

MARIA LASOCKA

Badanie stanów rozproszeniowych i związanych atomu wodoru metodami geometryczno—grupowymi

WSTĘP

Wspólną cechą "algebraicznych" lub "grupowo-teoretycznych" modeli układów dynamicznych jest posługiwanie się niezwartymi grupami względnie niezwartymi algebrami, oraz ich nieskończone wymiarowymi unitarnymi reprezentacjami, przy czym przestrzeń reprezentacji identyfikuje się z przestrzenią Hilberta stanów dynamicznego układu kwantowego, realizującego się w różnych swoich stanach w postaci nieskończonego multipletu. Pojawiające się w latach 1960-1970 prace na temat "algebraicznych" modeli cząstek elementarnych bazują na analogii z algebraiczną teorią nierelatywistycznego atomu wodoru, którego zbiór wszystkich stanów związanych może zostać opisany przy pomocy nieredukowalnej reprezentacji niezwanej grupy $O(4,1)$. Takie niezwane grupy, względnie ich algebry Lie'go zostały nazwane grupami dynamicznymi. Nazwa ta ma odzwierciedlać ich własności dostarczania nieskończonych multipletów odpowiadających stanom układu kwantowego, którego wewnętrzna dynamika determinująca te stany jest opisana w pewien sposób przy pomocy grupy dynamicznej.

W ostatnich latach pojawiły się również nowe idee opisu prostych układów dynamicznych metodami geometrycznymi [9,11,12,13]. Oto krótki opis tej metody: Przestrzeń fazowa

M , klasycznego, skończenie wymiarowego układu z n -stopniami swobody jest $2n$ -wymiarową rozmaitością różniczkowalną. Ze struktury nawiasów Poissona wynika istnienie skośnie-symetrycznego tensora kowariantnego drugiego rzędu, który jest wyrażony w kanonicznej mapie lokalnej $(q_1 \dots q_n, p_1 \dots p_n)$ w postaci

$$\omega = \sum_{i=1}^n dp_i \wedge dq_i$$

oraz spełnia warunek: $d\omega=0$. Tensor ten został nazwany formą symplektyczną na rozmaitości M , zaś para (M, ω) jest nazwana rozmaitością symplektyczną. Grupę G nazywamy grupą niezmienniczą układu, jeśli działanie grupy na rozmaitości symplektycznej M jest takie, że dwuforma ω jest niezmiennicza względem transformacji grupy G (transformacje te są transformacjami kanonicznymi rozmaitości M). Przestrzeń stanów układu kwantowo-mechanicznego jest zbiorem H promieni (jednowymiarowych podprzestrzeni) zespolonej przestrzeni Hilberta H . Prawdopodobieństwo przejścia między dwoma promieniami obrazującymi stany kwantowo-mechaniczne układu jest zdefiniowane przez wartość bezwzględną iloczynu skalarnego wektorów jednostkowych generujących te promienie. Grupa G jest nazwana niezmienniczą grupą układu kwantowo-mechanicznego, jeśli działanie grupy G na przestrzeni H jest takie, że określone wyżej prawdopodobieństwo przejścia jest niezmiennikiem. Kwantowo-mechaniczny układ z przestrzenią H będziemy nazywać elementarnym, jeśli nie będą istnieć właściwe domknięte podprzestrzenie przestrzeni H niezmiennicze względem reprezentacji grupy G (tzn. jeśli grupa G działa na przestrzeni H poprzez swoją nieredukowalną reprezentację). Analogicznie układ klasyczny z przestrzenią fazową M będziemy nazywać elementarnym (w związku z działaniem grupy G) jeśli działanie grupy G na rozmaitości różniczkowalnej M jest tranzytywne (tzn. nie istnieją właściwe podzbiory rozmaitości M niezmiennicze względem działania grupy G).

Do klasyfikacji układów elementarnych przy pomocy grup Liego jako grup niezmienniczości używa się operatorów Casimira, które są niezmiennikami grupy G . Operatory Casimira są "wielomianami" skonstruowanymi na algebrze obwiedniej algebry Liego grupy G . W mechanice kwantowej podprzestrzenie generowane przez funkcje własne operatora Hamiltona o ustalonej wartości własnej E są przestrzeniami Hilberta stanów układu kwantowego z ustaloną energią E . W mechanice klasycznej mamy analogiczną sytuację: zbiór wszystkich klasycznych trajektorii ruchu w $2n$ -wymiarowej przestrzeni fazowej o ustalonej wartości energii E jest $(2n-2)$ -wymiarową rozmaitością symplektyczną. Idea geometrycznego kwantowania polega na tym, że startując z klasycznej przestrzeni fazowej M konstruujemy kwantową przestrzeń H . Konstrukcja powyższa winna być naturalna w tym sensie, że z istnienia niezmienniczej grupy G w mechanice klasycznej powinno wynikać istnienie reprezentacji tej grupy w przestrzeni stanów kwantowych. H. Kostant [9] otrzymał taką strukturę dzięki wprowadzeniu dodatkowej struktury zwanej "polaryzacją" na klasycznej przestrzeni fazowej. Algebraiczny opis nierelatywistycznego atomu wodoru pozwala otrzymać wszystkie informacje dotyczące tego układu, bez używania skomplikowanego aparatu teorii równań różniczkowych. Zasygnalizowanie metod geometrycznych oraz ich porównanie z metodami algebraicznymi wydaje się użyteczne, ze względu na ewentualne możliwości badania tymi metodami również innych układów dynamicznych.

