Math-Net.Ru

Общероссийский математический портал

А. А. Дрокин, А. В. Шаповалов, И. В. Широков, Алгебра локальных симметрий уравнения Шредингера для атома водорода, *ТМФ*, 1996, том 106, номер 2, 273–284

DOI: <https://doi.org/10.4213/tmf1113>

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением

<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 52.6.47.48

26 апреля 2023 г., 10:25:47

А. А. Дрокин, А. В. Шаповалов, И. В. Широков

АЛГЕБРА ЛОКАЛЬНЫХ СИММЕТРИЙ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

Дано полное описание всех локальных симметрий (представляющих собой дифференциальные операторы произвольного конечного порядка) стационарного уравнения Шредингера для атома водорода на основе редукции уравнения Шредингера для изотропного гармонического осциллятора к уравнению Шредингера для атома водорода, порождающей соответствующую редукцию алгебр симметрии. Показано, что все нетривиальные локальные операторы симметрии в случае n -мерного изотропного гармонического осциллятора принадлежат обертывающей алгебре $U(su(n, C))$ алгебры $su(n, C)$. В случае атома водорода все нетривиальные локальные симметрии составляют обертывающую алгебру $U(so(4, C))$ алгебры $so(4, C)$. Базис $so(4, C)$ состоит из генераторов группы вращений и операторов Рунге–Ленца.

1. ВВЕДЕНИЕ

Локальные симметрии являются важным инструментом исследования групповых и алгебраических свойств линейных и нелинейных дифференциальных уравнений [1–4]. Множество локальных симметрий, коммутирующих с оператором уравнения на его решениях, образует бесконечномерную алгебру Ли $\mathcal{A}$, называемую алгеброй симметрии уравнения. Подалгебры алгебры $\mathcal{A}$ используются для построения точных решений дифференциальных уравнений. Например, теория разделения переменных строится на основе коммутативных подалгебр специального вида алгебры $\mathcal{A}$, порядок элементов которых не превышает порядка уравнения [5, 6]. Некоммутативные подалгебры алгебры $\mathcal{A}$ использованы в работе [7] для интегрирования линейных дифференциальных уравнений в частных производных. Однако свойства алгебры $\mathcal{A}$ в целом для заданного уравнения изучены мало, т.к. полное описание алгебры симметрии известно лишь для очень ограниченного числа уравнений.

Прямое вычисление алгебры $\mathcal{A}$ для конкретного уравнения представляет собой сложную задачу. В многомерном случае алгебра $\mathcal{A}$ найдена таким способом для свободного уравнения Клейна–Гордона в пространстве Минковского $R_{1,3}$ в [8], для волнового уравнения – в [9]. В работе [10] алгебра $\mathcal{A}$ найдена для уравнения Лапласа–Бельтрами в пространстве $R_{p,q}$ с помощью теорем о структуре алгебры $\mathcal{A}$, минуя прямое ее вычисление. Там же доказана теорема о том, что все локальные симметрии линейных уравнений с числом независимых переменных больше двух линейны.

В данной работе вычисляется алгебра $\mathcal{A}_H$ всех локальных симметрий уравнения

Шредингера для атома водорода, коммутирующих с оператором уравнения H . Последний имеет переменные коэффициенты, что отличает данную задачу от исследованных ранее случаев.

Для стационарного уравнения Шредингера алгебра $\mathcal{A}$ симметрий, коммутирующих с оператором уравнения на его решениях, отличается от алгебры $\mathcal{A}_H$ операторов симметрии, коммутирующих с H на всей области определения H , идеалом, состоящим из тривиальных операторов вида RH , где R – произвольный линейный оператор. Это обстоятельство следует из общих теорем работ [2, 3, 11] и позволяет без потери общности ограничиться рассмотрением алгебры $\mathcal{A}_H$.

Изучение симметрии уравнения Шредингера для атома водорода является одной из классических задач математической физики. Фок [12] и Баргман [13] установили инвариантность уравнения Шредингера в импульсном представлении относительно группы $O(4)$. Дальнейшее развитие эти идеи получили в работах [14–18], где была развита концепция динамической симметрии (алгебры, генерирующей спектр). Операторы алгебры динамической симметрии принадлежат алгебре $\mathcal{A}$. Базис пространства решений в некоторых случаях может быть построен действием специально подобранных операторов динамической симметрии на некоторое единственное исходное решение. Более полную информацию можно найти в обзорах и монографиях [19–22]. Отметим также, что известные уравнения, для которых решения построены с помощью динамических симметрий [20–22], допускают интегрирование методом разделения переменных, т.е. с помощью коммутативных подалгебр алгебры $\mathcal{A}$. Найденная Фоком и Баргманом $O(4)$ -симметрия уравнения Шредингера для атома водорода содержится в алгебре $\mathcal{A}_H$. В координатном представлении часть генераторов группы $O(4)$ становятся дифференциальными операторами второго порядка (вектор Рунге–Ленца (см., например, [22])) и являются элементами алгебры $\mathcal{A}_H$. В импульсном представлении операторы, образующие конечномерную подалгебру $so(4)$ алгебры $\mathcal{A}_H$, реализуются дифференциальными операторами первого порядка и генерируют группу $SO(4)$.

