АНАЛИТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НАБЛЮДАЕМЫХ И СОСТОЯНИЙ ВОДОРОДОПОДОБНОГО ЦЕНТРА I. Квадратичная алгебра

Е.М. Новикова

Московский институт электроники и математики при НИУ ВШЭ, Москва

e.m.novikova@gmail.com

Поступила 20.05.2012

Представлена алгебраическая техника, позволяющая моделировать алгебру симметрий водородоподобного центра. Описаны квадратичные коммутационные соотношения, оператор “действие” и операторы комплексной структуры.

УДК 51.73, 53.043

1. Введение

Водородоподобные центры — это активно используемые нанообъекты [1–6]. Они представляют собой заряды (обычно, ионы), которые встроены в кристаллическую решетку как примесные центры, и вокруг которых вращаются захваченные кулоновским полем заряды (электроны, дырки) противоположного знака. Математическая модель такого объекта та же самая, что и у атома водорода с очень высоко возбужденными (ридбергеровскими) состояниями. Размер водородоподобного центра может в $10^2 \div 10^3$ раз превышать размер обычного атома водорода.

*Работа выполнена при поддержке РФФИ, грант 12-01-00627а.

Как известно, спектр оператора Шредингера, описывающего атомы водорода, сильно вырожден: кратность вырождения равна n^2, где n — номер возбужденного уровня. Таким образом, для ридбергеровских уровней с номерами $n \sim 10 \div 100$ кратность имеет величину порядка $10^2 \div 10^4$. Это означает, что для анализа наблюдаемых и состояний водородоподобного центра, если его проводить с использованием обычных базисов собственных функций, приходится задействовать матричные массивы размера от $10^2 \times 10^2$ до $10^4 \times 10^4$ и выше. Такой массив данных в вычислениях (проводимых, конечно, компьютерами) лишает результаты наглядности и затрудняет их анализ.

В квантовой механике известны методы описания высокоразмерных матричных массивов с помощью операторов, когда матричные конструкции и преобразования заменяются анализом представлений и спектров некоммутативных алгебр. Высокая матричная размерность скрывается в генераторах алгебры, а на передний план выходит структура перестановочных соотношений этой алгебры. Если алгебра оказывается конечно-порожденной, то весь анализ перемещается в область геометрии (квантовой геометрии) на конечномерных многообразиях. При этом важную роль играет наличие комплексной поляризации, инвариантной или почти инвариантной относительно потока, порожденного основным изучаемым оператором. Такая поляризация позволяет использовать язык комплексной геометрии (когерентных состояний) и обойти особенности, присущие вещественной симплектической геометрии.

В случае гамильтониана водородоподобного центра, задача осложняется кулоновской сингулярностью, которая затрудняет прямой анализ. Чтобы регуляризовать кулоновскую сингулярность можно использовать метод Кустаанхеймо, но при этом расширить число степеней свободы с 3 до 4. На уровне классической механики и геометрического квантования анализ этой задачи был сделан Сурьо [7] и Ронсли [8–11]. Но в этих работах не были изучены соответствующие алгебры наблюдаемых. Это не позволяло использовать развитую аналитическую технику, например, в задачах теории возмущений, где алгебраический подход, как раз, играет ключевую роль (а техники геометрического и деформационного квантования здесь оказывается не достаточно). Необходимые алгебраические структуры были представлены в [12–14] с общих позиций теории нелиевских алгебр. В данном обзорном цикле статей, следуя схеме [14], подробно описываются коммутационные соотношения, операторы "действие", операторы комплексной структуры и когерентные преобразования (см. Часть II) алгебры наблюдаемых для гамильтониана водородоподобного центра.

Автор признателен М. В. Карасеву за многочисленные обсуждения и помощь в подготовке данной статьи.

2. Гамильтониан после регуляризации Кустаанхеймо и операторы комплексной структуры

В безразмерных координатах гамильтониан водородоподобного центра можно представить в виде

$$\mathbf{H}_0 = -\Delta - \frac{1}{|x|}, \qquad x \in \mathbb{R}^3.$$

Его дискретный спектр, как известно, состоит из чисел $-\frac{1}{4n^2}$, $n = 1, 2, \ldots$. Если ввести квазиклассичский параметр $\hbar = 1/n$ и перейти к новым координатам $\mathbf{q} = x/n^2$, то задачу на собственные значения $\mathbf{H}_0\varphi = -\frac{1}{4n^2}\varphi$ можно переписать в виде

$$\mathbf{S}_0\varphi = \varphi \tag{2.1}$$

для нового Гамильтониана

$$\mathbf{S}_0 = |\mathbf{q}|\Big(\frac{1}{4} + ||\mathbf{p}|^2\Big), \qquad \mathbf{p} = -i\hbar\partial/\partial\mathbf{q}. \tag{2.2}$$

Гамильтониан $\mathbf{S}_0$ отличается от исходного $\mathbf{H}_0$ тем, что у него устранена сингулярность в начале координат. Операторы алгебры симметрий, которые хорошо известны для $\mathbf{H}_0$, несколько модифицируются для $\mathbf{S}_0$, а точнее операторы углового момента

$$\mathbf{M} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathbf{q}\times\mathbf{p} \tag{2.3}$$

не меняются, а операторы Лапласа–Рунге–Ленца заменяются на следующие

$$\mathbf{L} \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathbf{q}\Big(\frac{1}{4} + \mathbf{p}^2\Big) - (\mathbf{p}\times\mathbf{M}) + (\mathbf{M}\times\mathbf{p}). \tag{2.4}$$

Они удовлетворяют коммутационным соотношениям [15, 16]:

$$\begin{gathered}
[\mathbf{S}_0, \mathbf{M}] = [\mathbf{S}_0, \mathbf{L}] = 0,\\
[\mathbf{M}_j, \mathbf{M}_k] = i\hbar\varepsilon_{jk\ell}\mathbf{M}_\ell, \qquad [\mathbf{L}_j, \mathbf{L}_k] = i\hbar\varepsilon_{jk\ell}\mathbf{M}_\ell, \qquad [\mathbf{M}_j, \mathbf{L}_k] = i\hbar\,\varepsilon_{jkl}\mathbf{L}_l,\\
\big\langle\mathbf{M}, \mathbf{L}\big\rangle = 0, \qquad \mathbf{M}^2 + \mathbf{L}^2 = \mathbf{S}_0^2 - \hbar^2.
\end{gathered} \tag{2.5}$$

Гамильтониан (2.2) можно преобразованием Кустаанхеймо свести к четырехмерному осциллятору.

Точки и их декартовы координаты в $\mathbb{R}^4$ обозначим $u = (u_1, \dots, u_4)$. Преобразование Кустганхеймо задается формулой

$$\begin{gathered}
\sigma\colon \mathbb{R}^4 \to \mathbb{R}^3, \qquad \sigma\colon u \mapsto q = {}^\sigma u,\\
q_1 = 2(u_1u_2 + u_2u_4), \quad q_2 = 2(u_1u_4 - u_2u_3), \quad q_3 = u_1^2 + u_2^2 - u_3^2 - u_4^2,
\end{gathered} \tag{2.6}$$

Отметим следующие свойства отображения (2.6):

(а) функция $|q| = \sqrt{q_1^2 + q_2^2 + q_3^2}$ преобразуется в гладкую функцию от переменных u, а именно, $|q| = |{}^\sigma u| = u^2$;

(б) любая функция $\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3)$ удовлетворяет соотношению

$$\int_{\mathbb{R}^4} \varphi({}^\sigma u)\,du = \frac{\pi}{4}\int_{\mathbb{R}^3}\varphi(q)\,\frac{dq}{|q|},$$

и таким образом, отображение σ связывает стандартное скалярное произведение в пространстве $L^2(\mathbb{R}^4)$ со следующим скалярным произведением в $\mathbb{R}^3$:

$$(\varphi', \varphi'')_- \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{\pi}{4}\int_{\mathbb{R}^3}\overline{\varphi'(q)}\,\varphi''(q)\,\frac{dq}{|q|} = \int_{\mathbb{R}^4}\overline{\varphi'({}^\sigma u)}\,\varphi''({}^\sigma u)\,du.$$

(в) любая дифференцируемая функция $\varphi(q)$ на $\mathbb{R}^3$ удовлетворяет соотношениям

$$\Big(u_1\frac{\partial}{\partial u_2} - u_2\frac{\partial}{\partial u_1} + u_3\frac{\partial}{\partial u_4} - u_4\frac{\partial}{\partial u_3}\Big)\varphi({}^\sigma u) \equiv 0, \qquad \frac{\partial\varphi}{\partial q}({}^\sigma u) \equiv \frac{1}{2u^2}\,D(u)\frac{\partial}{\partial u}\big(\varphi({}^\sigma u)\big),$$