WŁASNOŚCI KLASYCZNEGO RUCHU ELEKTRONU DOKOŁA JĄDRA

Jak wiadomo, rozpatrując klasycznie ruch cząstki w polu potencjalnym o potencjale $V(r) = -\frac{\alpha}{r}$, z funkcją Hamiltona:

$$H = \frac{p^2}{2} - \frac{\alpha}{r} \quad ; \quad m=1$$

zauważamy, że istnieje dodatkowa całka ruchu M zdefiniowana przez:

$$\vec{M} = \vec{L} \times \vec{p} + \alpha \frac{\vec{r}}{r} \quad \left| \quad \begin{array}{l} \vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \\ \vec{r} \end{array} \right. \quad \begin{array}{l} \text{- wektor mo-} \\ \text{mentu pędu} \\ \text{- wektor po-} \\ \text{łożenia} \end{array} \quad (1.1)$$

czyli tak zwany wektor Lenza, specyficzna dla potencjału kulombowskiego. Z definicji wektorów \vec{M} i \vec{L} wynika, że ich iloczyn skalarny jest równy zero.

$$\vec{L} \cdot \vec{M} = 0 \quad (1.2)$$

Ze związków 1.1 oraz 1.2 wnioskujemy również, że wektor \vec{M} ma kierunek dużej osi elipsy będącej klasycznym torem ruchu, w przypadku ujemnej energii. Wprowadzając wektor \vec{A} zdefiniowany następująco:

$$\vec{A} = \frac{1}{\sqrt{-2E}} \vec{M} \quad (1.3)$$

/A jest również całką ruchu/
otrzymujemy wyrażenie na energię:

$$E = -\frac{\alpha^2}{2(L^2 + A^2)} \quad (1.4)$$

Fundamentalną rolę w mechanice klasycznej odgrywają nawiasy Poissona, które dla całek ruchu \vec{L} i \vec{M} określonych przez wzory 1.1 przyjmują postać:

$$\left. \begin{array}{l} \{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L^k \\ \{L_i, M_j\} = \epsilon_{ijk} M^k \\ \{M_i, M_j\} = -2HE_{ijk} L^k \end{array} \right| \quad \begin{array}{l} \vec{M}(M_1, M_2, M_3) \\ \vec{L}(L_1, L_2, L_3) \end{array} \quad (1.5)$$

Związki powyższe formalnie można rozpatrywać jako algebrę Lie'go utworzoną z operatorów L_i, M_j . Wprowadzając w miejsce wektora \vec{M} wektor \vec{A} zdefiniowany wzorem 1.3 / $E < 0$ ustalone/ otrzymujemy "reguły komutacji" algebry Lie'go grupy $O(4)$.

$$\left. \begin{array}{l} \{L_i, L_j\} = \epsilon_{ijk} L^k \\ \{L_i, A_j\} = \epsilon_{ijk} A^k \\ \{A_i, A_j\} = \epsilon_{ijk} L^k \end{array} \right| \quad (1.6)$$

ALGEBRA LIE'GO GRUPY O/4/ JAKO ALGEBRA GRUPY SYMETRII
 POTENCJAŁU KULOMBOWSKIEGO W MECHANICE KWANTOWEJ ($E < 0$)

Zgodnie z ogólną ideą mechaniki kwantowej wektory reprezentujące wielkości fizyczne w mechanice klasycznej zostają zastąpione przez operatory hermitowskie. W związku z powyższym Hamiltonian atomu wodoru w jednostkach: $\mu = \hbar = \alpha = 1$ / $-\mu$ - masa zredukowana, α - stała występująca w potencjale/ ma postać:

$$H = \frac{1}{2} \vec{P}^2 - \frac{1}{r} \quad (2.1)$$

gdzie: $\vec{P} (P_x, P_y, P_z)$ jest operatorem pędu elektronu.

Wektor Lenza zastępujemy operatorem hermitowskim zdefiniowanym następująco:

$$\vec{M} = \frac{1}{\sqrt{-2H}} \left\{ (\vec{L} \times \vec{p}) - (\vec{p} \times \vec{L}) + \frac{\vec{r}}{r} \right\} \quad (2.2)$$

Wprowadzone wyżej operatory 2.1, 2.2 oraz operator krętu \vec{L} spełniają następujące reguły komutacji:

$$[L_i, H] = [M_i, H] = 0 \quad i=1,2,3 \quad (2.3)$$

Ze związków 2.3 wynika, że operatory \vec{L} i \vec{M} są kwantowymi całkami ruchu. Nawiasy Poissona 1.5 zostają zastąpione przez komutatory:

$$\begin{aligned} [L_i, L_j] &= i \varepsilon_{ijk} L^k \\ [L_i, M_j] &= i \varepsilon_{ijk} M^k \\ [M_i, M_j] &= i \varepsilon_{ijk} L_k \end{aligned} \quad (2.4)$$

Zastępując operator M przez operator A zdefiniowany jak w 1.3, otrzymujemy następujące reguły komutacji dla operatorów L i A

$$\begin{aligned} [L_i, A_j] &= [A_i, A_j] = i \varepsilon_{ijk} L^k \\ [L_i, A_j] &= i \varepsilon_{ijk} A^k \quad i, j, k = 1, 2, 3 \end{aligned} \quad (2.5)$$

Uwaga: Definicja operatora A ma sens tylko wtedy, gdy działa on na stany związane o określonej ujemnej energii $E < 0$, wtedy w miejsce operatora H wstawiamy jego wartość własną w danym stanie.