Полная алгебра $\mathcal{A}_H$ (т.е. дифференциальные операторы симметрии произвольного порядка уравнения Шредингера с кулоновским полем, не зависящие от энергии как от параметра уравнения) оставалась найденной. Нахождение алгебры $\mathcal{A}_H$ может быть полезно с различных точек зрения. В частности, представляет интерес выяснить, существуют ли операторы симметрии высокого порядка, не разложимые в произведение операторов симметрии первого порядка или в произведение операторов первого порядка и компонент вектора Рунге–Ленца. Такие операторы можно было бы рассматривать как аналоги вектора Рунге–Ленца высокого порядка.

Для нахождения алгебры $\mathcal{A}_H$ в основу нашего подхода положена известная редукция уравнения Шредингера для четырехмерного изотропного гармонического осциллятора к уравнению Шредингера для атома водорода [23]. Применение метода редукции для исследования алгебры симметрии редуцированного уравнения в общем случае сводится к решению следующих задач:

- 1) найти все локальные симметрии исходного уравнения;
- 2) выяснить связь симметрии исходного и редуцированного уравнений, в частности, установить, является ли алгебра симметрии редуцированного уравнения некоторым подмножеством алгебры симметрии исходного уравнения (это подмножество будем называть редукцией алгебры симметрии исходного уравнения);

3) найти в явном виде алгебру симметрии редуцированного уравнения.

Как правило, алгебра симметрии исходного уравнения устроена достаточно просто: в большинстве случаев это обертывающая алгебра некоторой алгебры Ли. Вторая задача нетривиальна, поскольку алгебра симметрии редуцированного уравнения может быть как уже, так и шире алгебры симметрии исходного уравнения. В качестве примера рассмотрим уравнение

$$\Delta_{1,2}\psi \equiv (\partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2)\psi = 0. \quad (1.1)$$

Редукция этого уравнения по оператору $Y = \partial_y$ подразумевает ограничение его решений дополнительным условием $Y\psi = 0$, что приводит к (редуцированному) уравнению

$$H_r\psi \equiv (\partial_t^2 - \partial_x^2)\psi = 0 \longleftrightarrow \{\Delta_{1,2}\psi = 0, \quad Y\psi = 0\}. \quad (1.2)$$

Алгеброй Ли операторов симметрии первого порядка исходного уравнения (1.1) является конформная алгебра $k_{1,2}$. Аналогичная алгебра Ли редуцированного уравнения (1.2) бесконечномерна. Третья задача в общем случае также нетривиальна. В настоящей работе предьявлен алгоритм решения этой проблемы в случае, когда алгебра симметрии исходного уравнения принадлежит обертывающей алгебре некоторой полупростой алгебры Ли, а оператор Y , по которому производится редукция, принадлежит подалгебре Картана.

Рассмотрим кратко, следуя [23], переход от уравнения Шредингера для гармонического осциллятора к уравнению Шредингера для атома водорода.

Стационарное уравнение Шредингера для четырехмерного изотропного гармонического осциллятора запишем в виде

$$H\psi(x) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^4 (-\partial_{x_j}^2 + \omega^2 x_j^2)\psi(x) = \varepsilon\psi(x). \quad (1.3)$$

Уравнение (1.3) в системе координат

$$\begin{aligned} x_1 &= \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi + \alpha}{2}, & x_2 &= \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2} \cos \frac{\varphi - \alpha}{2}, \\ x_3 &= \sqrt{r} \cos \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi + \alpha}{2}, & x_4 &= \sqrt{r} \sin \frac{\theta}{2} \sin \frac{\varphi - \alpha}{2} \end{aligned} \quad (1.4)$$

принимает вид

$$\begin{aligned} & -2 \left\{ \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{\sin^2 \theta} \left(\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - 2 \cos \theta \frac{\partial^2}{\partial \varphi \partial \alpha} \right) \right] - \frac{\omega^2 r}{4} \right\} \psi = \varepsilon \psi. \end{aligned}$$

Решение этого уравнения, не зависящее от переменной α , совпадает с решением уравнения Шредингера для атома водорода

$$\begin{aligned} H_r\psi &= \left\{ -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \right. \right. \\ & \left. \left. + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] \right] - \frac{e}{r} \right\} \psi = E\psi, \end{aligned} \quad (1.5)$$

где $e = -\frac{\varepsilon}{4}$, $E = -\frac{\omega^2}{8}$.

Этому переходу можно придать алгебраический вид, в котором множество решений уравнения (1.3) редуцируется по оператору симметрии $Y = \partial_\alpha$, именно:

$$\text{Ker}(H_r - E) = \text{Ker}(H - \varepsilon) \cap \text{Ker } Y.$$

В частности, уравнение (1.5) эквивалентно системе

$$H\psi = \varepsilon\psi, \quad Y\psi = 0. \quad (1.6)$$

В координатах (x) оператор Y имеет вид $Y = \frac{1}{2}(L_{13} - L_{24})$, где $L_{kj} = x_k \partial_{x_j} - x_j \partial_{x_k}$.

