|\psi\rangle$, $\langle\psi|\psi\rangle = \int d\mu(x)\,|\Psi(x)|^2 .$

Аналогично:

$$|x'\rangle = \int\limits_{H\backslash G} d\mu(x)\,|x\rangle\langle x|x'\rangle = \int\limits_{H\backslash G} d\mu(x)\,K(x',x)|x\rangle ,$$

т.е. система когерентных состояний переполнена.

Задача 27. Показать, что ядро $K(x',x)$ является "самопроизводящимся":

$$K(x',x)=\int d\mu(y)\,K(x',y)\,K(y,x).$$

Рассмотрим частный, но очень важный случай нильпотентной группы Гайзенберга-Вейля W_1. W_1 имеет генераторы $\hat{q},\hat{p},\hat{I}$ со следующими коммутационными соотношениями (см. § 2)

$$[\hat{q},\hat{p}]=i\hat{I}, \tag{82}$$

если ввести операторы $\hat{a}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q}+i\hat{p})$, $\hat{a}^{+}=\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{q}-i\hat{p})$, то коммутационные соотношения имеют вид:

$$[\hat{a},\hat{a}^{+}]=\hat{I}. \tag{83}$$

Операторы $\hat{a}$ и $\hat{a}^{+}$ эрмитово сопряжены друг другу. Оператор

$$\hat{X}=t\hat{I}-i(\alpha\hat{a}^{+}-\bar{\alpha}\hat{a}) \tag{84}$$

является самосопряженным, если $t\in R$.
Оператор $\exp(i\hat{X})$ в этом случае задает унитарное представление группы W_1.

$$\exp(i\hat{X})=\exp(it\hat{I})\,\hat{T}(\alpha); \tag{85}$$
$$\hat{T}(\alpha)=\exp(\alpha\hat{a}^{+}-\bar{\alpha}\hat{a}).$$

Задача 28. Доказать формулу Бейкера-Хаусдорфа:

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}}=e^{\frac{1}{2}[\hat{A},\hat{B}]}\,e^{\hat{A}+\hat{B}}, \tag{86}$$

которая справедлива, если $[A[A,B]]=[\hat{B}[\hat{A},\hat{B}]]$.
Проверить, что закон умножения в группе W_1 из элементов $W(t,\alpha)$, определенных в соответствии с (85) имеет вид

$$W(t',\alpha')\,W(t,\alpha)=W(t'+t+\mathrm{Im}(\alpha'\bar{\alpha}),\ \alpha'+\alpha) \tag{87}$$

Операторы $\hat{a},\hat{a}^{+},\hat{I}$ действуют в гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$, в котором существует вакуумный вектор $|0\rangle$:

$$\hat{a}|0\rangle=0, \quad \langle 0|0\rangle=1 \tag{88}$$

Векторы $|n\rangle$, определенные согласно формулам

$$|n\rangle = \frac{(\hat{a}^{+})^{n}}{\sqrt{n!}}\,|0\rangle, \tag{89}$$

образуют в $\mathcal{H}$ ортонормированный базис с хорошо известными свойствами (см.,например, [13]).

Построим теперь когерентные состояния для группы W_1 . В качестве вектора $|\Psi_0\rangle$ выберем вакуумный вектор $|0\rangle$ и получим множество состояний:

$$|\alpha\rangle = \hat{T}(\alpha)\,|0\rangle . \tag{90}$$

Состояния (60) принято называть Глауберовскими, т.к. многие важные свойства этих состояний были изучены в знаменитых работах Р.Глаубера [52] (см.также [53]).

Справедливы соотношения:

$$|\alpha\rangle = e^{-\frac{1}{2}|\alpha|^2}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}}\,|n\rangle ; \tag{91}$$

$$\langle\alpha|\beta\rangle = \exp\left[-\frac{1}{2}\left(|\alpha|^2+|\beta|^2-2\bar{\alpha}\beta\right)\right]; \tag{92}$$

$$\int_{\mathbb{C}} d\mu(\alpha)\,|\alpha\rangle\langle\alpha| = \hat{I}\,, \quad d\mu(\alpha)=\frac{1}{\pi}d^2\alpha=\frac{1}{\pi}d\alpha_1\,d\alpha_2\,, \quad \alpha=\alpha_1+i\alpha_2\,. \tag{93}$$

$$\hat{a}\,|\alpha\rangle = \alpha\,|\alpha\rangle\,, \quad \hat{T}(\alpha)\,\hat{a}\,\hat{T}^{-1}(\alpha) = \hat{a}-\alpha\,. \tag{94}$$

Задача 29. Проверить формулы (91) - (94).

Указание: привести оператор $\hat{T}(\alpha)$ к "нормальной"форме:

$$\hat{T}(\alpha) = e^{-\frac{|\alpha|^2}{2}}\,e^{\alpha\hat{a}^{+}}\,e^{-\bar{\alpha}\hat{a}}\,. \tag{95}$$

Система когерентных состояний Глаубера широко используется в оптике для описания когерентных свойств лазерного излучения. Они применялись в теории диамагнетизма Ландау (см.[54]), расчете радиационных ширин уровней Ландау (синхротронного излучения[55]).

Рассмотрим теперь когерентные состояния для группы $SU(2)$. Напомним (см.§ I), что алгебра $SU(2)$ определена следующим образом: $[\hat{J}_3, \hat{J}_{\pm}] = \pm\hat{J}_{\pm}$, $[\hat{J}_{+}, \hat{J}_{-}] = 2\hat{J}_3$.

Для унитарного представления $\mathcal{D}^j: (\hat{J}_-)^+ = \hat{J}_+$, $j=0,\frac{1}{2},\dots$ и определяет собственные значения оператора Казимира $\hat{J}^2$.

Выберем в качестве фиксированного вектора $|0\rangle$ в представлении $\mathcal{D}^j$ вектор $|0\rangle = |j,-j\rangle$, для которого

$$\hat{J}_- |j,-j\rangle = 0. \tag{96}$$

Стационарной подгруппой этого вектора является группа вращений вокруг оси x_3. Действуя на $|j,-j\rangle$ оператором поворота

$$\hat{R}(\theta,\varphi) = \exp(-i\theta \hat{J}_{\vec{n}}) = \exp[i\theta(\sin\varphi\cdot\hat{J}_1 - \cos\varphi\cdot\hat{J}_2)] =$$
$$= \exp(\tau\hat{J}_+ - \bar{\tau}\hat{J}_-), \quad \tau = \frac{\theta}{2}e^{i\varphi}; \tag{97}$$
$$J_{\vec{n}} = -\hat{J}_1 \sin\varphi + \hat{J}_2 \cos\varphi,$$

получим искомую систему когерентных состояний

$$|\theta,\varphi\rangle \equiv |\vec{n}\rangle \equiv |\tau\rangle = \hat{R}(\theta,\varphi)|j,-j\rangle. \tag{98}$$

$\vec{n}$ - единичный вектор с угловыми уоординатами θ,φ, получающийся из вектора $\vec{n}_0 = (0,0,-1)$ в результате поворота $R(\theta,\varphi)$.

Когерентное состояние $|\vec{n}\rangle$ определяется точкой фактор-пространства $U(1)\backslash SU(2)$, являющимся двумерной сферой (единичного радиуса $\vec{n}^2 = 1$).

<u>Задача 30</u>. Представить оператор $\hat{R}(\theta,\varphi)$ в "распутанном" виде:

$$\hat{R}(\theta,\varphi) = \exp(\zeta\hat{J}_+)\exp(\ln(1+|\zeta|^2)\hat{J}_3)\exp(-\bar{\zeta}\hat{J}_-), \tag{99}$$

показать, что $\zeta = \frac{\tau}{|\tau|}\,\mathrm{tg}|\tau| = e^{i\varphi}\,\mathrm{tg}\frac{\theta}{2}$.

(100)

Формула (90) устанавливает стереографическое отображение двумерной сферы на плоскость $\mathbb{C}$. Используя (89), получаем систему состояний

$$|\zeta\rangle = \hat{R}(\theta,\varphi)|j,-j\rangle = \frac{1}{(1+|\zeta|^2)^j} e^{\zeta\hat{J}_+}|j,-j\rangle = \tag{101}$$
$$= \frac{1}{(1+|\zeta|^2)^j}\sum_{m=0}^{2j}\frac{\zeta^m(\hat{J}_+)^m}{m!}|j,-j\rangle,$$

откуда

$$\langle \zeta | \eta \rangle = (1+\bar{\zeta}\eta)^{2j}(1+|\zeta|^2)^{-j}(1+|\eta|^2)^{-j}. \tag{102}$$

Группа $SU(2)$ действует на $\overline{C}$ как группа дробнолинейных преобразований (см.§ I)

$$\mathcal{U}\cdot\zeta = \frac{\alpha\zeta+\beta}{-\bar{\beta}\zeta+\bar{\alpha}}, \quad \mathcal{U} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix} \in SU(2). \tag{103}$$

Действуя оператором $\hat{T}(\mathcal{U})$ на состояние $|\zeta\rangle$, вновь получаем когерентное состояние

$$\hat{T}(\mathcal{U})|\zeta\rangle = e^{i\Phi}|\zeta'\rangle; \qquad \zeta' = \mathcal{U}^{-1}\cdot\zeta = \frac{\bar{\alpha}\zeta-\beta}{\bar{\beta}\zeta+\alpha}. \tag{104}$$

Задача 3I. Показать, что нормированной инвариантной мерой на $\mathbb{C}$ (относительно преобразований (103)) является

$$d\mu(\zeta) = \frac{2j+1}{\pi}\cdot\frac{d^2\zeta}{(1+|\zeta|^2)^2}$$

и имеет место разложение единицы:

$$\frac{2j+1}{\pi}\int_{\mathbb{C}}\frac{d^2\zeta}{(1+|\zeta|^2)^2}|\zeta\rangle\langle\zeta| = \hat{I}. \tag{105}$$

Когерентные состояния группы $SU(2)$ использовались для изучения статистической суммы квантовой системы спинов [56] . В работах [57] они применялись для описания взаимодействия излучения с ансамблем двухуровневых систем (модель Дике). В работах Л.А.Шелепина и Т.М.Махвиладзе (см.обзорные статьи в [47а) и б)]) строились иные когерентные состояния углового момента (глауберовского типа) основанные на представлении генераторов группы через бозонные операторы рождения и уничтожения двух сортов:

$$\hat{J}_3 = \frac{1}{2}(\hat{a}_1^+ a_1 - \hat{a}_2^+\hat{a}_2), \quad J_+ = a_1^+ a_2, \quad \hat{J}_- = \hat{a}_2^+\hat{a}_1.$$

(Аналогичные представления (через бозонные операторы N -сортов) существуют и для генераторов группы $SU(N)$). Такие состояния использовались при изучении когерентных кооперативных эффектов в многоуровневых молекулярных и атомных системах.

