9 Grupy a symetrie

9.1 Algebraické řešení atomu vodíku

Klasický Hamiltonián částice o hmotnosti M pohybující se v Coulombickém poli je

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} - \frac{\gamma}{r}, \tag{9.1.1}$$

kde $r = \sqrt{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2}$ a $\gamma = e^2/(4\pi\epsilon_0)$. Kromě impulsmomentu $\boldsymbol{L}$ existuje ještě jeden integrál pohybu, tzv. *Runge-Lenzův* vektor

$$\boldsymbol{R} = \frac{1}{M}(\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L}) - \gamma\frac{\boldsymbol{x}}{r}, \tag{9.1.2}$$

který směřuje vždy ve směru hlavní poloosy pohybu. Jeho neměnnost v Coulombickém (případně gravitačním) poli souvisí s dodatečnou symetrií systému a důsledkem je, že trajektorie pro $E < 0$ jsou uzavřené elipsy a nedochází k jejich precesi.

V kvantovém případě musí být operátor Runge-Lenzova vektoru hermitovský, čehož docílíme rozepsáním

$$\boldsymbol{p} \times \boldsymbol{L} \longmapsto \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}\right), \tag{9.1.3}$$

kde $\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{x}} \times \hat{\mathbf{p}}$.

1. Ukažte, že operátor Runge-Lenzova vektoru

$$\hat{\mathbf{R}} = \frac{1}{2M}\left(\hat{\mathbf{p}} \times \hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{L}} \times \hat{\mathbf{p}}\right) - \gamma\frac{\hat{\mathbf{x}}}{\hat{\mathsf{r}}} \tag{9.1.4}$$

   je samosdružený (označili jsme $\hat{\mathsf{r}} = |\hat{\mathbf{x}}| = \sqrt{\hat{\mathsf{x}}_1^2 + \hat{\mathsf{x}}_2^2 + \hat{\mathsf{x}}_3^2}$).

2. V prvním cvičení jsme dokázali, že $[f(\hat{\mathsf{x}}), \hat{\mathsf{p}}] = \mathrm{i}\hbar f'(\hat{\mathsf{x}})$, což lze přímočaře zobecnit pro 3D prostor

$$[f(\hat{\mathbf{x}}), \hat{\mathbf{p}}] = \mathrm{i}\hbar\,\nabla f(\hat{\mathbf{x}})\,. \tag{9.1.5}$$

   Na základě tohoto vztahu odvoďte, čemu se rovnají komutátory

$$\left[\hat{\mathsf{L}}_k, f(\hat{\mathsf{r}})\right] \qquad \text{a} \qquad \left[\frac{\hat{\mathsf{x}}_j}{\hat{\mathsf{r}}}, \hat{\mathsf{p}}_k\right]. \tag{9.1.6}$$

3. Ukažte, že $\hat{\mathbf{R}}$ je integrálem pohybu, tj. že $\left[\hat{\mathsf{H}}, \hat{\mathbf{R}}\right] = 0$.

4. Ukažte, že $\hat{\mathbf{R}} \cdot \hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{L}} \cdot \hat{\mathbf{R}} = 0$.

5. Nalezněte, čemu se rovná $\hat{\mathbf{R}}^2$, a vyjádřete tento operátor jen pomocí operátorů $\hat{\mathsf{H}}$, $\hat{\mathbf{L}}$ a konstant.

6. Spočítejte komutátory $\left[\hat{\mathsf{L}}_j, \hat{\mathsf{R}}_k\right]$ a $\left[\hat{\mathsf{R}}_j, \hat{\mathsf{R}}_k\right]$.

Uvažujme dále jen vázané stavy, tj. stavy s $E < 0$. Jelikož

$$\hat{\mathsf{H}}\,|E\alpha\rangle = E\,|E\alpha\rangle \tag{9.1.7}$$

(E jsou energie, α další indexy číslující vlastní vektory), můžeme nadále nahrazovat ve výrazech $\hat{\mathsf{H}} \mapsto E$.