Otrzymane reguły komutacji 2.5 są zgodne z regułami komutacji dla generatorów grupy O/4/. Grupa O/4/ jest grupą symetrii czterowymiarowej sfery:

$$X_1^2 + X_2^2 + X_3^2 + X_4^2 = 1$$

Hamiltonian 2.1 można wyrazić przez operatory L i A w następujący sposób:

$$H = -\frac{1}{2} (L^2 + A^2 + 1)^{-1} \quad (2.6)$$

Wprowadzając operatory:

$$I := \frac{L+A}{2} \quad (2.7)$$

$$K := \frac{L-A}{2}$$

otrzymujemy następujące reguły komutacji dla operatorów zdefiniowanych wzorem 2.7:

$$[I_k, I_l] = i \varepsilon_{klm} I^m \quad (2.8)$$

$$[K_k, K_l] = i \varepsilon_{klm} K^m \quad \text{dla dowolnych } k, l = 1, 2, 3$$

$$[I_k, K_l] = 0$$

Z reguł komutacji 2.8 wynika, że operatory I, K tworzą parę wzajemnie przemiennych "operatorów krętowych" generując algebrę iloczynu prostego O/3/x O/3/, która jak wiadomo, jest izomorficzna z algebrą Lie'go grupy O/4/. Operator Hamiltona można wyrazić następującym wzorem przy pomocy operatorów 2.7:

$$H = -\frac{1}{4} (I^2 + K^2 + \frac{1}{2})^{-1} \quad (2.9)$$

Jeżeli jako bazę reprezentacji grupy $O(4)$ przyjmiemy zbiór wspólnych wektorów własnych $|i, i_3, k, k_3\rangle$ operatorów I^2, I_3, K^2, K_3 , to w bazie tej Hamiltonian będzie diagonalny oraz jego wartości własne wyrażą się przez liczby kwantowe i, k , następująco:

$$E_{ik} = -\frac{1}{4} \frac{1}{4[(i+\frac{1}{2})^2 + (k+\frac{1}{2})^2]} \quad i, k = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (2.10)$$

Niereducowalne reprezentacje grupy $O(4)$ są określone przez wartości własne dwóch operatorów Casimira /4/

$$\begin{aligned} C_1 &= \frac{1}{2} (L^2 + A^2) = I^2 + K^2 \\ C_2 &= \vec{L} \cdot \vec{A} = I^2 - K^2 \end{aligned} \quad (2.11)$$

Ze związków 2.1 oraz 2.11 wynika, że:

$$\vec{L} \cdot \vec{A} = 0 \quad (2.12)$$

czyli

$$\left. \begin{aligned} I^2 &= K^2 \\ i &= k \end{aligned} \right\} \quad (2.13)$$

oraz

Za tym stany atomu wodoru będą opisywane przez reprezentacje grupy $O(4)$, dla których $C_2 = 0$ oraz $C_1 = 2 I^2$. Wartości własne operatora Casimira C_1 wynoszą:

$$C_1 = 2i(i+1) \quad i = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (2.14)$$

Dla reprezentacji $D(1,1) = D(1)$ otrzymamy wzór na wartość własną energii w dowolnym stanie:

$$E_i = \frac{1}{8(i+\frac{1}{2})^2} = -\frac{1}{2n^2} = E_n; \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

gdzie: $n = 2i + 1$ jest główną liczbą kwantową.

Wzór 2.16 pokrywa się ze znanym wzorem Rydberga-Bohra.

Wymiar reprezentacji $D(n)$ jest równy n^2 , co pokrywa się ze stopniem degeneracji poziomów energii. Powyższe rozumowanie wykazuje, że podprzestrzenie $H_{E_n} = H_n$ przestrzeni Hilberta stanów związanych atomu wodoru należących do energii $E_n = -\frac{1}{2n^2}$ są identyczne z przestrzeniami niereducowalnych reprezentacji $D(2n+1)$ grupy $O(4)$. Różnym wartościom energii $E_n < 0$ odpowiadają różne reprezentacje $D(n)$, $n = 1, 2, \dots$

ALGEBRA GRUPY $O(4,1)$ JAKO ALGEBRA SYMETRII
STANÓW ZWIĄZANYCH ATOMU WODORU

Jak zaznaczono na końcu rozdziału drugiego, algebra grupy $O(4)$ jest algebrą symetrii stanów związanych w ramach jednego poziomu widma energii $E_n < 0$. Zgodnie z ogólną ideą rozszerzeń algebr w zastosowaniu do wyznaczenia kompletnego zbioru stanów układu dynamicznego [5,8,14], należałoby znaleźć taką algebrę (niezwartą), która zawierałaby algebrę grupy $O(4)$ jako maksymalnie zwartą podalgebrę. Niżej zostanie wykazane, że przestrzeń jednej, unitarnej (nieskończenie wymiarowej) nieredukowalnej reprezentacji algebry Lie'go niezwartej ortogonalnej grupy $O(4,1)$ odtwarza zbiór wszystkich stanów związanych atomu wodoru. W poprzednim rozdziale jako bazę reprezentacji $D(n)$ grupy $O(4)$ przyjęliśmy zbiór wspólnych wektorów własnych: $|i, i_3, k_3\rangle$; $i = k = \frac{1}{2}(n-1)$

$$i_3, k_3 = -i, -i+1, \dots, +i$$

Baza $|i_1, i_3, k_3\rangle$ reprezentacji $D(n)$ jest identyczna z bazą $|n, n_1, n_2\rangle$, która w reprezentacji położeniowej odpowiada funkcjom falowym atomu wodoru we współrzędnych parabolicznych ($\xi = r+z$, $\eta = r-z$, φ).