Тот факт, что для одной и той же квантовой системы можно ввести обобщенные когерентные состояния разного типа не должен вызывать удивления, поскольку для описания системы можно использовать в качестве базиса любые полные наборы векторов состояния. Один такой полный набор ничем не выделен по сравнению с другим. В различных конкректных физических задачах могут быть полезны разные когерентные состояния.

Рассмотрим теперь кратко когерентные состояния для дискретной серии T_+^k группы $SU(1,1)/Z_2$ - группы движения плоскости Лобачевского (круга единичного радиуса комплексной плоскости, см.задачу 6) [5I] (здесь $k(k-1) \equiv j(j+1)$ - собственное значение оператора Казимира группы $SU(1,1)$).

Представление T_+^k удобно реализовать в пространстве $\mathcal{F}_k$ - пространстве функций голоморфных в $\{|z|<1\}$ и удовлетворяющих условию $\|f\|_k < \infty$, где

$$\|f\|_k^2 = \int\limits_{|z|<1} |f(z)|^2 d\mu_k(z), \quad d\mu_k(z) = \frac{2k-1}{\pi}(1-|z|^2)^{2k-2} dx dy. \tag{I06}$$

Действие операторов $T^k(g)$ $\left(g = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \bar\beta & \bar\alpha \end{pmatrix}\right)$ задается формулой:

$$\left[T^k(g) f\right](z) = (-\bar\beta z + \alpha)^{-2k} f\left(\frac{\bar\alpha z - \beta}{-\bar\beta z + \alpha}\right). \tag{I07}$$

Легко проверить, что функции

$$f_n(z) = \sqrt{\frac{\Gamma(n+2k)}{n!\,\Gamma(2k)}}\, z^n, \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{I08}$$

образуют ортонормированный базис в $\mathcal{F}_k$. Выберем в качестве $|\Psi_0\rangle \equiv f_0 = 1$ и действуя на него оператором $\hat{T}^k(g)$, получаем систему когерентных состояний:

$$T^k(g)|\Psi_0\rangle = (-\bar\beta z + \alpha)^{-2k} = e^{i\varphi}\Psi_\zeta(z); \tag{I09}$$

$$\zeta = +\bar\beta/\alpha, \quad \varphi = -2k \arg\alpha$$

$$\Psi_\zeta(z) = (1-|\zeta|^2)^k (1-\zeta z)^{-2k}. \tag{II0}$$

Стационарной подгруппой вектора $f_0 = 1$ является группа $SO(2)$. При этом фактор-пространство $U(1)\backslash SU(1,1) = SO(2)\backslash SO(2,1)$ можно рассматривать как плоскость Лобачевского $\{\zeta : |\zeta|<1\}$.

Каждой точке ζ круга единичного радиуса соответствует когерентное состояние Ψ_ζ. Из (II0) следует, что разложение когерентных состояний по ортонормированному базису имеет вид

$$\Psi_\zeta(z) = (1-|\zeta|^2)^k \sum_{n=0}^{\infty} f_n(\zeta) f_n(z). \tag{III}$$

Имеет место разложение единицы

$$\frac{2k-1}{\pi}\int d\mu(\zeta)\,|\Psi_\zeta\rangle\langle\Psi_\zeta|; \qquad (112)$$

$$d\mu(\zeta) = (1-|\zeta|^2)^{-2}\,d\zeta_1\,d\zeta_2 \quad , \quad \zeta=\zeta_1+i\zeta_2;$$

$$\langle\Psi_\zeta|\Psi_{\zeta'}\rangle = (1-|\zeta|^2)^k(1-|\zeta'|^2)^k(1-\bar\zeta\zeta')^{-2k}. \qquad (113)$$

Когерентные состояния на группах Ли оказались весьма важными в методе так называемого "геометрического квантования" [19,21], в котором параллельно с квантовой системой рассматривается соответствующая классическая система, обладающая той же группой динамической симметрии. Оказывается, что когерентные состояния осуществляют "переход" от классической теории к квантовой наиболее естественным образом - они являются квантовыми состояниями наиболее близкими к классическим. В этом смысле построение когерентных состояний завершает процедуру квантования.

Если для квантовой системы построены когерентные состояния группы динамической симметрии и оператор эволюции при этом является оператором представления этой группы, то квантовую динамику можно сформулировать на "классическом языке" (см.также [54]).Поэтому метод когерентных состояний по духу близок Фейнмановскому подходу к квантовой механике - континуальным интегралам по траекториям.

§ 4. КВАНТОВЫЕ СИСТЕМЫ С ЭКВИДИСТАНТНЫМ СПЕКТРОМ

В предыдущем параграфе было отмечено, что в случае систем с линейным спектром группу динамической симметрии часто удается построить в явном виде. Здесь мы изучим некоторые из таких систем и применим метод групп динамической симметрии к анализу ряда физических эффектов.

4а). Линейные канонические преобразования и динамическая симметрия осциллятора

В § 2(в) мы видели, что множество всех классических наблюдаемых порождает бесконечномерную группу канонических преобразований $Aut(\Omega)$ фазового пространства Ω . Если в $Aut(\Omega)$ можно выделить некоторую подгруппу G (группу Ли), транзитивную на Ω , то G можно назвать группой динамической симметрии классической системы, так как такая группа будет отображать траектории системы друг в друга. Существует мнение, что в этом случае группы динамической симметрии квантовой системы и её классического аналога можно выбрать совпадающими, т.е., чтобы в пространстве состояний квантовой системы действовало унитарное неприводимое представление группы динамической симметрии классической системы. Проведем подобное построение для гармонического осциллятора.

Рассмотрим одномерный гармонический (классический) осциллятор, функция Гамильтона которого имеет вид

$$H(q,p)= \frac{1}{2}(p^2+q^2) \tag{1}$$

(пользуемся для простоты системой единиц $\mu=\omega=\hbar=1$).

Классические наблюдаемые q, p и 1 образуют классическую алгебру Гайзенберга-Вейля $\underset{\sim}{W_1}$:

$$\{q,p\} = 1. \tag{2}$$

Рассмотрим вещественное неоднородное каноническое преобразование

$$\begin{pmatrix} q' \\ p' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \xi \\ \eta \end{pmatrix}. \tag{3}$$

Легко проверить, что для того, чтобы $\{q', p'\}=1$ необходимо и достаточно, чтобы $ad-bc=1$, т.е.

$$\Lambda = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \in SL(2,R) \approx Sp(2,R) \approx SU(1,1) \approx SO(2,1).$$

<u>Задача 32.</u> Показать, что наблюдаемые

$$K_0 = \frac{1}{4}(p^2+q^2), \; K_1 = \frac{1}{4}(p^2-q^2), \; K_2 = \frac{1}{2}qp, \; q, \tag{4}$$

p являются генераторами преобразования (3), причем K_0, K_1, K_2 образуют алгебру Ли группы $SL(2,R) \approx Sp(2,R)$, скобкой Ли, в которой является скобка Пуассона:

$$\{K_1, K_2\} = -K_0 \; , \{K_2, K_0\} = K_1, \; \{K_0, K_1\} = K_2 . \tag{5}$$

<u>Указание:</u> Рассмотреть в группе матриц $SL(2,R)$ следующие однопараметрические подгруппы

$$\Lambda_1(\tau) = \begin{pmatrix} ch\frac{\tau}{2} & sh\frac{\tau}{2} \\ sh\frac{\tau}{2} & ch\frac{\tau}{2} \end{pmatrix}, \quad \Lambda_2(\tau) = \begin{pmatrix} e^{\frac{\tau}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-\tau/2} \end{pmatrix},$$

$$\Lambda_0(\tau)=\begin{pmatrix}\cos\frac{\tau}{2} & \sin\frac{\tau}{2}\\ -\sin\frac{\tau}{2} & \cos\frac{\tau}{2}\end{pmatrix}$$ и использовать формулу (2.25).

Итак, линейные канонические преобразования, сохраняющие скобку Пуассона $\{q,p\}$ определяют в фазовом пространстве гармонического осциллятора группу $T_2 \boxminus Sp(2,R)$. Группа трансляций T_2 порождается генераторами q и p. Так как скобка Пуассона $\{q,p\}=1\neq 0$, как должно быть в группе трансляций, то при переходе к квантовой теории (как и в случае группы Галилея) необходимо провести одномерное центральное расширение группы $T_2 \boxminus Sp(2,R)$, что дает полупрямое произведение: $W_1 \boxminus Sp(2,R)$.