7. Ukažte, že operátory $\hat{\mathsf{L}}$ a $\hat{\mathsf{Q}}$, kde

$$\hat{\mathsf{Q}} = \sqrt{\frac{M}{-2E}}\,\hat{\mathsf{R}} \tag{9.1.8}$$

splňují komutační relace

$$\begin{aligned} \left[\hat{\mathsf{L}}_j, \hat{\mathsf{L}}_k\right] &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}L_l \\ \left[\hat{\mathsf{L}}_j, \hat{\mathsf{Q}}_k\right] = \left[\hat{\mathsf{Q}}_j, \hat{\mathsf{L}}_k\right] &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}Q_l \\ \left[\hat{\mathsf{Q}}_j, \hat{\mathsf{Q}}_k\right] &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}L_l. \end{aligned} \tag{9.1.9}$$

Toto jsou komutační relace pro generátory grupy SO(4).

8. Ukažte, že složky operátorů

$$\begin{aligned} \hat{\mathsf{A}} &= \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{Q}}\right) \\ \hat{\mathsf{B}} &= \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{L}} - \hat{\mathbf{Q}}\right) \end{aligned} \tag{9.1.10}$$

splňují

$$\begin{aligned} \left[\hat{\mathsf{A}}_j, \hat{\mathsf{A}}_k\right] &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}A_l \\ \left[\hat{\mathsf{B}}_j, \hat{\mathsf{B}}_k\right] &= \mathrm{i}\hbar\epsilon_{jkl}B_l \\ \left[\hat{\mathsf{A}}_j, \hat{\mathsf{B}}_k\right] &= 0, \end{aligned} \tag{9.1.11}$$

což jsou komutační relace pro dva nezávislé impulsmomenty—generátory grupy SU(2)[31]. Díky těmto komutačním relacím můžeme hledat vlastní stavy ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{\mathsf{A}}^2 \left|Eab\right\rangle &= \hbar^2 a(a+1)\left|Eab\right\rangle \\ \hat{\mathsf{B}}^2 \left|Eab\right\rangle &= \hbar^2 b(b+1)\left|Eab\right\rangle, \end{aligned} \tag{9.1.12}$$

kde $a, b = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$ jsou kladná polocelá čísla.

9. Ukažte, že Casimirovy operátory grupy SO(4) se dají vyjádřit jako

$$\hat{\mathsf{C}}_1[\mathrm{SO}(4)] = \hat{\mathsf{A}}^2 + \hat{\mathsf{B}}^2 = -\frac{1}{2} - \frac{M\gamma^2}{2\hbar^2 E}, \tag{9.1.13}$$

$$\hat{\mathsf{C}}_2[\mathrm{SO}(4)] = \frac{1}{2\hbar^2}\sqrt{\frac{M}{-2E}}\left(\hat{\mathbf{L}}\cdot\hat{\mathbf{R}} + \hat{\mathbf{R}}\cdot\hat{\mathbf{L}}\right) = 0 \tag{9.1.14}$$

přičemž identická nulovost $\hat{\mathsf{C}}_2$ plyne z výše zmíněné ortogonality vektorů $\hat{\mathbf{L}}$ a $\hat{\mathbf{R}}$.

10. Jelikož $\hat{\mathsf{C}}_2 = 0$, dokažte, že $a = b$.

[31] Vztah mezi operátory $(\hat{\mathsf{L}}, \hat{\mathsf{Q}})$ a $(\hat{\mathsf{A}}, \hat{\mathsf{B}})$ souvisí se skutečností, že grupu SO(4) lze rozložit na direktní součet $\mathrm{SO}(4) = \mathrm{SU}(2) \oplus \mathrm{SU}(2)$

11. Dopočítejte energii a vyjádřete ji ve tvaru

$$E_n = -\frac{M\gamma^2}{2\hbar^2 n^2}, \tag{9.1.15}$$

kde jsme označili $n = 2a + 1$, takže $n = 1, 2, \ldots$ jsou přirozená čísla.

Tímto jsme určili energetické spektrum částice v Coulombickém poli jen pomocí algebraických metod a ukázali, že dynamická symetrie tohoto systému je SO(4), tj. vyšší než jen rotační symetrie SO(3).

Poznámka: K výpočtu se vám mohou hodit vztahy pro Levi-Civitův symbol

$$\begin{aligned} \epsilon_{jkl}\epsilon_{jmn} &= \delta_{km}\delta_{ln} - \delta_{kn}\delta_{lm} \\ \epsilon_{jkl}\epsilon_{jkm} &= 2\delta_{lm}\,. \end{aligned} \tag{9.1.16}$$