где матрица $D(u)$ имеет вид

$$D(u) = \begin{pmatrix} u_3 & u_4 & u_1 & u_2 \\ u_4 & -u_3 & -u_2 & u_1 \\ u_1 & u_2 & -u_3 & -u_4 \end{pmatrix}.$$

Будем рассматривать функции от наборов операторов

$$\mathbf{u} \equiv u, \qquad \mathbf{w} \equiv -i\hbar\frac{\partial}{\partial u}.$$

Обозначим

$$\mathbf{Q} = {}^{\sigma}\mathbf{u}, \qquad \mathbf{P} = \frac{1}{2\mathbf{u}^2}\, D(\mathbf{u})\mathbf{w}.$$

Если оператор $\mathbf{F}$ имеет вид

$$\mathbf{F} = f(\overset{2}{\mathbf{Q}}, \overset{1}{\mathbf{P}}),$$

то мы имеем

$$\forall\, \varphi \in C^\infty(\mathbb{R}^3) \qquad (\mathbf{f}\varphi)({}^{\sigma}u) = \mathbf{F}(\varphi({}^{\sigma}u)), \tag{2.7}$$

где

$$\mathbf{f} = f(\overset{2}{\mathbf{q}}, \overset{1}{\mathbf{p}}).$$

Для операторов, связанных соотношением (2.7), введем обозначение

$$\mathbf{f} = [\mathbf{F}]_\sigma$$

Введем оператор

$$\mathbf{D}_0 \overset{\text{def}}{=} \mathbf{u}_1\mathbf{w}_2 - \mathbf{u}_2\mathbf{w}_1 + \mathbf{u}_3\mathbf{w}_4 - \mathbf{u}_4\mathbf{w}_3 = -\frac{i}{2}(\mathbf{b}_1\mathbf{c}_2 - \mathbf{b}_2\mathbf{c}_1 + \mathbf{b}_3\mathbf{c}_4 - \mathbf{b}_4\mathbf{c}_3),$$

Лемма 2.1. (а) Единственными операторами, коммутирующими с $\mathbf{D}_0$, являются операторы виде $[\mathbf{F}]_\sigma$.

(б) Функция $\Phi(u)$ на $\mathbb{R}^4$ удовлетворяет уравнению $\mathbf{D}_0\Phi(u) = 0$ тогда и только тогда, когда существует функция $\varphi(q)$ на $\mathbb{R}^3$ такая, что $\Phi(u) = \varphi({}^{\sigma}u)$.

(в) Отображение $\varphi \to \Phi(u) \overset{\text{def}}{=} \varphi({}^{\sigma}u)$ унитарно, т.е. $\|\Phi\|_{L^2(\mathbb{R}^4)} = \|\varphi\|_{-}$.

Лемма 2.2. Имеют место следующие тождества:

$$|\mathbf{q}| = [\mathbf{u}^2]_\sigma, \qquad \mathbf{p}^2 = \Big[\frac{1}{4\mathbf{u}^2}\mathbf{w}^2\Big]_\sigma, \qquad \langle \mathbf{q}, \mathbf{p}\rangle = \Big[\frac{1}{2}\langle \mathbf{u}, \mathbf{w}\rangle\Big]_\sigma,$$
$$\mathbf{S}_0 = \Big[\frac{1}{4}(\mathbf{u}^2 + \mathbf{w}^2)\Big]_\sigma, \qquad \mathbf{M} = \Big[\frac{1}{2}C(\mathbf{u})\mathbf{w}\Big]_\sigma, \qquad \mathbf{L} = \Big[\frac{1}{4}({}^{\sigma}\mathbf{u} + {}^{\sigma}\mathbf{w})\Big]_\sigma$$

где

$$C(u) = \begin{pmatrix} u_4 & -u_3 & u_2 & -u_1 \\ -u_3 & -u_4 & u_1 & u_2 \\ u_2 & -u_1 & -u_4 & u_3 \end{pmatrix}.$$

На уровне фазового пространства преобразование Кустаанхеймо задает отображение

$$\Sigma:\ (u, w) \to (q, p) = (Q, P), \tag{2.8}$$

где

$$Q(u, w) \equiv {}^{\sigma}u, \qquad P(u, w) \equiv \frac{1}{2u^2}D(u)w.$$

В силу Леммы 2.1, функции $Q(u,w)$ и $P(u,w)$ являются первыми интегралами гамильтоновой системы с гамильтонианом

$$D_0(u,w) = u_1w_2 - u_2w_1 + u_3w_4 - u_4w_3, \tag{2.9}$$

откуда следует, что отображение Σ постоянно вдоль траекторий гамильтонова поля $\mathrm{ad}(D_0)$.

В силу свойства (в) в лемме 2.1, естественно рассматривать поверхность нулевого уровня его символа D_0 в фазовом пространстве $\mathbb{R}^8_{u,w}$:

$$\{(u,w) \in \mathbb{R}^8 \mid D_0(u,w) = 0\}. \tag{2.10}$$

Заметим, что отображение Σ (2.8) определяет расслоение семимерной поверхности (2.10) траекториями гамильтонова поля $\mathrm{ad}(D_0)$. Базой этого расслоения является некоторая шестимерная поверхность Ξ, а естественными координатами на этой базе будут функции q_j и p_j $(j = 1,2,3)$, связанные с координатами u_k и w_k $(k = 1,2,3,4)$ по формулам

$$q \equiv {}^{\sigma}u, \qquad p = \frac{1}{2u^2}D(u)w.$$

Симплектическая структура $dw \wedge du$ на фазовом пространстве $\mathbb{R}^8_{u,w}$ сводится к симплектической структуре $dp \wedge dq$ на Ξ.

Отображение Σ связывает "действие" $S_0 = |q|\big(\frac{1}{4} + p^2\big)$ на симплектическом многообразии Ξ с функцией Гамильтона гармонического осциллятора $\frac{1}{4}(u^2+w^2)$ на фазовом пространстве $\mathbb{R}^8$.

Рассмотрим симплектическое многообразие Ξ более подробно. Сначала введем комплексную структуру на этом многообразии. Для этого, в исходном пространстве $\mathbb{R}^8_{u,w}$ с комплексными координатами $c_j = u_j + iw_j$ $(j = 1,2,3,4)$, найдем голоморфные функции, которые постоянны вдоль слоев отображения Σ. Такими функциями будут скалярная переменная c^2 и компоненты вектора ${}^{\sigma}c$, так как они находятся в инволюции с функцией $D_0(u,w)$. Таким образом, в качестве комплексных координат на фазовом пространстве Ξ можно взять функции

$$v = \frac{1}{4}c^2\Big|_{\{D_0=0\}}, \qquad V_j = \frac{1}{4}({}^{\sigma}c)_j\Big|_{\{D_0=0\}} \qquad (j = 1,2,3),$$

удовлетворяющие соотношению

$$V_1^2 + V_2^2 + V_3^2 = v^2.$$

Комплексные функции v, V_j можно выразить через действительные координаты q_j, p_j следующим образом:

$$\begin{aligned} v &= |q|\left(\frac{1}{4} - p^2\right) + i\,\langle q, p\rangle, \\ V_j &= q_j\Big(\frac{1}{4} - p^2\Big) + 2(p \times M)_j + i\,|q|\,p_j, \qquad j = 1,2,3. \end{aligned} \tag{2.11}$$

Эти формулы являются модификацией хорошо известной комплексной структуры Сурьо [7, 10].

Скобки Пуассона между введенными выше комплексными координатами имеют вид

$$
\begin{aligned}
&\{V_j, V_k\} = 0, \qquad \{V_j, v\} = 0,\\
&\{V_j, \overline{V_k}\} = 2i\,\delta_{jk} S_0 + i(V_j\overline{V_k} - V_k\overline{V_j})\, S_0^{-1},\\
&\{V_j, \overline{v}\} = i(V_j\overline{v} + \overline{V_j}v)\, S_0^{-1},\\
&\{v, \overline{v}\} = 2i\, S_0, \qquad \{v, S_0\} = i\, v, \qquad \{V_j, S_0\} = i\, V_j,
\end{aligned}
$$

где

$$
S_0 = \sqrt{\big(|v|^2 + |V|^2\big)/2}.
$$

Эти соотношения позволяют выразить симплектическую (кэлерову) форму на Ξ через комплексные координаты следующим образом:

$$
dp \wedge dq = d\varpi, \qquad \varpi = i\frac{\overline{v}\, dv + \big\langle V, dV\big\rangle}{\sqrt{2(|v|^2 + |V|^2)}} = i\partial\Big(\sqrt{2(|v|^2 + |V|^2)}\Big).
$$

(Здесь рассматривается только одна карта, покрывающая все многообразие Ξ за исключением точек, в которых $q_1 = q_2 = q_3 = 0$).

