

**М. И. Петрашень
Е. Д. Трифонов**

**ПРИМЕНЕНИЕ
ТЕОРИИ ГРУПП
В КВАНТОВОЙ
МЕХАНИКЕ**

Издание четвертое,
стереотипное



Москва • 2002

УРСС

Петрашень Мария Ивановна, Трифонов Евгений Дмитриевич

Применение теории групп в квантовой механике

М.: Эдиториал УРСС, 2000. — 280 с.

ISBN 5–8360–0078–6

Книга знакомит читателя с основами теории конечных и непрерывных групп и приложениями теории представлений групп к задачам квантовой механики.

Рассмотренные приложения относятся к таким разделам квантовой механики, как теория атома, квантовая химия, теория твердого тела и релятивистская квантовая механика.

Включен ряд вопросов, которые либо не рассматриваются в других монографиях, либо излагаются там недостаточно подробно. Это относится прежде всего к исследованию симметрии шредингеровской волновой функции, к объяснению «дополнительного» вырождения в кулоновском поле и к некоторым вопросам теории твердого тела.

Настоящее издание дополнено параграфом, посвященным классификации точечных групп по Вейлю, а также доказательством теоремы Вигнера—Экарта, применение которой иллюстрируется на примере эффекта Зеемана.

Книга рассчитана в первую очередь на студентов физических факультетов. Она будет также полезна научным работникам — физикам и химикам, желающим научиться использовать методы теории групп в своих исследованиях.

Группа подготовки издания:

Директор — Доминго Марин Рикой

Заместители директора — Наталья Финогенова, Ирина Макеева

Компьютерный дизайн — Виктор Романов

Верстка — Михаил Кириллов

Редакционно-корректорские работы — Елена Кудряшова

Обработка графики — Елена Ефремова

Обработка текста — Андрей Стулов

Техническая поддержка — Наталья Аринчева

Издательство «Эдиториал УРСС». 113208, г. Москва, ул. Чертановская, д. 2/11, к. п.
Лицензия ЛР № 064418 от 24.01.96 г. Гигиенический сертификат на выпуск книжной
продукции № 77.ФЦ.8.953.П.270.3.99 от 30.03.99 г. Подписано к печати 08.02.2000 г.
Формат 60 × 84/16. Печ. л. 17,5. Зак. № 270.

Отпечатано в множительной лаборатории Кольчугинского завода технических изделий.
601750, Владимирская обл., г. Кольчугино, ул. Добровольского, 2.

Эдиториал УРСС

научная и учебная литература



Тел: 135-44-23, 135-42-46

E-mail: urss@urss.ru

Каталог изданий в

Internet: <http://urss.ru>

ISBN 5–8360–0078–6

© М. И. Петрашень,
Е. Д. Трифонов, 2000

© Эдиториал УРСС, 2000

Предисловие ко второму изданию (как была написана эта книга)

В 1952 г. Мария Ивановна Петрашень читала нам, второкурсникам физического факультета Ленинградского университета, лекции по высшей математике, в частности, линейную алгебру и некоторые вопросы математической физики.

Кроме курса высшей математики Мария Ивановна читала спецкурс по применению теории групп в квантовой механике. Как известно, основные принципы использования аппарата теории групп в квантовой механике были сформулированы почти одновременно с рождением этой области физики, в начале 30-х годов, когда вышли монографии Г. Вейля и Е. Вигнера. Однако даже в начале 50-х годов этот метод не получил еще достаточно широкого распространения среди наших физиков-теоретиков, хотя в курсе квантовой механики Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшица, первое издание которого появилось в 1948 г., вопросам теории симметрии было уделено уже достаточно много места. Книги Вейля и Вигнера были переведены на русский язык значительно позже.

Мария Ивановна по образованию была математиком, хотя ее научная работа всегда была связана с теоретической физикой. Известно, что первые расчеты атомов по методу Хартри—Фока были выполнены Марией Ивановной.

В. А. Фок, который был научным руководителем Марии Ивановны, никогда не использовал теорию групп, хотя именно его фундаментальные работы о симметрии атома водорода и многоэлектронной волновой функции во многом способствовали развитию применения этого математического аппарата в квантовой механике. По-видимому, интерес Марии Ивановны к теории групп был связан с переходом в ее работах от атомной физики к физике твердого тела.

Курс теории групп меня заинтересовал, хотя я не могу признаться, что сразу же активно все воспринимал. Это заставляло меня самостоятельно разбираться в непонятных математических вопросах в основном по III тому учебника В. И. Смирнова.

Мария Ивановна вела также студенческий семинар, на котором мы рассказывали рекомендованные нам научные работы. Мне было поручено разобрать работу Е. Вигнера о пространственных группах и работу Г. Бете о расщеплении уровней атома в кристаллическом поле. Я сделал подробные рефераты этих работ, показал их Марии Ивановне, получив ее одобрение.

Усиление моего интереса к приложениям теории в квантовой механике также было связано с поступлением в аспирантуру.

На вступительных экзаменах в аспирантуру я получил вопрос от М. Г. Веселова по статье Фока о симметрии координатной многоэлектронной волновой функции. Хотя в своих лекциях Михаил Григорьевич излагал нам этот материал, рассказать об этом на экзамене без предварительной подготовки мне оказалось не под силу. Обычно Михаил Григорьевич задавал этот вопрос уже на кандидатском экзамене, причем делал это заранее, а не на самом экзамене. Одним словом, вступительный экзамен я не выдержал.

Михаил Григорьевич разрешил отвечать по этому же вопросу на другой день и в конце концов все закончилось благополучно. Но мне потребовалось для этого основательно разобрать упомянутую статью В. А. Фока. Несколько позже мне удалось связать свойства симметрии координатной волновой функции, сформулированные в этой статье, с теми, которые были установлены при группово-теоретическом подходе. Мне пришлось еще разбирать вопрос о переводе на язык теории групп работы В. А. Фока о дополнительной симметрии (относительно четырехмерных вращений) атома водорода. Это было связано с дипломной работой моего друга и однокурсника Ю. Добронравова, трагически погибшего в 1955 г. Я подготовил его работу, выполненную под руководством Ю. Н. Демкова, к печати, и она вышла в 1956 г. в «Вестнике университета». Моя дипломная работа, также опубликованная в этом журнале в 1957 г., была посвящена неприводимым представлениям группы четырехмерных вращений. Тогда же я познакомился с работами Ю. Н. Демкова по динамической симметрии гармонического осциллятора, что позже позволило мне объяснить бесфононные линии в спектрах кристаллов как оптический аналог эффекта Мессбауэра. Мария Ивановна с интересом относилась к этим моим занятиям и предложила мне читать отдельные темы в ее лекционном курсе. В результате у нас появилась идея написать книгу, отражающую содержание расширенного курса. Мы рассчитывали сначала на издательство университета, но никаких предварительных переговоров с этим издательством не вели. Решили сначала написать текст. Книга была закончена в 1966 г. Первую половину курса писала Мария Ивановна, вторую — я. Мы постоянно обменивались рукописями и обсуждали их содержание. Часто возникали противоположные точки зрения, которые удавалось согласовывать с помощью М. Н. Адамова, ставшего впоследствии редактором нашей книги.

Относительно опубликования книги Мария Ивановна решила посоветоваться с В. И. Смирновым, который предложил направить рукопись в издательство «Наука». Он просмотрел текст и согласился подписать рекомендацию, к которой присоединился и В. А. Фок. Этого было достаточно, чтобы книга сразу же была принята к печати и в 1967 г.

опубликована. Хотя она вышла 15-тысячным тиражом, на следующий год ее уже нельзя было найти на полках магазинов. Еще через год мы случайно узнали, что наша книга была переведена в Англии, Франции, Германии и США. Это было сделано без каких-либо усилий с нашей стороны и даже без нашего ведома (в те годы Советский Союз не участвовал в конвенции по охране авторских прав).

В журнале «Physics Today» вышла положительная рецензия. Все же мы жалели о том, что иностранные издательства не предупредили нас о предполагаемом переводе и публикации нашей книги. Как почти всегда бывает при первом издании, мы обнаружили некоторые опечатки и неточности, которые можно было исправить, но, к сожалению, они были механически сохранены в переводах. В связи с этим мы планировали новое издание книги на русском языке, в которое хотели также добавить несколько новых параграфов. Тяжелая болезнь и кончина Марии Ивановны в 1977 г. заставили забыть об этом на долгое время.

Недавно ко мне обратилось московское издательство «УРСС», которое специализируется по переводам научной и учебной литературы на испанский язык, а в последнее время активно издает монографии и учебники по физике и математике и на русском языке, с предложением опубликовать второе издание нашей книги. Я воспользовался этой возможностью, чтобы осуществить наши старые планы. Общая структура книги, рассчитанная на первое знакомство с предметом, полностью сохранена. Добавлено лишь несколько вопросов, имеющих принципиальное значение. В частности, добавлен параграф, посвященный классификации точечных групп по Вейлю, где задача об отыскании всех точечных групп сводится к решению простых алгебраических уравнений в целых числах. Восполнено упущение первого варианта книги — приведено доказательство теоремы Вигнера—Эккарта, играющей важную роль в приложениях. Теорема Вигнера—Эккарта дает общее выражение для матричного элемента неинвариантного оператора на базисных функциях неприводимого представления. Применение теоремы Вигнера—Эккарта иллюстрируется на примере теории эффекта Зеемана.

Как было отмечено в предисловии к первому изданию, данную книгу следует рассматривать как введение в область применения теории групп к задачам квантовой механики. Для более подробного изучения этих вопросов, наряду с уже упомянутыми учебниками и монографиями, читателю можно рекомендовать литературу, появившуюся в более позднее время [12–28].

Большая работа была выполнена по устранению опечаток. В связи с этим я выражаю благодарность А. В. Тулубу, обратившему мое внимание на ряд неточностей, допущенных в Приложении, которые теперь исправлены. Неизбежно какие-то недостатки сохранятся и во втором

издании, и я буду благодарен внимательному читателю за критику и замечания. Я надеюсь, что новое издание будет интересно не только тем, кто только начинает изучение данного предмета, но и тем, кто им владеет и в свое время познакомился с первым изданием книги.

Е. Д. Трифонов

Предисловие к первому изданию

Эта книга написана на основе курса лекций по применению методов теории групп к задачам квантовой механики, который читался авторами на физическом факультет Ленинградского университета студентам-теоретикам IV курса.

После известного периода недоверия к теории групп как средству исследования физических систем эта математическая теория завоевала всеобщее признание физиков. Аппарат теории групп в настоящее время широко используется в таких разделах квантовой физики, как теория атома, теория твердого тела, квантовая химия и др. Достижения последних лет в теории элементарных частиц, связанные с применением теории групп, значительно повысили интерес к возможности использования теоретико-групповых методов исследования и еще раз показали важность и естественность применения их в квантовой теории.

Вопросам применения теории групп в физике посвящено довольно большое число учебников и монографий. Наибольшую известность у нас получили книги¹⁾ Вигнера [1], Ван дер Вардена [2], Вейля [3], Любарского [4] и Хейне [5]. Очень ценными являются изложения теории групп для физиков, написанные математиками, в первую очередь следует отметить главу по теории групп в курсе высшей математики акад. В. И. Смирнова. Превосходное изложение теории представлений группы вращения и группы Лоренца имеется в книге И. М. Гельфанда, Р. А. Минлоса, З. Я. Шапиро [6]. Весьма полезными являются монографии Мурнагана [7] и Бёрнера [8]. По приложениям теории групп к физике можно также отметить книги Ломонта [9], Хамермеша [10] и Макуини [11].

Область применения в физике методов теории групп непрерывно расширяется, поэтому в настоящее время вряд ли возможно написать монографию, охватывающую все эти применения. По-видимому, более

¹⁾ Список этих книг см. на с. 273.

целесообразно включать соответствующие приложения теории групп в монографии или учебники, посвященные специальным физическим проблемам, как это, например, сделано в курсе теоретической физики Ландау и Лифшица. Можно ожидать, что со временем такая тенденция будет только усиливаться.

В то же время физику-теоретика полезно иметь общие представления об основных идеях и методах теории групп, применяемых в физике. Мы стремились к тому, чтобы наш курс способствовал этому. Кроме того, мы сочли целесообразным включить в книгу ряд вопросов, которые не рассматриваются в известных нам монографиях или излагаются там недостаточно подробно. Это в первую очередь относится к исследованию симметрии шредингеровской волновой функции, к объяснению (дополнительного) вырождения в кулоновском поле и к некоторым вопросам теории твердого тела.

В нашем курсе мы ограничили область приложений теории групп задачами квантовой механики. Таким образом, эту книгу можно рассматривать как первую часть более широкого курса, вторая часть которого должна быть посвящена применению теоретико-групповых методов в теории квантованных полей. Мы заканчиваем эту книгу изложением смежных вопросов, касающихся условий релятивистской инвариантности в квантовой теории.

Авторы выражают глубокую благодарность М. Н. Адамову, прочитавшему рукопись и сделавшему ряд ценных замечаний, А. Г. Жиличу и И. Б. Левинсону, просмотревшим отдельные главы. При подготовке рукописи к печати мы воспользовались любезной помощью А. А. Киселева, Б. Я. Фрезинского, Р. А. Эварестова, А. А. Березина и Г. А. Натанзона.

*М. И. Петрашень
Е. Д. Трифонов*

Глава I

Введение

В первой главе мы постараемся, насколько это возможно в начале книги, показать естественность и целесообразность применения теории групп к решению физических задач. Мы надеемся, что это поможет читателю, интересующемуся в основном приложениями теории групп к физике, усвоить некоторые общие сведения об абстрактных группах, необходимые для приложений.

1. Свойства симметрии физических систем

При исследовании различных физических систем часто удается представить обнаруженные свойства и закономерности в форме законов симметрии. Эти законы выражаются в инвариантности (независимости вида) уравнений движения рассматриваемой физической системы относительно некоторых определенных преобразований. Если, например, уравнения движения инвариантны относительно ортогональных преобразований декартовых координат в трехмерном пространстве, то можно сказать, что в данном случае симметрия проявляется в эквивалентности определенным образом ориентированных друг относительно друга систем отсчета при описании движения соответствующей физической системы. Эквивалентными системами отсчета принято называть такие системы, в которых тождественные явления протекают одинаковым образом, если для них созданы одинаковые начальные условия. Наоборот, если в физической теории постулируется эквивалентность некоторых систем отсчета, то уравнения движения должны быть инвариантны относительно преобразований, связывающих координаты в этих системах. Так, например, постулат теории относительности об эквивалентности систем отсчета, движущихся друг относительно друга равномерно и прямолинейно, выражается в инвариантности уравнений движения относительно преобразований Лоренца. Класс эквивалентных систем отсчета для данной задачи часто определяется из наглядных геометрических соображений, относящихся к модели рассматриваемой физической системы, как это имеет место для симметричных молекул, кристаллов и т. д.