Задача 33. Показать, что закон группового умножения в группе $W_1 \boxminus Sp(2,R)$ имеет вид

$$(\theta',\vec{\xi}',\hat{\Lambda}')\cdot(\theta,\vec{\xi},\hat{\Lambda})=$$
$$=\left(\theta'+\theta+\tfrac{1}{2}(\vec{\xi}'\hat{\Sigma}\hat{\Lambda}'\vec{\xi}),\ \vec{\xi}'+\hat{\Lambda}'\vec{\xi},\ \hat{\Lambda}'\hat{\Lambda}\right), \tag{6}$$

где $\vec{\xi}=\begin{pmatrix}\xi\\ \eta\end{pmatrix}$, $\hat{\Sigma}=\begin{pmatrix}0 & -1\\ 1 & 0\end{pmatrix}$.

В квантовом случае операторы

$$\hat{K}_0=\tfrac{1}{4}(\hat{p}^2+\hat{q}^2),\quad \hat{K}_1=\tfrac{1}{4}(\hat{p}^2-\hat{q}^2),\quad \hat{K}_0=\tfrac{1}{4}(\hat{p}\hat{q}+\hat{q}\hat{p}) \tag{4'}$$

являются самосопряженными генераторами группы $Sp(2,R)\approx SU(1,1)$, т.е.

$$[\hat{K}_1,\hat{K}_2]=-i\hat{K}_0,\quad [K_2,K_0]=iK_1;\ [K_0,K_1]=iK_2. \tag{5'}$$

Перейдем от операторов $\hat{q},\hat{p}$ к операторам рождения и уничтожения $\hat{a}^+,\hat{a}$ и введем новые операторы:

$$\hat{K}_\pm=\hat{K}_1\pm i\hat{K}_2$$

после чего коммутационные соотношения (5') принимают вид

$$[\hat{K}_0,\hat{K}_\pm]=\pm\hat{K}_\pm,\quad [\hat{K}_+,\hat{K}_-]=-2\hat{K}_0. \tag{7}$$

Оператор $\hat{C}=\hat{K}_0^2-\hat{K}_1^2-\hat{K}_2^2=\hat{K}_0(\hat{K}_0+I)+\hat{K}_-\hat{K}_+$ является оператором Казимира.

Явный вид операторов $\hat{K}_0$ и $\hat{K}_\pm$ также легко находится:

$$\hat{K}_0=\tfrac{1}{4}(\hat{a}^+\hat{a}+\hat{a}\hat{a}^+),\quad \hat{K}_+=\tfrac{1}{2}(\hat{a}^+)^2,\quad \hat{K}_-=\tfrac{1}{2}\hat{a}^2. \tag{8}$$

В гильбертовом пространстве $\mathcal{H}$ гармонического осциллятора с базисом $\{|n\rangle\}$ (см. (3.52)) оператор Казимира $\hat{C}$ имеет собственное значение равное $-3/16$. Будем нумеровать представления группы $SU(1,1) \approx Sp(2,R)$ числом k:

$$\hat{C} = k(k-1)\hat{I}. \tag{9}$$

Видно, что в случае гармонического осциллятора $k=\frac{1}{4}$ и $\frac{3}{4}$. Состояния с четными квантовыми числами n образуют пространство неприводимого представления $T_+^{1/4}$, а для нечетных $\sim T_+^{3/4}$.

Строго говоря, эти представления являются представлениями универсальной накрывающей $\widetilde{SU(1,1)} = \widetilde{Sp(2,R)}$ (напомним, что группа $O(2)$ – подгруппа групп $SU(1,1)$, $Sp(2,R)$ и т.д. бесконечносвязна). В случае гармонического осциллятора достаточно рассмотреть группу, получающуюся из двух экземпляров групп $Sp(2,R)$ ($SU(1,1)$ и т.п.) соответствующим образом склееных [58]. Если к операторам $\hat{K}_0, \hat{K}_\pm$ добавить генераторы группы Гайзенберга-Вейля $\hat{a}, \hat{a}^+, \hat{I}$, то в пространстве состояний гармонического осциллятора будет реализовано представление алгебры Ли группы $W_1 \boxminus Sp(2,R)$, которое является неприводимым.

Итак группу $W_1 \boxminus Sp(2,R)$ можно использовать в качестве группы динамической симметрии гармонического осциллятора.

Рассмотрим обобщение на многомерный случай (для определенности положим $N = 3$). Гамильтониан трехмерного осциллятора запишем в виде

$$\hat{H} = \hbar\omega \sum_{k=1}^{3} \left(\hat{a}_k^+ \hat{a}_k + \frac{1}{2}\right). \tag{10}$$

Операторы $\hat{a}_k$, $\hat{a}_k^+$ удовлетворяют коммутационным соотношениям:

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_\ell^+] = \delta_{k\ell}\hat{I}, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_\ell] = [\hat{a}_k^+, \hat{a}_\ell^+] = 0 \tag{11}$$

и определяют алгебру $\underset{\sim}{W_3}$.

В гильбертовом пространстве существует общий вакуумный вектор $|0\rangle$, такой, что

$$\langle 0|0\rangle = 0, \quad \hat{a}_k|0\rangle = 0, \quad k=1,2,3$$

Векторы

$$|[n]\rangle \equiv |n_1 n_2 n_3\rangle = \frac{(\hat{a}_1^+)^{n_1}(\hat{a}_2^+)^{n_2}(\hat{a}_3^+)^{n_3}}{\sqrt{n_1!\, n_2!\, n_3!}}|0\rangle$$

являются собственными для гамильтониана (10) с собственными значениями $\hbar\omega(n+3/2)$, где $n=n_1+n_2+n_3$ — главное квантовое число. Как и для атома водорода очевидная $O(3)$ симметрия гамильтониана трехмерного изотропного осциллятора не объясняет дополнительного вырождения энергетических уровней. Группа точной симметрии осциллятора была найдена в работах [59,60,61]. Введем операторы

$$\hat{B}_{ij} = \frac{1}{2}\{\hat{a}_i^+, \hat{a}_j\}, \tag{12}$$

где $\{\hat{a},\hat{b}\} = \hat{a}\hat{b} + \hat{b}\hat{a}$ — антикоммутатор (не путать со скобкой Пуассона!). Операторы $\hat{B}_{ij}$ образуют замкнутую алгебру Ли группы $U(3)$:

$$[\hat{B}_{ij}, \hat{B}_{kl}] = \delta_{jl}\hat{B}_{ik} - \delta_{ik}\hat{B}_{lj} \tag{13}$$

и коммутируют с гамильтонианом. Однако в алгебре $U(3)$ имеется оператор

$$\sum_{k=1}^{3} \hat{B}_{kk} = \hat{a}_1^+\hat{a}_1 + \hat{a}_2^+\hat{a}_2 + \hat{a}_3^+\hat{a}_3 + \frac{3}{2}, \tag{14}$$

который тривиально коммутирует гамильтонианом и тем самым со всеми $\hat{B}_{ij}$

Перейдем поэтому от $\hat{B}_{ij}$ к операторам:

$$\hat{A}_{ij} = \hat{B}_{ij} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\sum_{k=1}^{3}\hat{B}_{kk}. \tag{15}$$

Операторы $\hat{A}_{ij}$ удовлетворяют коммутационным соотношениям (13) и генерируют полупростую группу $SU(3)$. С фиксированным уровнем энергии трехмерного осциллятора связано неприводимое унитарное представление $\mathcal{D}(n,0)$ группы $SU(3)$ (см. [62, 63]). Вращательная инвариантность $\hat{H}$ описывается операторами углового момента

$$\hat{L}_k = -i(\hat{B}_{lm} - \hat{B}_{ml}), \tag{16}$$

где $k,l,m = (1,2,3)$.

Итак, группой точной симметрии трехмерного изотропного осциллятора является группа $SU(3)$ (в N-мерном случае аналогичную роль выполняет группа $SU(N)$).

Рассмотрим теперь систему из 21 оператора:

$$\hat{B}_{kj} = \frac{1}{2}\{a_k^+, \hat{a}_j\}, \quad \hat{C}_{kj} = \{\hat{a}_k^+, \hat{a}_j^+\}, \quad \hat{\mathcal{D}}_{kj} = \frac{1}{2}\{\hat{a}_k, \hat{a}_j\}. \tag{17}$$

<u>Задача 34.</u> Показать, что операторы определенные соотношениями (17) и (11) порождают неоднородное (квантовое) каноническое преобразование:

$$\hat{a}'_k = \sum_e (u_{ke}\hat{a}_e + v_{ke}\hat{a}_e^+) + \beta_k ;$$
$$\hat{a}'^+_k = \sum_e (\bar{v}_{ke}\hat{a}_e + \bar{u}_{ke}\hat{a}_e^+) + \bar{\beta}_k \quad , \tag{I8}$$

где коэффициенты преобразования удовлетворяют соотношениям:

$$\sum_e (u_{ke}\bar{u}_{me} - v_{ke}\bar{v}_{me}) = \delta_{km}, \tag{I9}$$

что обеспечивает сохранение коммутационных соотношений:

$$[\hat{a}'_k , \hat{a}'^+_e] = \delta_{ke}\hat{I}.$$

Итак, операторы (II) и (I7) образуют базис алгебры Ли $W_3 \boxminus Sp(6,R)$ [64] . (В N -мерном случае $W_N \boxminus Sp(2N,R)$).