Квантовая версия соотношений (2.11) имеет вид

$$
\begin{aligned}
&\mathbf{v} \overset{\text{def}}{=} |\mathbf{q}| \left(\frac{1}{4} - \mathbf{p}^2\right) + \frac{i}{3}\Big(2\big\langle \mathbf{q}, \mathbf{p}\big\rangle + \big\langle \mathbf{p}, \mathbf{q}\big\rangle\Big),\\
&\mathbf{V} \overset{\text{def}}{=} \mathbf{q} \left(\frac{1}{4} - \mathbf{p}^2\right) + (\mathbf{p} \times \mathbf{M}) - (\mathbf{M} \times \mathbf{p}) + i|\mathbf{q}|\, \mathbf{p},
\end{aligned}
\tag{2.12}
$$

Преобразование Кустаанхеймо приводит эти операторы к виду

$$
\mathbf{v} = \left[\frac{1}{4}(\mathbf{u} + i\mathbf{w})^2\right]_\sigma, \qquad \mathbf{V} = \left[\frac{1}{4}{}^{\sigma}(\mathbf{u} + i\mathbf{w})\right]_\sigma.
$$

Теорема 2.1. Операторы комплексной структуры (2.12) удовлетворяют коммутационным соотношениям

$$
\begin{aligned}
&[\mathbf{V}_j, \mathbf{V}_k] = 0, \qquad [\mathbf{V}_j, \mathbf{v}] = 0,\\
&[\mathbf{V}_j, \mathbf{V}_k^*] = 2\hbar\, \delta_{jk} \mathbf{S}_0 + \frac{\hbar}{2}(\mathbf{V}_j\mathbf{V}_k^* + \mathbf{V}_k^*\mathbf{V}_j - \mathbf{V}_k\mathbf{V}_j^* - \mathbf{V}_j^*\mathbf{V}_k)\, \mathbf{S}_0^{-1},
\end{aligned}
\tag{2.13}
$$

и тождествам

$$
\mathbf{V}_1^2 + \mathbf{V}_2^2 + \mathbf{V}_3^2 = \mathbf{v}^2, \qquad \frac{1}{4}\Big(\mathbf{v}\mathbf{v}^* + \mathbf{v}^*\mathbf{v} + \big\langle \mathbf{V}, \mathbf{V}^*\big\rangle + \big\langle \mathbf{V}^*, \mathbf{V}\big\rangle\Big) - \hbar^2 = \mathbf{S}_0^2. \tag{2.14}
$$

3. Квадратичная алгебра, представляющая $T^*\mathbf{S}^3$

С помощью построенных операторов комплексной структуры можно получить интересную квантовую реализацию кокасательного расслоения $T^*\mathbf{S}^3$, вложенного в пространство $\mathbb{R}^8$

Далее будем использовать универсальные обозначения

$$
\mathbf{V} \equiv \mathbf{C}, \qquad \mathbf{V}^* \equiv \mathbf{B}, \qquad \mathbf{v} \equiv \mathbf{C}^0, \qquad \mathbf{v}^* \equiv \mathbf{B}_0, \qquad \mathbf{S}_0 \equiv \mathbf{A}.
$$

Тогда соотношения (2.13), (2.14) можно переписать в виде перестановочных соотношений

$$
\begin{gathered}
\mathbf{C}^0\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_0\mathbf{C}^0 + 2\hbar\mathbf{A}, \qquad \mathbf{C}^q\mathbf{B}_p = \mathbf{B}_p(1+\hbar\mathbf{A}^{-1})\mathbf{C}^q - \hbar\mathbf{B}_q\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}^p + 2\hbar\delta_p^q\mathbf{A},\\
\mathbf{C}^p\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_0(1+\hbar\mathbf{A}^{-1})\mathbf{C}^p + \hbar\mathbf{B}_p\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}^0,\\
\mathbf{C}^0\mathbf{B}_p = \mathbf{B}_p(1+\hbar\mathbf{A}^{-1})\mathbf{C}^0 + \hbar\mathbf{B}_0\mathbf{A}^{-1}\mathbf{C}^p,\\
\mathbf{A}\mathbf{B}_0 = \mathbf{B}_0(\mathbf{A}+\hbar), \qquad \mathbf{C}^0\mathbf{A} = (\mathbf{A}+\hbar)\mathbf{C}^0,\\
\mathbf{A}\mathbf{B}_p = \mathbf{B}_p(\mathbf{A}+\hbar), \qquad \mathbf{C}^p\mathbf{A} = (\mathbf{A}+\hbar)\mathbf{C}^p,\\
[\mathbf{B}_0,\mathbf{B}_p] = [\mathbf{B}_p,\mathbf{B}_q] = 0, \qquad [\mathbf{C}^0,\mathbf{C}^p] = [\mathbf{C}^p,\mathbf{C}^q] = 0,\\
p, q, = 1, 2, 3,
\end{gathered}
\tag{3.1}
$$

и тождеств

$$
\begin{gathered}
\mathbf{B}_1^2 + \mathbf{B}_2^2 + \mathbf{B}_3^2 = \mathbf{B}_0^2, \qquad (\mathbf{C}^1)^2 + (\mathbf{C}^2)^2 + (\mathbf{C}^3)^2 = (\mathbf{C}^0)^2,\\
\frac{1}{4}\big(\langle\mathbf{C},\mathbf{B}\rangle + \langle\mathbf{B},\mathbf{C}\rangle\big) - \hbar^2 = \mathbf{A}^2.
\end{gathered}
\tag{3.2}
$$

Если ввести вещественные и мнимые части

$$
\begin{gathered}
\boldsymbol{\zeta}_0 = -\frac{1}{2}(\mathbf{B}_0 + \mathbf{C}^0), \quad \boldsymbol{\zeta}_p = \frac{i}{2}(\mathbf{B}_p - \mathbf{C}^p),\\
\boldsymbol{\eta}_0 = \frac{i}{2}(\mathbf{B}_0 - \mathbf{C}^0), \quad \boldsymbol{\eta}_p = \frac{1}{2}(\mathbf{B}_p + \mathbf{C}^p), \qquad p = 1, 2, 3,
\end{gathered}
$$

то получим следующие коммутационные соотношения

$$
\begin{gathered}
[\mathbf{A},\boldsymbol{\zeta}_p] = i\hbar\boldsymbol{\eta}_p, \qquad [\mathbf{A},\boldsymbol{\eta}_p] = -i\hbar\boldsymbol{\zeta}_p,\\
[\boldsymbol{\zeta}_p,\boldsymbol{\zeta}_q] = -i\hbar(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1}, \qquad [\boldsymbol{\eta}_p,\boldsymbol{\eta}_q] = -i\hbar(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1},\\
[\boldsymbol{\zeta}_p,\boldsymbol{\eta}_q] = -i\hbar\delta_{pq}\mathbf{A}, \qquad p, q = 0, 1, 2, 3,
\end{gathered}
\tag{3.3}
$$

и тождества

$$
\boldsymbol{\zeta}^2 = \boldsymbol{\eta}^2 = \mathbf{A}^2 + \hbar^2, \qquad \langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle = -\langle\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\zeta}\rangle = -2i\hbar\mathbf{A}.
\tag{3.4}
$$

Теперь остается немного “подкрутить” рассматриваемые операторы с помощью квадратного корня из $\mathbf{A}$ (принимая во внимание, что $\mathbf{A} > 0$):

$$
\boldsymbol{\rho}_p \stackrel{\mathrm{def}}{=} \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2}, \qquad \boldsymbol{\sigma}_p \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2}\big(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{-1/2} + \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{1/2}\big).
\tag{3.5}
$$

Теорема 3.1. Эрмитовы операторы (3.5) удовлетворяют следующим квадратичным коммутационным соотношениям:

$$
\begin{aligned}
&[\boldsymbol{\rho}_p,\boldsymbol{\rho}_q] = 0,\\
&[\boldsymbol{\rho}_p,\boldsymbol{\sigma}_q] = -i\hbar\,(\delta_{pq}\boldsymbol{\rho}^2 - \boldsymbol{\rho}_p\boldsymbol{\rho}_q),\\
&[\boldsymbol{\sigma}_p,\boldsymbol{\sigma}_q] = -i\hbar\,(\boldsymbol{\sigma}_p\boldsymbol{\rho}_q - \boldsymbol{\sigma}_q\boldsymbol{\rho}_p),
\end{aligned}
\tag{3.6}
$$

Здесь $\rho^2 \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_{p=0}^3 \rho_p^2$, $\hbar > 0$. Для этих соотношений выполняются тождества Якоби.