Однако не всегда преобразования, относительно которых инвариантны уравнения движения, можно интерпретировать как преобразования перехода к новой системе отсчета. Симметрия физической системы

может не обладать геометрической наглядностью. Например, как было показано В. А. Фоком, уравнение Шрёдингера для атома водорода инвариантно относительно вращений в четырехмерном пространстве, связанном с пространством импульсов.

Свойства симметрии физической системы являются общими и очень существенными ее характеристиками. Общность этих свойств обычно обуславливает их стабильность в процессе уточнения наших знаний о данной физической системе. Не следует, однако, их абсолютизировать. Как и любое описание физической системы, они являются приближенными. Приближенность одних свойств симметрии связана с уровнем наших знаний, другие свойства симметрии являются следствием сознательного упрощения модели физической системы, облегчающего решение задачи.

Итак, под симметрией системы мы всегда будем понимать инвариантность ее уравнений движения относительно некоторой совокупности преобразований. Всегда имеет место следующее важное свойство: если уравнение инвариантно относительно преобразований A и B , то оно инвариантно также относительно преобразования C , представляющего результат последовательного применения преобразований A и B . Преобразование C принято называть произведением преобразований A и B . Таким образом, совокупность преобразований симметрии данной физической системы замкнута относительно определенной нами операции умножения. Такую совокупность преобразований называют группой преобразований симметрии рассматриваемой физической системы.

Дадим строгое определение группы.

2. Определение группы

Группой G называют совокупность объектов или операций (элементов группы), обладающих следующими свойствами.

1. Для этой совокупности определен закон «умножения», т. е. закон, по которому любым двум элементам A и B совокупности G , взятым в определенном порядке, единственным образом сопоставляется некоторый элемент C этой совокупности, называемый произведением элементов A и B ; $C = AB$.

2. Это умножение должно обладать свойством ассоциативности, т. е. должно выполняться равенство $(AB)D = A(BD)$ для любых элементов A , B и D совокупности. Переместительным свойством это умножение может не обладать; в общем случае $AB \neq BA$. Те группы, в которых умножение обладает переместительным свойством, называются абелевыми группами.

3. Среди элементов совокупности имеется единичный элемент, т. е. такой элемент E , что равенство

$$AE = EA = A$$

имеет место для любого элемента A совокупности.

4. Наряду с элементом A в совокупности G всегда имеется элемент F такой, что

$$AF = E.$$

Этот элемент F называется *обратным* по отношению к элементу A и обозначается A^{-1} .

Эти четыре свойства и определяют группу; мы видим, что она представляет собой совокупность, замкнутую относительно заданного в ней закона умножения. Из перечисленных свойств вытекают такие следствия:

а) В группе имеется только один единичный элемент. Если мы предположим, например, что в группе G существует два единичных элемента E и E' , то в силу третьего свойства группы будем иметь

$$EE' = E = E'E = E',$$

т. е. $E = E'$.

б) Если F — обратный элемент по отношению к A , то элемент A будет обратным по отношению к F , т. е. если $AF = E$, то и $FA = E$. Действительно, умножая первое из этих равенств слева на F , получим $FAF = F$. Для элемента F , как и для всякого элемента совокупности G , в этой совокупности имеется обратный элемент F^{-1} . Умножая последнее равенство на F^{-1} справа, получаем $FAFF^{-1} = FF^{-1}$, т. е. $FA = E$.

в) Для каждого элемента из совокупности существует только один обратный элемент. Допустим, что для элемента A в G имеется два обратных элемента F и D , т. е. $AF = E$ и $AD = E$. Тогда, умножая равенство $AF = AD$ слева на A^{-1} , получаем $F = D$.

г) Если $C = AB$, то $C^{-1} = B^{-1}A^{-1}$ в силу ассоциативности умножения в группе.

Отметим еще, что если число элементов в группе конечно, то группа называется *конечной*, в противном случае — *бесконечной*. Число элементов конечной группы называют *порядком* группы.

Приведем примеры групп:

1. Совокупность всех целых чисел вместе с нулем образует бесконечную группу, если в качестве группового умножения мы возьмем сложение. Единичным элементом в этой группе будет нуль. Обратным элементом для числа A будет $-A$. Эта группа, очевидно, абелева.

2. Совокупность всех рациональных чисел, за исключением нуля, образует группу с операцией умножения, совпадающей с обычным умножением. Единичным элементом будет единица. Это также бесконечная абелева группа. Положительные рациональные числа сами по себе образуют группу. Отрицательные рациональные числа группы не образуют.

3. Совокупность векторов n -мерного линейного пространства образует группу. Групповым умножением является сложение векторов; единичным элементом будет нулевой вектор, обратным элементом для вектора \mathbf{a} будет вектор $-\mathbf{a}$.

4. Примером неабелевой группы может служить совокупность всех неособых матриц n -го порядка (или соответствующих им линейных преобразований в n -мерном пространстве), которые образуют так называемую общую линейную группу $GL(n)$. Очевидно, что элементы этой группы зависят от n^2 непрерывно изменяющихся параметров (элементов матриц). Бесконечные группы, элементы которых зависят от непрерывно изменяющихся параметров, называются *непрерывными* группами. Единичным элементом в группе $GL(n)$ является единичная матрица; обратным элементам соответствуют обратные матрицы. Операция группового умножения совпадает с правилом умножения матриц, которое, как известно, свойством коммутативности не обладает.

3. Примеры групп, имеющих приложение в физике

Перечислим теперь некоторые группы, которые будут использованы в приложениях.

1. Группа *сдвигов* (трансляций) в трехмерном пространстве: элементами ее являются преобразования переноса начала координат на произвольный вектор \mathbf{a} :

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}.$$

Очевидно, что это трехпараметрическая (три составляющие вектора \mathbf{a}) непрерывная группа.

2. Группа *вращений* $O^+(3)$: ее элементы — преобразования вращения трехмерного пространства или соответствующие им ортогональные матрицы с определителем, равным единице. Это также непрерывная трехпараметрическая группа: 9 элементов ортогональной матрицы преобразования связаны, как известно, шестью условиями. В качестве независимых параметров вращения могут быть выбраны, например, углы $\{\varphi, \theta, \psi\}$. Полярные углы φ и θ определяют положение оси вращения, проходящей через начало координат. Угол ψ определяет поворот относительно этой оси¹⁾. Инвариантность относительно группы $O^+(3)$ выражает свойство изотропности (т. е. равноправности направлений) трехмерного пространства.

Если к группе вращений добавить операцию инверсии $x' = -x$, $y' = -y$, $z' = -z$, то получим *ортогональную* группу $O(3)$.

3. Группы симметрии молекул, или *точечные* группы, состоят из некоторых ортогональных преобразований трехмерного пространства.

¹⁾ См. упр. 1.1.

Например, группа симметрии молекулы, имеющей конфигурацию тетраэдра (как молекула метана CH_4) состоит из 24 элементов: вращений и отражений, переводящих вершины тетраэдра друг в друга.

4. Группы симметрии кристаллов, или *пространственные* группы, состоят из конечного числа ортогональных преобразований, из дискретных сдвигов (трансляций) и произведений этих преобразований. Строго говоря, такой симметрией обладает лишь бесконечный кристалл или модель кристалла с так называемыми циклическими граничными условиями.

5. Группа *перестановок* n символов, например координат n тождественных частиц. Это конечная группа порядка $n!$.

6. Группа *Лоренца* L^+ состоит из преобразований, связывающих координаты двух систем отсчета, которые движутся друг относительно друга равномерно и прямолинейно. Эта группа включает в себя группу вращений $O^+(3)$ и зависит от 6 параметров: от трех углов, определяющих взаимную ориентацию пространственных осей, и от трех составляющих скорости относительного движения. Требование инвариантности уравнений движения относительно группы Лоренца является следствием постулатов теории относительности.

Перечисленные группы, конечно, не исчерпывают всех групп, которые находят применение в физике. Однако наше основное внимание в дальнейшем будет уделено именно этим группам.

4. Условия инвариантности уравнений движения

Выясним теперь условия инвариантности уравнений движения физической системы относительно преобразований ее группы симметрии. В классической механике движение системы описывается уравнениями Лагранжа. Поэтому симметрия физической системы относительно определенной группы преобразований находит свое выражение в инвариантности уравнений Лагранжа (и дополнительных условий, если таковые имеются) относительно этих преобразований. Так как уравнения движения, записанные через функцию Лагранжа \mathcal{L} , при любом выборе обобщенных координат q_i имеют всегда один и тот же вид:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{q}_i} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial q_i} = 0, \quad (1.1)$$

то их инвариантность будет обеспечена, если этим свойством будет обладать сама функция Лагранжа. Следует, однако, заметить, что требование инвариантности функции Лагранжа является слишком жестким. Мы знаем, что уравнения движения не изменятся, если функцию Лагранжа умножить на число или добавить к ней полную производную по времени от произвольной функции обобщенных координат. Например, свойство симметрии одномерного гармонического осциллятора относительно взаимной замены координаты и импульса

(так называемое касательное преобразование в классической механике) соответствует изменению знака его функции Лагранжа

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}p^2 - \frac{1}{2}q^2.$$

В квантовой механике состояние физической системы описывается волновой функцией $\psi(x, t)$ которая является решением уравнения Шрёдингера:

$$\hat{H}(x)\psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t). \quad (1.2)$$

Поэтому симметрия квантовомеханической системы относительно некоторой группы проявляется как инвариантность уравнения Шрёдингера относительно преобразований из этой группы. Если группа симметрии состоит из преобразований конфигурационного пространства

$$x' = ux,$$

то проверка инвариантности уравнения Шрёдингера осуществляется подстановкой

$$x = u^{-1}x', \quad \psi'(x') = \psi(u^{-1}x'). \quad (1.3)$$

Если уравнение Шрёдингера инвариантно относительно преобразования u , то после подстановки (1.3) в (1.2) оно должно сохранить прежний вид. Очевидно, что это будет выполнено, если эта подстановка не изменит вид гамильтониана $\hat{H}(x)$.

Теория групп дает возможность классифицировать состояния физической системы на основе только ее свойств симметрии, без решения самих уравнений движения. В этом и состоит ценность метода теории групп, так как известно, что даже приближенное решение уравнений движения часто оказывается весьма трудоемким. Применяя теоретико-групповые методы, мы можем установить свойства симметрии точных решений этих уравнений и тем самым получить важную информацию о физической системе.

Не имея сейчас возможности использовать аппарат теории групп, мы все-таки попытаемся проиллюстрировать эти соображения на примере из классической механики. Мы знаем, что в классической механике классификация движений данной системы проводится по значениям интегралов движения. Покажем, что наличие интегралов движения обусловлено симметрией системы относительно групп непрерывных преобразований. Рассмотрим систему материальных точек, функция Лагранжа которой инвариантна относительно группы трансляций в трехмерном пространстве. Это означает, что приращение функции Лагранжа, обусловленное сдвигом

$$r'_i = r_i + a, \quad \delta r_i = a \quad (1.4)$$

должно быть равно нулю. Считая \mathbf{a} бесконечно малым вектором, мы получаем

$$\delta \mathcal{L} = \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}_i} \delta \mathbf{r}_i = \mathbf{a} \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}_i} = 0. \quad (1.5)$$

Согласно уравнениям Лагранжа

$$\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \mathbf{r}_i} = \frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i}, \quad (1.6)$$

и, следовательно, в силу произвольности \mathbf{a} мы будем иметь

$$\frac{d}{dt} \sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} = 0 \quad (1.7)$$

или

$$\sum_i \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\mathbf{r}}_i} \equiv \sum_i \mathbf{p}_i = \mathbf{P} = \text{const}. \quad (1.8)$$

Таким образом, из инвариантности функции Лагранжа относительно трансляций в трехмерном пространстве следует, что полный импульс системы есть интеграл движения.

Аналогично можно показать, что из требования инвариантности относительно трансляций по времени следует, что энергия системы есть интеграл движения.

Позднее мы докажем, что аналогичные результаты справедливы и в квантовой теории.

Упражнения

1.1. Доказать, что любое преобразование вращения трехмерного пространства может быть представлено в виде поворота на определенный угол вокруг некоторой оси, проходящей через начало координат.

1.2. Показать, что из инвариантности функции Лагранжа относительно группы трехмерных вращений следует, что полный момент количества движения системы есть интеграл движения.

Глава II

Абстрактные группы

При исследовании общих свойств группы несущественна конкретная реализация ее элементов (преобразованиями, матрицами, перестановками и т. д.). Обозначив элементы группы некоторыми символами, для которых задан определенный закон умножения, мы получаем так называемую *абстрактную* группу. В этой главе мы рассмотрим некоторые свойства абстрактных групп.

1. Сдвиг по группе

Пусть группа G состоит из m элементов g_1, g_2, \dots, g_m . Умножим справа каждый из элементов группы на один и тот же элемент g_i , или, как говорят, произведем правый сдвиг по группе. Тогда мы получим последовательность

$$g_1g_i, g_2g_i, \dots, g_mg_i. \quad (2.1)$$

Покажем, что в этой последовательности каждый элемент группы встречается один и только один раз. Действительно, пусть g_l — произвольный элемент группы. Очевидно, что $g_l = (g_lg_i^{-1})g_i$, и, следовательно, элемент g_l содержится в последовательности (2.1). Так как число элементов в нашей последовательности равно порядку группы, то каждый из элементов может содержаться в ней только по одному разу. Таким же свойством обладает последовательность элементов

$$g_ig_1, g_ig_2, \dots, g_ig_m, \quad (2.2)$$

получаемая с помощью левого сдвига.

2. Подгруппа

Часть элементов группы G , которые сами по себе образуют группу с тем же законом умножения, называют *подгруппой* группы G . Оставшаяся часть группы G не может образовывать группы, так как она не содержит, например, единичного элемента.

3. Порядок элемента

Возьмем произвольный элемент g_i группы G и образуем различные степени этого элемента g_i, g_i^2, g_i^3, \dots . Так как мы рассматриваем конечную группу, то члены в этой последовательности обязательно должны

повторяться. Пусть, например,

$$g_i^{k_1} = g_i^{k_2} = g_i, \quad k_2 > k_1.$$

Тогда

$$g_i^{k_2} = g_i^{k_1} g_i^{k_2 - k_1} = g_i g_i^{k_2 - k_1} = g_i,$$

и, следовательно,

$$g_i^{k_2 - k_1} = E.$$

Наименьший показатель степени h , для которого имеет место равенство

$$g_i^h = E,$$

называют *порядком элемента* g_i . Периодом или циклом элемента g_i называется совокупность элементов $g_i, g_i^2, \dots, g_i^h = E$. Очевидно, период элемента образует подгруппу группы G . Легко видеть, что все элементы этой подгруппы коммутируют друг с другом, и, следовательно, эта подгруппа будет абелевой.