В таком подходе удобно исследовать алгебраические свойства редуцированных уравнений, наследующих часть свойств исходного уравнения.

Следуя изложенной выше схеме, рассмотрим алгебру симметрии уравнения Шредингера для гармонического осциллятора.

2. АЛГЕБРА СИММЕТРИЙ КВАНТОВОГО n -МЕРНОГО ИЗОТРОПНОГО ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

С алгебраической точки зрения четырехмерный изотропный гармонический осциллятор принципиально не отличается от n -мерного, поэтому исследование симметрии уравнения Шредингера для изотропного гармонического осциллятора и редуцированного из него уравнения по некоторому оператору симметрии Y мы проведем для n -мерного случая.

Рассмотрим n -мерное стационарное уравнение Шредингера с потенциалом изотропного гармонического осциллятора

$$H\psi \equiv \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n (-\partial_{x_j}^2 + \omega^2 x_j^2) \psi = \varepsilon \psi, \quad \omega > 0. \quad (2.1)$$

Введем интегральное преобразование Вейерштрасса [24]

$$\psi(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, z) \varphi(z) dz \quad (2.2)$$

с ядром $K(x, z) = \exp(-\omega z^2 + 2i\omega(x \cdot z) + \omega x^2/2)$ и обратное преобразование

$$\varphi(z) = \int_{-\infty}^{+\infty} \overline{K}(x, z) \psi(x) dx \quad (2.3)$$

с ядром $\overline{K}(x, z) = \left(\frac{\omega}{\pi}\right)^n \exp(\omega z^2 - 2i\omega(x \cdot z) - \omega x^2/2)$, $x, z \in R^n$. Формулы обращения принимают вид

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, z) \overline{K}(x', z) dz &= \delta(x - x'), \\ \int_{-\infty}^{+\infty} K(x, z) \overline{K}(x, z') dx &= \delta(z - z'). \end{aligned}$$

Обозначим через Ω и $\overline{\Omega}$ функциональные пространства образов и прообразов преобразования Вейерштрасса (2.2) и (2.3), соответственно, т.е. $\psi(x) \in \Omega$, $\varphi(z) \in \overline{\Omega}$.

Отметим, что функции $K(x, z)$, $\overline{K}(x, z)$ обладают свойствами

$$\begin{aligned}(\partial_{x_j} - \omega x_j)K(x, z) &= 2i\omega z_j K(x, z), \\(\partial_{x_j} + \omega x_j)K(x, z) &= -i\partial_{z_j} K(x, z), \\(\partial_{x_j} + \omega x_j)\overline{K}(x, z) &= -2i\omega z_j \overline{K}(x, z), \\(\partial_{x_j} - \omega x_j)\overline{K}(x, z) &= -i\partial_{z_j} \overline{K}(x, z).\end{aligned}$$

Если функции ψ, φ связаны соотношением (2.2): $\psi(x) \longleftrightarrow \varphi(z)$, то

$$\begin{aligned}(\partial_{x_j} - \omega x_j)\psi(x) &\longleftrightarrow 2i\omega z_j \varphi(z), \\(\partial_{x_j} + \omega x_j)\psi(x) &\longleftrightarrow i\partial_{z_j} \varphi(z).\end{aligned}$$

Отсюда непосредственно следует, что преобразования (2.2), (2.3) осуществляют не только взаимнооднозначные отображения пространств, $\Omega \longleftrightarrow \overline{\Omega}$, но и операторов, действующих в этих пространствах. Именно, каждому линейному дифференциальному оператору $X(x, \partial_x)$ с аналитическими коэффициентами, действующему в пространстве Ω , взаимнооднозначно соответствует аналогичный оператор $\overline{X}(z, \partial_z)$, действующий в пространстве $\overline{\Omega}$: $X(x, \partial_x) \longleftrightarrow \overline{X}(z, \partial_z)$. Очевидно также, что это отображение является изоморфизмом ассоциативных алгебр аналитических линейных дифференциальных операторов, действующих в пространствах $\Omega, \overline{\Omega}$.

При отображении (2.3) уравнение (2.1) перейдет в уравнение

$$\overline{H}\varphi(z) \equiv \omega \left(\sum_j z_j \partial_{z_j} + \frac{n}{2} \right) \varphi(z) = \varepsilon \varphi(z). \quad (2.4)$$

Согласно общим теоремам работ [2, 3, 11] нетривиальные операторы симметрии уравнения (2.1) следует искать в классе линейных дифференциальных операторов X , не зависящих от параметра ε и определяемых уравнением

$$[H, X] = 0. \quad (2.5)$$

Множество таких операторов образует алгебру Ли относительно коммутатора линейных операторов, которую мы будем рассматривать в качестве алгебры симметрии $\mathcal{A}$ уравнения (2.4). В таком подходе исключаются из рассмотрения тривиальные операторы симметрии, переводящие всякое решение уравнения (2.4) в нулевое.