$$\begin{aligned} |n, n_1, n_2\rangle &= |n_1, n_2, m\rangle = \Psi_{n_1, n_2, m}(\xi, \eta, \varphi) = \\ &= N_{n, n_1, n_2} e^{im\varphi} \exp\left(-\frac{\xi\eta}{2n}\right) \left(\frac{\xi\eta}{n^2}\right)^{\frac{m}{2}} L_{n_1+m}^m\left(\frac{\xi}{\eta}\right) L_{n_2+m}^m\left(\frac{\eta}{\xi}\right) \end{aligned} \quad (3.1)$$

gdzie: $n = n_1 + n_2 + m + 1$ $m \geq 0$.

zaś L_n^m - są wielomianami Laguerre'a.

Związki między liczbami kwantowymi (i, i_3, k_3) oraz (n_1, n_2, m) są następujące:

$$\begin{aligned} 2i+1 &= n_1 + n_2 + m + 1 \\ i_3 + k_3 &= m \\ i_3 - k_3 &= n_1 - n_2 \end{aligned} \quad (3.2)$$

Obie bazy odpowiadają postaci $O/3/ \times O/3/$ algebry Lie'go grupy $O/4/$. Aby wykazać, że algebra Lie'go grupy $O/4,1/$ jest szukaną niezwartą algebrą na zbiorze stanów $|n_1, n_2, m\rangle$ określamy reprezentację macierzową operatorów N_1^-, N_2^- , definiując jedyne niezerowe elementy macierzowe tych operatorów następująco:

$$\langle n_1-1, n_2, m | N_1^- | n_1, n_2, m \rangle = - [n_1(n_1+m)]^{1/2} \quad (3.3)$$

$$\langle n_1, n_2-1, m | N_2^- | n_1, n_2, m \rangle = + [n_2(n_2+m)]^{1/2}$$

Z definicji 3.3 wynika, że operatory $N_{1,2}^-$ obniżają liczby kwantowe n_1, n_2 o 1 nie zmieniając pozostałych. Określamy hermitowsko sprzężone operatory:

$$N_{1,2}^+ := (N_{1,2}^-)^* \quad (3.4)$$

Operatory te podwyższają odpowiednio o 1 liczby kwantowe n_1, n_2 . Konstruujemy następujące liniowe kombinacje operatorów $N_{1,2}^+$ i $N_{1,2}^-$ = z niowych wzorami 3.3, 3.4:

$$E_3 = \frac{1}{2} (N_1^+ + N_2^+) \quad (3.5)$$

$$A_3^\pm = \frac{1}{2} (N_1^\pm - N_2^\pm)$$

Następnie konstruujemy operatory $A_{1,2}^\pm$, które stanowią uzupełnienie A_3^\pm do wektorów /względem algebry $O/3/$ operatorów krętowych $L/$ definiując je poprzez:

$$A_k^\pm = i [L_{3k}, A_3^\pm] \quad k=1,2 \quad \begin{matrix} L_{31} = L_2 \\ L_{32} = -L_1 \end{matrix} \quad (3.6)$$

Wprowadzając oznaczenia:

$$L_{jk} = \varepsilon_{jki} L_i \quad (i,j,k=1,2,3) \quad L_{i5} = A_i^+ + A_i^- \quad i=1,2,3 \quad (3.7)$$

$$L_{i4} = M_i \quad (i=1,2,3) \quad L_{45} = -i(B^+ - B^-)$$

gdzie L_1, M_1 są znanymi już operatorami algebry grupy $O/4/$ /patrz część II niniejszej pracy /otrzymujemy następujące

reguły komutacji dla dziesięciu operatorów L_{ab} , $L_{ab} = L_{ba}$
 $a, b = 1, 2, \dots, 5$

$$[L_{ab}, L_{cd}] = 0 \quad cd \neq ab; [L_{ab}, L_{bc}] = i g_{bb} L_{ca} \quad (3.8)$$

$$g_{bb} = \begin{cases} -1 & \text{dla } b=5 \\ 1 & \text{dla } b=1, 2, 3, 4 \end{cases}$$

Relacje 3.8 są relacjami komutacji algebry Lie'go grupy $O(4,1)$. Zbiór wszystkich stanów $|n_1, n_2, m\rangle$ może być przyjęty za bazę przestrzeni pewnej nieredukowalnej reprezentacji tej algebry. Podzbiór generatorów L_i, M_i maksymalnie zwartej podalgebry $O(4) \subset O(4,1)$ pozostawia niezmienniczą podprzestrzeń napiętą na wektorach $|n_1, n_2, m\rangle$ o określonej wartości liczby kwantowej $n = n_1 + n_2 + m + 1$. Podprzestrzeń ta jest przestrzenią skończenie wymiarowej reprezentacji $D/n/$ tej zwartej podalgebry. Ze względu na tę podalgebrę liniowa powłoka H stanów $|n_1, n_2, m\rangle$ rozkłada się na sumę prostą przestrzeni Hilberta $H/n/$ reprezentacji $D/n/$.