Вновь вернемся к одномерному случаю. Рассмотрим эрмитовый гамильтониан, квадратичный по операторам $\hat{a}^+ , \hat{a}$,

$$\hat{H} = A(\hat{a}^+)^2 + \bar{A}\hat{a}^2 + B(\hat{a}^+\hat{a} + \hat{a}\hat{a}^+), \tag{20}$$

используя явный вид операторов $\hat{K}_0 , \hat{K}_1 , \hat{K}_2$ (4'), перепишем гамильтониан (20) в виде

$$\hat{H} = \Omega_0\hat{K}_0 - \Omega_1\hat{K}_1 - \Omega_2\hat{K}_2 . \tag{2I}$$

Задача 35. Проверить, что унитарным преобразованием $\hat{H} \to \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{-1}$, $\hat{U} = \exp(i\alpha\hat{K}_0)$, гамильтониан $\hat{H}$ можно привести к виду:

$$\hat{H} = \varphi_0\hat{K}_0 - \varphi_1 K_1 \quad , \qquad \text{где} \tag{22}$$

$$\varphi_0 - \Omega_0 \quad , \quad \varphi_1 = \sqrt{\Omega_1^2 + \Omega_2^2}.$$

Теперь гамильтониан (22) можно диагонализовать унитарным преобразованием $V = \exp(i\chi\hat{K}_2)$;

$$V\hat{H}V^{-1} = e^{i\chi\hat{K}_2}(\varphi_0\hat{K}_0 - \varphi_1\hat{K}_1)e^{-i\chi\hat{K}_2} = \tag{23}$$

$$= (\varphi_0 \operatorname{ch}\chi + \varphi_1 \operatorname{sh}\chi)\hat{K}_0 - (\varphi_0 \operatorname{sh}\chi + \varphi_1 \operatorname{ch}\chi)\hat{K}_1 .$$

Возможны следующие три случая:

I). $\varphi_0^2 - \varphi_1^2 > 0 \quad , \quad \varphi_0 > 0.$

Полагая $\chi = \operatorname{arcth}\left(-\frac{\varphi_0}{\varphi_1}\right)$, приведем гамильтониан к виду:

$$\hat{H} = \nu(\hat{b}^+\hat{b} + \tfrac{1}{2}) \quad ; \quad \nu = \tfrac{1}{2}(\varphi_0^2 - \varphi_1^2)^{1/2};$$
$$b = u a + v\hat{a}^+, \quad b^+ = \bar{v}\hat{a} + \bar{u}\hat{a}^+, \quad u = ch\tfrac{\chi}{2}, \quad v = sh\chi/2, \tag{24}$$

т.е. приходим к обычному гамильтониану осциллятора с частотой ν.

2). $\varphi_0^2 - \varphi_1^2 < 0 \quad , \quad \varphi_0 > 0.$

Здесь, полагая $\chi = \operatorname{arcth}\left(-\frac{\varphi_0}{\varphi_1}\right)$, получаем

$$\hat{H} = 2\mu\hat{K}_1 \quad , \quad \mu = \tfrac{1}{2}(\varphi_1^2 - \varphi_0^2)^{1/2}, \tag{25}$$

т.к. оператор K_1 является некомпактным, то спектр такого гамильтониана непрерывен и неограничен ни снизу, ни сверху. Такой гамильтониан возникает в задаче об осцилляторе с переменной частотой, периодически зависящей от времени [60] и соответствует зоне неустойчивости (см. также§4 в).

3). $\varphi_0^2 - \varphi_1^2 = 0 \quad , \quad \varphi_0 = -\varphi_1 > 0 .$

В этом случае

$$\hat{H} = \varphi_0(\hat{K}_0 + \hat{K}_1), \tag{26}$$

т.к. $\hat{K}_0 + \hat{K}_1 = \frac{1}{2}\hat{P}^2$, то спектр гамильтониана (26) непрерывен и ограничен снизу. Такой гамильтониан соответствует границе зоны устойчивости в задаче об осцилляторе с переменной и периодической во времени частотой [65] (см.также § 4в).

Отметим, что преобразования типа (18) и (23) рассматривались Н.Н.Боголюбовым [66] в задаче о сверхтекучести взаимодействующих бозонов. В работе [66в] было выяснено, что преобразование Боголюбова в теории сверхтекучести можно описать при помощи динамической группы $\prod_r \otimes SU_r(1,1)$.

4б). Вибронные переходы в многоатомной молекуле

Покажем, что общие соображения, развитые в предыдущем пункте, могут быть использованы в задаче о вычислении вероятностей электронно-колебательных (вибронных) переходов в молекулах (обобщим результаты работы [67] на общий случай N-колебательных степеней свободы).

Относительные вероятности вибронных переходов с высокой точностью даются квадратами интегралов перекрывания (интегралов Франка-Кордона) колебательных волновых функций основного и возбужденного электронных состояний. В большинстве случаев колебания ядер можно рассматривать в гармоническом приближении и использовать приближение Борна-Оппенгеймера для отделения движения ядер и электронов.

Для малых колебаний гамильтониан (в основном электронном состоянии) запишем в виде:

$$\hat{H}_{кол} = \frac{1}{2}\sum_{K=1}^{N}\left(\hat{P}_K^2 + \omega_K^2\hat{q}_K^2\right). \tag{27}$$

Собственные функции $\hat{H}_{кол}$ хорошо известны:

$$|[v]\rangle = \mathcal{N}([v])\exp\left(-\frac{1}{2}\vec{q}^{\,T}\hat{\omega}\vec{q}\right)\mathcal{H}_{[v]}\left(\hat{\omega}^{\frac{1}{2}}\vec{q}\right);$$

$$\mathcal{N}([v]) = \left[\frac{(\det\hat{\omega})^{1/2}}{\pi^{N/2}[v!]\,2^{[v]}}\right]^{1/2}. \tag{28}$$

Здесь:

$$[v] = [v_1, v_2, \ldots, v_N], \quad [v!] = v_1!\,v_2!\ldots v_N!$$

$$2^{[v]} = 2^{v_1+v_2+\ldots+v_N}$$

$$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \omega_2 & 0 & \cdots & 0 \\ & & \ddots & & \\ 0 & & & & \omega_N \end{pmatrix}$$

$$\mathcal{H}_{[v]}(\xi) = \mathcal{H}_{v_1}(\xi_1)\cdots\mathcal{H}_{v_n}(\xi_N).$$

$\mathcal{H}_n(\xi)$ - полином Эрмита, $\vec{q}$ - N- мерный вектор нормальных координат.

В возбужденном электронном состоянии колебания описываются гамильтонианом, имеющем вид аналогичный (27). Условимся все величины, отвечающие этому состоянию отмечать штрихом ($\vec{q}\,'$ - мерный вектор нормальных координат в возбужденном состоянии).

Известно также [68] , что нормальные координаты двух электронных состояний связаны линейным преобразованием (при условии, что равновесные конфигурации расположения ядер в этих состояниях мало отличаются),

$$\vec{q}\,' = \hat{R}\vec{q} + \Delta\vec{q} \tag{29}$$

$$\hat{R} = (\hat{L}')^{-1}\hat{L}, \qquad \Delta\vec{q} = (\hat{L}')^{-1}\Delta\vec{R}, \quad \Delta\vec{R} = \vec{R}_0 - \vec{R}_0'$$

$\hat{L}, \hat{L}'$ - матрицы форм колебаний основного и возбужденного электронного состояния.

Воспользовавшись преобразованием (29) легко выразить гамильтониан возбужденного состояния через переменные основного электронного состояния:

$$\hat{H}' = \frac{1}{2}\left[\vec{P}^{\,T}\vec{P} + \vec{q}^{\,T}\hat{\Gamma}\vec{q} + \vec{B}^{\,T}\cdot\vec{q}\right], \tag{30}$$

здесь

$$\hat{\Gamma} = \hat{R}^{T}\hat{\omega}'^{2}\hat{R}, \quad \vec{B} = 2\hat{R}^{T}\Delta\vec{q};$$

$$(\hat{\omega}'^{2})_{\ell j} = \omega'^{2}_{\ell}\delta_{\ell j}.$$

В гамильтониане (30) опущен несущественный постоянный член $\Delta\vec{q}^{\,T}\hat{\omega}'^{2}\Delta\vec{q}$. Аналогичные преобразования можно выполнить и над собственными функциями гамильтониана (30). Введем два набора операторов рождения и уничтожения:

$$\hat{a}_{K} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}_{K} + i\hat{\mathcal{P}}_{K}), \quad \hat{a}^{+}_{K} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}_{K} - i\hat{\mathcal{P}}_{K});$$

$$\hat{a}'_{K} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}'_{K} + i\hat{\mathcal{P}}'_{K}), \quad \hat{a}'^{+}_{K} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{Q}'_{K} - i\hat{\mathcal{P}}'_{K});$$

$$\vec{Q} = \hat{\omega}^{\frac{1}{2}}\vec{q}; \quad \vec{Q}' = \hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}\vec{q}', \quad \vec{Q}' = \hat{J}\vec{Q} + \hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}\Delta\vec{q}, \quad \hat{J} = \hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}\hat{R}\hat{\omega}^{-\frac{1}{2}}.$$

В матричной форме их связь (в соответствии с (29)) выглядит следующим образом: вводим вектор-столбцы $\vec{a}$ и $\vec{a}^{+}$ и вектор - строчки $\vec{a}'$, $\vec{a}'^{+}$:

$$\vec{a}' = \frac{1}{2}(\hat{J} + \hat{J}^{-1})\vec{a} + \frac{1}{2}(\hat{J} - \hat{J}^{-1})\vec{a}^{+} + \vec{\delta};$$

$$\vec{a}'^{+} = \frac{1}{2}(\hat{J} - \hat{J}^{-1})\vec{a} + \frac{1}{2}(\hat{J} + \hat{J}^{-1})\vec{a} + \vec{\delta}; \tag{31}$$

$$\vec{\delta} = \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}\Delta\vec{q}.$$