Алгебра (3.6) имеет два элемента Казимира

$$\mathbf{K}_1 = \boldsymbol{\rho}^2, \qquad \mathbf{K}_2 = \frac{1}{2}\big(\langle \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\sigma}\rangle + \langle \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\rho}\rangle\big), \tag{3.7}$$

где $\langle \rho, \sigma\rangle \overset{\text{def}}{=} \sum_{p=0}^{3} \rho_p \sigma_p$.

В рассматриваемом нами представлении алгебры (3.6) выполняются тождества

$$\mathbf{K}_1 = \mathbf{I}, \qquad \mathbf{K}_2 = 0. \tag{3.8}$$

Доказательство теоремы 3.1 приведено в Приложении 1.

Отметим, что “связи” (3.8) на значения функций Казимира являются уравнениями симплектического листа, соответствующего неприводимому представлению алгебры (3.6). Этот лист является поверхностью $\{\rho^2 = 1, \langle \rho, \sigma\rangle = 0\}$, вложенной в пространство $\mathbb{R}^8$ с классическими координатами ρ, σ, и эта поверхность диффеоморфна $T^*\mathbb{S}^3$.

Следствие 3.1. Исходный гамильтониан $\mathbf{S}_0 = \mathbf{A}$ водородоподобного центра, имеющий вид (2.2), задается в терминах образующих алгебры (3.6) следующим соотношением

$$\mathbf{A}^2 = \boldsymbol{\sigma}^2 - \frac{\hbar^2}{4}\boldsymbol{\rho}^2 - \hbar^2. \tag{3.9}$$

Это представление гамильтониана атома водорода, как и сама алгебра (3.6), были найдены в [14].

Квадратичная алгебра (3.6) представляет самостоятельный интерес.

Можно доказать неравенство [14]

$$\boldsymbol{\sigma}^2 \geq \frac{9}{4}\hbar^2 \mathbf{K}_1 + (\mathbf{K}_1)^{-1}(\mathbf{K}_2)^2.$$

Поэтому правая часть (3.9) оценивается снизу величиной $2\hbar^2(\mathbf{K}_1 - \frac{1}{2}) + (\mathbf{K}_1)^{-1}(\mathbf{K}_2)^2$. Следовательно, во всех неприводимых представлениях алгебры (3.6), где $\mathbf{K}_1 > \frac{1}{2}$, в частности, в представлении (3.8), положительный оператор $\mathbf{A}$ корректно определен соотношением (3.9).

Далее, в любом представлении алгебры (3.6) на пространстве H, где выполнены тождества (3.8) можно по генераторам $\boldsymbol{\sigma}_p$, $\boldsymbol{\rho}_p$ восстановить операторы $\boldsymbol{\zeta}_p$, $\boldsymbol{\eta}_p$, т.е. обратить формулы (3.5) и доказать соотношения (3.3), (3.4). А значит далее можно перейти к (3.1), (3.2) и, наконец, вернуться к соотношениям для операторов комплексной структуры (2.13), (2.14). Это доказано в Приложении 2.

Приложение 1. Доказательство теоремы 3.1

Заметим, что оператор $\mathbf{A}_0 = \mathbf{S}_0$ (2.2) имеет минимальное собственное значение $\hbar$. Обозначим через $\mathfrak{P}_0$ соответствующий собственный вектор

$$\mathbf{A}\mathfrak{P}_0 = \hbar\mathfrak{P}_0, \tag{П1.1}$$

Из (3.1) получаем

$$\hbar\mathbf{C}^p\mathfrak{P}_0 = \mathbf{C}^p\mathbf{A}\mathfrak{P}_0 = (\mathbf{A} + \hbar)\mathbf{C}^p\mathfrak{P}_0. \tag{П1.2}$$

Отсюда следует, что

$$\mathbf{C}^p\mathfrak{P}_0 = 0, \qquad \mathbf{C}^q\mathbf{B}_p\mathfrak{P}_0 = 2\hbar^2\delta_p^q\,\mathfrak{P}_0.$$

Вторая формула здесь вытекает из первого соотношения (3.1)

Применяя коммутационные соотношения (3.3), запишем

$$[\mathbf{A}^{-1},\boldsymbol{\zeta}_p] = -i\hbar\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{-1}, \qquad [\mathbf{A}^{-1},\boldsymbol{\eta}_p] = i\hbar\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}. \tag{П1.3}$$

Для операторов $\boldsymbol{\rho}_p$, определенных формулой (3.5), получим

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{\rho}_p,\boldsymbol{\rho}_q] &= \mathbf{A}^{-1/2}(\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1/2}\\
&= \mathbf{A}^{-1/2}\big([\boldsymbol{\zeta}_p,\boldsymbol{\eta}_q] - i\hbar(\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p)\big)\mathbf{A}^{-3/2}\\
&= -i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}\big(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p + \boldsymbol{\zeta}_p\boldsymbol{\eta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\boldsymbol{\eta}_p\\
&\qquad + i\hbar(\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p)\big)\mathbf{A}^{-5/2}\\
&= -i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}\big([\boldsymbol{\eta}_p,\boldsymbol{\zeta}_q] + [\boldsymbol{\zeta}_p,\boldsymbol{\eta}_q]\big)\mathbf{A}^{-5/2}\\
&\qquad + \hbar^2\mathbf{A}^{-1/2}(\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1/2}\cdot\mathbf{A}^{-2}\\
&= \hbar^2[\boldsymbol{\rho}_p,\boldsymbol{\rho}_q]\cdot\mathbf{A}^{-2}
\end{aligned}$$

или

$$[\boldsymbol{\rho}_p,\boldsymbol{\rho}_q]\cdot(\mathbf{I} - \hbar^2\mathbf{A}^{-2}) = 0. \tag{П1.4}$$

Отсюда следует, что первое коммутационное соотношение $[\boldsymbol{\rho}_p,\boldsymbol{\rho}_q] = 0$ в (3.6) выполняется на подпространстве $\mathcal{P}_0^{\perp}$, ортогональном собственному вектору $\mathfrak{P}_0$ (П1.1).

Из (П1.2) и коммутационного соотношения $\mathbf{A}^{-1}\mathbf{B}_q = \mathbf{B}_q(\mathbf{A}+\hbar)^{-1}$ (которое является следствием (3.1)), получим цепочку равенств

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\rho}_p\boldsymbol{\rho}_q\mathfrak{P}_0 &= \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1/2}\mathfrak{P}_0 = \frac{i}{2}\hbar^{-1/2}\mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}(\mathbf{B}_q - \mathbf{C}^q)\mathfrak{P}_0\\
&= \frac{i}{2}\hbar^{-1/2}\mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{B}_q(\mathbf{A}+\hbar)^{-1}\mathfrak{P}_0\\
&= -\frac{1}{8}\hbar^{-3/2}\mathbf{A}^{-1/2}(\mathbf{B}_p - \mathbf{C}^p)\mathbf{B}_q\mathfrak{P}_0 = -\frac{1}{8}\hbar^{-3/2}\mathbf{A}^{-1/2}(\mathbf{B}_p\mathbf{B}_q - 2\hbar^2\delta_q^p)\mathfrak{P}_0,\\
&\qquad\qquad p,q = 1,2,3.
\end{aligned} \tag{П1.5}$$

Так как операторы $\mathbf{B}_p$ и $\mathbf{B}_q$ коммутируют, замена переменных $p \longleftrightarrow q$ не меняет правую часть последнего соотношения. Следовательно, имеем

$$\boldsymbol{\rho}_p\boldsymbol{\rho}_q\mathfrak{P}_0 = \boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathfrak{P}_0, \qquad p,q = 1,2,3.$$

Случай $p = 0$ или $q = 0$ рассматривается аналогично.

Итак, мы полностью доказали первое коммутационное соотношение (3.6).