При отображении (2.3) уравнение (2.5) перейдет в уравнение

$$[\overline{H}, \overline{X}] = 0. \quad (2.6)$$

Оператор $\overline{H}$ является оператором растяжений по координатам z_j , поэтому нетрудно непосредственно найти общее решение уравнения (2.6) в классе дифференциальных операторов. Оно имеет вид $\overline{X} = \overline{X}(C_{jk})$, здесь $\overline{X}(C_{jk})$ — произвольный полином от операторов $C_{jk} = z_j \partial_{z_k}$. Введем обозначения $\overline{X}_{jk} = -\omega(C_{jk} + C_{kj})$; $\overline{L}_{jk} = C_{jk} - C_{kj}$. Совершая обратный переход (2.2), получим, что общим решением уравнения (2.5) в классе

дифференциальных операторов является произвольная аналитическая функция от операторов X_{jk} , L_{jk} . Последние имеют вид

$$X_{jk} = \partial_{x_j} x_k - \omega^2 x_j x_k, \quad L_{jk} = x_j \partial_{x_k} - x_k \partial_{x_j} \quad (2.7)$$

и образуют алгебру Ли $u(n, C)$ относительно обычного коммутатора линейных операторов. Если исключить из этой алгебры тривиальный оператор $H = -\frac{1}{2} \sum_j X_{jj}$, то остальные операторы будут составлять алгебру $su(n, C)$. Таким образом, справедлива

ТЕОРЕМА 2.1. *Все нетривиальные дифференциальные операторы симметрии стационарного уравнения Шредингера с потенциалом n -мерного изотропного гармонического осциллятора (2.1) принадлежат обертывающей алгебре $U(su(n, C))$ алгебры $su(n, C)$, которая имеет базис (2.7).*

3. АЛГЕБРА СИММЕТРИИ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА ДЛЯ АТОМА ВОДОРОДА

Проведем редукцию уравнения (2.1) по некоторому оператору $Y \in su(n, C)$, полагая

$$H_r \psi = \varepsilon \psi \iff \{H \psi = \varepsilon \psi, \quad Y \psi = 0\}. \quad (3.1)$$

Нетривиальные операторы симметрии X системы (3.1) определяются уравнениями

$$[H, X] = QY, \quad (3.2)$$

$$[Y, X] = RY. \quad (3.3)$$

Рассмотрим уравнение (3.2) в пространстве $\overline{\Omega}$:

$$[\overline{H}, \overline{X}] = \overline{QY}. \quad (3.4)$$

Перейдем в уравнении (3.4) к сферической системе координат: $(z_1, \dots, z_n) \rightarrow (\rho, \theta_1, \dots, \theta_{n-1})$. Здесь θ_j — угловые переменные, $\rho^2 = \sum_{j=1}^n z_j^2$. В этих координатах $\overline{H} = \omega(\rho \partial_\rho + n/2)$ и (3.4) имеет вид

$$[\overline{H}, \overline{X}] = \omega \rho \frac{\partial \overline{X}}{\partial \rho} = \overline{QY}.$$

Решение последнего уравнения можно представить в виде

$$\overline{X} = \overline{X}_0(\theta, \partial_\theta) + \overline{BY}, \quad (3.5)$$

где

$$[\overline{H}, \overline{X}_0] = 0, \quad \overline{B} = \int_{\rho_0}^{\rho} \frac{\overline{Q}}{\omega \rho} d\rho.$$

Содержательную информацию несет оператор $\overline{X}_0$, поэтому, не теряя общности, можно положить $\overline{B} = \overline{Q} = 0$.

ЗАМЕЧАНИЕ. К оператору $\overline{X}$ можно добавить тривиальное решение $R(\theta, \partial_\theta)f(\overline{H})$, где $f(\overline{H})$ – полином по $\overline{H}$. На решениях системы (3.1) этот оператор примет вид $R(\theta, \partial_\theta)f(\varepsilon)$ и его можно включить в первый член правой части (3.5). Поэтому оператор $R(\theta, \partial_\theta)f(\overline{H})$ в (3.5) опущен. Отсюда следует, что для любого решения X уравнения (3.2) существует такой оператор B , что $X = X_0 + BY$, где $[H, X_0] = 0$. Таким образом, не теряя общности, можно положить в (3.2) $Q = 0$.

Аналогично можно показать, что $R = 0$ в (3.3). В системе координат, где $\overline{Y} = \partial_y$, уравнение (3.3) имеет вид $\partial\overline{X}/\partial y = \overline{R}\overline{Y}$. Его решение можно представить в виде $\overline{X} = \overline{X}_0 + \overline{A}\overline{Y}$, где $\partial\overline{X}_0/\partial y = 0$, $\overline{A} = \int_0^y \overline{R} dy$. Повторяя вышеприведенные рассуждения, положим $\overline{R} = 0$.