Видно, что (31) является частным случаем преобразований типа (18) и, следовательно, может быть описано с использованием унитарного оператора $\hat{V}$ из неприводимого представления группы $W_N \boxplus Sp(2N,R)$

$$\vec{a}' = \hat{V}\vec{a}\hat{V}^{+}, \quad \vec{a}'^{+} = \hat{V}\vec{a}^{+}\hat{V}^{+}. \tag{32}$$

Принимая во внимание структуру преобразований (29), (3I), оператор $\hat{V}$ представим в виде:

$$\hat{V} = \hat{T}(\vec{\delta})\,\hat{\mathcal{D}}(\vec{\rho})\,\hat{\mathcal{U}}(\mathcal{R}'), \tag{33}$$

где

$$T = \exp[\vec{\delta}^{\,T}(\vec{a}^{\,+} - \vec{a})] \tag{34}$$

унитарный оператор трансляции ,

$$\hat{\mathcal{D}}(\vec{\rho}) = \exp(\vec{\rho}^{\,T}(\vec{a}^{\,2} - \vec{a}^{\,+2})) \tag{35}$$

– унитарный оператор дилатации, $\vec{\rho}^{\,T} = (\rho_1, \ldots, \rho_N)$ – параметры изменения масштабов, по осям $q_1, \ldots, q_N$, $\rho_K = \frac{1}{4}\ln\frac{\omega_K'}{\omega_K}$,

$$\hat{\mathcal{U}}(\hat{\mathcal{R}}') = \exp\{\sum_{K<\ell} \varphi_{K\ell}(\hat{a}_K^+\hat{a}_\ell - \hat{a}_K\hat{a}_\ell^+)\} \tag{36}$$

– унитарный оператор N -мерного поворота , $\varphi_{K\ell}$ – угол поворота в плоскости (K,ℓ), зависящей от явного вида матрицы $\hat{\mathcal{R}}'$:

$$\hat{\mathcal{J}} = \hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}\hat{\mathcal{R}}\hat{\omega}^{-\frac{1}{2}} = \hat{\mathcal{R}}'\hat{\mathcal{D}}\ , \quad \hat{\mathcal{R}}' = \hat{\mathcal{D}}^{-1}\hat{\mathcal{J}}\ ; \tag{57}$$

$$\hat{\mathcal{R}}'^T\hat{\mathcal{R}}' = \hat{\mathcal{R}}'\hat{\mathcal{R}}'^T = \hat{I}\ , \quad \hat{\mathcal{R}}' \in SO(N);$$

$$\hat{\mathcal{D}} = \hat{\mathcal{D}}^T = (\hat{\mathcal{J}}^T\hat{\mathcal{J}})^{\frac{1}{2}}. \tag{38}$$

Легко проверить, что (30) также переписывается в виде:

$$\hat{H}' = \hat{V}\hat{H}\hat{V}^+. \tag{39}$$

Отсюда ясно, что колебательные волновые функции возбужденного и основного электронных состояний связаны унитарным преобразованием:

$$|[v']\rangle = \hat{V}\,|[v]\rangle. \tag{40}$$

Для интегралов перекрывания колебательных волновых функций различных электронных состояний имеем:

$$\mathcal{J}([v],[n']) \equiv \langle[v]|[n']\rangle = \langle[v]\hat{V}|[n]\rangle. \tag{41}$$

Следовательно, расчет интегралов Франка-Кондона свелся к отысканию матричных элементов оператора $\hat{V}$. Его вычисление удобно провести, совершив переход к глауберовским когерентным состояниям гармонического осциллятора (см § 3в)

$$|\vec{\alpha}\rangle = \hat{T}(\vec{\alpha})|[0]\rangle = \exp\left(\vec{\alpha}^{T}\hat{\vec{a}}^{+} - \vec{\alpha}^{+}\hat{\vec{a}}\right)|[0]\rangle =$$

$$= \exp\left(-\tfrac{1}{2}|\vec{\alpha}|^2\right)\sum_{[v]=0}^{\infty}\frac{\vec{\alpha}^{[v]}}{\sqrt{[v!]}}|[v]\rangle \qquad (42)$$

В координатном представлении когерентное состояние N-мерного осциллятора имеет вид:

$$\langle\vec{q}\,|\vec{\alpha}\rangle = \left(\frac{\det\hat{\omega}}{\pi^N}\right)^{1/4}\exp\left\{-\tfrac{1}{2}\vec{q}^{\,T}\hat{\omega}\vec{q} + \sqrt{2}\,\vec{q}^{\,T}\hat{\omega}^{\frac{1}{2}}\vec{\alpha} - \tfrac{1}{2}\left(\vec{\alpha}^{2} + |\vec{\alpha}|^2\right)\right\} \qquad (43)$$

Поскольку когерентные состояния являются производящими для обычных (фоковских) состояний осциллятора, то матричный элемент между двумя когерентными состояниями является производящей функцией для интегралов Франка-Кондона:

$$\langle\vec{\beta}|\hat{V}|\vec{\alpha}\rangle = \exp\left[-\tfrac{1}{2}\left(|\vec{\beta}|^2 + |\vec{\alpha}|^2\right)\right]\times$$

$$\times\sum_{[v],[n]}\frac{\vec{\beta}^{*[v]}\,\vec{\alpha}^{[n]}}{\sqrt{[v!]\cdot[n!]}}\langle[v]|\hat{V}|[n]\rangle, \qquad (44)$$

причем

$$\langle[m]|\hat{V}|[k]\rangle = \frac{\sqrt{[m!][k!]}}{(2\pi i)^{2N}}\oint\oint d\vec{\alpha}\,d\vec{\beta}^{*}\,\frac{e^{\frac{1}{2}\left(|\vec{\alpha}|^2 + |\vec{\beta}|^2\right)}\langle\vec{\beta}|\hat{V}|\alpha\rangle}{\left[\vec{\beta}^{*}\right]^{[m+1]}\left[\vec{\alpha}\right]^{[k+1]}}, \qquad (45)$$

поэтому для вычисления интегралов перекрывания достаточно получить выражение для

$$\exp\left[\tfrac{1}{2}\left(|\vec{\beta}|^2 + |\vec{\alpha}|^2\right)\right]\langle\vec{\beta}|\hat{V}|\vec{\alpha}\rangle = \qquad (46)$$

$$= \exp\left[\tfrac{1}{2}|\vec{\beta}|^2 + |\vec{\alpha}|^2\right]\langle 0|\hat{T}^{+}(\vec{\beta})\,\hat{T}(\vec{\delta})\,\hat{\mathcal{D}}(\vec{\rho})\,\hat{\mathcal{U}}(\hat{R}')\,\hat{T}(\vec{\alpha})|0\rangle.$$

Задача 36. Показать, что результаты расчета (46) имеют вид:

$$\left[\det\hat{\omega}\cdot\det\hat{\omega}'\right]^{N}\cdot\det\left[\hat{R}\left(\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\hat{R}+\hat{\omega}\right)\right]^{-\frac{1}{2}}\times$$

$$\times\exp\left[-\frac{1}{2}\vec{\Delta q}^{T}\hat{\omega}'\left\{\vec{\Delta q}+\hat{R}\left(\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\hat{R}+\hat{\omega}\right)^{-1}\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\vec{\Delta q}\right\}\right]\times$$

$$\times\exp\left[\vec{\beta}^{+}\hat{\mathcal{F}}\vec{\beta}+\vec{\beta}^{+}\vec{G}+\vec{\alpha}^{+}\hat{\mathcal{N}}\vec{\alpha}+\vec{\alpha}^{+}\vec{\mathcal{M}}+\vec{\beta}^{+}\hat{Q}\vec{\alpha}\right]. \tag{47}$$

Здесь введены обозначения

$$\hat{\mathcal{F}}=2\hat{\omega}^{\frac{1}{2}}\left(\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\hat{R}+\hat{\omega}\right)^{-1}\hat{\omega}^{\frac{1}{2}}-\hat{I};$$

$$\vec{G}=-2\hat{\omega}^{\frac{1}{2}}\left(\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\hat{R}+\hat{\omega}\right)^{-1}\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\vec{\Delta q};$$

$$\hat{\mathcal{N}}=2\hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}\hat{R}\left(\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\hat{R}+\hat{\omega}\right)^{-1}\hat{R}^{T}\hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}-\hat{I};$$

$$\vec{\mathcal{M}}=-2\hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}\left[\hat{R}\left(\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\hat{R}+\hat{\omega}\right)^{-1}\hat{R}^{T}\hat{\omega}'-\hat{I}\right]\vec{\Delta q};$$

$$\vec{Q}=4\hat{\omega}^{\frac{1}{2}}\left(\hat{R}^{T}\hat{\omega}'\hat{R}+\hat{\omega}\right)^{-1}\hat{R}^{T}\hat{\omega}'^{\frac{1}{2}}.$$

Задача 37. Рассмотреть одномерный случай ($N=1$, $\hat{R}=1$) и определить явное выражение для интегралов Франка-Кондона.