$$H = \sum_{n/1}^{\infty} \oplus H_n \quad (3.9)$$

JEDNORODNA GRUPA LORENTZA JAKO GRUPA SYMETRII CIĄGŁEGO WIDMA ATOMU WODORU

Startując z poziomów energii, dla których $E > 0$ oraz wprowadzając operatory:^{*}

$$A_i = \frac{1}{\sqrt{2H}} \left\{ (\vec{L} \times \vec{p}) - (\vec{p} \times \vec{L}) + \frac{\vec{r}}{r} \right\} \quad (4.1)$$

otrzymujemy w miejsce reguł komutacji określonych wzorami 2.5 następujące reguły komutacji:

* Przy $E=0$ definicja ta nie ma oczywiście sensu.

$$\begin{aligned}
 [L_i, L_j] &= -[A_i', A_j'] = i\varepsilon_{ijk} L^k \\
 [L_i, A_j'] &= i\varepsilon_{ijk} A^k
 \end{aligned}
 \tag{4.2}$$

Reguły komutacji 4.2 są identyczne z regułami komutacji generatorów grupy Lorentza. Aby opisać przestrzeń utworzoną przez stany odpowiadające dodatniej energii musimy użyć nieredukowalnych reprezentacji grupy Lorentza /4, 10/. Grupa Lorentza posiada nieredukowalne reprezentacje dwóch typów: 1. Skończenie wymiarowe reprezentacje $D/J_1, J_2/$, które z wyjątkiem reprezentacji skalarnej $D/0,0/$ są reprezentacjami nieunitarnymi.

2. Nieskończenie wymiarowe unitarne reprezentacje, które z kolei można podzielić na dwie klasy: reprezentacje serii głównej oraz serii dopełniającej. W fizyce znalazły zastosowanie reprezentacje serii głównej $D/m, \varrho /$, przy czym m - jest liczbą całkowitą /dodatnią lub ujemną/, zaś ϱ - dowolną liczbą rzeczywistą /10/. Reprezentacje $D/m, \varrho /$ oraz $D/-m, -\varrho /$ są reprezentacjami równoważnymi, w związku z czym wystarczy rozpatrywać wartość $\varrho \geq 0$ (przy dowolnym znaku m). Operatory Casimira F, G grupy Lorentza można przedstawić w następującej postaci /4/:

$$\begin{aligned}
 F &= L^2 - A'^2 = \left[1 + \frac{1}{4}(\varrho^2 - m^2) \right] \\
 G &= (\vec{L} \vec{A}') = \frac{m\varrho}{4}
 \end{aligned}
 \tag{4.3}$$

Hamiltonian H wyrażony przy pomocy operatorów Casimira ma postać:

$$H = -\frac{1}{2}(F+1)^{-1} = -\frac{1}{2}(L^2 - A'^2 + 1)^{-1}
 \tag{4.4}$$

Ze związków 4.4 oraz 2.12 wynika, że wartości własne operatorów Casimira dla stanów rozproszonych atomu wodoru o określonej energii E wynoszą odpowiednio:

$$F = -\left(1 + \frac{1}{2E}\right)
 \tag{4.5}$$

Wartości własne operatorów F i G określają jednoznacznie nieredukowalne reprezentacje algebry grupy Lorentza. Z porównania związków 4.3 i 4.5 otrzymujemy związek między wartościami energii oraz parametrami $/m, \varrho/$ reprezentacji $D/m, \varrho/$.

$$m=0 \quad \varrho = \sqrt{\frac{2}{E}} \quad \left. \begin{array}{l} \text{dla ciągłego wid-} \\ \text{ma energii} \end{array} \right\} \text{ (4.6)}$$

Tak więc układ funkcji falowych stanów rozproszonych z określoną wartością $E > 0$ przedstawia bazę nieskończenie wymiarowej nieredukowalnej unitarnej reprezentacji $D/0, \varrho/$ grupy Lorentza. Fizyczna konsekwencja występowania nieskończenie wymiarowych reprezentacji polega na tym, że wartości orbitalnego momentu pędu w stanach rozproszonych są nieograniczone.

UKŁAD FUNKCJI FALOWYCH WIDMA CIĄGŁEGO ASYMPTOTYKA W PRZESTRZENI PĘDOWEJ

W celu otrzymania funkcji falowych stanów rozproszonych rozwiązujemy równanie Shrodingera w reprezentacji pędowej:

$$\left(\frac{1}{2} \vec{p}^2 - E\right) \Psi(\vec{p}) - \frac{1}{2\pi^2} \int \frac{\Psi(\vec{p}')}{|\vec{p} - \vec{p}'|^2} d^3 p' = 0 \quad (5.1)$$

Celem ułatwienia obliczeń przestrzeń pędową traktujemy jako rzut stereograficzny hiperboloidy, wprowadzając na niej współrzędne "hiperboliczne"

$$\begin{aligned} \xi_1 &= \sinh \alpha \sin \theta \cos \varphi \\ \xi_2 &= \sinh \alpha \sin \theta \sin \varphi \\ \xi_3 &= \sinh \alpha \cos \theta \\ \xi_0 &= \cosh \alpha \end{aligned} \quad (5.2)$$