Если h — порядок элемента g_i , то $g_i^{h-1} = g_i^{-1}$. Поэтому для конечных групп существование обратных элементов является следствием трех других групповых свойств.

4. Сопряженные совокупности

Пусть H — подгруппа группы G с элементами h_1, h_2, \dots, h_m ; m — порядок группы H . Составим следующую последовательность совокупностей элементов группы G . Сначала возьмем элементы подгруппы H , затем выберем из группы G какой-нибудь элемент g_1 , не содержащийся в H , и составим совокупность элементов $g_1 h_1, g_1 h_2, \dots, g_1 h_m$, которую будем обозначать через $g_1 H$. Выберем теперь из группы G элемент g_2 , который не содержится ни в H , ни в $g_1 H$, и составим еще одну совокупность $g_2 H$. Мы можем продолжать построение таких совокупностей, пока не исчерпаем всю группу. В результате мы получим следующую последовательность:

$$H, g_1 H, g_2 H, \dots, g_{k-1} H. \quad (2.3)$$

Совокупности элементов $g_i H$ называют *сопряженными совокупностями слева* по подгруппе H .

Покажем, что построенные сопряженные совокупности не имеют общих элементов. Действительно, предположим, что в совокупностях $g_1 H$ и $g_2 H$ имеется один общий элемент, например, $g_1 h_1 = g_2 h_2$. Тогда $g_2 = g_1 h_1 h_2^{-1} = g_1 h_3$, и мы получим, что g_2 принадлежит совокупности $g_1 H$. Но этот результат противоречит построению. Таким образом, каждый элемент группы G входит только в одну из сопряженных совокупностей.

Так как группа G содержит n элементов, а каждая из сопряженных совокупностей m элементов, то $m = \frac{n}{k}$. Число k называют *индексом* подгруппы H для группы G . Мы видим, что порядок подгруппы является делителем порядка группы.

Аналогичным образом можно провести разложение группы G на сопряженные совокупности справа:

$$H, Hg'_1, Hg'_2, \dots, Hg'_{k-1}. \quad (2.4)$$

При построении сопряженных совокупностей имеется произвол в выборе элементов g_i . Покажем, что при любом допустимом выборе элементов g_i мы получаем один и тот же набор сопряженных совокупностей и, следовательно, одно и то же разложение. Этот результат непосредственно следует из теоремы: две сопряженные совокупности g_iH и g_kH (g_i и g_k — два любых элемента группы G) либо совпадают, либо не имеют ни одного общего элемента. Действительно, если эти совокупности имеют хотя бы один общий элемент $g_ih_\alpha = g_kh_\beta$, то $g_k = g_ih_\alpha h_\beta^{-1}$ и, следовательно, $g_k \in g_iH$. Но тогда любой элемент совокупности g_kH представим в виде $g_kh_\gamma = g_ih_\alpha h_\beta^{-1}h_\gamma = g_ih_\delta$ и также принадлежит сопряженной совокупности g_iH .

Таким образом, группа G может быть однозначно разложена на сопряженные совокупности слева (или справа) по подгруппе H .

5. Сопряженные элементы и класс

Пусть g — некоторый элемент группы G . Составим элемент $g' = g_i g g_i^{-1}$; $g_i \in G$. Элементы g и g' называются *сопряженными*. Пусть теперь g_i пробегает все элементы группы G . Тогда мы получим n элементов, среди которых могут оказаться одинаковые. Пусть число разных элементов равно k . Обозначим их через g_1, g_2, \dots, g_k . Очевидно, что эта совокупность включает в себя все элементы группы G , которые сопряжены с элементом g . Легко показать, что все элементы этой совокупности являются взаимно сопряженными. Действительно, пусть $g_1 = g_\alpha g g_\alpha^{-1}$, $g_2 = g_\beta g g_\beta^{-1}$. Тогда $g = g_\alpha^{-1} g_1 g_\alpha$ и $g_2 = g_\beta g_\alpha^{-1} g_1 g_\alpha g_\beta^{-1} = g_\beta g_\alpha^{-1} g_1 (g_\beta g_\alpha^{-1})^{-1}$.

Совокупность всех взаимно сопряженных элементов называют *классом*. Таким образом, элементы g_1, g_2, \dots, g_k образуют класс сопряженных элементов. Как мы видим, класс вполне определяется заданием одного из элементов. Число элементов в классе называют *порядком класса*. Всякая конечная группа может быть разбита на несколько классов сопряженных элементов. Единичный элемент группы сам по себе образует класс. Легко убедиться в том, что все элементы одного и того же класса имеют одинаковый порядок.

Покажем, что совокупность произведений элементов двух классов состоит из целых классов. Условно это может быть записано в следующем виде:

$$C_i C_j = \sum_k h_{ijk} C_k, \quad (2.5)$$

где C_i — совокупность элементов i -го класса, а h_{ijk} — целые числа. Прежде всего докажем, что если элемент $g_p \in C_i C_j$, то и весь класс C_p , в который входит g_p , принадлежит совокупности $C_i C_j$. Действительно, пусть $g_p = g_i g_j$, $g_i \in C_i$, $g_j \in C_j$. Тогда при любом $g \in G$

$$g^{-1} g_p g = g^{-1} g_i g g^{-1} g_j g \in C_i C_j. \quad (2.6)$$

Для доказательства формулы (2.5) остается показать, что каждый элемент класса C_p входит в совокупность $C_i C_j$ одинаковое число раз. Пусть, например, элемент g_p входит два раза, т. е.

$$g_i g_j = g_p \quad \text{и} \quad g_{i'} g_{j'} = g_p, \quad (2.7)$$

причем

$$g_i \neq g_{i'}, \quad g_j \neq g_{j'}. \quad (2.8)$$

Тогда каждый элемент $g'^{-1} g_p g'$ ($g' \in G$) будет содержаться в совокупности $C_i C_j$ не меньше двух раз. Действительно,

$$\left. \begin{aligned} g'^{-1} g_p g' &= g'^{-1} g_i g_j g' = (g'^{-1} g_i g') (g'^{-1} g_j g'), \\ g'^{-1} g_p g' &= g'^{-1} g_{i'} g_{j'} g' = (g'^{-1} g_{i'} g') (g'^{-1} g_{j'} g'), \end{aligned} \right\} \quad (2.9)$$

причем из (2.8) следует, что

$$g'^{-1} g_i g' \neq g'^{-1} g_{i'} g' \quad \text{и} \quad g'^{-1} g_j g' \neq g'^{-1} g_{j'} g'. \quad (2.10)$$

Ясно, что элемент $g'^{-1} g_p g'$ не может содержаться больше чем два раза, так как в противном случае с помощью аналогичного рассуждения мы могли бы показать, что элемент g_p также встречается больше двух раз, что противоречит сделанному вначале предположению.

6. Инвариантная подгруппа (нормальный делитель)

Пусть H — подгруппа группы G и $g_i \in G$. Составим совокупность элементов $g_i H g_i^{-1}$ (элемент g_i фиксирован). Эта совокупность также является группой, так как для нее выполняются все групповые аксиомы. Такую подгруппу называют подобной подгруппе H . Если $g_i \in H$, то подобная подгруппа, очевидно, будет совпадать с H . Однако, если $g_i \notin H$, то в общем случае мы получим некоторую подгруппу группы G , отличную от H . В тех случаях, когда подгруппа H совпадает со всеми своими подобными подгруппами, она называется *инвариантной подгруппой* или *нормальным делителем*. Инвариантную подгруппу

мы будем обозначать буквой N : Из определения следует, что если инвариантная подгруппа содержит некоторый элемент g группы G , то вместе с ним она содержит и весь класс, к которому принадлежит g . Поэтому говорят, что инвариантная подгруппа состоит из целых классов группы.

Для инвариантной подгруппы N группы G сопряженные совокупности слева и справа совпадают. Действительно,

$$g_i N = g_i N g_i^{-1} g_i = N g_i, \quad (2.11)$$

так как

$$g_i N g_i^{-1} = N. \quad (2.12)$$

Всякая группа имеет две тривиальные инвариантные подгруппы: первая совпадает с самой группой, а вторая состоит из единичного элемента группы. Группы, не имеющие инвариантных подгрупп, отличных от тривиальных, называются *простыми*.

7. Фактор-группа

Пусть N — инвариантная подгруппа группы G . Разложим группу G на сопряженные совокупности по группе N :

$$N, g_1 N, g_2 N, \dots, g_{k-1} N.$$

Образуем теперь совокупность $g_1 N g_2 N$, которая состоит из различных элементов $g_1 n_\alpha g_2 n_\beta$, когда n_α и n_β независимо пробегает всю подгруппу N . Легко видеть, что

$$g_1 N g_2 N = g_1 g_2 g_2^{-1} N g_2 N = g_1 g_2 N N = g_1 g_2 N = g_3 N. \quad (2.13)$$

Если совокупность $g_1 N g_2 N$ называть произведением совокупностей $g_1 N$ и $g_2 N$, то можно сказать, что произведения двух сопряженных с N совокупностей дают опять некоторую сопряженную с N совокупность. Далее, умножение (в указанном смысле) сопряженной с N совокупности на N слева или справа не изменяет этой сопряженной совокупности:

$$N g_1 N = g_1 g_1^{-1} N g_1 N = g_1 N N = g_1 N. \quad (2.14)$$

Для каждой сопряженной совокупности $g_i N$ имеется такая сопряженная совокупность $g_i^{-1} N$, что их произведение равно N :

$$g_i^{-1} N g_i N = N N = N. \quad (2.15)$$

Из этих результатов следует, что сопряженные совокупности инвариантной подгруппы можно рассматривать как элементы некоторой новой группы, в которой N играет роль единичного элемента. Эту группу называют *фактор-группой* по инвариантной подгруппе. Ее порядок равен индексу инвариантной подгруппы.

8. Изоморфизм и гомоморфизм групп

Если между элементами двух групп существует взаимно однозначное соответствие, которое не нарушается при групповом умножении, то такие группы называются *изоморфными*. Пусть G и \tilde{G} — изоморфные группы. Тогда, если элементам g_i и g_k группы G соответствуют элементы \tilde{g}_i и \tilde{g}_k группы \tilde{G} :

$$g_i \leftrightarrow \tilde{g}_i, \quad g_k \leftrightarrow \tilde{g}_k,$$

то

$$g_i g_k = g_l \leftrightarrow \tilde{g}_l = \tilde{g}_i \tilde{g}_k.$$

Установление изоморфизма групп позволяет свести исследование рассматриваемой группы к изучению другой группы, изоморфной с ней.

Другим важным понятием в теории групп является понятие *гомоморфизма*. Если каждому элементу группы G соответствует только один определенный элемент группы \tilde{G} , а каждому элементу группы \tilde{G} соответствует несколько элементов группы G , причем это соответствие сохраняется при групповом умножении, то говорят, что группа \tilde{G} гомоморфна группе G . Гомоморфные группы обладают следующими свойствами.

а) Если группа \tilde{G} гомоморфна группе G , то единичному элементу группы G соответствует единичный элемент группы \tilde{G} . Действительно, пусть E — единичный элемент группы G , тогда для любого $g \in G$ $Eg = gE = g$; пусть \tilde{E} и \tilde{g} — элементы из группы \tilde{G} , соответствующие E и g , тогда, в силу гомоморфизма групп,

$$\tilde{E}\tilde{g} = \tilde{g}\tilde{E} = \tilde{g},$$

откуда следует, что \tilde{E} — единичный элемент группы \tilde{G} .

б) Если группа \tilde{G} гомоморфна группе G , то взаимно обратным элементам группы G соответствуют взаимно обратные элементы группы \tilde{G} . Действительно, пусть $g_i g_k = E$, тогда, в силу соответствия, $\tilde{g}_i \tilde{g}_k = \tilde{E}$.

в) Если группа \tilde{G} гомоморфна группе G , то все элементы группы G , которые соответствуют единичному элементу группы \tilde{G} , образуют инвариантную подгруппу N группы G . Действительно, пусть единичному элементу \tilde{E} группы \tilde{G} соответствуют элементы g'_1, g'_2, \dots, g'_s группы G . Тогда произведению $g'_i g'_k$ соответствует $\tilde{E}\tilde{E} = \tilde{E}$. Следовательно, $g'_i g'_k = g'_l$ и совокупность g'_1, g'_2, \dots, g'_s замкнута относительно группового умножения. Согласно свойству (а) в ней должен содержаться единичный элемент. Так как единичный элемент \tilde{E} является обратным к самому себе, то, в силу (б), для каждого элемента g'_i найдется обратный элемент g'_k . Далее, из равенства $\tilde{g}\tilde{E}\tilde{g}^{-1} = \tilde{E}$, где \tilde{g} — произвольный

элемент группы \bar{G} , следует $gg'_i g^{-1} = g'_i$ для произвольного элемента g группы G . Установленных здесь свойств совокупности g'_1, g'_2, \dots, g'_s достаточно, чтобы утверждать, что она образует инвариантную подгруппу группы G .

г) Если группа \bar{G} гомоморфна группе G , то элементы группы G , соответствующие элементу \bar{g}_i , образуют сопряженную совокупность Ng_i , где g_i — любой из элементов группы G , соответствующих элементу \bar{g}_i , а N — инвариантная подгруппа, соответствующая единичному элементу группы \bar{G} .

Для доказательства этого свойства разобьем группу G на сопряженные совокупности

$$N, g_1N, g_2N, \dots, g_{k-1}N.$$

Любому элементу совокупности g_iN соответствует элемент $\bar{g}_i \bar{E} = \bar{g}_i$, т. е. один и тот же элемент \bar{g}_i группы \bar{G} . Остается показать, что разным сопряженным совокупностям соответствуют разные элементы. Предположим обратное. Пусть совокупностям g_1N и g_2N соответствует один и тот же элемент \bar{g}_1 группы \bar{G} . Тогда элементу $g_1^{-1}g_2$ соответствует $\bar{g}_1^{-1}\bar{g}_1 = \bar{E}$, откуда следует, что $g_1^{-1}g_2$ принадлежит N . Но тогда $g_1^{-1}g_2 = g'_k$ и $g_2 = g_1g'_k$, что противоречит исходному предположению о том, что сопряженные совокупности g_1N и g_2N различны. Таким образом, между сопряженными совокупностями g_iN и элементами группы \bar{G} имеется однозначное соответствие. Следовательно, группа \bar{G} изоморфна фактор-группе по инвариантной подгруппе N .