Таким образом, справедлива

ТЕОРЕМА 3.1. *Все нетривиальные дифференциальные операторы симметрии X редуцированного уравнения (3.1) определяются уравнениями*

$$[H, X] = [Y, X] = 0.$$

Из теоремы 3.1 непосредственно получаем

СЛЕДСТВИЕ 3.1. *Алгебра $\mathcal{A}_H$ локальных симметрий уравнения Шредингера (1.5) для атома водорода является редукцией алгебры $U(su(4, C))$ с помощью оператора*

$$Y = \frac{1}{2}(L_{13} - L_{24}), \quad (3.6)$$

именно:

$$\mathcal{A}_H = \{X \in U(su(4, C)) \mid [Y, X] = 0\}.$$

Перейдем к нахождению алгебры симметрии редуцированного уравнения в явном виде. В нашем случае оператор Y вида (3.6) принадлежит подалгебре Картана полупростой алгебры $su(4, C)$, что является существенным упрощением задачи.

Предварительно рассмотрим более общую задачу редукции обертывающей алгебры $U(L)$ полупростой алгебры L по элементу Y из подалгебры Картана. Другими словами, требуется найти подалгебру $U_Y(L)$ алгебры $U(L)$, элементы которой коммутируют с оператором Y :

$$U_Y(L) = \{X \in U(L) \mid [X, Y] = 0\}.$$

Выберем в алгебре L базис так, чтобы матрица $\text{ad } Y$ была диагональной:

$$\text{ad } Y = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_1, \dots, \lambda_t, \dots, \lambda_t, 0, \dots, 0),$$

где $\lambda_1 \neq \lambda_2 \neq \dots \neq \lambda_t$ – характеристические числа матрицы $\text{ad } Y$ в пространстве L . Разложим L в прямую сумму корневых подпространств

$$L = \bigoplus_{i=1}^t E_i \oplus E_0. \quad (3.7)$$

Здесь $E_i = \{X \in L \mid [Y, X] = \lambda_i X\}$ — корневое пространство, соответствующее корню λ_i , $\dim E_i = s(\lambda_i)$ — кратность корня. Подпространство E_0 , отвечающее нулевому характеристическому числу, имеет размерность

$$\dim E_0 = \dim L - \sum_{i=1}^t s(\lambda_i)$$

и является подалгеброй алгебры L вследствие тождества Якоби. Очевидно, что

$$E_0 \subset U_Y(L) \Rightarrow U(E_0) \subset U_Y(L),$$

т.к. E_0 состоит из элементов алгебры L , коммутирующих с Y .

Рассмотрим структуру обертывающей алгебры $U(L)$, возникающую вследствие корневого разложения (3.7). Введем пространства

$$U_{\vec{n}} = E_1^{n_1} \otimes \cdots \otimes E_t^{n_t}, \quad n_i \geq 0, \quad \vec{n} = (n_1, \dots, n_t), \quad n = \sum_{i=1}^t n_i$$

с базисом в виде упорядоченных мономов

$$\{X_{(a_1^1 \dots a_{n_1}^1)}^1 \cdots X_{(a_1^t \dots a_{n_t}^t)}^t\},$$

где $\{X_{a^i}^i\}$ — базис пространства E_i , $a^i = 1, \dots, s(\lambda_i) = \dim E_i$. Круглые скобки означают симметризацию. Определим пространство

$$U^{(r)} = \bigoplus_{\substack{n_1 + n_2 + \dots + n_t = n; \\ n = 0, 1, \dots, r}} U_{\vec{n}} \otimes E_0^{r-n}$$

как линейную оболочку всевозможных мономов порядка r , причем имеет место разложение $U(L) = \bigoplus_{r=0} U^{(r)}$. Действие $\text{ad } Y$ естественно продолжается в обертывающую алгебру $U(L)$:

$$\forall X \in U(L) \quad \text{ad } Y(X) = [Y, X].$$

Пространства $U^{(r)}$ инвариантны относительно действия оператора $\text{ad } Y$ на $U(L)$. Очевидно, что

$$\text{ad } Y(U_{\vec{n}}) = \left(\sum_{i=1}^t n_i \lambda_i \right) U_{\vec{n}},$$

т.е. все элементы пространства $U_{\vec{n}}$ являются собственными для оператора $\text{ad } Y$ с одним и тем же собственным значением $\sum_{i=1}^t n_i \lambda_i$.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ 3.1. Число $\sum_{i=1}^t n_i \lambda_i$ назовем весом пространства $U_{\vec{n}}$.

Обозначим через $W_{\vec{n}}$ пространство нулевого веса, т.е. пространства $U_{\vec{n}}$, для которого

$$\sum_{i=1}^t n_i \lambda_i = 0. \quad (3.8)$$

Из вышеприведенных рассуждений следует

ТЕОРЕМА 3.2. *Редуцированная алгебра $U_Y(L)$ представляется в виде*

$$U_Y(L) = \bigoplus_{r=0}^{\infty} \left(\bigoplus_{\substack{n_1+n_2+\dots+n_t=n \\ n=0,1,\dots,r}} W_{\vec{n}} \otimes E_0^{r-n} \right) \quad (3.9)$$

(здесь принято соглашение $W_{\vec{n}} \otimes E_0^{r-n}|_{n=0} = E_0^r$).