/Uwaga! hiperboloida składa się z dwóch powłok: $1 \leq \xi_0 < +\infty$ oraz $-\infty < \xi_0 < -1$ Związki między współrzędnymi / $\vec{\xi}, \xi_0$ / a współrzędnymi / \vec{p} / rzutu stereograficznego są następujące:

$$\vec{\xi} = \frac{2p_0 \vec{p}}{p^2 - p_0^2} ; \xi_0 = \frac{p^2 + p_0^2}{p^2 - p_0^2} \quad (p_0 = \sqrt{2E}) \quad (5.3)$$

Z /5.3/ wynikają związki:

$$(\xi - \xi')^2 = - \frac{4p_0 |\vec{p} - \vec{p}'|^2}{(p^2 - p_0^2)(p'^2 - p_0^2)} \quad (5.4)$$

$$d^3 p = \left| \frac{p^2 - p_0^2}{2p_0} \right|^3 d^3 \xi / \xi_0$$

W nowych współrzędnych przyjmujemy następującą postać funkcji falowej:

$$\Psi(\xi) = C(p^2 - p_0^2) \Psi(\vec{p}) \quad (5.5)$$

i równanie Schrödingera sprowadzamy do postaci:

$$\Psi(\xi) - \frac{\eta}{2\pi^2} \int \frac{d\xi'}{\xi_0} \frac{\Psi(\xi')}{(\xi - \xi')^2} = 0 ; \eta = \pm \frac{1}{p_0} \quad (5.6)$$

Jak wykazano w [16,17] układ zupełny rozwiązań równania 5.6 można przedstawić w postaci:

$$\Psi_{g,l,m}(\xi) = \pi_{g,l}(\alpha) Y_{lm}(\theta, \varphi) ; g = \sqrt{\frac{2}{E}} \quad (5.7)$$

gdzie:

$$|\pi_{g,l}(\alpha) = (-)^{l+1} \frac{[(\frac{g}{4} + 1)^2] \dots (\frac{g}{4} + l^2)]^{\frac{1}{2}}}{2^{l+1} \Gamma(l + \frac{3}{2})} (\sinh \alpha)^2 \times \quad (5.8)$$

$$\times F(l+1 + \frac{i g}{2}, l+1 - \frac{i g}{2}, l + \frac{3}{2}, -\sinh^2 \frac{\alpha}{2})$$

Z warunkiem normalizacyjnym postaci:

$$\int_0^{+\infty} \sin^2 h \alpha d\alpha \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_0^{2\pi} d\varphi \Psi_{g,l,m}(\alpha, \theta, \varphi) \Psi_{g',l',m'}^*(\alpha, \theta, \varphi) = \delta(g-g') \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (5.9)$$

W pracach [16,17] wykazano również, że zbiór funkcji falowych /5.7/, przy ustalonym g , stanowi bazę kanoniczną nie-

skończenie wymiarowej reprezentacji $D/O, \mathcal{G}$ / grupy Lorentza. Zgodnie z powyższym winien zachodzić następujący związek:

$$\Psi_{E,l,m}(\xi) \equiv (p^2 - p_0^2)^2 \Psi_{E,l,m}(\vec{p}) = \begin{cases} c_1 \Psi_{g,l,m}(\xi) & |\vec{p}| > p_0 \\ c_2 \Psi_{s,l,m}(\xi) & |\vec{p}| < p_0 \end{cases} \quad (5.10)$$

Natomiast postać $\Psi_{g,l,m}(\alpha, \theta, \varphi)$ jest identyczna na obu powłokach hiperboloidy. Z punktu widzenia fizyki interesującym problemem jest zbadanie asymptotycznej postaci funkcji $\Psi_{g,l,m}$ określonych wzorem 5.7 w nieskończoności, bowiem w tej postaci powinny pojawić się przesunięcia fazowe δ_l , charakterystyczne dla potencjału kulombowskiego. W tym celu badamy postać asymptotyczną funkcji $\pi_{g,l}(\alpha)$ określonej wzorem 8.5.^{**} Wykorzystując własności funkcji gamma oraz funkcji hipergeometrycznej otrzymujemy:

$$\pi_{g,l}(\alpha) \rightarrow \frac{p^2 - p_0^2}{2p_0} \exp\left[i\eta \ln\left|\frac{p-p_0}{2p_0}\right| + i \arg \Gamma(l+1+i\eta) + \delta_0\right] C(p) \quad (5.11)$$

$$\Psi_{E,l,m}(p) = \frac{C(p_0)}{(p^2 - p_0^2)} \exp\left[i\eta \ln\left|\frac{p-p_0}{2p_0}\right| + i \arg \Gamma(l+1+i\eta) + \delta_0\right]$$

Oznaczając:

$$\delta_l = \arg \Gamma(l+1+i\eta) \quad (5.12)$$

widzimy, że otrzymany wynik jest identyczny z wynikiem, który otrzymujemy badając asymptotyczne zachowanie funkcji falowych stanów rozproszeniowych atomu wodoru otrzymanych w wyniku rozwiązania równania Schrödingera w reprezentacji położeniowej [18].

GEOMETRYCZNE KWANTOWANIE POZIOMÓW ENERGII /E < 0/

Przestrzeń fazowa skończenie wymiarowego klasycznego układu hamiltonowskiego jest różniczkowalną klasą C^∞ na której jest określona zamknięta dwuforma ω

^{**} Uwaga: przy $|\xi| \rightarrow \infty$ $\alpha \rightarrow \infty$ zaś $|\vec{p}| \rightarrow p_0$, a więc otrzymujemy przejście na "powłokę masową" odpowiadającą "swobodnej" cząstce.