На этом мы закончим рассмотрение общих свойств конечных групп. Ряд более специальных теорем будет доказан позднее, непосредственно в приложениях методов теории групп к физическим задачам.

Упражнения

2.1. Элементы E, A, B, C, D, F образуют группу S_6 шестого порядка с таблицей умножения (первые множители стоят в строке, например, $AB = D$):

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

а) Найти порядки всех элементов.

б) Найти подгруппы.

в) Разбить группу на сопряженные совокупности; убедиться в единственности такого разбиения.

- г) Разбить группу на классы сопряженных элементов.
- д) Найти инвариантные подгруппы. Убедиться, что сопряженные совокупности справа и слева для инвариантной подгруппы совпадают.
- е) Написать таблицу умножения для соответствующей фактор-группы.
- ж) Показать, что абстрактная группа S_6 может иметь следующие реализации: группа перестановок трех элементов и группа матриц второго порядка, соответствующих вращениям и отражениям на плоскости, совмещающим вершины равностороннего треугольника.

2.2. Доказать, что порядок группы является целым кратным порядка любого ее элемента.

2.3. Используя понятие порядка элемента группы, построить таблицы умножения для возможных групп третьего порядка, четвертого порядка.

2.4. Доказать, что все элементы одного класса имеют один и тот же порядок.

2.5. Доказать, что любая подгруппа индекса 2 является инвариантной.

2.6. Доказать, что в совокупности gg, g^{-1} , где g пробегает всю группу, каждый элемент класса, которому принадлежит g , встречается одинаковое число раз.

Глава III

Представления конечных групп

В первой главе мы определили симметрию физической системы как инвариантность соответствующих уравнений движения относительно некоторой группы преобразований. Каждое преобразование группы симметрии этих уравнений вызывает определенное преобразование их решений. Если уравнение инвариантно относительно некоторого преобразования, то это еще не означает, что все его решения также инвариантны по отношению к этому преобразованию.

Каковы возможные преобразования решений уравнения при операциях из его группы симметрии? Оказывается, что ответить на этот вопрос можно, опираясь только на свойства самой группы. Говорят, что совокупность преобразований решений, вызываемых операциями из группы симметрии уравнения, образует представление данной группы. Далее мы дадим строгое определение линейного представления группы, а в качестве примера рассмотрим преобразования симметрии для решений уравнения Шрёдингера, принадлежащих одному и тому же собственному значению энергии. В целом данная глава посвящена изучению общих свойств представлений группы и ее содержание является важным для всего последующего изложения.

1. Определение представления группы

Рассмотрим некоторую конечную группу G с элементами g_1, g_2, \dots, g_m . Если группа T линейных операторов \hat{T}_g в некотором пространстве R гомоморфна группе G , то говорят, что группа T образует представление группы G . В силу гомоморфизма мы имеем

$$\hat{T}_g, \hat{T}_{g_k} = \hat{T}_{g, g_k}. \quad (3.1)$$

Если пространство R есть n -мерное векторное пространство R_n , то любой его элемент \mathbf{x} может быть разложен по n ортам \mathbf{e}_k , образующим базис этого пространства:

$$\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + \dots + x_n \mathbf{e}_n.$$

Оператор \hat{T}_g будет определен, если мы зададим его действие на каждый из ортов \mathbf{e}_k . Пусть

$$\hat{T}_g \mathbf{e}_k = \sum_{r=1}^n D_{rk}(g) \mathbf{e}_r. \quad (3.2)$$

Мы видим, что каждому элементу g_i нашей группы сопоставляется матрица $\|D_{rk}(g_i)\|$. Ясно, что единичному элементу группы должна быть сопоставлена единичная матрица, а обратным элементам — обратные матрицы. Покажем, что для матриц D выполняется равенство

$$D(g_i)D(g_j) = D(g_i g_j). \quad (3.3)$$

Действительно, применив к орту e_k последовательно операторы \widehat{T}_{g_j} и \widehat{T}_{g_i} , мы получим

$$\begin{aligned} \widehat{T}_{g_i} \widehat{T}_{g_j} e_k &= \widehat{T}_{g_i} \sum_r D_{rk}(g_j) e_r = \\ &= \sum_{f,r} D_{rk}(g_j) D_{fr}(g_i) e_f = \sum_f \left(\sum_r D_{fr}(g_i) D_{rk}(g_j) \right) e_f. \end{aligned} \quad (3.4)$$

Но, с другой стороны,

$$\widehat{T}_{g_i} \widehat{T}_{g_j} e_k = \widehat{T}_{g_i g_j} e_k = \sum_f D_{fk}(g_i g_j) e_f. \quad (3.5)$$

Сравнивая окончательные результаты в (3.4) и (3.5), мы видим, что равенство (3.3) действительно выполняется. Мы будем говорить, что матрицы $D(g_i)$ образуют представление порядка n группы G . Пространство R_n называют *пространством представления*, а базис в этом пространстве — *базисом представления*. При действии оператора \widehat{T}_{g_i} на произвольный вектор x пространства R_n мы получаем

$$\widehat{T}_{g_i} x = \sum_k x_k \widehat{T}_{g_i} e_k = \sum_{k,r} x_k D_{rk}(g_i) e_r = \sum_r x'_r e_r, \quad (3.6)$$

где $x'_r = \sum_k D_{rk}(g_i) x_k$. Рассмотрим, как изменяется матрица представления, если в пространстве R_n выбрать новый базис e'_i , связанный с базисом e_k линейным преобразованием:

$$e'_i = \sum_k V_{ki} e_k, \quad e_i = \sum_k \{V^{-1}\}_{ki} e'_k. \quad (3.7)$$

Для этого подействуем на орт e'_j оператором \widehat{T}_{g_i} . Используя (3.7), мы получим

$$\begin{aligned} \widehat{T}_{g_i} e'_j &= \sum_k V_{kj} \widehat{T}_{g_i} e_k = \sum_{k,s} V_{kj} D_{sk}(g_i) e_s = \\ &= \sum_{k,s,r} V_{kj} D_{sk} \{V^{-1}\}_{rs} e'_r = \sum_r \{V^{-1} D V\}_{rj} e'_r. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Таким образом, при переходе к новому базису матрицы представления испытывают преобразование подобия. Представление матрицами $V^{-1}DV$ называется *эквивалентным* по отношению к представлению матрицами D .

Если матрицы представления все унитарные, то представление называют *унитарными*.

Если группа матриц $D(g_i)$ изоморфна группе G , то говорят, что матрицы дают *точное* представление группы G .

2. Примеры представлений

Среди представлений группы всегда имеется тривиальное *тождественное* представление, в котором каждому элементу группы сопоставляется единица. Если элементами группы являются линейные преобразования, то матрицы этих преобразований сами дают представление, изоморфное группе. Эти два представления соответствуют двум тривиальным инвариантным подгруппам, которые упоминались в предыдущей главе.

Для иллюстрации других представлений группы рассмотрим получение одного из представлений группы матриц C собственных линейных преобразований n переменных x_1, x_2, \dots, x_n :

$$x'_i = \sum_k C_{ik} x_k. \quad (3.9)$$

Рассмотрим квадратичную форму

$$\sum_{i,k} a_{ik} x_i x_k, \quad a_{ik} = a_{ki}. \quad (3.10)$$

Преобразование переменных x_1, x_2, \dots, x_n индуцирует преобразование коэффициентов этой формы. Действительно, если мы произведем подстановку

$$x_j = \sum_i \{C^{-1}\}_{ij} x'_i, \quad (3.11)$$

то получим выражение квадратичной формы (3.10) в новых (штрихованных) переменных:

$$\sum_{i,k,j,l} a_{ik} \{C^{-1}\}_{ij} x'_j \{C^{-1}\}_{kl} x'_l = \sum_{j,l} a'_{jl} x'_j x'_l, \quad (3.12)$$

где

$$a'_{jl} = \sum_{i,k} \{C^{-1}\}_{ij} a_{ik} \{C^{-1}\}_{kl}. \quad (3.13)$$

Вводя обозначение $\|a_{ik}\| = A$, мы можем записать преобразование коэффициентов a_{ik} в матричной форме:

$$A' = C^{-1*} A C^{-1}, \quad (3.14)$$

где C^{-1*} — матрица, транспонированная относительно C^{-1} . Применим теперь к переменным x_1, x_2, \dots, x_n последовательно преобразования C_1 и C_2 . Тогда мы получим матрицу

$$A'' = C_2^{-1*} A' C_2^{-1} = C_2^{-1*} C_1^{-1*} A C_1^{-1} C_2^{-1},$$

или

$$A'' = (C_2 C_1)^{-1*} A (C_2 C_1)^{-1}. \quad (3.15)$$

Мы видим, что последовательное применение сначала преобразования C_1 и затем преобразования C_2 эквивалентно применению преобразования $C_2 C_1$. Поэтому можно утверждать, что преобразования (3.13) коэффициентов квадратичной формы образуют представление группы C .

3. Представление группы симметрии уравнения Шрёдингера, реализующееся на его собственных функциях

Так как нашей основной целью является рассмотрение приложений методов теории групп к физическим задачам, то уместно сразу показать, насколько важным для этих приложений окажется изучение представлений группы. В качестве примера рассмотрим квантовомеханическую систему, которая описывается уравнением Шрёдингера:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}). \quad (3.16)$$

Предположим, что группа симметрии этой системы состоит из ортогональных преобразований u_s :

$$\mathbf{r}' = u_s \mathbf{r}. \quad (3.17)$$

Как мы знаем из главы I, подстановка

$$\mathbf{r} = u_s^{-1} \mathbf{r}' \quad (3.18)$$

должна сохранять вид уравнения (3.16). Так как оператор Лапласа инвариантен относительно любых ортогональных преобразований координат, то в результате этой подстановки мы получим

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}'} + V(u_s^{-1} \mathbf{r}') \right] \psi(u_s^{-1} \mathbf{r}') = E\psi(u_s^{-1} \mathbf{r}'). \quad (3.19)$$

В силу инвариантности уравнения Шрёдингера относительно преобразований u_s , должно выполняться равенство

$$V(u_s^{-1} \mathbf{r}) = V(\mathbf{r}). \quad (3.20)$$

Поэтому преобразованная волновая функция

$$\psi'(\mathbf{r}') = \widehat{T}_{u_s} \psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(u_s^{-1} \mathbf{r}) \quad (3.21)$$

также является собственной функцией уравнения Шрёдингера (3.9) с тем же собственным значением E . Пусть $\psi_1(\mathbf{r}), \dots, \psi_k(\mathbf{r})$ — полный набор ортонормированных собственных функций этого уравнения, соответствующих собственному значению E . Докажем, что эти функции образуют базис представления группы. Действительно, каждую из преобразованных функций $\widehat{T}_{u_s} \psi_i(\mathbf{r})$ можно представить в виде

$$\widehat{T}_{u_s} \psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(u_s^{-1} \mathbf{r}) = \sum_{j=1}^k D_{ji}(u_s) \psi_j(\mathbf{r}). \quad (3.22)$$

Функции $\widehat{T}_{u_s} \psi_i(\mathbf{r})$ ($i = 1, 2, \dots, k$) также должны быть ортонормированы, поскольку замена переменной с помощью ортогонального преобразования (3.18) сохраняет условие ортонормированности:

$$\int \bar{\psi}_i(u_s^{-1} \mathbf{r}) \psi_j(u_s^{-1} \mathbf{r}) d\tau = \int \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \psi_j(\mathbf{r}) d\tau = \delta_{ij}. \quad (3.23)$$

Отсюда следует, что матрицы $\|D_{ij}(u_s)\|$ должны быть унитарными. Таким образом, каждому преобразованию u_s из группы симметрии уравнения Шрёдингера сопоставляется унитарная матрица k -го порядка. Покажем, что эти матрицы образуют представление группы. Пусть u_s и u_t — два преобразования из группы. Тогда при последовательном применении их получим

$$\begin{aligned} \widehat{T}_{u_s} \widehat{T}_{u_t} \psi_i(\mathbf{r}) &= \widehat{T}_{u_s} \psi_i(u_t^{-1} \mathbf{r}) = \psi_i(u_t^{-1} u_s^{-1} \mathbf{r}) = \\ &= \psi_i((u_s u_t)^{-1} \mathbf{r}) = \sum_{l=1}^k D_{li}(u_s u_t) \psi_l(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.24)$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} \widehat{T}_{u_s} \widehat{T}_{u_t} \psi_i(\mathbf{r}) &= \widehat{T}_{u_s} \sum_{j=1}^k D_{ji}(u_t) \psi_j(\mathbf{r}) = \\ &= \sum_{j=1}^k D_{ji}(u_t) \sum_{l=1}^k D_{lj}(u_s) \psi_l(\mathbf{r}) = \sum_{l=1}^k \{D(u_s) D(u_t)\}_{li} \psi_l(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.25)$$

Сравнивая окончательные результаты в (3.24) и (3.25), мы получаем

$$D(u, u_t) = D(u,)D(u_t), \quad (3.26)$$

что и требовалось доказать.

Важность изучения представлений групп для данной задачи заключается в том, что каждому собственному значению энергии мы можем сопоставить некоторое представление группы и установить возможные типы симметрии волновых функций системы, не решая уравнения Шрёдингера.

Перейдем теперь к изучению свойств представлений конечных групп.

4. Существование эквивалентного унитарного представления

Докажем, что всякое представление конечной группы эквивалентно унитарному.

Пусть задано некоторое представление D группы G , состоящей из m элементов g_1, g_2, \dots, g_m . Будем рассматривать матрицы представления $D(g_i)$ как матрицы преобразования в векторном n -мерном пространстве R_n . Пусть $\mathbf{x}(x_1, x_2, \dots, x_n)$ и $\mathbf{y}(y_1, y_2, \dots, y_n)$ — векторы в этом пространстве. Скалярное произведение векторов определим, как обычно:

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = x_1 \bar{y}_1 + x_2 \bar{y}_2 + \dots + x_n \bar{y}_n. \quad (3.27)$$

Преобразование $D(g_i)$ переводит вектор \mathbf{x} в вектор $\mathbf{x}^{(i)}$:

$$\mathbf{x}^{(i)} = D(g_i)\mathbf{x}, \quad x_\alpha^{(i)} = \sum_{\beta=1}^n D_{\alpha\beta}(g_i)x_\beta, \quad (3.28)$$

вектор \mathbf{y} — в вектор $\mathbf{y}^{(i)}$:

$$\mathbf{y}^{(i)} = D(g_i)\mathbf{y}. \quad (3.29)$$

Допустим, что преобразование $D(g_i)$ неунитарное и, следовательно, не сохраняет скалярное произведение (\mathbf{x}, \mathbf{y}) . Покажем, что в пространстве R_n можно так выбрать новый базис, что матрицы преобразования составляющих векторов этого пространства будут унитарными. Для доказательства усредним скалярное произведение (3.27) по группе, т. е. составим выражение

$$\sum_{i=1}^m (D(g_i)\mathbf{x}, D(g_i)\mathbf{y}) = \sum_{i=1}^m (\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}). \quad (3.30)$$

Покажем, что (3.30) можно представить в виде

$$\sum_{i=1}^m (\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}) = (L\mathbf{x}, L\mathbf{y}), \quad (3.31)$$

где L — некоторое линейное преобразование. Для этого запишем (3.30) следующим образом:

$$\sum_{i=1}^m (D(g_i)\mathbf{x}, D(g_i)\mathbf{y}) = \left(\sum_{i=1}^m D^+(g_i)D(g_i)\mathbf{x}, \mathbf{y} \right). \quad (3.32)$$

Матрица $\sum_{i=1}^m D^+(g_i)D(g_i)$ эрмитова и поэтому может быть приведена к диагональному виду с помощью некоторого унитарного преобразования V . Мы получим

$$\mathbf{d} = V^{-1} \sum_{i=1}^m D^+(g_i)D(g_i)V, \quad (3.33)$$

откуда

$$\sum_{i=1}^m D^+(g_i)D(g_i) = V\mathbf{d}V^{-1}, \quad (3.34)$$

где \mathbf{d} — диагональная матрица.