Теперь докажем первое соотношение в (3.8). Применяя (П1.3) и (3.4), получим

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\rho}^2 &= \mathbf{A}^{-1/2}\sum_{p=0}^{3}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2} = \mathbf{A}^{-1/2}\Big(\boldsymbol{\zeta}^2 - i\hbar\sum_{p=0}^{3}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p\Big)\mathbf{A}^{-3/2}\\
&= \mathbf{A}^{-1/2}\Big(\mathbf{A}^2 + \hbar^2 - i\hbar\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle\mathbf{A}^{-1} + \hbar^2\sum_{p=0}^{3}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\Big)\mathbf{A}^{-3/2}
\end{aligned}$$

$$= \mathbf{I} - \hbar^2 \mathbf{A}^{-2} + \hbar^2 \boldsymbol{\rho}^2 \mathbf{A}^{-2},$$

или

$$\boldsymbol{\rho}^2 (\mathbf{I} - \hbar^2 \mathbf{A}^{-2}) = \mathbf{I} - \hbar^2 \mathbf{A}^{-2}.$$

На подпространстве $\mathcal{P}_0^{\perp}$, где обратим оператор $\mathbf{I} - \hbar^2 \mathbf{A}^{-2}$, это соотношение дает искомое первое коммутационное соотношение в (3.8), т.е. $\boldsymbol{\rho}^2 = \mathbf{I}$.

В силу (П1.5), имеем

$$\sum_{p=1}^{3} \boldsymbol{\rho}_p^2 \mathfrak{P}_0 = -\frac{1}{8} \hbar^{-3/2} \mathbf{A}^{-1/2} \Big(\sum_{p=1}^{3} \mathbf{B}_p^2 - 6\hbar^2 \Big) \mathfrak{P}_0.$$

Аналогично, получим

$$\boldsymbol{\rho}_0^2 \mathfrak{P}_0 = \frac{1}{8} \hbar^{-3/2} \mathbf{A}^{-1/2} (\mathbf{B}_0^2 + 2\hbar^2) \mathfrak{P}_0.$$

Суммируя два последних соотношения и принимая во внимание первое соотношение в (3.2), получим

$$\boldsymbol{\rho}^2 \mathfrak{P}_0 = \hbar^{1/2} \mathbf{A}^{-1/2} \mathfrak{P}_0 = \mathfrak{P}_0.$$

Таким образом, первое соотношение в (3.8) доказано на всем пространстве представлений.

Далее, применяя второе соотношение в (П1.3), также как и последнее соотношение в (3.4), вычислим коммутатор

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{\rho}_p, \boldsymbol{\sigma}_q] &= \frac{1}{2} (\mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\zeta}_p \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{1/2} \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\zeta}_p \mathbf{A}^{-1/2} \\
&\qquad + \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\zeta}_p \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{1/2} - \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\eta}_q \boldsymbol{\zeta}_p \mathbf{A}^{-1/2}) \\
&= \mathbf{A}^{-1/2} \Big([\boldsymbol{\zeta}_p, \boldsymbol{\eta}_q] + \frac{i\hbar}{2} (\boldsymbol{\zeta}_q \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\zeta}_p + \boldsymbol{\zeta}_p \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\zeta}_q) \Big) \mathbf{A}^{-1/2} \\
&= -i\hbar \Big(\delta_{pq} \cdot \mathbf{I} - \frac{1}{2} (\boldsymbol{\rho}_p \boldsymbol{\rho}_q + \boldsymbol{\rho}_q \boldsymbol{\rho}_p) \Big).
\end{aligned}$$

Из уже доказанных соотношений $\boldsymbol{\rho}_p \boldsymbol{\rho}_q = \boldsymbol{\rho}_q \boldsymbol{\rho}_p$ и $\boldsymbol{\rho}^2 = \mathbf{I}$ получим второе коммутационное соотношение в (3.6), т.е. $[\boldsymbol{\rho}_p, \boldsymbol{\sigma}_q] = -i\hbar (\delta_{pq} \boldsymbol{\rho}^2 - \boldsymbol{\rho}_p \boldsymbol{\rho}_q)$.

Вычислим последний коммутатор в (3.6). Снова применим соотношения (3.3) и их следствия, т.е. второе соотношение в (П1.3) и коммутационное соотношение $[\boldsymbol{\eta}_p \boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q \boldsymbol{\zeta}_p, \mathbf{A}^{-1}] = 0$. Тогда мы получим цепочку соотношений

$$\begin{aligned}
[\boldsymbol{\sigma}_p, \boldsymbol{\sigma}_q] &= \frac{1}{4} \big(\mathbf{A}^{1/2} \boldsymbol{\eta}_p \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{1/2} \boldsymbol{\eta}_q \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A}^{-1/2} + \mathbf{A}^{1/2} \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{1/2} \\
&\qquad - \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A} \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A}^{-1/2} + \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A} \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{1/2} \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A}^{1/2} \\
&\qquad + \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\eta}_p \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{1/2} - \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\eta}_q \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A}^{1/2} \big) \\
&= \frac{1}{4} \big(2\mathbf{A}^{1/2} [\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\eta}_q] \mathbf{A}^{-1/2} + 2\mathbf{A}^{-1/2} [\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\eta}_q] \mathbf{A}^{1/2} \\
&\qquad - i\hbar (\mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\zeta}_p \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{1/2} - \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\zeta}_q \mathbf{A}^{-1} \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A}^{1/2} \\
&\qquad - \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\zeta}_p \boldsymbol{\eta}_q \mathbf{A}^{-1/2} + \mathbf{A}^{-1/2} \boldsymbol{\zeta}_q \boldsymbol{\eta}_p \mathbf{A}^{-1/2})\big) \\
&= -\frac{i\hbar}{4} \big(4\mathbf{A}^{-1/2} (\boldsymbol{\eta}_p \boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q \boldsymbol{\zeta}_p) \mathbf{A}^{-1/2}
\end{aligned}$$

$$+ i\hbar(\mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2})\big)$$
$$= -i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1/2} + \frac{\hbar^2}{4}[\boldsymbol{\rho}_p, \boldsymbol{\rho}_q].$$

Так как $\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p = \boldsymbol{\rho}_p\boldsymbol{\rho}_q$, то получим

$$[\boldsymbol{\sigma}_p, \boldsymbol{\sigma}_q] = -i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1/2}. \tag{П1.6}$$

С другой стороны, имеем

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_p\boldsymbol{\rho}_q - \boldsymbol{\sigma}_q\boldsymbol{\rho}_p &= \frac{1}{2}\big(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1/2} + \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1/2} \\ &\quad - \mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\eta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2}\big) \\ &= \frac{1}{2}\big(2\mathbf{A}^{-1/2}(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1/2} \\ &\quad - i\hbar(\mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2})\big) \\ &= \mathbf{A}^{-1/2}(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1/2} - i\hbar[\boldsymbol{\rho}_p, \boldsymbol{\rho}_q].\end{aligned}$$

Так как $\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p = \boldsymbol{\rho}_p\boldsymbol{\rho}_q$, то получим

$$\boldsymbol{\sigma}_p\boldsymbol{\rho}_q - \boldsymbol{\sigma}_q\boldsymbol{\rho}_p = \mathbf{A}^{-1/2}(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A}^{-1/2}. \tag{П1.7}$$

Сравнивая (П1.6) and (П1.7), получим последний коммутатор в (3.6), т.е.

$$[\boldsymbol{\sigma}_p, \boldsymbol{\sigma}_q] = -i\hbar(\boldsymbol{\sigma}_p\boldsymbol{\rho}_q - \boldsymbol{\sigma}_q\boldsymbol{\rho}_p).$$

Наконец, применяя второе соотношение в (3.4) и уже доказанное первое соотношение в (3.8), так же как и в (3.6), получим

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\sigma}\rangle &= \frac{1}{2}\Big(\mathbf{A}^{-1/2}\langle\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}\rangle\mathbf{A}^{-1/2} + \mathbf{A}^{-1/2}\sum_{p=0}^{3}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{1/2}\Big) \\ &= \frac{1}{2}\Big(-2i\hbar + \mathbf{A}^{-1/2}\langle\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}\rangle\mathbf{A}^{-1/2} + i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}\sum_{p=0}^{3}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2}\Big) \\ &= -2i\hbar + \frac{i\hbar}{2}\boldsymbol{\rho}^2 = -\frac{3}{2}i\hbar\end{aligned}$$

и

$$\langle\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\rho}\rangle = \langle\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\sigma}\rangle + \sum_{p=0}^{3}[\boldsymbol{\sigma}_p, \boldsymbol{\rho}_p] = -\frac{3}{2}i\hbar + 3i\hbar\boldsymbol{\rho}^2 = \frac{3}{2}i\hbar.$$

Отсюда следует

$$\langle\boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\sigma}\rangle + \langle\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\rho}\rangle = 0,$$

т.е. выполняется второе соотношение в (3.8). Теорема 3.1 доказана. □

Приложение 2

Покажем, как вернуться от алгебры (3.6) и соотношений (3.8) к (3.3), (3.4).