В общем случае 1-мерной колебательной системы интегралы перекрывания можно представить как:

$$I_{vn'}=\langle v|\hat{V}|n\rangle=I_{oo}\,(v!\,n!)^{-\frac{1}{2}}\,H_{vn}(\sigma,\tau);$$

$$I_{oo}=\left(\frac{\omega+\omega'}{2\sqrt{\omega\omega'}}\right)^{\frac{1}{2}}\exp\left[-\frac{\omega\omega'}{2(\omega+\omega')}(\Delta R)^{2}\right],$$

где $H_{vn}(\sigma,\tau)$ — полином Эрмита от 2-х переменных, а σ,τ имеют вид [67]

$$\sigma=\frac{\omega'\sqrt{2\omega}}{\omega+\omega'}\Delta R,\qquad \tau=-\frac{\omega\sqrt{2\omega'}}{\omega+\omega'}\Delta R.$$

4в). Нестационарный сингулярный осциллятор

Рассмотрим систему, описываемую гамильтонианом:

$$\hat{H} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + x^2) + \frac{g}{x^2} \tag{48}$$

Такая система была изучена в работах Калоджеро [69] , где было показано, что если $g > -\frac{1}{8}$, то в задаче имеется дискретный спектр, а если $g < -\frac{1}{8}$, то возникает сплошной спектр (падение частицы на центр).

Будем далее, для определения, считать, что $g > 0$. Групповые аспекты данной задачи (стационарный сингулярный осциллятор) были рассмотрены в [70] . Собственные значения E_n оператора $\hat{H}$ имеют вид [41,69]

$$E_n = 2n + d + \frac{1}{2} \quad , \quad d = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + 2g} . \tag{49}$$

При $g \to 0$, $d \to 1$ и волновые функции задачи переходят в волновые функции гармонического осциллятора, соответствующие, однако, только нечетным значениям квантового числа n . Поскольку спектр гамильтониана (48) эквидистантный, то в соответствии с общим подходом, рассмотренном в § 3а, должны существовать повышающие и понижающие операторы, которые удовлетворяют соотношениям:

$$[\hat{H}, \hat{A}^+] = 2\hat{A}^+ \quad , \quad [\hat{H}, \hat{A}] = -2\hat{A} . \tag{50}$$

<u>Задача 38</u>. Показать, что соотношениям (50) удовлетворяют операторы $\hat{A}^+ = \hat{a}^{+2} - g/x^2$, $\hat{A} = \hat{a}^2 - g/x^2$, причем $[\hat{A}, \hat{A}^+] = 4\hat{H}$. Ввести операторы $\hat{K}_0 = \frac{1}{2}\hat{H}$, $\hat{K}_\pm = \hat{K}_1 \pm i\hat{K}_2$, $K_+ = -\frac{1}{2}\hat{A}^+$, $\hat{K}_- = -\frac{1}{2}\hat{A}$ и убедиться, что они удовлетворяют коммутационным соотношениям алгебры $\widetilde{SU}(1,1)$ вида (7).

Оператор Казимира $\hat{C} = \hat{K}_0^2 - \hat{K}_1^2 - \hat{K}_2^2$ на собственных функциях гамильтониана (48) сводится к числу $k(k-1) = \frac{3}{16} - \frac{1}{4}d(d-1)$. Откуда $k = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + d\right) = \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{16} + \frac{g}{2}}$. Последнее означает, что в пространстве собственных векторов гамильтониана сингулярного осциллятора реализуется унитарное неприводимое представление T_+^k дискретной серии группы $\widetilde{SU}(1,1)$, $k = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2} + d\right)$. Иными словами $\widetilde{SU}(1,1)$ является группой динамической симметрии данной системы.

Задача о N -мерном изотропном сингулярном осцилляторе рассматривалась в работе [7I], где показано, что в этом случае группой динамической симметрии является группа $\widetilde{SU(1,1)} \otimes SO(N)$.

Рассмотрим теперь квантовую систему, гамильтониан который явно зависит от времени и описываемую уравнением Шредингера:

$$i\,\frac{\partial|\psi(t)\rangle}{\partial t} = \hat{H}(t)|\psi(t)\rangle; \tag{5I}$$

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2}\left(\hat{p}^2 + \omega^2(t)x^2\right) + g/x^2;$$
$$\omega(t_0) = 1. \tag{52}$$

Генераторы группы динамической симметрии для стационарного осциллятора $(\omega(t) \equiv 1)$ имеют вид:

$$\hat{K}_0 = \frac{1}{4}\left(\hat{p}^2 + x^2\right) + \frac{g}{x^2}; \quad \hat{K}_1 = \frac{1}{4}\left(\hat{p}^2 - x^2\right) + \frac{g}{2x^2}; \tag{53}$$
$$\hat{K}_2 = \frac{1}{4}\left(\hat{p}\cdot x + x\hat{p}\right).$$

Эти операторы переводят одно решение уравнения (5I) взятое в момент времени t_0 в другое решение в тот же момент времени

$$\hat{K}_i\,|\psi(t_0)\rangle = a_i\,|\psi'(t_0)\rangle; \tag{54}$$

Подействовав на (54) оператором эволюции $\hat{U}(t,t_0)$, получим:

$$\hat{K}_i(t)\,|\psi(t)\rangle = a_i\,|\psi'(t)\rangle; \tag{55}$$

$$\hat{K}_i(t) = \hat{U}(t,t_0)\,\hat{K}_i\,\hat{U}^{-1}(t,t_0). \tag{56}$$

Ясно, что $\hat{K}_i(t)$ удовлетворяют стандартным коммутационным соотношениям алгебры Ли группы $SU(1,1)$. Так как собственное значение инвариантного оператора $\hat{C} = \hat{K}_0^2(t) - \hat{K}_1^2(t) - \hat{K}_2^2(t)$ от времени не зависит, то и в нестационарном случае в гильбертовом пространстве решений уравнения (5I) действует неприводимое представление T_+^K группы $\widetilde{SU(1,1)}$ (в нашей задаче $\frac{3}{4} \leq k < \infty$).

Для построения операторов $\hat{K}_i(t)$ необходимо знать оператор эволюции $\hat{U}(t,t_0)$, подчиняющийся уравнению

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t,t_0) = \hat{H}(t)\hat{U}(t,t_0). \tag{57}$$

Нетрудно видеть, что

$$\hat{H}(t) = \Omega_0(t)\hat{K}_0 - \Omega_1(t)\hat{K}_1, \tag{58}$$

где $\Omega_{0,1}(t) = \omega^2(t) \pm 1$, а $\hat{K}_0$ и $\hat{K}_1$ – стационарные операторы из (53). (58) можно переписать в виде:

$$\hat{H}(t) = \Omega_0(t)\hat{K}_0 - \tfrac{1}{2}\Omega_1(t)\left(\hat{K}_+ + \hat{K}_-\right). \tag{58'}$$

Будем искать оператор $\hat{\mathcal{U}}(t,t_0)$ в виде

$$\hat{\mathcal{U}}(t,t_0) = e^{a(t)\hat{K}_+}\, e^{b(t)\hat{K}_0}\, e^{c(t)\hat{K}_-}. \tag{59}$$

Подставляя (59) в уравнение (57) и используя (58'), приходим к системе уравнений :

$$\begin{aligned} &\dot{a} - a\dot{b} + a^2\dot{c}\,e^{-b} = \frac{i\Omega_1}{2}; \\ &\dot{b} - 2a\dot{c}\,e^{-b} = -i\Omega_0; \\ &\dot{c}\,e^{-b} = \tfrac{i}{2}\Omega_1. \end{aligned} \tag{60}$$

Откуда нетрудно получить уравнение:

$$\dot{a} = \tfrac{i}{2}\left[\Omega_1(t)a^2 - 2\Omega_0(t)a + \Omega_1(t)\right]; \tag{6I}$$

$$a(t_0) = 0.$$

<u>Задача</u> 39. Вывести уравнение (60), перейдя к точному неунитарному представлению группы $SU(1,1)$, для которого

$$\hat{K}_0 = \tfrac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}, \quad \hat{K}_+ = \begin{pmatrix}0 & i\\ 0 & 0\end{pmatrix}, \quad \hat{K}_- = \begin{pmatrix}0 & 0\\ i & 0\end{pmatrix}.$$

Подстановкой $a = \dfrac{i\dot{\xi} + \xi}{i\dot{\xi} - \xi}$ уравнение (6I) сводится к уравнению

$$\ddot{\xi} + \omega^2(t)\xi = 0 \tag{62}$$

для классического гармонического осциллятора с переменной частотой. Начальное условие имеет вид $\dot{\xi}(t_0) = i\xi(t_0)$. Можно, например, взять $\xi(t_0) = 1$, $\dot{\xi}(t_0) = i$. Функции a, b, c выражаются через $\xi(t)$ и $\dot{\xi}(t)$:

$$a(t) = \frac{i\dot{\xi} + \xi}{i\dot{\xi} - \xi}, \quad c(t) = \frac{i\dot{\xi} - \bar{\xi}}{i\dot{\xi} - \xi}, \quad e^{-\frac{b(t)}{2}} = \frac{-i\dot{\xi} - \xi}{2}, \tag{63}$$

Таким образом, для нахождения оператора эволюции квантовой нестационарной задачи достаточно решить классическое уравнение (62).

Пусть при $t \to \pm\infty$ частота стремится к постоянным пределам, соответственно ω_+ и $\omega_- = 1$ (в этом случае $t_0 = -\infty$). В $\pm\infty$ существуют стационарные состояния, являющиеся собственными для гамильтонианов $\hat{H}(-\infty) = 2\hat{K}_0$ и $\hat{H}(+\infty) = \Omega_0^+ \hat{K}_0 - \Omega_1^+ \hat{K}_1$, где $\Omega_{0,1}^+ = \omega_+^2 \pm 1$ и можно вычислить вероятность перехода из начального состояния $|n,->$ в состояние $|m,+>$ при $t \to +\infty$, которая равна

$$w_{mn} = |<m,+|\,\hat{S}\,|n,->|^2, \tag{64}$$

где $\hat{S} = \lim\limits_{\substack{t_0 \to -\infty \\ t \to +\infty}} \hat{U}(t, t_0)$ (S - матрица).