Если ввести обозначения $\tilde{D}(g_i) = V^{-1}D(g_i)V$, то мы можем написать

$$\mathbf{d} = \sum_{i=1}^m V^{-1}D^+(g_i)V V^{-1}D(g_i)V = \sum_{i=1}^m \tilde{D}^+(g_i)\tilde{D}(g_i). \quad (3.35)$$

Отсюда диагональные элементы матрицы \mathbf{d} равны

$$d_{\alpha\alpha} = \sum_{i=1}^m \sum_{\beta=1}^n \tilde{D}_{\alpha\beta}^+(g_i)\tilde{D}_{\beta\alpha}(g_i) = \sum_{i=1}^m \sum_{\beta=1}^n |\tilde{D}_{\beta\alpha}(g_i)|^2 > 0. \quad (3.36)$$

Определим диагональную матрицу $d^{1/2}$ с элементами $\{d^{1/2}\}_{\alpha\alpha} = \sqrt{d_{\alpha\alpha}}$. Очевидно, что $d^{1/2}d^{1/2} = \mathbf{d}$. Используя самосопряженность матрицы $d^{1/2}$, мы получим

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^m (\mathbf{x}^{(i)}, \mathbf{y}^{(i)}) &= (V\mathbf{d}V^{-1}\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \\ &= (d^{1/2}d^{1/2}V^{-1}\mathbf{x}, V^{-1}\mathbf{y}) = (d^{1/2}V^{-1}\mathbf{x}, d^{1/2}V^{-1}\mathbf{y}). \end{aligned} \quad (3.37)$$

Таким образом, мы действительно имеем равенство (3.31), причем искомое преобразование L имеет вид

$$L = d^{1/2} V^{-1}. \quad (3.38)$$

Теперь мы можем показать, что представление группы G , даваемое матрицами LDL^{-1} , является унитарным. Сначала покажем, что для произвольного элемента g_k группы G

$$(LD(g_k)x, LD(g_k)y) = (Lx, Ly). \quad (3.39)$$

Действительно, согласно (3.30), (3.31)

$$\begin{aligned} (LD(g_k)x, LD(g_k)y) &= \\ &= \sum_{i=1}^m (D(g_i)D(g_k)x, D(g_i)D(g_k)y) = \\ &= \sum_{i=1}^m (D(g_i g_k)x, D(g_i g_k)y). \end{aligned} \quad (3.40)$$

Но мы знаем, что, когда элемент g_i пробегает всю группу, элемент $g_i g_k$ также пробегает всю группу. Поэтому мы можем окончательно написать

$$(LD(g_k)x, LD(g_k)y) = \sum_{i=1}^m (D(g_i)x, D(g_i)y) = (Lx, Ly). \quad (3.41)$$

Если теперь ввести векторы $x' = Lx$ и $y' = Ly$, то равенство (3.39) можно представить в виде

$$(LD(g_k)L^{-1}x', LD(g_k)L^{-1}y') = (x', y'). \quad (3.42)$$

Отсюда следует, что матрицы $LD(g_k)L^{-1}$ ($g_k \in G$) действительно унитарные.

5. Приводимые и неприводимые представления группы

Пусть в пространстве R_n задано представление D группы G . Если в пространстве R_n существует подпространство R_k ($k < n$), инвариантное относительно всех преобразований D , т. е. если для $x \in R_k$ имеем $Dx \in R_k$, то представление называется *приводимым*. Выберем в качестве первых k ортов в пространстве R_n орты подпространства R_k . Тогда

матрица представления должна иметь следующий вид:

$$\left. \begin{array}{cccc|ccc} D_{11} & D_{12} & \dots & D_{1k} & D_{1k+1} & \dots & D_{1n} \\ D_{21} & D_{22} & \dots & D_{2k} & D_{2k+1} & \dots & D_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ D_{k1} & D_{k2} & \dots & D_{kk} & D_{kk+1} & \dots & D_{kn} \\ \hline 0 & 0 & \dots & 0 & D_{k+1k+1} & \dots & D_{k+1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & D_{nk+1} & \dots & D_{nn} \end{array} \right\}.$$

Если же в пространстве R_n нельзя выделить инвариантное подпространство, то представление называется *неприводимым*.

Покажем, что если приводимое представление D унитарно, то ортогональное дополнение подпространства R_k , которое мы обозначим через R_{n-k} , также инвариантно относительно преобразований D . Действительно, пусть $x \in R_k$, $y \in R_{n-k}$. Тогда $(x, y) = 0$. В силу инвариантности подпространства R_k имеем

$$(D(g)x, y) = 0, \quad (3.43)$$

но

$$(D(g)x, y) = (x, D^+(g)y) = (x, D^{-1}(g)y) = (x, D(g^{-1})y) = 0, \quad (3.44)$$

откуда

$$D(g^{-1})y \in R_{n-k}. \quad (3.45)$$

Когда g пробегает всю группу, обратный элемент g^{-1} также пробегает всю группу. Поэтому (3.45) выполняется для всех матриц рассматриваемого представления, и инвариантность R_{n-k} доказана. Если теперь в качестве k первых ортов выбрать орты подпространства R_k , а в качестве последних $n-k$ ортов — орты подпространства R_{n-k} , то матрицы представления будут иметь следующий квазидиагональный вид:

$$\left. \begin{array}{cccc|ccc} D_{11} & D_{12} & \dots & D_{1k} & 0 & \dots & 0 \\ D_{21} & D_{22} & \dots & D_{2k} & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ D_{k1} & D_{k2} & \dots & D_{kk} & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & 0 & \dots & 0 & D_{k+1k+1} & \dots & D_{k+1n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 0 & D_{nk+1} & \dots & D_{nn} \end{array} \right\}.$$

Если пространство R может быть разложено на инвариантные подпространства, в каждом из которых реализуется неприводимое представление, то представление D называют *вполне приводимым*. Матрицы

этого представления при соответствующем выборе ортов имеют квази-диагональный вид:

$$\begin{array}{c} \left| \begin{array}{cccc} 0 & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & \dots & 0 & \\ \dots & & & \\ 0 & & & 0 \\ & & & \dots \\ & & & 0 \end{array} \right| \end{array}.$$

Из проведенного рассмотрения следует, что

1) унитарное представление группы всегда либо неприводимо, либо вполне приводимо;

2) представление конечной группы или неприводимо, или вполне приводимо (так как оно эквивалентно унитарному).

Если представление D приводимо, то приведение его матриц к диагональному виду осуществляется, как мы видели, с помощью перехода к новой системе ортов. Мы знаем, что в этом случае матрицы представления испытывают преобразование подобия:

$$D \rightarrow V^{-1}DV,$$

где V — матрица, связывающая орты старого и нового базисов (см. (3.7)). Поэтому условие приводимости представления можно сформулировать следующим образом. Представление D является приводимым, если существует такая неособенная матрица V , что матрицы $V^{-1}DV$ являются квазидиагональными.

6. Первая лемма Шура

Сейчас мы докажем важную для приложений теорему (первую лемму Шура):

Матрица, коммутирующая со всеми матрицами неприводимого представления, кратна единичной.

Пусть $D(g)$ — матрицы неприводимого представления порядка n группы G , $g \in G$. Предположим, что матрица M коммутирует со всеми матрицами $D(g)$:

$$MD(g) = D(g)M. \quad (3.46)$$

Обозначим через R_n пространство, в котором реализуется представление $D(g)$. В пространстве R_n должен существовать по крайней мере один собственный вектор матрицы M . Обозначим его через x . Мы имеем

$$Mx = \lambda x. \quad (3.47)$$

Применим к вектору \mathbf{x} преобразование с матрицей представления $D(g)$:

$$D(g)\mathbf{x} = \mathbf{x}_g. \quad (3.48)$$

Получившийся при этом вектор \mathbf{x}_g также является собственным вектором матрицы M с тем же самым собственным значением λ . Действительно, в силу (3.46) мы имеем

$$M\mathbf{x}_g = MD(g)\mathbf{x} = D(g)M\mathbf{x} = \lambda D(g)\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x}_g. \quad (3.49)$$

Отсюда следует, что подпространство собственных векторов матрицы M , соответствующих одному и тому же собственному значению, инвариантно относительно преобразований $D(g)$. Но так как по предположению представление $D(g)$ неприводимо, то это подпространство должно совпадать со всем пространством R_n , а матрица M , умножающая любой вектор пространства R_n на число λ , должна иметь вид

$$M = \begin{pmatrix} \lambda & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \lambda \end{pmatrix}.$$

Таким образом, теорема доказана.

Если представление вполне приводимо, т. е. его матрицы имеют квазидиагональный вид, то всегда существует матрица, отличная от кратной единичной, которая коммутирует со всеми матрицами этого представления. Легко проверить, что в качестве такой матрицы можно взять диагональную матрицу, у которой диагональные элементы, соответствующие различным блокам матрицы представления, не равны друг другу.

Отсюда можно сделать заключение, что если *единственной матрицей, коммутирующей со всеми матрицами некоторого представления группы, является матрица, кратная единичной, то такое представление неприводимо.*

7. Вторая лемма Шура

Пусть $D^{(1)}(g)$ и $D^{(2)}(g)$ — матрицы двух неприводимых неэквивалентных представлений группы G порядка n_1 и n_2 соответственно. Тогда всякая прямоугольная матрица M с n_1 столбцами и n_2 строками, удовлетворяющая соотношению

$$MD^{(1)}(g) = D^{(2)}(g)M \quad (3.50)$$

для всех $g \in G$, должна быть нулевой матрицей.

Доказательство. Возьмем эрмитово сопряжение от обеих частей равенства (3.50). Мы получим

$$D^{(1)+}(g)M^+ = M^+D^{(2)+}(g). \quad (3.51)$$

Если представления $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ унитарные, то мы можем написать

$$D^{(1)-1}(g)M^+ = M^+D^{(2)-1}(g) \quad (3.52)$$

или

$$D^{(1)}(g^{-1})M^+ = M^+D^{(2)}(g^{-1}). \quad (3.53)$$

Если элемент g пробегает всю группу, то элемент g^{-1} тоже пробегает всю группу. Поэтому последнее равенство можно записать также в виде

$$D^{(1)}(g)M^+ = M^+D^{(2)}(g). \quad (3.54)$$

Умножим обе части этого равенства слева на матрицу M :

$$MD^{(1)}(g)M^+ = MM^+D^{(2)}(g).$$

Используя условия (3.50), найдем

$$D^{(2)}(g)MM^+ = MM^+D^{(2)}(g). \quad (3.55)$$

Отсюда согласно первой лемме Шура заключаем, что матрица MM^+ должна быть кратна единичной:

$$MM^+ = \lambda E_{n_2}. \quad (3.56)$$

Здесь E_{n_2} — единичная матрица порядка n_2 .

Рассмотрим теперь три возможных случая: 1) $n_1 = n_2$, 2) $n_2 > n_1$ и 3) $n_1 > n_2$.

1) $n_1 = n_2$. В этом случае матрица M обязательно должна быть особой, т. е. $\det M = 0$. Действительно, в противном случае из равенства (3.50) мы получили бы условие эквивалентности представлений:

$$D^{(1)}(g) = M^{-1}D^{(2)}(g)M. \quad (3.57)$$

Вычисляя теперь определители обеих частей равенства (3.56), мы получим

$$\det M \det M^+ = \lambda^{n_2} = 0, \quad (3.58)$$

откуда $\lambda = 0$. С другой стороны, из (3.56) находим

$$\lambda = \sum_j M_{ij} \bar{M}_{ij} = \sum_j |M_{ij}|^2. \quad (3.59)$$

и, следовательно, λ может равняться нулю только в том случае, если все матричные элементы M_{ij} равны нулю.

2) $n_2 > n_1$. Дополним матрицу M до квадратной $n_2 - n_1$ нулевыми столбцами и соответственно матрицу M^+ таким же количеством нулевых строк. Новые матрицы обозначим соответственно через \tilde{M} и \tilde{M}^+ . Ясно, что для этих матриц также выполняется равенство (3.56):

$$\tilde{M}\tilde{M}^+ = \lambda E_{n_2}. \quad (3.60)$$

Согласно построению матриц \tilde{M} и \tilde{M}^+

$$\det \tilde{M} = \det \tilde{M}^+ = 0.$$

Поэтому, повторяя рассуждение, относящееся к первому случаю, мы опять получим

$$M_{ik} = 0. \quad (3.61)$$

3) $n_2 < n_1$. Этот случай сводится к предыдущему, и рассмотрение его мы предоставляем читателю.

При доказательстве леммы Шура мы использовали унитарность представлений $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$. Покажем сейчас, что это ограничение является несущественным. Мы знаем, что всякое представление конечной группы эквивалентно унитарному. Пусть, например, $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ — неунитарные представления. Всегда можно найти такие неособые матрицы V и W , что представления

$$\tilde{D}^{(1)} = V^{-1}D^{(1)}V, \quad \tilde{D}^{(2)} = W^{-1}D^{(2)}W \quad (3.62)$$

будут уже унитарными. Тогда условие (3.50) может быть представлено в виде

$$MV\tilde{D}^{(1)}V^{-1} = W\tilde{D}^{(2)}W^{-1}M. \quad (3.63)$$

Отсюда мы получаем

$$(W^{-1}MV)\tilde{D}^{(1)} = \tilde{D}^{(2)}(W^{-1}MV) \quad (3.64)$$

или, вводя обозначение $N = W^{-1}MV$,

$$N\tilde{D}^{(1)} = \tilde{D}^{(2)}N, \quad (3.65)$$

и задача, таким образом, сводится к рассмотренной выше. Матрица N может быть только нулевой. Но если матрица N нулевая, то, конечно, и матрица $M = WNV^{-1}$ также будет нулевой.