Сначала докажем следующие общие свойства генераторов $\boldsymbol{\rho}_p$, $\boldsymbol{\sigma}_p$ и оператора $\mathbf{A}$ из алгебры (3.6) на подпространстве H, где выполнены соотношения (3.8):

$$
\begin{aligned}
&\text{(a)}\quad [\boldsymbol{\rho}_p, \mathbf{A}^2] = -2i\hbar\,\boldsymbol{\sigma}_p, \qquad [\boldsymbol{\sigma}_p, \mathbf{A}^2] = i\hbar\Big(\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p + \boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 - \frac{\hbar^2}{2}\boldsymbol{\rho}_p\Big);\\
&\text{(b)}\quad [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\,] = \hbar^2\boldsymbol{\rho}_p, \qquad [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\sigma}_p]\,] = \hbar^2\boldsymbol{\sigma}_p;\\
&\text{(c)}\quad \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} = \frac{1}{2}(\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p + \boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2) - \frac{\hbar^2}{2}\boldsymbol{\rho}_p; \qquad\qquad (\Pi 2.1)\\
&\text{(d)}\quad [\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}, \mathbf{A}] = \frac{i\hbar}{2}(\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_p + \boldsymbol{\sigma}_p\mathbf{A}) + \frac{\hbar}{4}[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p];\\
&\text{(e)}\quad [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A} = i\hbar\,\boldsymbol{\sigma}_p - \frac{\hbar^2}{2}\boldsymbol{\rho}_p.
\end{aligned}
$$

Равенства (a) непосредственно следуют из (3.6), (3.8), (3.9) и тождества

$$\big\langle \boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{\rho} \big\rangle = \big\langle \boldsymbol{\rho}, \boldsymbol{\sigma} \big\rangle + 3i\hbar.$$

Для доказательства (b), вычислим

$$[\mathbf{A}^2, [\mathbf{A}^2, \boldsymbol{\rho}_p]\,] = 2i\hbar[\mathbf{A}^2, \boldsymbol{\sigma}_p] = 2\hbar^2(\boldsymbol{\rho}\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}) - \hbar^4\boldsymbol{\rho}.$$

С другой стороны, имеем

$$[\mathbf{A}^2, [\mathbf{A}^2, \boldsymbol{\rho}_p]\,] = [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \ [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]]\,]_+\,]_+,$$

где скобки $[\cdot,\cdot]_+$ обозначают антикоммутатор $[\mathbf{A}, \mathbf{R}]_+ \equiv \mathbf{AR} + \mathbf{RA}$. Таким образом, получим

$$[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \ [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]]\,]_+\,]_+ = 2\hbar^2[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]_+\,]_+ - \hbar^4\boldsymbol{\rho}_p - 4\hbar^2\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}, \qquad (\Pi 2.2)$$

поскольку

$$\boldsymbol{\rho}\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho} \equiv [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]_+\,]_+ - 2\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}\mathbf{A}.$$

Теперь подставим выражение

$$2\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} = \frac{1}{2}[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]_+\,]_+ - \frac{1}{2}[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\,]$$

в (П2.2) и получим

$$[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \ [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\,] - \hbar^2\boldsymbol{\rho}_p]_+\,]_+ = \hbar^2\left([\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\,] - \hbar^2\boldsymbol{\rho}_p\right). \qquad (\Pi 2.3)$$

Однако неравенство $\mathbf{A} \geq \hbar$ дает следующее вложение спектра:

$$\operatorname{spec}\left([\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \ \cdot\,]_+\,]_+\right) \subset \{(\lambda' + \lambda'')^2 \mid \lambda', \lambda'' \in \operatorname{spec}(\mathbf{A})\} \subset [4\hbar^2, \infty).$$

Таким образом, оператор $[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \ \cdot\,]_+\,]_+ - \hbar^2\mathbf{I}$ обратим и из (П2.3) следует, что

$$[\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\,] - \hbar^2\boldsymbol{\rho}_p = 0.$$

Второе тождество в (b) доказывается аналогично. Тождество (c) очевидным образом следует из (b).

Докажем (d). Из (c) имеем

$$\begin{aligned}
[\mathbf{A}, \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}] &= \frac{1}{2}[\mathbf{A}, \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p + \boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 - \hbar^2\boldsymbol{\rho}_p] \\
&= \frac{1}{2}\big(\mathbf{A}^2[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p] + [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A}^2\big) - \frac{\hbar^2}{2}[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p] \\
&= \frac{1}{2}\big(\mathbf{A}[\mathbf{A}^2, \boldsymbol{\rho}_p] - [\boldsymbol{\rho}_p, \mathbf{A}^2]\mathbf{A}\big) - \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} + \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 - \frac{\hbar^2}{2}[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p].
\end{aligned}$$

Теперь применим (a) и получим искомое тождество (d).

Наконец, рассмотрим равенство

$$[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A} + \mathbf{A}[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p] = [\mathbf{A}^2, \boldsymbol{\rho}_p]. \tag{П2.4}$$

Второе слагаемое в левой части равно

$$\mathbf{A}[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p] = [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A} + [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\,] = [\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A} + \hbar^2\boldsymbol{\rho}_p,$$

где использовано (b). Таким образом, из (5.15) получим

$$2[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A} + \hbar^2\boldsymbol{\rho}_p = [\mathbf{A}^2, \boldsymbol{\rho}_p].$$

Применяя (a) к правой части, получим (e).

Теперь зададим операторы $\boldsymbol{\zeta}_p$, $\boldsymbol{\eta}_p$ формулами

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\zeta}_p &\overset{\text{def}}{=} \mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^{1/2}, \\
\boldsymbol{\eta}_p &\overset{\text{def}}{=} \frac{1}{2}\big(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\sigma}_p\mathbf{A}^{-1/2} + \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\sigma}_p\mathbf{A}^{1/2}\big) \\
&\qquad + \frac{i\hbar}{4}\big(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^{1/2}\big).
\end{aligned} \tag{П2.5}$$

Выведем для этих операторов соотношения (3.3), (3.4).

Сначала, из определения коммутатора и в силу (П2.5), получим

$$[\boldsymbol{\eta}_p, \mathbf{A}] = i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}\Big(\frac{1}{2}\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} + \frac{1}{4}(\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p) - \frac{\hbar^2}{4}\boldsymbol{\rho}_p\Big)\mathbf{A}^{-1/2}.$$

Из (П2.1) (c) следует, что

$$[\boldsymbol{\eta}_p, \mathbf{A}] = i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}\Big(\frac{1}{2}\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} + \frac{1}{2}\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\Big)\mathbf{A}^{-1/2} = i\hbar\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^{1/2} = i\hbar\boldsymbol{\zeta}_p.$$

Таким образом, мы доказали второе соотношение на первой строке в формуле (3.3).

Аналогично, получим

$$\begin{aligned}
[\mathbf{A}, \boldsymbol{\zeta}_p] &= \mathbf{A}^{-1/2}(\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} - \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2)\mathbf{A}^{-1/2} = \mathbf{A}^{-1/2}[\mathbf{A}, \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}]\mathbf{A}^{-1/2} \\
&= i\hbar\mathbf{A}^{-1/2}\Big(\frac{1}{2}(\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_p + \boldsymbol{\sigma}_p\mathbf{A}) + \frac{i\hbar}{4}[\mathbf{A}, \boldsymbol{\rho}_p]\Big)\mathbf{A}^{-1/2},
\end{aligned}$$

где мы использовали (П2.1) (d). Таким образом, имеем

$$\begin{aligned}[\mathbf{A},\boldsymbol{\zeta}_p]=i\hbar\Big(&\frac{1}{2}(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\sigma}_p\mathbf{A}^{-1/2}+\mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\sigma}_p\mathbf{A}^{1/2})\\&+\frac{i\hbar}{4}(\mathbf{A}^{1/2}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^{-1/2}-\mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^{1/2})\Big).\end{aligned}$$

Из определения (П2.5) получим первое соотношение в формуле (3.3), именно,

$$[\mathbf{A},\boldsymbol{\zeta}_p]=i\hbar\boldsymbol{\eta}_p.$$

Теперь докажем последнее соотношение в (3.3). Имеем

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p&=\mathbf{A}^{-1/2}\Big(\frac{1}{2}(\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}+\boldsymbol{\sigma}_q\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A})+\frac{i\hbar}{4}(\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\boldsymbol{\rho}_q\mathbf{A}-\boldsymbol{\rho}_q\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A})\Big)\mathbf{A}^{-1/2},\\ \boldsymbol{\zeta}_p\boldsymbol{\eta}_q&=\mathbf{A}^{-1/2}\Big(\frac{1}{2}(\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_q+\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\boldsymbol{\sigma}_q\mathbf{A})+\frac{i\hbar}{4}(\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_q-\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A})\Big)\mathbf{A}^{-1/2},\end{aligned}$$