Поскольку имеет место однозначное соответствие

$$W_{\vec{n}} \longleftrightarrow \vec{n} = (n_1, \dots, n_t),$$

то решение задачи сводится к нахождению всех целочисленных положительных векторов $\vec{n}$, удовлетворяющих условию (3.8). Произведению пространств $W_{\vec{n}} \otimes W_{\vec{m}}$ отвечает вектор $\vec{n} + \vec{m} = (n_1 + m_1, \dots, n_t + m_t)$.

Множество решений уравнения (3.8) имеет конечное число частных решений – образующих так, что все решения являются линейными комбинациями образующих с положительными целочисленными коэффициентами. Другими словами, алгебра $U_Y(L)$ порождена конечным множеством операторов, построенных по системе образующих. Именно, пусть известны $\vec{n}_1, \dots, \vec{n}_\alpha$ — положительные целочисленные векторы, порождающие все решения уравнения (3.8), т.е. для любого решения уравнения (3.8) $\vec{m}$ существуют такие положительные целые числа $\mu_1, \dots, \mu_\alpha$, что $\vec{m} = \sum_{i=1}^{\alpha} \mu_i \vec{n}_i$. Пусть $\{Z_a^p\}$ – базис пространства $W_{\vec{n}_p}$, $a = 1, \dots, \dim W_{\vec{n}_p}$, $\{Y_b\}$ – базис подалгебры E_0 , $b = 1, \dots, \dim E_0$. Очевидно, что любой элемент алгебры $U_Y(L)$ состоит из линейных комбинаций произведений операторов Y_b , Z_a^p , и в этом смысле алгебра $U_Y(L)$ порождается этими операторами.

Применим изложенный выше алгоритм для нахождения локальных симметрий уравнения Шредингера для атома водорода. Выберем в алгебре $su(4, C)$ базис, в котором оператор $\text{ad } Y$ диагонален. Разложение (3.7) имеет вид

$$su(4, C) = E_1 \oplus E_2 \oplus E_0; \quad \lambda_1 = i, \quad \lambda_2 = -i.$$

Алгебра E_0 состоит из прямой суммы одномерной алгебры $\{Y\}$ и алгебры $so(4, C)$: $E_0 = \{Y\} \oplus so(4, C)$. Алгебра $so(4, C)$ является алгеброй Ли нетривиальных симметрий уравнения (1.5), и ее базис состоит из трех операторов вращений $\tilde{L}_{ik}$ в трехмерном пространстве и трех компонент R_i вектора Рунге–Ленца:

$$\begin{aligned} \tilde{L}_{12} &= \frac{1}{2}(L_{13} + L_{24}), & \tilde{L}_{13} &= \frac{1}{2}(L_{34} - L_{12}), & \tilde{L}_{23} &= \frac{1}{2}(L_{23} - L_{14}); \\ R_1 &= \frac{1}{4}(X_{34} - X_{12}), & R_2 &= -\frac{1}{4}(X_{14} + X_{23}), & R_3 &= \frac{1}{8}(X_{22} + X_{44} - X_{11} - X_{33}). \end{aligned} \quad (3.10)$$

Здесь обозначено

$$\tilde{L}_{ik} = q_i \partial_{q_k} - q_k \partial_{q_i}; \quad R_i = \sum_{k \neq i} \tilde{L}_{ik} \partial_{q_k} - \partial_{q_i} + \frac{eq_i}{r};$$

(q_1, q_2, q_3) – декартовы координаты: $q_1 = r \sin \theta \cos \varphi$, $q_2 = r \sin \theta \sin \varphi$, $q_3 = r \cos \theta$.

Корневое пространство E_1 имеет базис, состоящий из векторов G_1, G_3, G_5, G_7 :
 $[Y, G_{1,3,5,7}] = iG_{1,3,5,7}$, где

$$\begin{aligned} G_1 &= \frac{1}{2}(L_{14} + L_{23}) + \frac{i}{2}(L_{12} + L_{34}), & G_3 &= \frac{1}{2}(X_{14} - X_{23}) + \frac{i}{2}(X_{12} + X_{34}), \\ G_5 &= \frac{1}{2}(X_{11} - X_{33}) + iX_{13}, & G_7 &= X_{24} + \frac{i}{2}(X_{22} - X_{44}). \end{aligned}$$

Векторы G_2, G_4, G_6, G_8 составляют базис пространства E_2 : $[Y, G_{2,4,6,8}] = -iG_{2,4,6,8}$, где

$$G_2 = G_1^*, \quad G_4 = G_3^*, \quad G_6 = G_5^*, \quad G_8 = G_7^* \quad (3.11)$$