8. Соотношение ортогональности для матричных элементов неприводимых представлений

С помощью первой и второй лемм Шура можно получить некоторые соотношения между матричными элементами неприводимых представлений группы.

Пусть $D^{(i)}(g)$ и $D^{(j)}(g)$ — матрицы двух неприводимых неэквивалентных унитарных представлений группы G , состоящей из m элементов. Обозначим через n_i и n_j порядки этих представлений. Докажем, что между элементами матриц $D^{(i)}$ и $D^{(j)}$ существуют следующие

соотношения:

$$\sum_{g \in G} D_{\mu\nu}^{(i)}(g) \bar{D}_{\alpha\beta}^{(j)}(g) = 0, \quad (3.66)$$

$$\sum_{g \in G} D_{\mu\nu}^{(i)}(g) \bar{D}_{\alpha\beta}^{(i)}(g) = \frac{n}{n_i} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta}. \quad (3.67)$$

Доказательство. Составим матрицу

$$M = \sum_{g \in G} D^{(i)}(g) X D^{(j)}(g^{-1}),$$

где X — произвольная матрица с n_i строками и n_j столбцами. Докажем, что матрица M удовлетворяет соотношению

$$D^{(i)} M = M D^{(j)}. \quad (3.68)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} D^{(i)}(g') M &= D^{(i)}(g') \sum_{g \in G} D^{(i)}(g) X D^{(j)}(g^{-1}) = \\ &= \sum_{g \in G} D^{(i)}(g') D^{(i)}(g) X D^{(j)}(g^{-1}) D^{(j)}(g'^{-1}) D^{(j)}(g') = \\ &= \sum_{g \in G} D^{(i)}(g'g) X D^{(j)}((g'g)^{-1}) D^{(j)}(g') = \\ &= \sum_{g'' \in G} D^{(i)}(g'') X D^{(j)}(g''^{-1}) D^{(j)}(g') = M D^{(j)}(g'). \end{aligned}$$

Отсюда согласно второй лемме Шура следует, что M — нулевая матрица, т. е.

$$M_{\mu\alpha} = \sum_{g \in G} \sum_{s,k} D_{\mu s}^{(i)}(g) X_{sk} D_{k\alpha}^{(j)}(g^{-1}) = 0. \quad (3.69)$$

Так как матрица X произвольна, то мы можем положить $X_{sk} = 1$, если $s = \nu$ и $k = \beta$, и $X_{sk} = 0$ для других значений индексов s и k . Тогда мы получим

$$\sum_{g \in G} D_{\mu\nu}^{(i)}(g) D_{\beta\alpha}^{(j)}(g^{-1}) = 0. \quad (3.70)$$

Заметим, что до сих пор мы не предполагали унитарности представлений. Поэтому равенство (3.70) справедливо также для неунитарных представлений. Если же представления $D^{(i)}$ и $D^{(j)}$ унитарные, то из (3.70) мы получаем соотношение (3.66).

Перейдем теперь к доказательству второго соотношения ортогональности.

Составим матрицу

$$N = \sum_{g \in G} D^{(i)}(g) X D^{(i)}(g^{-1}). \quad (3.71)$$

Здесь X — произвольная квадратная матрица порядка n_i . Аналогично можно показать, что она коммутирует со всеми матрицами неприводимого представления $D^{(i)}$. Следовательно, по первой лемме Шура матрица N кратна единичной, т. е.

$$N_{\mu\alpha} = \sum_{g \in G} \sum_{s,k} D_{\mu s}^{(i)}(g) X_{sk} D_{k\alpha}^{(i)}(g^{-1}) = \lambda \delta_{\mu\alpha}. \quad (3.72)$$

Выберем теперь такую матрицу X , у которой единственный отличный от нуля элемент $X_{\nu\beta}$ равен 1. Соответствующую константу λ обозначим через $\lambda_{\nu\beta}$. Тогда получим

$$\sum_{g \in G} D_{\mu\nu}^{(i)}(g) D_{\beta\alpha}^{(i)}(g^{-1}) = \lambda_{\nu\beta} \delta_{\mu\alpha}. \quad (3.73)$$

Для определения $\lambda_{\nu\beta}$ положим в этом равенстве $\mu = \alpha$ и просуммируем обе его части по μ от 1 до n_i . Мы получим

$$\sum_{g \in G} \sum_{\mu} D_{\mu\nu}^{(i)}(g) D_{\beta\mu}^{(i)}(g^{-1}) = \lambda_{\nu\beta} n_i \quad (3.74)$$

или

$$\sum_{g \in G} D_{\beta\nu}^{(i)}(E) = \delta_{\nu\beta} m = \lambda_{\nu\beta} n_i. \quad (3.75)$$

Отсюда находим, что

$$\lambda_{\nu\beta} = \delta_{\nu\beta} \frac{m}{n_i}. \quad (3.76)$$

Таким образом, мы имеем

$$\sum_{g \in G} D_{\mu\nu}^{(i)}(g) D_{\beta\alpha}^{(i)}(g^{-1}) = \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta} \frac{m}{n_i}. \quad (3.77)$$

Если представление $D^{(i)}(g)$ унитарно, то из (3.77) мы получаем (3.67).

Доказанные нами соотношения ортогональности (3.66) и (3.67) могут быть объединены в одной формуле:

$$\sum_{g \in G} D_{\mu\nu}^{(i)}(g) \bar{D}_{\alpha\beta}^{(j)}(g) = \frac{m}{n_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha} \delta_{\nu\beta}. \quad (3.78)$$

Соотношение (3.78) можно интерпретировать как условия ортогональности и нормировки системы векторов в m -мерном пространстве. Каждый из этих векторов характеризуется тремя индексами: i, μ, ν , а его составляющие равны элементам матриц неэквивалентных неприводимых представлений. Вектор $D_{\mu\nu}^{(i)}$, например, имеет составляющие $D_{\mu\nu}^{(i)}(g_1), D_{\mu\nu}^{(i)}(g_2), \dots, D_{\mu\nu}^{(i)}(g_m)$. Число таких векторов, соответствующих одному неприводимому представлению, скажем $D^{(i)}$, равно n_i^2 . Поэтому общее число ортонормированных векторов в этой системе равняется

$$\sum_i n_i^2, \quad (3.79)$$

где суммирование проводится только по неэквивалентным неприводимым представлениям. В силу ортогональности все эти векторы должны быть линейно независимыми. Так как число линейно независимых векторов не может превышать размерности векторного пространства, то

$$\sum_i n_i^2 \leq m. \quad (3.80)$$

Отсюда, в частности, мы получаем важное утверждение о том, что число различных неприводимых представлений конечной группы конечно. В п. 10 этой главы мы покажем, что в действительности всегда имеет место равенство

$$\sum_i n_i^2 = m. \quad (3.81)$$

9. Характеры представлений

Введем понятие *характера* представления. Характером представления $D(g)$ называют функцию элементов группы, определенную формулой

$$\chi(g) = \sum_i D_{ii}(g) = \text{Sp } D(g). \quad (3.82)$$

Выясним некоторые свойства характеров представлений.

а) Эквивалентные представления имеют одинаковые характеры, так как след матрицы инвариантен относительно преобразования подобия и, следовательно, $\text{Sp } V^{-1}D(g)V = \text{Sp } D(g)$.

б) Характеры матриц представления, соответствующие элементам одного класса, совпадают.

в) Характеры неприводимых представлений обладают свойством ортогональности:

$$\sum_{g \in G} \chi^{(i)}(g) \bar{\chi}^{(j)}(g) = m \delta_{ij}, \quad (3.83)$$

где $\chi^{(i)}(g)$ и $\chi^{(j)}(g)$ — характеры неприводимых представлений $D^{(i)}$ и $D^{(j)}$ соответственно. Учитывая свойство а), достаточно провести доказательство (3.83) для унитарных представлений. Из (3.78) мы имеем

$$\sum_{g \in G} D_{\mu\mu}^{(i)}(g) \bar{D}_{\alpha\alpha}^{(j)}(g) = \frac{m}{n_i} \delta_{ij} \delta_{\mu\alpha}. \quad (3.84)$$

Просуммируем обе части этого равенства по μ и по α . Тогда получим

$$\sum_{g \in G} \chi^{(i)}(g) \bar{\chi}^{(j)}(g) = \frac{m}{n_i} n_i \delta_{ij} = m \delta_{ij}, \quad (3.85)$$

что и требовалось доказать. Для элементов одного и того же класса $\chi(g)$ имеет одно и то же значение. Поэтому полученное соотношение можно также записать в виде

$$\sum_s k_s \chi_s^{(i)} \bar{\chi}_s^{(j)} = m \delta_{ij}, \quad (3.86)$$

где k_s — число элементов в классе C_s , а $\chi_s^{(i)}$ — значение характера представления, соответствующее элементам этого класса.

г) Характер приводимого представления D равен сумме характеров неприводимых представлений, на которые оно может быть разложено. Для того чтобы это стало очевидным, достаточно вспомнить квазидиагональный вид приведенного представления, а также учесть свойство а). Если обозначить через $\chi(g)$ характер приводимого представления, то

$$\chi(g) = \sum_j r_j \chi^{(j)}(g), \quad (3.87)$$

где число r_j показывает, сколько раз неприводимое представление $D^{(j)}$ входит в разложение приводимого представления D . Из условия ортогональности (3.83) характеров мы легко получаем очень важную для приложений формулу

$$r_j = \frac{1}{m} \sum_{g \in G} \bar{\chi}^{(j)}(g) \chi(g). \quad (3.88)$$

Отсюда, в частности, следует, что разложение приводимого представления на неприводимые части может быть выполнено единственным образом.

Разложение приводимого представления D на неприводимые мы будем символически записывать в виде суммы:

$$D = \sum_j^{\oplus} r_j D^{(j)}.$$

Значок \oplus над знаком суммы должен напомнить, что выражение, стоящее в правой части равенства, не является суммой матриц в обычном смысле.

10. Регулярное представление

Введем понятие *регулярного* представления. Пусть задана группа G . Возьмем произвольный ее элемент g_s и произведем операцию сдвига по группе, т. е. каждый из элементов группы умножим слева на g_s . Тогда, как мы знаем (см. п. 1 главы II), если $g_s \neq E$, то ни один из элементов группы «не останется на месте». Если же $g_s = E$, то никакого сдвига не произойдет.

Сдвиг, соответствующий любому элементу g_s , можно формально записать с помощью матрицы $\|R_{ij}(g_s)\|$ порядка m

$$g_s g_i = \sum_t R_{ti}(g_s) g_t. \quad (3.89)$$

Очевидно, что в каждом столбце матрицы R имеется только один элемент, отличный от нуля и равный единице. Если $g_s g_i = g_j$, то $R_{ji}(g_s) = 1$, а $R_{ti}(g_s) = 0$ при $t \neq j$. Матрицы $R(g_s)$, построенные таким образом, дают представление порядка m группы G , которое называется *регулярным*.

Из определения регулярного представления следует, что его характеры таковы:

$$\left. \begin{aligned} \chi^{(R)}(g_s) &= m, \text{ если } g_s = E, \\ \chi^{(R)}(g_s) &= 0, \text{ если } g_s \neq E. \end{aligned} \right\} \quad (3.90)$$

Разложим регулярное представление на неприводимые части, т. е. выясним, сколько раз в нем содержится каждое неприводимое представление $D^{(j)}$. Для этого воспользуемся формулой (3.88). Мы получим

$$\tau_j = \frac{1}{m} \sum_g \bar{\chi}^{(R)}(g) \chi^{(j)}(g) \quad (3.91)$$

или, согласно (3.90),

$$\tau_j = \frac{1}{m} m \chi^{(j)}(E) = \chi^{(j)}(E) = n_j. \quad (3.92)$$

Таким образом, мы видим, что каждое неприводимое представление содержится в регулярном представлении столько же раз, каков порядок этого неприводимого представления.

С помощью этой теоремы мы можем выразить порядок регулярного представления через порядки неприводимых представлений,

на которые оно распадается. Мы получим

$$\sum_j n_j^2 = m. \quad (3.93)$$

Вспомним теперь, что выражение, стоящее в левой части этого равенства, определяет число ортогональных векторов $D_{\alpha\beta}^{(j)}$. Мы видим, что это число совпадает с размерностью векторного пространства, в котором реализуется регулярное представление. Поэтому векторы $D_{\alpha\beta}^{(j)}$ образуют в нем полную систему. Этим результатом мы воспользуемся в следующем пункте для доказательства теоремы о числе различных неприводимых представлений конечной группы.

11. Число неприводимых представлений

Характеры представления $\chi(g_1), \chi(g_2), \dots, \chi(g_m)$ также можно рассматривать как составляющие вектора в m -мерном пространстве R_m . При этом характеры неприводимых представлений, как это следует из (3.83), образуют систему ортонормированных векторов. Так как для элементов одного класса характеры совпадают, то все такие векторы принадлежат подпространству R_κ пространства R_m . Пространство R_κ характеризуется тем, что составляющие векторов, соответствующие элементам одного класса, совпадают друг с другом. Составляющие произвольного вектора $F(F(g_1), F(g_2), \dots)$ подпространства R_κ обладают свойством

$$F(g') = F(g^{-1}g'g) \quad (3.94)$$

при любых g' и g из группы G . Так как число различных составляющих вектора F не может превышать числа классов в группе G , то максимальное число k линейно независимых векторов в подпространстве R_κ равно числу классов в группе. Покажем, что произвольный вектор F подпространства R_κ может быть разложен по векторам $\chi^{(j)}$, соответствующим неприводимым представлениям группы G .