$d\omega = 0$. Dwuforma ω jest nieosobliwa w tym sensie, że istnieje bijektywne odwzorowanie:

$$\alpha \rightarrow X_\alpha \quad (6.1)$$

kowariantnego pola wektorowego w kontrawariantne pole wektorowe spełniające związek:

$$\omega(X, X_\alpha) = \alpha(X) \quad (6.2)$$

Parę (M, ω) nazywamy rozmaitością symplektyczną. Dla zwartej rozmaitości M warunek kwantowania sformułowany przez Kostantę, postuluje by okresy całki ω /na dwucykłach/ przyjmowały wartości całkowite. Celem przeprowadzenia odpowiednich obliczeń definiujemy nawiasy Poissona w następujący sposób:

$$\{\phi, \psi\} := X_\phi(\psi) = \omega(X_\phi, X_\psi) \quad (6.3)$$

gdzie: ϕ, ψ są funkcjami klasy C^∞ na rozmaitości M, ω zaś X_ϕ jest polem kontrawariantnym na rozmaitości M spełniającym warunek:

$$\omega(X, X_\phi) = X\phi \quad (6.4)$$

Przestrzenią fazową odpowiadającą swobodnej cząstce jest przestrzeń:

$$M = \{(p, q); p, q \in R^3; p, q \neq 0\} \quad (6.5)$$

z dwuformą postaci:

$$\omega = \sum_{i=1}^3 dp_i \wedge dq_i \quad (6.6)$$

Nawiasy Poissona na rozmaitości M są określone w następujący sposób:

$$\{\phi, \psi\} = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial \phi}{\partial p_i} \frac{\partial \psi}{\partial q_i} - \frac{\partial \phi}{\partial q_i} \frac{\partial \psi}{\partial p_i} \right) \quad (6.7)$$

Następujące funkcje:

$$\begin{aligned} H &= \frac{p^2}{2m} - \frac{K}{q} & H &- \text{funkcja energii} \\ \vec{L} &= \vec{q} \times \vec{p} & \vec{L} &- \text{wektor momentu pędu} \\ \vec{M} &= \vec{L} \times \vec{p} + mk \frac{\vec{q}}{q} & \vec{M} &- \text{wektor Runge-Lenza} \end{aligned} \quad (6.8)$$

spełniające związki (1.5) , (1.2) oraz:

$$M^2 - 2mHL^2 = m^2k^2 \quad (6.9)$$

są funkcjami stałymi na trajektoriach pola wektorowego określonego przez:

$$X_H = \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial H}{\partial p_i} \frac{\partial}{\partial q_i} - \frac{\partial H}{\partial q_i} \frac{\partial}{\partial p_i} \right) \quad (6.10)$$

Trajektorie pól wektorowych są rozwiązaniem równań Hamiltona:

$$\frac{dq_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial p_i} = \frac{p_i}{m} \quad ; \quad \frac{dp_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial q_i} = -\frac{kq_i}{q^3} \quad (6.11)$$

Trajektorie X_H nazywamy orbitami Keplera. Jeśli ustalimy wartość ujemnej energii $E < 0$ to przez M_E rozumiemy zbiór takich orbit keplerowskich, na których funkcja H ma stałą wartość E . M_E - jest pięciowymiarową rozmaiłością/. Jeśli oznaczymy:

$$\varrho = \sqrt{-2mE} \quad (6.12)$$

oraz wprowadzimy nowe zmienne \vec{x}, \vec{y} określone na M_E następująco:

$$\vec{x} = \varrho \vec{L} + \vec{M}$$

$$\vec{y} = \varrho \vec{L} - \vec{M}$$

wtedy wykorzystując związek 6.9 otrzymujemy:

$$\vec{x}^2 = \vec{y}^2 = m^2 k^2 \quad (6.13)$$

Z równania 6.13 wynika, że para (\vec{x}, \vec{y}) odwzorowuje M_E bijektywnie w iloczyn kartezjański $S \times S^2$ dwóch sfer o promieniach równych mk . Odwzorowanie: $(\vec{x}, \vec{y}) \rightarrow S^2 \times S^2$ nadaje rozmaiłości M_E strukturę rozmaiłości dyfeomorficzną z $S^2 \times S^2$. Forma symplektyczna wokreślona na rozmaiłości M , (6.5) ogranicza się do zamkniętej dwuformy ω_E na pięciowymiarowej podrozmaiłości M_E . Para (M_E, ω_E) stanowi rozmaiłość symplektyczną dyfeomorficzną z $S^2 \times S^2$. Aby skwantować rozmaiłość (M_E, ω_E) zauważamy, że nawiasy Poissona funkcji (\vec{x}, \vec{y}) są funkcjami na rozmaiłości M_E generowanymi przez nawiasy Poissona funkcji $(\varrho \vec{L} + \vec{M}), (\varrho \vec{L} - \vec{M})$ na rozmaiłości (M, ω) . W związku z powyższym "relacje komutacji" przyjmują następującą postać:

$$\{x_1, x_2\} = -2g x_3; \{x_i, y_j\} = 0; \{y_1, y_2\} = -2g y_3 \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (6.14)$$

Przyjmując (x_1, x_2, y_1, y_2) jako współrzędne na rozmaitości M_E otrzymujemy

$$X_\phi = \sum_{i=1}^3 [\{\phi, x_i\} \frac{\partial}{\partial x_i} + \{\phi, y_i\} \frac{\partial}{\partial y_i}] \quad (6.15)$$