и поэтому

$$\begin{aligned}[\boldsymbol{\eta}_q,\boldsymbol{\zeta}_p]=\mathbf{A}^{-1/2}\Big(&\frac{1}{2}\mathbf{A}[\boldsymbol{\sigma}_q,\boldsymbol{\sigma}_p]\mathbf{A}+\frac{i\hbar}{2}\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\\&+\frac{1}{2}(\boldsymbol{\sigma}_q\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}-\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\sigma}_q)\\&-\frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}+\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_q)\Big)\mathbf{A}^{-1/2}.\end{aligned}\tag{П2.6}$$

Применим (3.6) к выражению на первой строке в правой части формулы (П2.6) и заменим эти слагаемые на

$$\frac{1}{2}\mathbf{A}[\boldsymbol{\sigma}_q,\boldsymbol{\sigma}_p]\mathbf{A}+\frac{i\hbar}{2}\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}=\frac{i\hbar}{2}\delta_{qp}\mathbf{A}^2.\tag{П2.7}$$

Из (П2.1) (c) следует, что третье слагаемое в правой части формулы (П2.6) имеет вид

$$\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}_q,\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}]=\frac{1}{4}[\boldsymbol{\sigma}_q,\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p+\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2-\hbar^2\boldsymbol{\rho}_p].$$

Теперь применим коммутаторы (3.6) и (П2.1) (a) следующим образом:

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}_q,\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}]=&\frac{i\hbar}{4}\Big(\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p+\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2-\frac{\hbar^2}{2}\boldsymbol{\rho}_p\Big)\boldsymbol{\rho}_q+\frac{i\hbar}{4}\boldsymbol{\rho}_q\Big(\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_p+\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2-\frac{\hbar^2}{2}\boldsymbol{\rho}_p\Big)\\&+\frac{i\hbar}{4}\mathbf{A}^2(\delta_{pq}-\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p)+\frac{i\hbar}{4}(\delta_{pq}-\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p)\mathbf{A}^2-\frac{i\hbar^3}{4}(\delta_{pq}-\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p).\end{aligned}$$

Если поменять местами $\mathbf{A}^2$ и $\boldsymbol{\rho}_q$ чтобы создать комбинации $\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p$ и $\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2$, то получим

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}_q,\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}]=&\frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2+\mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p)+\frac{i\hbar}{2}\delta_{pq}\mathbf{A}^2-\frac{i\hbar^3}{4}\delta_{pq}\\&+\frac{i\hbar}{4}\boldsymbol{\rho}_p[\mathbf{A}^2,\boldsymbol{\rho}_q]+\frac{i\hbar}{4}[\boldsymbol{\rho}_q,\mathbf{A}^2]\boldsymbol{\rho}_p.\end{aligned}$$

С помощью (П2.1) (a) и (3.6), преобразуем последние два слагаемых следующим образом:

$$\frac{i\hbar}{4}[\boldsymbol{\rho}_p,[\mathbf{A}^2,\boldsymbol{\rho}_q]\,]=-\frac{\hbar^2}{2}[\boldsymbol{\rho}_p,\boldsymbol{\sigma}_q]=\frac{i\hbar^3}{2}(\delta_{pq}-\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p).$$

Таким образом, получим

$$\frac{1}{2}[\boldsymbol{\sigma}_q, \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}] = \frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p) + \frac{i\hbar}{2}\delta_{pq}\mathbf{A}^2 + \frac{i\hbar^3}{4}\delta_{pq} - \frac{i\hbar^3}{2}\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p. \qquad (\text{П}2.8)$$

В последнем слагаемом в (П2.6), имеем

$$\begin{aligned}
&-\frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} + \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_q)\\
&\quad= -\frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p) + \frac{i\hbar}{4}(\mathbf{A}[\mathbf{A},\boldsymbol{\rho}_p]\boldsymbol{\rho}_q - \boldsymbol{\rho}_q[\mathbf{A},\boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A})\\
&\quad= -\frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p) + \frac{i\hbar}{4}[\mathbf{A},[\mathbf{A},\boldsymbol{\rho}_p]]\boldsymbol{\rho}_q + \frac{i\hbar}{4}[[\mathbf{A},\boldsymbol{\rho}_p]\mathbf{A},\boldsymbol{\rho}_q].
\end{aligned}$$

Теперь, применяя (П2.1) (b), (e) and (3.6), получим

$$-\frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A} + \mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\rho}_q) = -\frac{i\hbar}{4}(\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p\mathbf{A}^2 + \mathbf{A}^2\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p) + \frac{i\hbar^3}{2}\boldsymbol{\rho}_q\boldsymbol{\rho}_p - \frac{i\hbar^3}{4}\delta_{qp}. \qquad (\text{П}2.9)$$

Объединяя (П2.7), (П2.8) и (П2.9) в правой части формулы (П2.6), получим

$$[\boldsymbol{\eta}_q, \boldsymbol{\zeta}_p] = \mathbf{A}^{-1/2}(i\hbar\,\delta_{pq}\mathbf{A}^2)\mathbf{A}^{-1/2} = i\hbar\,\delta_{pq}\mathbf{A}.$$

Таким образом, мы доказали последние соотношения в формуле (3.3).

Теперь из (П2.5) и (3.6) следует, что

$$0 = [\boldsymbol{\rho}_p, \boldsymbol{\rho}_q] = \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1/2} - \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2},$$

т.е.

$$\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q = \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p. \qquad (\text{П}2.10)$$

Из последнего соотношения в (3.3) также получим

$$\begin{gathered}
\boldsymbol{\eta}_q = \mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_q\mathbf{A} - i\hbar\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q, \qquad \boldsymbol{\zeta}_p = \mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A} + i\hbar\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p,\\
[\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\zeta}_q] + [\boldsymbol{\zeta}_p, \boldsymbol{\eta}_q] = 0.
\end{gathered} \qquad (\text{П}2.11)$$

Объединяя (П2.11) и (П2.10), получим

$$-i\hbar(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p) - i\hbar(\boldsymbol{\zeta}_p\boldsymbol{\eta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\boldsymbol{\eta}_p) + \hbar^2(\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p) = 0. \qquad (\text{П}2.12)$$

Теперь заменяя $\boldsymbol{\eta}_q$ и $\boldsymbol{\eta}_p$ во второй скобке выражениями (П2.11), получим

$$-i\hbar(\boldsymbol{\zeta}_p\boldsymbol{\eta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\boldsymbol{\eta}_p) = -i\hbar(\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p)\mathbf{A} - \hbar^2(\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p).$$

Подставляя в (П2.12), приходим к выражению

$$-i\hbar(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p) + \big(\boldsymbol{\zeta}_p(-i\hbar\boldsymbol{\eta}_q) - \boldsymbol{\zeta}_q(-i\hbar\boldsymbol{\eta}_p)\big)\mathbf{A} = 0.$$

Во второй скобке, заменим $(-i\hbar\boldsymbol{\eta}_q)$ и $(-i\hbar\boldsymbol{\eta}_p)$ на выражения (П2.11) и получим

$$-i\hbar(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p) + \boldsymbol{\zeta}_p(\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_q\mathbf{A} - \boldsymbol{\zeta}_q)\mathbf{A} - \boldsymbol{\zeta}_q(\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A} - \boldsymbol{\zeta}_p)\mathbf{A} = 0.$$

Применяя (П2.10), получим

$$-i\hbar(\boldsymbol{\eta}_p\boldsymbol{\zeta}_q - \boldsymbol{\eta}_q\boldsymbol{\zeta}_p) + [\boldsymbol{\zeta}_q, \boldsymbol{\zeta}_p]\mathbf{A} = 0.$$

Таким образом, мы доказали соотношение для $[\boldsymbol{\zeta}_p, \boldsymbol{\zeta}_q]$ в (3.3).