Так как вектор F принадлежит пространству R_m , то он может быть разложен по полной системе векторов $D_{\alpha\beta}^{(j)}$, и для составляющих этого вектора будем иметь

$$F(g') = \sum_{j,\alpha,\beta} C_{\alpha\beta}^{(j)} D_{\alpha\beta}^{(j)}(g'). \quad (3.95)$$

Используя свойство (3.94), мы можем написать

$$F(g') = F(g^{-1}g'g) = \sum_{j,\alpha,\beta} C_{\alpha\beta}^{(j)} D_{\alpha\beta}^{(j)}(g^{-1}g'g). \quad (3.96)$$

Усредним полученное равенство по элементу g . Тогда получим

$$\begin{aligned}
 F(g') &= \frac{1}{m} \sum_g \sum_{j, \alpha, \beta} C_{\alpha\beta}^{(j)} D_{\alpha\beta}^{(j)}(g^{-1}g') = \\
 &= \frac{1}{m} \sum_g \sum_{j, \alpha, \beta} C_{\alpha\beta}^{(j)} \sum_{\gamma, \delta} D_{\alpha\gamma}^{(j)}(g^{-1}) D_{\gamma\delta}^{(j)}(g') D_{\delta\beta}^{(j)}(g) = \\
 &= \frac{1}{m} \sum_g \sum_{j, \alpha, \beta, \gamma, \delta} C_{\alpha\beta}^{(j)} \bar{D}_{\gamma\alpha}^{(j)}(g) D_{\delta\beta}^{(j)}(g) D_{\gamma\delta}^{(j)}(g'). \quad (3.97)
 \end{aligned}$$

Используя соотношения ортогональности (3.67), мы получим

$$\begin{aligned}
 F(g') &= \frac{1}{m} \sum_{j, \alpha, \beta, \gamma, \delta} C_{\alpha\beta}^{(j)} \frac{m}{n_j} \delta_{\gamma\delta} \delta_{\alpha\beta} D_{\gamma\delta}^{(j)}(g') = \\
 &= \frac{1}{m} \sum_{j, \alpha, \delta} C_{\alpha\alpha}^{(j)} \frac{m}{n_j} D_{\delta\delta}^{(j)}(g') = \sum_j B_j \chi^{(j)}(g'), \quad (3.98)
 \end{aligned}$$

где

$$B_j = \frac{1}{n_j} \sum_{\alpha} C_{\alpha\alpha}^{(j)}.$$

Мы видим, что произвольный вектор $F \in R_x$ может быть разложен по векторам $\chi^{(j)}$. Отсюда следует, что система векторов $\chi^{(j)}$ является полной в подпространстве R_x , и, следовательно, число этих векторов равно числу k классов группы G .

Таким образом, мы получаем важную теорему: *число различных неприводимых представлений группы равно числу ее классов.*

12. Вычисление характеров неприводимых представлений

Мы знаем, что характеры неприводимых представлений удовлетворяют соотношениям ортогональности и нормировки (3.83). Кроме того, разбивая порядок группы m на k квадратов целых чисел, мы можем найти согласно (3.93) порядки неприводимых представлений, которые, очевидно, равны характерам этих представлений, соответствующих единичному элементу группы. Однако в общем случае этих условий недостаточно для однозначного определения значений всех характеров неприводимых представлений. Покажем сейчас, что для характеров неприводимых представлений можно дополнительно получить квадратичные соотношения, которые позволяют решить задачу. В главе II было доказано, что всевозможные произведения элементов двух классов группы образуют совокупность, состоящую из целых классов этой

группы. Этот результат был записан нами в виде равенства (2.5):

$$C_i C_j = \sum_k h_{ijk} C_k. \quad (3.99)$$

Рассмотрим теперь одно из неприводимых представлений $D^{(p)}$ порядка n_p группы G . Составим произведения матриц этого представления, соответствующих произведениям элементов, образующих совокупность $C_i C_j$:

$$D^{(p)}(g_i) D^{(p)}(g_j), \quad g_i \in C_i, \quad g_j \in C_j.$$

Напишем теперь матрицы представления $D^{(p)}$, соответствующие элементам совокупности $\sum_k h_{ijk} C_k$. Очевидно, что в силу (3.99) построенные таким образом совокупности матриц представления должны совпадать. Ясно, что будет иметь место равенство

$$\sum_{\substack{g_i \in C_i \\ g_j \in C_j}} D^{(p)}(g_i) D^{(p)}(g_j) = \sum_{g_k \in C_k} h_{ijk} D^{(p)}(g_k). \quad (3.100)$$

Если ввести обозначение

$$S_i^{(p)} \equiv \sum_{g_i \in C_i} D^{(p)}(g_i), \quad (3.101)$$

то формула (3.100) может быть переписана в виде

$$S_i^{(p)} S_j^{(p)} = \sum_k h_{ijk} S_k^{(p)}. \quad (3.102)$$

Но матрицы $S_i^{(p)}$ кратны единичным (см. упр. 3.3):

$$S_i^{(p)} = \lambda_i^{(p)} E_{n_p}. \quad (3.103)$$

Найдем след матрицы $S_i^{(p)}$. С одной стороны, мы имеем

$$\text{Sp } S_i^{(p)} = \sum_{g_i \in C_i} \text{Sp } D^{(p)}(g_i) = k_i \chi_i^{(p)}, \quad (3.104)$$

где k_i — число элементов в классе C_i . С другой стороны,

$$\text{Sp } S_i^{(p)} = n_p \lambda_i^{(p)}. \quad (3.105)$$

Поэтому,

$$\lambda_i^{(p)} = \frac{k_i}{n_p} \chi_i^{(p)}. \quad (3.106)$$

Подставляя (3.103) в (3.102) и используя (3.106), мы получим соотношения

$$k_i k_j \chi_i^{(p)} \chi_j^{(p)} = n_p \sum_l h_{ijl} k_l \chi_l^{(p)}, \quad (3.107)$$

которым должны удовлетворять характеры неприводимых представлений. Практически, как правило, нет необходимости решать эти уравнения, поскольку характеры представлений большинства конечных групп, используемых в приложениях, вычислены и затабулированы.

Упражнения

3.1. Доказать, что любое представление простой группы (т. е. группы без нормального делителя) изоморфно самой группе.

3.2. С помощью первой леммы Шура доказать, что все неприводимые представления абелевой группы первого порядка.

3.3. С помощью первой леммы Шура доказать, что сумма матриц неприводимого представления, соответствующих элементам одного класса, кратна единичной.

3.4. Построить матрицы регулярного представления для группы шестого порядка (см. упр. 2.1).

3.5. Доказать, что обратным элементам соответствуют комплексно сопряженные характеры представления.

3.6. Доказать, что равенство $\frac{1}{m} \sum_g \bar{\chi}(g) \chi(g) = 1$ является достаточным условием неприводимости представления.

3.7. Доказать, что сумма по группе матричных элементов любого неприводимого представления, кроме тождественного, равна нулю.

Глава IV

Композиция представлений и прямое произведение групп

Перед тем как переходить к приложениям, введем еще понятие композиции, или прямого произведения, представлений группы и понятие прямого произведения групп. С этой целью введем сначала понятие прямого произведения матриц.

1. Прямое произведение матриц

Пусть имеются две квадратные матрицы: матрица A порядка n и матрица B порядка m с элементами

$$\left. \begin{array}{l} a_{ik} \quad (i, k = 1, 2, \dots, n), \\ b_{\alpha\beta} \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \dots, m). \end{array} \right\} \quad (4.1)$$

Прямым произведением матрицы A на матрицу B называют суперматрицу $A \times B$ порядка n , (i, k) -й элемент которой есть матрица $a_{ik}B$ порядка m . Для примера напишем прямое произведение двух матриц второго порядка:

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B \\ a_{21}B & a_{22}B \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} a_{11}b_{11} & a_{11}b_{12} & a_{12}b_{11} & a_{12}b_{12} \\ a_{11}b_{21} & a_{11}b_{22} & a_{12}b_{21} & a_{12}b_{22} \\ a_{21}b_{11} & a_{21}b_{12} & a_{22}b_{11} & a_{22}b_{12} \\ a_{21}b_{21} & a_{21}b_{22} & a_{22}b_{21} & a_{22}b_{22} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Мы видим, что элементами матрицы $A \times B$ являются всевозможные произведения элементов матриц A и B . Для нумерации строк и столбцов прямого произведения двух матриц удобно использовать не один, а два индекса. Тогда мы можем написать

$$\{A \times B\}_{i\alpha, k\beta} = a_{ik}b_{\alpha\beta}. \quad (4.3)$$

Очевидно, что порядок прямого произведения матриц равен произведению порядков множителей.

Из определения прямого произведения матриц следует, что прямое произведение диагональных матриц будет диагональной матрицей, а прямое произведение единичных матриц — единичной матрицей.

Рассмотрим некоторые свойства прямого произведения матриц:

а) Если $A^{(1)}$ и $A^{(2)}$ — матрицы порядка n , а $B^{(1)}$ и $B^{(2)}$ — матрицы порядка m , то

$$(A^{(1)} \times B^{(1)})(A^{(2)} \times B^{(2)}) = A^{(1)}A^{(2)} \times B^{(1)}B^{(2)}. \quad (4.4)$$

Для доказательства напомним $(i\alpha, k\beta)$ -й элемент для левой и правой частей этого равенства. Элемент матрицы, написанной слева, равен

$$\begin{aligned} & \{(A^{(1)} \times B^{(1)})(A^{(2)} \times B^{(2)})\}_{i\alpha, k\beta} = \\ & = \sum_{l, \delta} \{A^{(1)} \times B^{(1)}\}_{i\alpha, l\delta} \{A^{(2)} \times B^{(2)}\}_{l\delta, k\beta} = \sum_{l, \delta} a_{il}^{(1)} b_{\alpha\delta}^{(1)} a_{lk}^{(2)} b_{\delta\beta}^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Элемент матрицы, написанной справа в формуле (4.4), можно представить в виде

$$\begin{aligned} & \{(A^{(1)}A^{(2)}) \times (B^{(1)}B^{(2)})\}_{i\alpha, k\beta} = \{A^{(1)}A^{(2)}\}_{ik} \{B^{(1)}B^{(2)}\}_{\alpha\beta} = \\ & = \sum_l a_{il}^{(1)} a_{lk}^{(2)} \sum_\delta b_{\alpha\delta}^{(1)} b_{\delta\beta}^{(2)} = \sum_{l, \delta} a_{il}^{(1)} a_{lk}^{(2)} b_{\alpha\delta}^{(1)} b_{\delta\beta}^{(2)}, \end{aligned} \quad (4.6)$$

и, следовательно, он равен соответствующему элементу матрицы, стоящей в левой части формулы (4.4). Таким образом, мы видим, что формула (4.4) действительно имеет место.

б) Если матрицы A и B унитарные, то матрица $A \times B$ тоже унитарная.

Действительно, из свойства а) следует, что

$$(A \times B)^{-1} = A^{-1} \times B^{-1}. \quad (4.7)$$

С другой стороны, очевидно, что

$$(A \times B)^+ = A^+ \times B^+. \quad (4.8)$$

Так как матрицы A и B унитарные, то $A^+ = A^{-1}$, $B^+ = B^{-1}$, и мы имеем

$$(A \times B)^+ = A^+ \times B^+ = A^{-1} \times B^{-1} = (A \times B)^{-1}, \quad (4.9)$$

что и требовалось доказать.

Мы ввели понятие прямого произведения для квадратных матриц. Однако иногда оказывается полезным понятие прямого произведения прямоугольных матриц, которое определяется так же, как и для квадратных. Ясно, что можно рассматривать прямое произведение не двух, а произвольного числа матриц.

2. Композиция представлений группы

Теперь мы можем ввести понятие *композиции*, или *прямого произведения*, представлений группы.

Пусть заданы два представления D и D' (не обязательно неприводимых) группы G . Мы будем рассматривать матрицы этих представлений как матрицы преобразований соответственно в l_1 - и l_2 -мерных пространствах R_{l_1} и R_{l_2} . Тогда для ортов u_k пространства R_{l_1} имеем

$$\widehat{T}_g u_i = \sum_m D_{mi}(g) u_m, \quad (4.10)$$

а для ортов v_k пространства R_{l_2} получим

$$\widehat{T}'_g v_k = \sum_n D'_{nk}(g) v_n. \quad (4.11)$$

Выберем в пространстве R_{l_1} вектор x (x_1, x_2, \dots, x_{l_1}), а в пространстве R_{l_2} вектор y (y_1, y_2, \dots, y_{l_2}). Образует $l_1 l_2$ произведений $x_i y_k$ составляющих векторов x и y и будем рассматривать эти числа как компоненты вектора в пространстве $R_{l_1 l_2}$. Этот вектор будем называть *прямым произведением* векторов x и y . Пространство $R_{l_1 l_2}$ будем называть *прямым произведением* пространств R_{l_1} и R_{l_2} и обозначать через $R_{l_1} \times R_{l_2}$. Ясно, что базис пространства $R_{l_1} \times R_{l_2}$ может быть образован из прямых произведений базисных ортов u_i и v_k пространств R_{l_1} и R_{l_2} :

$$w_{ik} = u_i \times v_k. \quad (4.12)$$

Определим теперь линейные операторы \widehat{T}_g'' , действующие в пространстве $R_{l_1} \times R_{l_2}$, формулой

$$\begin{aligned} \widehat{T}_g'' w_{ik} &= \widehat{T}_g u_i \times \widehat{T}'_g v_k = \sum_{m,n} D_{mi}(g) u_m \times D'_{nk}(g) v_n = \\ &= \sum_{m,n} D_{mi}(g) D'_{nk}(g) w_{mn}. \end{aligned} \quad (4.13)$$

Мы видим, что операторам \widehat{T}_g'' соответствуют матрицы, являющиеся прямым произведением матриц $D(g)$ и $D'(g)$.

Проверим, что матрицы $D(g) \times D'(g)$ образуют представление группы G . Действительно, пусть $g_i g_k = g_l$, так что

$$\left. \begin{aligned} D(g_i) D(g_k) &= D(g_l), \\ D'(g_i) D'(g_k) &= D'(g_l). \end{aligned} \right\} \quad (4.14)$$

Тогда, используя свойство а) прямого произведения матриц, мы получим

$$\begin{aligned} (D(g_i) \times D'(g_i)) (D(g_k) \times D'(g_k)) &= \\ &= (D(g_i) D(g_k)) \times (D'(g_i) D'(g_k)) = D(g_l) \times D'(g_l). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Представление матрицами $D(g) \times D'(g)$ называют *композицией* или *прямым произведением* представлений $D(g)$ и $D'(g)$. Если представления D и D' унитарны, то по свойству б) их прямое произведение также унитарно.