Гамильтонианы $\hat{H}(+\infty)$ и $\hat{H}(-\infty)$ связаны унитарным преобразованием:

$$\hat{H}(+\infty) = e^{i\chi\hat{K}_2}\,\hat{H}(-\infty)\,e^{-i\chi\hat{K}_2}, \tag{65}$$

где $\chi = \operatorname{arcth}\frac{\Omega_1^+}{\Omega_0^+}$,

тогда

$$w_{mn} = |<m,-|\,\hat{V}\,|n,->|^2, \tag{66}$$

здесь

$$\hat{V} = e^{-i\chi\hat{K}_2}\,\hat{S} \tag{67}$$

является оператором из представления группы $\widetilde{SU(1,1)}$, приведем его к виду:

$$\hat{V} = e^{-i\psi\hat{K}_0}\,e^{-i\beta\hat{K}_2}\,e^{-i\varphi\hat{K}_0}, \tag{68}$$

тогда (см. § Iд)

$$w_{mn} = |<m,-|\,e^{-i\beta\hat{K}_2}\,|n,->|^2 = |\Delta^k_{mn}(\beta)|^2. \tag{69}$$

Значения параметра β нетрудно получить из явного вида для оператора эволюции

$$\operatorname{th}^2\frac{\beta}{2} = \left|\frac{a - \operatorname{th}\chi/2}{a - \operatorname{th}\chi/2 + 1}\right|_{t\to+\infty} = \rho. \tag{70}$$

Здесь ρ - иммет смысл коэффициента отражения от одномерного барьера :

$$K^2(x) = 2(E - V) = \omega^2(x) \; ; \; [57]$$

$$\rho = \left| \frac{C_2}{C_1} \right|^2$$

(при $t \to +\infty$ решение уравнения (62) ищем в виде:
$\xi(t) = C_1 e^{i\omega_+ t} + C_2 e^{-i\omega_- t}$). Для W_{mn} получаем окончательное выражение

$$W_{mn} = \frac{m!}{[(m-n)!]^2\, n!} \; \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - d - n)}{\Gamma(\frac{1}{2} - d - m)} \left(sh \frac{\beta}{2} \right)^{2(m-n)} \left(ch \frac{\beta}{2} \right)^{2(m+n+d)+1}$$

$$\times \left\{ F\left(m+d+\tfrac{1}{2}, m+1; m+1-n; -sh^2 \frac{\beta}{2} \right) \right\}^2 \qquad (71)$$

(мы использовали формулу (I.50) и учли, что $\mu = \frac{1}{2}(2m + d + \frac{1}{2})$ собственное значение оператора $\hat{K}_0$).

Обсудим в заключении важный частный случай периодической зависимости гамильтониана от времени. Если $\hat{H}(t+T) = \hat{H}(t)$, то существуют решения $|\Psi_\varepsilon(t)\rangle$ обладающие свойством:

$$|\Psi_\varepsilon(t+T)\rangle = e^{-i\varepsilon T} |\Psi_\varepsilon(t)\rangle \qquad (72)$$

для любых t .

Величина ε называется квазиэнергией системы [57], а состояния $|\Psi_\varepsilon(t)\rangle$ - квазиэнергетическими.

Для процессов, протекающих под действием периодических во времени полей, квазиэнергия играет роль, аналогичную энергии в стационарном случае.

Покажем, что спектр квазиэнергий нашей системы (как и в случае осциллятора [65]) можно найти чисто теоретикогрупповым способом. В самом деле

$$|\Psi_\varepsilon(t_0+T)\rangle = \hat{U}(t_0+T, t_0) |\Psi_\varepsilon(t_0)\rangle = e^{-i\varepsilon T} |\Psi_\varepsilon(t_0)\rangle . \qquad (73)$$

Таким образом, состояния с квазиэнергией, в момент времени t_0 являются собственными векторами оператора сдвига на период. Следовательно, зная $U(t_0+T, t_0)$, можно получить и спектр квазиэнергий.

Для периодически изменяющейся частоты, линейно независимые решения уравнения (62) (в соответствии с теоремой Флоке [17]) имеют вид:

$$\xi_1(t) = e^{i\Lambda t} u_1(t) \quad , \xi_2(t) = e^{-i\Lambda t} u_2(t), \qquad (74)$$

где $u_1(t)$ и $u_2(t)$ периодические функции с периодом T. Если $Im\,\Lambda = 0$, то имеем зону устойчивости. Если $Re\,\Lambda = 0$, то имеем зону неустойчивости. В зоне устойчивости $\xi_1(t) = \overline{\xi_2}(t)$ и в качестве двух линейно независимых решений можно взять ξ и $\overline{\xi}$, где ξ удовлетворяет указанным в (62) начальным условиям.

В момент $t_0 + T$ получаем $\xi = e^{i\Lambda T}$, $\dot{\xi} = i e^{-i\Lambda T}$. Откуда находим, подставляя в (63)

$$a(t_0+T) = c(t_0+T) = 0 \quad , b(t_0+T) = -2i\Lambda T \, . \qquad (75)$$

Итак в <u>зоне устойчивости</u>

$$\hat{U}(t_0+T, t_0) = e^{-i2\Lambda T \hat{K}_0} . \qquad (76)$$

Спектр квазиэнергии здесь дискретный и равен

$$\varepsilon_n = 2\Lambda \nu_n , \qquad (77)$$

где ν_n - собственное значение оператора $\hat{K}_0$, равное

$$\nu_n = \frac{1}{2}\left(2n + d + \frac{1}{2}\right),$$

то есть спектр квазиэнергий эквидистантный; Λ сложным образом зависит от изменения частоты $\omega(t)$. Для нахождения Λ нужно решить уравнение (62).

В <u>зоне неустойчивости</u>

$$\xi_1(t) = \frac{\xi + \overline{\xi}}{2} \quad , \qquad \xi_2(t) = \frac{\xi - \overline{\xi}}{2},$$

откуда в момент времени $t_0 + T$ имеем:

$$\xi(t_0+T) = e^{i\Lambda T} ; \ \overline{\xi}(t_0+T) = e^{-i\overline{\Lambda} T} ; \qquad (\Lambda \text{ -мнимое})$$

$$U(t_0+T, t_0) = exp\left[-i\left(2i\Lambda T \hat{K}_2\right)\right] . \qquad (78)$$

Спектр оператора $\hat{K}_2$ непрерывен и заполняет всю вещественную ось $-\infty < \nu < +\infty$. Спектр квазиэнергий $\mathcal{E}_\nu = 2i\Lambda\nu$ является непрерывным $-\infty < \mathcal{E}_\nu < \infty$.

Если $\Lambda = 0$, то возникает особая ситуация. В этом случае одно из решений ξ_1, ξ_2 периодическое, а другое растет линейно по t. В момент времени $t_0 + T$ имеем:

$$\xi = 1 + iT \ , \quad \dot{\xi} = i .$$

Откуда
$$\hat{U}(t_0+T, t_0) = e^{-iT(\hat{K}_0 + \hat{K}_1)} \tag{79}$$

Спектр квазиэнергий в этом случае совпадает со спектром оператора $\hat{K}_0 + K_1 = \frac{1}{2}(\hat{P}^2) + g/x^2$, спектр которого непрерывен и ограничен снизу $0 \leq \nu < \infty$.

В произвольный момент времени квазиэнергетические состояния $|\Psi_\mathcal{E}(t)\rangle$ являются собственными для операторов:

$2\Lambda K_0(t)$ – в зоне устойчивости;

$2i\Lambda K_2(t)$ – в зоне неустойчивости;

$\hat{K}_0(t) + \hat{K}_1(t)$ – на границе зон устойчивости и неустойчивости.

Задача 40. Показать (с использованием выражения для оператора эволюции $U(t, t_0)$), что явный вид операторов $\hat{K}_i(t)$ следующий:

$$\hat{K}_0(t) = \frac{1}{2}\Big[(|\dot{\xi}|^2 - |\xi|^2)\hat{K}_0 + (|\xi|^2 - |\dot{\xi}|^2)\hat{K}_1 - (\dot{\bar{\xi}}\xi + \dot{\xi}\bar{\xi})\hat{K}_2\Big];$$

$$\hat{K}_1(t) = \frac{1}{4}\Big[(\dot{\xi}^2 + \xi^2 + \dot{\bar{\xi}}^2 + \xi^2)\hat{K}_0 + (\xi^2 - \dot{\xi}^2 + \bar{\xi}^2 - \dot{\bar{\xi}}^2)\hat{K}_1 - 2(|\xi|^2 + |\dot{\xi}|^2)\hat{K}_2\Big]; \tag{80}$$

$$\hat{K}_2(t) = \frac{i}{4}\Big[(\dot{\xi}^2 + \xi^2 - \dot{\bar{\xi}}^2 - \bar{\xi}^2)\hat{K}_0 + (\xi^2 - \dot{\xi}^2 - \bar{\xi}^2 + \dot{\bar{\xi}}^2)\hat{K}_1 + 2(|\dot{\xi}|^2 - |\xi|^2)K_2\Big].$$

Введем, наконец, когерентные состояния группы $\widetilde{SU(1,1)}$ (в представлении T_+^k)

$$|\xi\rangle = (1 - |\xi|^2)^k e^{\xi\hat{K}_+}|0\rangle \ , \quad |\xi| < 1 \tag{81}$$