(здесь G^* комплексно сопряжено с G). Базис решений уравнения (3.8) состоит из одного вектора $\vec{n} = (1, 1)$, и согласно теореме 3.1 алгебра локальных симметрий уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом $U_Y(su(4, C))$ имеет вид

$$U_Y(su(4, C)) = \bigoplus_{r=0}^{\infty} \left[\bigoplus_{n=0}^r (E_1 \otimes E_2)^n \otimes E_0^{r-n} \right].$$

Можно непосредственно показать, что базис пространства $E_1 \otimes E_2$ выражается через произведения операторов $\tilde{L}_{ij}, R_i$. Результат приведен в приложении. Следовательно, справедлива

ТЕОРЕМА 3.3. *Все локальные симметрии уравнения Шредингера с кулоновским потенциалом принадлежат обертывающей алгебре $U(so(4, C))$ алгебры $so(4, C)$ с базисом, состоящим из генераторов $\tilde{L}_{ik}$ группы вращений в трехмерном пространстве и операторов Рунге–Ленца R_i .*

Таким образом, для уравнения Шредингера для атома водорода не существует операторов симметрии выше второго порядка, представляющих собой аналоги векторов Рунге–Ленца.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Выражение базиса пространства $E_1 \oplus E_2$ через операторы $\tilde{L}_{ij}, R_i$ вида (3.10)

Обозначим

$$\begin{aligned} F_1 &= \frac{1}{2}(L_{13} + L_{24}), & F_2 &= L_{12} - L_{34}, & F_3 &= X_{12} - X_{34}, \\ F_4 &= L_{14} - L_{23}, & F_5 &= X_{14} - X_{23}, & F_6 &= \frac{1}{4}(X_{22} + X_{44} - X_{11} - X_{33}). \end{aligned} \quad (\text{П.1})$$

Здесь и ниже L_{ij}, X_i имеют вид (2.7), $i, j = 1, 2, 3, 4$; H, Y имеют вид (1.3), (3.6), соответственно.

Справедливы разложения

$$G_1 G_2 = F_1^2 + \frac{1}{4}(F_2^2 + F_4^2) - Y^2 + iY,$$

$$\begin{aligned}
 G_1 G_4 &= \frac{1}{4}(F_2 F_3 + F_4 F_5) + i \left(F_6 Y - \frac{1}{4} H F_1 \right), \\
 G_1 G_6 &= \frac{1}{2} \left(F_1 F_3 - F_4 F_6 + \frac{1}{4} H F_4 + F_3 Y \right) + \frac{i}{2} \left(-F_2 F_6 - F_1 F_5 + \frac{1}{4} H F_4 - F_5 Y \right), \\
 G_1 G_8 &= \frac{1}{2} \left(F_2 F_6 + F_1 F_5 + \frac{1}{4} H F_2 - F_5 Y \right) + \frac{i}{2} \left(F_4 F_6 - F_1 F_3 + \frac{1}{4} H F_4 + F_3 Y \right), \\
 G_3 G_4 &= \frac{1}{4}(F_3^2 + F_5^2 + \omega^2 F_2^2 + \omega^2 F_4^2) - \omega^2 G_1 G_2, \\
 G_3 G_6 &= \frac{1}{2} \left(\frac{1}{4} H F_5 + \omega^2 F_1 F_2 - F_5 F_6 + \omega^2 F_2 Y \right) + \\
 &\quad + \frac{i}{2} \left(-\omega^2 F_1 F_4 + \frac{1}{4} H F_3 - \omega^2 F_4 Y - F_3 F_6 \right), \\
 G_3 G_8 &= \frac{1}{2} \left(F_3 F_6 + \omega^2 F_1 F_4 + \frac{1}{4} H F_3 - \omega^2 F_4 Y \right) + \\
 &\quad + \frac{i}{2} \left(F_5 F_6 - \omega^2 F_1 F_2 + \frac{1}{4} H F_5 + \omega^2 F_2 Y \right), \\
 G_5 G_6 &= \frac{1}{2} \left(4F_6^2 + \frac{1}{2} \omega^2 F_2^2 + \frac{1}{2} \omega^2 F_4^2 + \frac{1}{2} F_5^2 + \frac{1}{2} F_3^2 - 4\omega^2 F_1^2 + H F_6 - 4\omega^2 F_1 Y \right) - \\
 &\quad - 2\omega^2 G_1 G_2 - 2i\omega^2 F_1, \\
 G_5 G_8 &= \frac{1}{2}(F_3 F_5 - \omega^2 F_2 F_4) - 2\omega^2 F_1 - \frac{i}{2}(-\omega^2 F_2^2 + \omega^2 F_4^2 - F_5^2 + F_3^2), \\
 G_7 G_8 &= \frac{1}{2}(4F_6^2 + H F_6 + 4\omega^2 F_1^2 - 4\omega^2 F_1 Y + \omega^2 F_2^2 + F_5^2) - 2\omega^2(G_1 G_2 - iY).
 \end{aligned}$$