Wykorzystując związek 6.15 otrzymujemy następującą postać pól wektorowych dla współrzędnych x_i :

$$\begin{aligned} X_{x_1} &= -2g x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} \\ X_{x_2} &= +2g x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} \end{aligned} \quad (6.16)$$

Wartość dwuformy ω na polach bazowych wynosi:

$$\begin{aligned} \omega_E \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial x_2} \right) &= \frac{1}{2g x_3} \\ \omega_E \left(\frac{\partial}{\partial x_1}, \frac{\partial}{\partial y_i} \right) &= 0 \\ \omega_E \left(\frac{\partial}{\partial y_1}, \frac{\partial}{\partial y_2} \right) &= \frac{1}{2g y_3} \end{aligned} \quad (6.17)$$

Formę symplektyczną ω_E można wyrazić również przy pomocy bazy dualnej do bazy $\frac{\partial}{\partial x_i}, \frac{\partial}{\partial y_i}$. W bazie dualnej forma ω_E przyjmuje postać:

$$\omega_E = \frac{dx_1 \wedge dx_2}{2g x_3} + \frac{dy_1 \wedge dy_2}{2g y_3} \quad (6.18)$$

Wykorzystując warunek kwantowania:

$$\int_{S^2} \omega_E := N \quad (6.19)$$

otrzymujemy związek:

$$\frac{2\pi m k}{g} = N \quad (6.20)$$

A za tym rozmaitość keplerowska będzie kwantowalna wtedy i tylko wtedy, gdy:

$$E = E_N = -\frac{2\pi^2 m k^2}{N^2}$$

Funkcje \vec{x}, \vec{y} są całkami ruchu na rozmaitości M_E . Relacje komutacji 6.14 można zapisać w ogólniejszej formie w postaci:

$$\{x_i, x_j\} = -2g \varepsilon_{ijk} x_k \quad \{x_i, y_j\} = 0 \quad \{y_i, y_j\} = -2g \varepsilon_{ijk} y_k \quad (6.22)$$

Ze związków 6.22 wynika, że \vec{x}, \vec{y} stanowią bazę algebry Lie'go grupy $SU(2)/\times SU(2)/$. Grupa ta działa tranzytywnie na zwartej rozmaitości $M_E = S^2 \times S^2$ oraz jej działanie zachowuje formę symplektyczną ω_E .

BIBLIOGRAFIA

1. P a u l i W., Z. Phys. V.36, 336 /1926/.
2. F o c k V., Z. Phys. V.98, 145 /1935/.
3. P o p o w S., Ukryte symetrie atomu wodoru. Materiały z konferencji w Jałcie, Kijów 1967.
4. P a u l i W., Continuous groups in quantum mechanics, Springer Tracts, V. 37, XX.
5. R a c a h G., Group theory and spectroscopy. Princeton 1951.
6. O l s z e w s k i J., Dynamic group and infinite multiplets in hadron theory. Materiały z konferencji w Jałcie, Kijów 1967.
7. J a u c h J.M., and H i l l E.L., Phys.Rev.V.139,1433 /1965/.
8. B a r u t A., Phys. Rev. V. 57, 641 /1940/.
9. K o s t a n t B., Quantization and unitary representations. Springer lecture notes in mathematics 1970.
10. N a i m a r k M.A., Linear representations of Lorentz grup. Am. Math. Soc. Trans. S.2, V.6 /1957/.
11. S i m m s D., Equivalence of Bohr-Sommerfeld and Pauli quantisations of Kepler problem, Coll. on Group Theor. Methods in Phys. Marseille 1972.
12. S i m m s D., Bohr- Sommerfeld orbits and quantisable symplectic manifolds, Proc. Camb. Soc. V.73, 489 /1973/.
13. S i m m s D., Geometric quantizations of energy levels in the Kepler problem /to be published in Theoretische Matematik/.

14. B u d i n i , Algebraic formulation of dynamical problem. Trieste 1967.
15. B o h m , Dynamical groups of simple non-relativistic models. Trieste 1967.
16. D o ł d y g i n A., Żet. Fiz. V.37, 1441 /1959/.
17. D o ł d y g i n A., M o s k a l e w Ż., Żet. Fiz. V.37, 1441 /1959/.
18. L a n d a u L., L i f s z i c E., Mechanika kwantowa, Warszawa, PWN /1975/.

Maria Lasocka

INVESTIGATION OF BOUND AND SCATTERING STATES OF
THE HYDROGEN ATOM BY GEOMETRIC AND GROUP-THEORETICAL
METHODS

Bound and scattering states of the hydrogen atom are described using Lie algebras of groups $O(4)$, $O(3,1)$, $O(4,1)$. Comparison with the results of the geometric quantization is made,

Мария Лясоцка

ИССЛЕДОВАНИЕ ДИСПЕРСНЫХ И СВЯЗНЫХ СОСТОЯНИЙ АТОМА ВОДОРОДА
ПРИ ПОМОЩИ МЕТОДОВ ГЕОМЕТРИЧЕСКИ-ГРУППОВЫХ

В работе описаны связанные состояния рассеяния для атома водорода, полученные при помощи метода алгебры Ли для групп $O(4)$, $O(4,1)$, $O(3,1)$. Результаты сравниваются с соответствующими результатами, полученными при помощи метода "геометрического квантования".