Теперь из соотношения для $[\mathbf{A}, \boldsymbol{\zeta}_p]$ в (3.3), получим

$$[\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\eta}_q] = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 [[\boldsymbol{\zeta}_p, \mathbf{A}], [\boldsymbol{\zeta}_q, \mathbf{A}]\,] = \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 [\boldsymbol{\zeta}_q, [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \boldsymbol{\zeta}_p]\,]\,] + \left(\frac{i}{\hbar}\right)^2 [\mathbf{A}, [\,[\mathbf{A}, \boldsymbol{\zeta}_p], \boldsymbol{\zeta}_q\,]\,].$$

Здесь мы применили тождество Якоби для коммутаторов. Из (П2.1) (b) and (3.3), получим

$$[\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\eta}_q] = -[\boldsymbol{\zeta}_q, \boldsymbol{\zeta}_p] - \frac{i}{\hbar}[\mathbf{A}, [\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\zeta}_q]\,].$$

Последнее слагаемое в правой части равно нулю в силу соотношения для $[\boldsymbol{\zeta}_p, \boldsymbol{\eta}_q]$ в формуле (3.3). Итак, мы получили

$$[\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\eta}_q] = -[\boldsymbol{\zeta}_q, \boldsymbol{\zeta}_p],$$

и таким образом, мы доказали соотношение для $[\boldsymbol{\eta}_p, \boldsymbol{\eta}_q]$ в формуле (3.3).

Теперь из (П2.5) следует, что $\mathbf{I} = \boldsymbol{\rho}^2 = \sum_{p=0}^3 \mathbf{A}^{-1/2}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1/2}$, и таким образом

$$\mathbf{A} = \sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p. \tag{П2.13}$$

Из этого равенства и (П2.11) получим

$$\mathbf{A}^2 = \sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A} = \boldsymbol{\zeta}^2 - i\hbar\sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p \tag{П2.14}$$

и

$$\mathbf{A}^2 = \sum_{p=0}^{3} \mathbf{A}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p = \boldsymbol{\zeta}^2 + i\hbar\sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p. \tag{П2.15}$$

Снова из (П2.11) следует, что

$$\langle\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}\rangle = \sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A} - i\hbar\sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p$$

и

$$\mathbf{A}\sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p = \langle\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\zeta}\rangle - i\hbar\sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p.$$

Применяя формулу (П2.13) к обоим выражениям, получим

$$\sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}_p = \langle\boldsymbol{\zeta}, \boldsymbol{\eta}\rangle\mathbf{A}^{-1} + i\hbar, \qquad \sum_{p=0}^{3} \boldsymbol{\eta}_p\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}_p = \mathbf{A}^{-1}\langle\boldsymbol{\eta}, \boldsymbol{\zeta}\rangle - i\hbar.$$

Таким образом, из (П2.14) и (П2.15) следует, что

$$\mathbf{A}^2 = \boldsymbol{\zeta}^2 + \hbar^2 - i\hbar\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle\mathbf{A}^{-1}, \qquad \mathbf{A}^2 = \boldsymbol{\zeta}^2 + \hbar^2 + i\hbar\mathbf{A}^{-1}\langle\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\zeta}\rangle. \tag{П2.16}$$

Последнее выражение в (3.3) приводит к равенству

$$\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle = \langle\boldsymbol{\eta},\boldsymbol{\zeta}\rangle - 4i\hbar\mathbf{A}. \tag{П2.17}$$

Следовательно, второе соотношение в (П2.16) сводится к

$$\mathbf{A}^3 = \mathbf{A}\boldsymbol{\zeta}^2 + i\hbar\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle - 3\hbar^2\mathbf{A}.$$

Первое соотношение в (П2.16) имеет вид

$$\mathbf{A}^3 = \boldsymbol{\zeta}^2\mathbf{A} - i\hbar\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle + \hbar^2\mathbf{A}. \tag{П2.18}$$

Из этих двух равенств получим

$$-i\hbar\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle = \frac{1}{2}[\mathbf{A},\boldsymbol{\zeta}^2] - 2\hbar^2\mathbf{A}.$$

Подставляя это выражение в (П2.18), получим

$$2(\mathbf{A}^3 + \hbar^2\mathbf{A}) = \mathbf{A}\boldsymbol{\zeta}^2 + \boldsymbol{\zeta}^2\mathbf{A}.$$

Решение этого уравнения имеет вид

$$\boldsymbol{\zeta}^2 = \mathbf{A}^2 + \hbar^2, \tag{П2.19}$$

и следовательно

$$\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle = -2i\hbar\mathbf{A}. \tag{П2.20}$$

С другой стороны, из (П2.11) следует, что

$$\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle = \mathbf{A}^{-1}\sum_{p=0}^{3}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\eta}_p + i\hbar\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}^2, \qquad \sum_{p=0}^{3}\boldsymbol{\zeta}_p\mathbf{A}\boldsymbol{\eta}_p = \langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle\mathbf{A} - i\hbar\boldsymbol{\zeta}^2,$$

и таким образом,

$$\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle = \mathbf{A}^{-1}\langle\boldsymbol{\zeta},\boldsymbol{\eta}\rangle\mathbf{A} - i\hbar\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\zeta}^2 + i\hbar\mathbf{A}^{-1}\boldsymbol{\eta}^2.$$

Отсюда, применяя (П2.17), (П2.19) и (П2.20), получим

$$\boldsymbol{\eta}^2 = \boldsymbol{\zeta}^2.$$

Таким образом, мы доказали все соотношения в формуле (3.4).

Литература

1. T. Tati, “Radiative corrections to the intensities for hydrogen-like atoms,” Phys. Rev. 85, 1064 (1952).
2. Ya. A. Rozneritsa and Ya. S. Matronitskii, “Ionization energy of a screened hydrogenlike imparity center in a semiconductor,” Russian Phys. J. 10 (9), 80–81 (1967).
3. V. A. Belyakov and V. A. Burdov, “Fine splitting of electron states in silicon nanocrystal with hydrogen-like shallow donor,” Nanoscale Res. Lett. 2 (11), 569–575 (2007).

4. A. S. Baltenkov, S. T. Manson, and A. Z. Msezane, Photoionization of hydrogenlike ions surrounded by a charged spherical shell," Phys. Rev. A 76, 042707–042712 (2007).
5. V. A. Yerokhin, "Two-loop self-energy for the ground state of medium-Z hydrogen-like ions," Phys. Rev. A 80, 040501–0420504 (2009).
6. S. Watanabe, in Review of Fundamental Processes and Applications of Atoms and Ions (World Science, Singapore, 1993).
7. J.-M. Souriau, "Sur la variet´e de Kepler," in Sympoisia Math. XIV (Academic Press, London–New York, 1974).
8. J. Rawnsley, "Coherent states and K¨ahler manifolds," Quart. J. Math. Oxford Ser. (2) 28, 403–415 (1977).
9. J. Rawnsley, "On the pairing of polarizations," Comm. Math. Phys. 58, 1–8 (1978).
10. J. Rawnsley, "A nonunitary pairing of polarizations for the Kepler problem," in Trans. Amer. Math. Soc. (1979), Vol. 250, pp. 167–180.
11. J. Rawnsley, "Deformation quantization of K¨ahler manifolds," in Symplectic Geometry and Mathematical Physics. Actes du colloque en l'honneur de J.-M.Souriau, Ed. by P. Donato et al. (Birkh¨auser, Basel-Boston, 1991) pp. 366–373.
12. M. V. Karasev and V. P. Maslov, "Нелиевские перестановочные соотношения," Успехи Мат. Наук 45 (5), 41–79 (1990); English transl. in Russian Math. Surveys 45 (5), 51–98 (1990).
13. M. V. Karasev and V. P. Maslov, Нелинейные скобки Пуассона. Геометрия и квантование (Наука, Москва, 1991); English transl. in Ser. Translations of Mathematical Monographs (Amer. Math. Soc., Providence, RI, 1993), Vol. 119.
14. M. V. Karasev and E. M. Novikova, "Non-Lie permutation relations, coherent states, and quantum embedding," AMS 187, 1–202 (1998).
15. M. V. Karasev and E. M. Novikova, "Представление точных и квазиклассических собственных функций через когерентные состояния. Атом водорода с магнитном поле," Теорет. Мат. Физ. 108 (3), 339–387 (1996); English transl. in Theoret. and Math. Phys. 108 (3), 1119–1159 (1996).
16. M. V. Karasev and E. M. Novikova, "Coherent transform of spectral problem and algebras with nonlinear commutation relations," J. Math. Sci. 95 (6), 2703–2798 (1999).

ALGEBRAIC MODELING OF OBSERVABLES AND STATES FOR HYDROGEN-LIKE CENTER. I. Quadratic algebra

E. M. Novikova

Moscow institute for electronics and mathematics at HSE

e.m.novikova@gmail.com

Received 20.05.2012

The algebraic technique making possible to model the symmetry algebra of the Hydrogen-like center is represented. The quadratic commutation relations, the "action" operator and the complex structure operators are described.