С учетом соотношений (3.11) имеем

$$\begin{aligned}
 G_2 G_3 &= (G_1 G_4)^*, & G_2 G_5 &= (G_1 G_6)^*, & G_2 G_7 &= (G_1 G_8)^*, \\
 G_4 G_5 &= (G_3 G_6)^*, & G_4 G_7 &= (G_3 G_8)^*, & G_6 G_7 &= (G_5 G_8)^*.
 \end{aligned}$$

Редукция уравнения (1.3) к уравнению (1.5) (следует положить $Y = 0$) приводит операторы (II.1) к виду

$$\begin{aligned}
 F_1 &= \tilde{L}_{12}, & F_2 &= -2\tilde{L}_{13}, & F_4 &= -2\tilde{L}_{23}; \\
 F_4 &= -4R_1, & F_5 &= -4R_2, & F_6 &= 2R_3,
 \end{aligned}$$

где $\tilde{L}_{ij}$, R_i имеют вид (3.10), оператор H принимает вид (1.5). В результате базисные элементы пространства $E_1 \otimes E_2$ выражаются через произведения операторов $\tilde{L}_{ij}$, R_i и оператор H .

Список литературы

- [1] Овсянников Л.В. Групповой анализ дифференциальных уравнений. М.: Наука, 1978.
- [2] Ибрагимов Н.Х. Группы преобразований в математической физике. М.: Наука, 1983.
- [3] Олвер Л. Приложения групп Ли к дифференциальным уравнениям. М.: Мир, 1989.
- [4] Фуцич В.И., Никитин А.Г. Симметрия уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1990.

- [5] Шаповалов В.Н. // Дифф. уравнения. 1980. Т. 16. №10. С. 1864–1874.
- [6] Миллер У. Симметрия и разделение переменных. М.: Мир, 1981.
- [7] Шаповалов А.В., Широков И.В. // Изв. вузов. Физика. 1991. №4. С. 95–100.
- [8] Никитин А.Г., Прилипко А.И. Симметрия и решения уравнений математической физики. Киев: Ин-т математики Украины, 1989. С. 40–44.
- [9] Мешков А.Г. // ТМФ. 1983. Т. 55. №2. С. 197–204.
- [10] Шаповалов А.В., Широков И.В. // ТМФ. 1992. Т. 92. №1. С. 3–12.
- [11] Шаповалов В.Н. // Изв. вузов. Физика. 1977. №6. С. 57–70.
- [12] Фок В.А. // Изв АН СССР (отд. матем. и естеств. наук). 1935. №2. С. 169–179.
- [13] Bargmann V. // Z. Physik. 1936. Bd. 99. S. 576.
- [14] Barut A.O., Bohm A. // Phys.Rev. B. 1965. V. 15. P. 1107–1112.
- [15] Dothan Y., Gell-Mann M., Ne'eman Y. // Phys. Lett. 1965. V. 15. P. 148–151.
- [16] Mukunda N., O'Raiheartaigh L., Sudarshan E. // Phys. Rev. Lett. 1965. V. 15. P. 1041–1044.
- [17] Малкин И.А., Манько В.И. // Письма в ЖЭТФ. 1965. Т. 2. С. 230–234.
- [18] Малкин И.А., Манько В.И. // ЯФ. 1966. Т. 3. В. 2. С. 372–382.
- [19] Манько В.И. Симплектическая группа и инварианты квантовых систем / Матем. анализ. (Итоги науки и техники.). М.: ВИНТИ, 1984. Т. 22. С. 59–100.
- [20] Додонов В.В., Манько В.И. // Тр. ФИАН СССР им. П.Н. Лебедева. 1987. Т. 183. С. 71–181.
- [21] Малкин И.А., Манько В.И. Динамические симметрии и когерентные состояния квантовых систем. М.: Наука, 1979.
- [22] Барут А., Рончка Р. Теория представлений групп и ее приложения. Т. 1, 2. М.: Мир, 1980.
- [23] Харт Н. Геометрическое квантование в действии. М.: Мир, 1985.
- [24] Брычков Ю.А., Прудников А.П. Интегральные преобразования обобщенных функций. М.: Наука, 1977.

Томский государственный университет
Омский государственный университет

Поступила в редакцию
3.V.1995 г.

A. A. Drokin, A. V. Shapovalov, I. V. Shirokov
LOCAL SYMMETRY ALGEBRA OF SHRÖDINGER
EQUATION FOR HYDROGEN ATOM

The complete description of local symmetries (which are differential operators of arbitrary finite order) is given for stationary Shrödinger equation for Hydrogen atom. This is done using the reduction of Shrödinger equation for isotropic harmonic oscillator to one for the Hydrogen atom, which induces the correspondent symmetry algebras reduction. It is shown that all nontrivial local symmetry operators for n -dimensional isotropic harmonic oscillator belong to enveloping algebra $U(su(n, C))$ of algebra $su(n, C)$. For Hydrogen atom all nontrivial local symmetries constitute enveloping algebra $U(so(4, C))$ of algebra $so(4, C)$. Basis of $so(4, C)$ consists of rotation group generators and Runge–Lenz-operators.