где $\hat{K}_-|0\rangle = 0$, $\hat{K}_0|0\rangle = \nu_0|0\rangle$, $\langle 0|0\rangle = 1$. (82)

В произвольный момент времени $|\zeta, t\rangle = \hat{U}(t,t_0)|\zeta\rangle$ поскольку $\hat{U}(t,t_0)$ – оператор из представления группы $\widetilde{SU(1,1)}$, то

$$|\zeta, t\rangle = e^{i\Phi(t)}|\zeta(t)\rangle, \tag{83}$$

где

$$|\zeta(t)\rangle = (1-|\zeta(t)|^2)^k e^{\zeta(t)\hat{K}_+}|0\rangle, \tag{84}$$

$\zeta(t)$ – задает эволюцию когерентного состояния со временем:

$$\zeta(t) = \frac{\zeta\,[e^{b(t)} - a(t)\cdot c(t)] + a(t)}{1 - \zeta\cdot c(t)} = \tag{85}$$

$$= \frac{\zeta(|\dot{y}|^2 + |y|^2 + 2) - \dot{y}^2 - y^2}{(i\dot{y} - y)[i\dot{y} - y - \zeta(i\dot{\bar{y}} - \bar{y})]},$$

где $y(t)$ решение уравнения $\ddot{y}(t) + \omega^2(t)y = 0$ с начальными условиями $y(t_0) = 1$, $\dot{y}(t_0) = i$.

Итак, применение метода группы динамической симметрии позволило полностью проанализировать поведение системы; вычислить вероятности переходов, найти спектр квазиэнергий (для периодического гамильтониана).

Задача о нестационарном сингулярном осцилляторе иными методами рассматривалась в работах [72] , [73].

Л И Т Е Р А Т У Р А

I. Эйзенхарт Л.П. Непрерывные группы преобразований. М., ИЛ ,1947.

2. Желобенко Д.П. Компактные группы Ли и их представления. М.,"Наука", 1970 .

3. Виленкин Н.Я. Специальные функции и теория представлений групп. М., "Наука", 1967.

4. Наймарк М.А. Теория представлений групп. М., "Наука", 1976.

5. Кириллов А.А. Элементы теории представлений. М., "Наука", 1972.

6. Хелгасон С. Дифференциальная геометрия и симметрические пространства. М., "Мир", 1964.

7. Теория групп и элементарные частицы. Сборник статей под редакцией Д.Иваненко. М., "Мир", 1967.

8. Hermann R., Lie groups for physicists. W.A.Benjamin Inc. 1966.

9. Зуланке Р., Винтген П. Дифференциальная геометрия и расслоения. М., "Мир", 1975.

10. Стернберг С. Лекции по дифференциальной геометрии. М.,"Мир",1970.

11. Дирак П.А.М. Принципы квантовой механики. М., Физматгиз, 1960.

12. Кемпфер Ф. Основные положения квантовой механики. М.,"Мир",1967.

13. Давыдов А.С. Квантовая механика. М., "Наука", 1973.

14. Гельфанд И.М., Виленкин Н.Я. Обобщенные функции.тт.IУ,У, М., Физматгиз, 1962, 1964.

15. Antoine J.P. J Math. Phys. 10, 53; 2276 (1969).
Melsheimer O., J Math. Phys. 15, 902; 917 (1974).

16. Боголюбов Н.Н., Логунов А.А., Тодоров И.Т. Основы аксиоматического подхода в квантовую теорию поля. М., "Наука", 1960.

17. Арнольд В.И. Математические методы классической механики. М., "Наука", 1974.

18. Berezin F.A. Preprint ITP-74-20E, Kiev, (1974)

19. а). Костант Б. УМН, 28, 163, 1973.
б). Simms D.J. Z. Naturf. 28a, 538, (1972).

20. И.фон Нейман. Математические основы квантовой механики. М.,"Наука", 1964.

21. Кириллов А.А. УМН, 17, 57, 1962.

22. Вигнер Е. Теория групп. М., ИЛ , 1961.

23. Швебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля. М., ИЛ , 1963.

24. Сигал И. Математические проблемы релятивистской физики. М.,"Мир", 1968.

25. Мишель Л., Шааф М. Симметрия в квантовой физике. М., "Мир",1974. (Лекции М.Шаафа).
26. Новожилов Ю.В. Введение в теорию элементарных частиц. М.,"Наука", 1972.
27. Стритер Р., Вайтман А. PCT, Спин и статистика и все такое. М., "Мир", 1966.
28. Менский М.Б. Метод индуцированных представлений. Пространство - время и концепция частиц. М., "Наука", 1976.
29. Wigner E.P. Ann. Math. 40, 149, (1939).
30. Inönu E., Wigner E.P. Nuovo Cimento, 9, 705, (1952).
31. Levy-Leblond J.M. J Math Phys. 4, 776, (1963).
32. Levy-Leblond J.M. in „Group Theory and its Applications" Vol 2. - Ed by E. Loeble N-Y, 1971, p. 221.
33. Аронсон Э.Б., Малкин И.А., Манько В.И. ЭЧАЯ, 5, 122, 1974.
34. См.[25] (лекции С.Мишеля.)
35. Dothan Y, Phys Rev, 2D, 2944, (1970).
36. Dothan Y, Gell-Mann M, Neeman Y, Phys Lett, 17, 148, (1965) Mukunda N., O'Raifeartaigh L., Sudarshan E. Phys Rev Lett. 15, 1041, (1965); 19, 322, (1965)
37. Andersen R.L., Kumei S., Wulfman C.E., Rev. Mex. Fis. 21, 1; 21; (1972). Phys. Rev. Lett. 28, 988, (1972)
38. Kleinert H.M., Forts. der. Phys 16, 1, (1968).
39. Nieder U., Helv. Phys. Acta, 45, 802, 1972; Hagen C.R., Phys. Rev 5D, 377 (1972); Barut A.O. IC/73/24, Trieste, 1973.
40. а) Попов В.С. В сборнике: Физика высоких энергий и теория элементарных частиц. Киев, "Наукова Думка", 1967, с. 702.
   б) Bander M., Itzykson C., Rev. of Mod. Phys. 38, 330, 346, (1966).
41. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. М., "Наука",1973.
42. а). Barut A.O., Phys Rev, 156, 1538, (1967).
   б). Barut A.O., Kleinert H., Phys Rev 156, 1541, (1967).
43. Малкин И.А., Манько В.И. Письма ЖЭТФ, 2, 23, 1965; ЯФ, 3,372,1966.
44. Тодоров И.Т. (см. [40а] стр. 237).
45. Дмитриев В.Ф., Румер Ю.Б. ТМФ, 5, 276, 1970.
46. Barut A.O., IC/73/179, Trieste, 1973.
47. а).Теоретико-групповые методы в физике. Труды ФИАН, т.70, М., "Наука", 1973.
   б).Когерентные кооперативные явления. Труды ФИАН, т.87,М.,"Наука" 1976.

48. Barut A.O., Rasmussen W, IC/73/10, Trieste, 1973.
49. Fronsdal C. IC/68/85, Trieste, 1968.
50. Грановский Я.И. ЖЭТФ, 70, 2035, 1976.
51. Perelomov A.M., Commun. Math Phys. 26, 222 (1972)
52. Glauber R.J Phys Rev, 131, 2766, (1963).
53. Клаудер Дж., Сударман Э. Основы квантовой оптики. М.,"Мир", 1970.
54. Когерентные состояния в квантовой теории (сб.статей),"Мир", 1972.
55. Грановский Я.И., Димашко Ю.А. ЖЭТФ, 68, 1991, 1975.
56. Lieb E.H., Comm. Math. Phys. 31, 327, 1973
57. Arecchi F.T., Counters E., Gilmore R., Phys Rev. 6A, 2211 (1972)
58. Переломов А.М. Некоторые методы теории представлений групп, используемые в ядерной физике, М., МИФИ, 1974.
59. Демков Ю.Н. Вестник ЛГУ. II, 127, 1953.
60. Jauch J.M., Hill E, Phys. Rev 57, 641, (1940).
61. Baker M. Phys Rev, 103, 1119, (1956).
62. Базь А.И., Зельдович Л.Б., Переломов А.М. Рассеяние, реакции и распады в нерелятивистской квантовой механике. М., "Наука", 1971.
63. Нгуен Ван Хьеу. Лекции по унитарной симметрии элементарных частиц. М., Атомиздат, 1967.
64. Haskell T.G., Wybourne B.G., Proc Roy. Soc. A334, 541, (1973)
65. Переломов А.М., Попов В.С., ТМФ, I, 360, 1969.
66. а).Боголюбов Н.Н. Изв. АН СССР сер. физическая, II, 77, 1947.
а). Solomon A.I. J Math. Phys. 12, 390, 1971.
67. Doktorov E.V., Malkin I.A. Man'ko V.I. J Mol. Spect, 56, 1, (1975); J Phys. 9B, 507, (1976).
68. Sharp T.E., Rosenstock H.M. J. Chem. Phys. 41, 3453, (1964)
69. Calogero F J. Math. Phys. 10, 2191; 2197, (1969).
70. Переломов А.М. ТМФ, 6, 364, 1971.
71. Горохов А.В. Сборник статей под ред. Ковнера М.А. Саратов, изд-во СГУ, 1972, с. 50.
72. Camiz, P. Gerardi A., Marchioro C J. Math. Phys. 12, 2040 (1971)
73. Dodonov V.V., Malkin I.A, Man'ko V.I., Physica, 59, 241, (1972).

СОДЕРЖАНИЕ