Если представления $D^{(i)}$ и $D^{(j)}$ неприводимы, то их прямое произведение оказывается в общем случае приводимым. Разложение композиции представлений на неприводимые представления называется разложением Клебша—Гордана:

$$D^{(i)}(g) \times D^{(j)}(g) = \sum_i^{\oplus} \gamma_{ijl} D^{(l)}(g), \quad (4.16)$$

где $D^{(l)}(g)$ — неприводимые представления группы G . Мы знаем, что с помощью соотношений ортогональности для характеров неприводимых представлений и по известным характеристам приводимого представления можно определить, столько раз в нем содержится каждое неприводимое представление. Используя формулу (3.88), мы получим

$$\gamma_{ijs} = \frac{1}{m} \sum_g \bar{\chi}^{(s)}(g) \chi^{(ij)}(g), \quad (4.17)$$

где через $\chi^{(ij)}(g)$ обозначены характеры представления $D^{(i)} \times D^{(j)}$. Найдем выражение для характеров $\chi^{(ij)}$. Так как элементы матрицы $D^{(i)} \times D^{(j)}$ имеют вид

$$\{D^{(i)} \times D^{(j)}\}_{l\alpha, k\beta} = D_{ik}^{(i)} D_{\alpha\beta}^{(j)}, \quad (4.18)$$

то характер $\chi^{(ij)}$ этого представления, очевидно, равен

$$\begin{aligned} \chi^{(ij)}(g) &= \text{Sp} (D^{(i)}(g) \times D^{(j)}(g)) = \sum_{l, \alpha} \{D^{(i)}(g) \times D^{(j)}(g)\}_{l\alpha, l\alpha} = \\ &= \sum_{l, \alpha} D_{ll}^{(i)}(g) D_{\alpha\alpha}^{(j)}(g) = \chi^{(i)}(g) \chi^{(j)}(g). \end{aligned} \quad (4.19)$$

Таким образом, характер композиции двух представлений равен произведению характеров сомножителей. Подставляя этот результат в формулу (4.17), мы получим

$$\gamma_{ijs} = \frac{1}{m} \sum_g \bar{\chi}^{(s)}(g) \chi^{(i)}(g) \chi^{(j)}(g). \quad (4.20)$$

Пусть композиция неприводимых представлений $D^{(i)}$ и $D^{(j)}$ разложена на неприводимые части, так что матрицы этого представления

имеют квазидиагональный вид. Мы знаем, что такое разложение получается в результате перехода к новому базису. В нашем случае это происходит в результате перехода от базиса $w_{pk} = u_p^{(i)} \times v_k^{(j)}$ к базису $w_q^{(s\gamma_s)}$, где значок s нумерует неэквивалентные неприводимые представления, а индекс γ_s учитывает кратность неприводимого представления $D^{(s)}$, причем новые орты являются линейной комбинацией старых:

$$w_q^{(s\gamma_s)} = \sum_{p, k} (ip, jk|s, \gamma_s, q) u_p^{(i)} \times v_k^{(j)}. \quad (4.21)$$

Коэффициенты $(ip, jk|s, \gamma_s, q)$ в этой формуле называют коэффициентами Клебша—Гордана или коэффициентами Вигнера.

Если орты $w_q^{(s\gamma_s)}$ и $u_p^{(i)} \times v_k^{(j)}$ образуют ортонормированные базисы, то связывающая их матрица с элементами $(ip, jk|s, \gamma_s, q)$ должна быть унитарной. В этом случае для коэффициентов Клебша—Гордана выполняются следующие условия ортогональности:

$$\sum_{p, k} \overline{(ip, jk|s, \gamma_s, q)} (ip, jk|s', \gamma'_s, q') = \delta_{qq'} \delta_{ss'} \delta_{\gamma_s \gamma'_s}, \quad (4.22)$$

$$\sum_{s, \gamma_s, q} \overline{(ip, jk|s, \gamma_s, q)} (ip', jk'|s, \gamma_s, q) = \delta_{pp'} \delta_{kk'}. \quad (4.23)$$

Аналогичным образом может быть рассмотрена композиция трех и большего числа представлений.

3. Прямое произведение групп

Введем понятие прямого произведения групп и исследуем неприводимые представления прямого произведения.

Пусть заданы две группы: $G^{(1)}$ с элементами $g_\alpha^{(1)}$ и $G^{(2)}$ с элементами $g_\beta^{(2)}$. Определим новую группу $G^{(1)} \times G^{(2)}$, элементами которой являются пары $(g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)})$, причем порядок расположения элементов в паре несуществен. Такая группа называется *прямым произведением групп* $G^{(1)}$ и $G^{(2)}$. Закон умножения для нее определяется следующим образом:

$$(g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)}) (g_{\alpha'}^{(1)}, g_{\beta'}^{(2)}) = (g_{\alpha\alpha'}^{(1)}, g_{\beta\beta'}^{(2)}), \quad (4.24)$$

где

$$g_{\alpha\alpha'}^{(1)} = g_\alpha^{(1)} g_{\alpha'}^{(1)}, \quad g_{\beta\beta'}^{(2)} = g_\beta^{(2)} g_{\beta'}^{(2)}. \quad (4.25)$$

Легко показать, что единичный элемент прямого произведения групп — это пара единичных элементов сомножителей. Обратным элементом по отношению к $(g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)})$ будет элемент $(g_\alpha^{(1)-1}, g_\beta^{(2)-1})$. Важной реализацией прямого произведения двух групп является случай, когда

группы $G^{(1)}$ и $G^{(2)}$ оказываются коммутирующими подгруппами одной группы. В этом случае пара элементов $(g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)})$ понимается как результат группового умножения элементов. Покажем, что из некоммутирующих подгрупп таким образом нельзя составить прямого произведения. Действительно, согласно закону умножения (4.24) мы имеем

$$(g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)}) (g_{\alpha'}^{(1)}, g_{\beta'}^{(2)}) = g_\alpha^{(1)} g_{\alpha'}^{(1)} g_\beta^{(2)} g_{\beta'}^{(2)}. \quad (4.26)$$

Если теперь в качестве $g_\alpha^{(1)}$ и $g_{\beta'}^{(2)}$ взять единичные элементы группы, то получим соотношение

$$g_\beta^{(2)} g_{\alpha'}^{(1)} = g_{\alpha'}^{(1)} g_\beta^{(2)}, \quad (4.27)$$

которое не выполняется, если рассматриваемые подгруппы не коммутируют.

Докажем, что число классов группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$ равно произведению чисел классов сомножителей. Для этого рассмотрим совокупность тех элементов группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$, в которых первый множитель принадлежит определенному классу группы $G^{(1)}$, а второй — определенному классу группы $G^{(2)}$. Покажем, что эти элементы группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$ образуют класс. В самом деле, если элемент $(g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)})$ принадлежит выделенной совокупности, то для любого элемента $(g_\gamma^{(1)}, g_\delta^{(2)})$ группы мы будем иметь

$$\begin{aligned} (g_\gamma^{(1)}, g_\delta^{(2)})^{-1} (g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)}) (g_\gamma^{(1)}, g_\delta^{(2)}) &= \\ &= (g_\gamma^{(1)-1}, g_\delta^{(2)-1}) (g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)}) (g_\gamma^{(1)}, g_\delta^{(2)}) = \\ &= (g_\gamma^{(1)-1} g_\alpha^{(1)} g_\gamma^{(1)}, g_\delta^{(2)-1} g_\beta^{(2)} g_\delta^{(2)}), \end{aligned} \quad (4.28)$$

т. е. получим элемент, принадлежащий той же совокупности. Нетрудно увидеть, что все элементы совокупности могут быть получены с помощью сопряжения из одного. Таким образом, выделенная совокупность элементов действительно образует класс группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$. Отсюда следует, что число классов прямого произведения равно произведению чисел классов сомножителей.

4. Неприводимые представления прямого произведения групп

Перейдем теперь к рассмотрению представлений прямого произведения групп. Пусть задано представление $D(g_\alpha^{(1)})$ порядка l_1 группы $G^{(1)}$ и представление $D'(g_\beta^{(2)})$ порядка l_2 группы $G^{(2)}$. Покажем, что

прямое произведение матриц $D(g_\alpha^{(1)}) \times D'(g_\beta^{(2)})$ образует представление порядка $l_1 l_2$ группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$.

Действительно, если

$$(g_\alpha^{(1)}, g_\beta^{(2)})(g_{\alpha'}^{(1)}, g_{\beta'}^{(2)}) = (g_{\alpha''}^{(1)}, g_{\beta''}^{(2)}), \quad (4.29)$$

то согласно (4.4) для прямых произведений матриц

$$D(g_\alpha^{(1)}) \times D'(g_\beta^{(2)}) \quad \text{и} \quad D(g_{\alpha'}^{(1)}) \times D'(g_{\beta'}^{(2)})$$

мы получаем аналогичное равенство:

$$\begin{aligned} & (D(g_\alpha^{(1)}) \times D'(g_\beta^{(2)}))(D(g_{\alpha'}^{(1)}) \times D'(g_{\beta'}^{(2)})) = \\ & = (D(g_\alpha^{(1)})D(g_{\alpha'}^{(1)})) \times (D'(g_\beta^{(2)})D'(g_{\beta'}^{(2)})) = D(g_{\alpha''}^{(1)}) \times D'(g_{\beta''}^{(2)}). \end{aligned} \quad (4.30)$$

Докажем теперь, что если представления D и D' неприводимы, то представление $D \times D'$ группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$ также неприводимо. Для этого мы покажем, что единственная матрица, которая коммутирует со всеми матрицами $D \times D'$, кратна единичной. Обозначим эту матрицу через X . Мы знаем, что матрицу $D \times D'$ можно рассматривать как суперматрицу, элементами которой являются матрицы $D_{ik}D'$. Запишем матрицу X в виде аналогичной суперматрицы с элементами X_{ik} , которые в свою очередь являются матрицами того же порядка, что и D' . Суперматрицы одинаковой структуры можно перемножать, как обычные матрицы (см. упр. 4.2). Итак, предположим, что матрица X коммутирует со всеми матрицами $D \times D'$. Напишем сначала условие коммутации с теми матрицами, которые соответствуют единичному элементу группы $G^{(1)}$, т. е. с матрицами $E_{i_1} \times D'(g_{\beta}^{(2)})$. Записанные как суперматрицы, они имеют вид матрицы, кратной единичной, с диагональными элементами, равными матрице D' . Мы имеем

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1l_1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ X_{l_1 1} & X_{l_1 2} & \dots & X_{l_1 l_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D' & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D' & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & D' \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} D' & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D' & 0 & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & D' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_{11} & X_{12} & \dots & X_{1l_1} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ X_{l_1 1} & X_{l_1 2} & \dots & X_{l_1 l_1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

или

$$\sum_{k=1}^{l_1} X_{ik} \delta_{kj} D' = \sum_{k=1}^{l_1} \delta_{ik} D' X_{kj},$$

откуда

$$X_{ij} D' = D' X_{ij}. \quad (4.31)$$

Таким образом, мы видим, что все субматрицы X_{ij} должны коммутировать со всеми матрицами неприводимого представления группы $G^{(2)}$, и поэтому они по первой лемме Шура кратны единичным матрицам:

$$X_{ik} = x_{ik} E_{l_2}, \quad (4.32)$$

где x_{ik} — некоторые числа. Запишем теперь условие коммутации X с теми матрицами прямого произведения, которые соответствуют единичному элементу группы $G^{(2)}$. Эти матрицы имеют вид $D \times E_{l_2}$. Записанное через суперматрицы условие коммутации имеет вид

$$\sum_k X_{ik} D_{kj} E_{l_2} = \sum_k D_{ik} E_{l_2} X_{kj}. \quad (4.33)$$

Отсюда, используя формулу (4.32), мы имеем

$$\sum_k x_{ik} D_{kj} = \sum_k D_{ik} x_{kj}. \quad (4.34)$$

Таким образом, мы показали, что матрица с элементами x_{ik} порядка l_1 коммутирует со всеми матрицами неприводимого представления $D(g^{(1)})$, следовательно, эта матрица кратна единичной и $x_{ik} = \delta_{ik} x$. Но отсюда также следует, что матрица X , имеющая вид

$$\begin{pmatrix} x_{11} E_{l_2} & x_{12} E_{l_2} & \dots & x_{1l_1} E_{l_2} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_{l_1 1} E_{l_2} & x_{l_1 2} E_{l_2} & \dots & x_{l_1 l_1} E_{l_2} \end{pmatrix},$$

также кратна единичной. Таким образом, наше утверждение доказано.

Представления группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$, построенные таким образом из неприводимых представлений групп $G^{(1)}$ и $G^{(2)}$, не могут быть эквивалентны друг другу. Это легко проверить по ортогональности характеров этих представлений, которые равны произведениям характеров представлений D и D' . Доказательство предоставляем читателю. Число представлений $D \times D'$, очевидно, равно произведению числа различных неприводимых представлений D на число различных неприводимых представлений D' или произведению чисел классов в группах $G^{(1)}$ и $G^{(2)}$. Но так как число классов прямого произведения равно как раз произведению чисел классов сомножителей, то, таким образом, мы получаем все неприводимые представления группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$.

Упражнения

4.1. Доказать, что тождественное представление содержится в композиции двух неприводимых представлений только в том случае, если эти представления являются комплексно сопряженными.

4.2. Убедиться в том, что суперматрицы с одинаковым разбиением на строки и столбцы можно перемножать по тому же правилу, что и обычные матрицы.

4.3. Доказать, что построенные в п. 3 неприводимые представления прямого произведения двух групп не эквивалентны.

4.4. Показать, что подгруппы $(g_\alpha^{(1)}, E^{(2)})$ и $(E^{(1)}, g_\beta^{(2)})$ будут нормальными делителями группы $G^{(1)} \times G^{(2)}$.

4.5. Доказать, что перестановка множителей в прямом произведении матриц эквивалентна некоторому преобразованию подобия: $A \times B = V(B \times A)V^{-1}$.

Глава V

Теорема Вигнера

После того, как мы познакомились с некоторыми основными понятиями и теоремами теории конечных групп, можно перейти к рассмотрению конкретных групп и к приложениям методов теории групп к физическим задачам. Большая часть приложений, как мы увидим, основана на тереме Вигнера, которая будет доказана в этой главе.

1. Симметрия квантовомеханической системы относительно группы преобразований

Мы знаем, что состояние квантовомеханической системы описывается решением уравнения Шрёдингера. Поэтому симметрия этой системы относительно некоторой группы означает инвариантность соответствующего уравнения Шрёдингера относительно преобразований этой группы. Мы ограничимся сейчас рассмотрением стационарной задачи, для которой уравнение Шрёдингера имеет вид

$$\hat{H}(x)\psi(x) = E\psi(x), \quad (5.1)$$

где x — совокупность переменных, характеризующих конфигурационное пространство системы. Напомним (см. главу III), что под инвариантностью уравнения Шрёдингера мы понимаем сохранение его вида при подстановке $x \rightarrow g^{-1}x$, $\psi(x) \rightarrow \hat{T}_g\psi(x) = \psi(g^{-1}x)$, где g — преобразование из группы симметрии G системы. Очевидно, что инвариантность уравнения Шрёдингера относительно преобразования g является следствием инвариантности гамильтониана системы:

$$\hat{H}(gx) = \hat{H}(x). \quad (5.2)$$

Покажем, что условие инвариантности уравнения (5.1) относительно группы G может быть записано в виде условия коммутативности операторов \hat{T}_g и оператора энергии \hat{H} :

$$\hat{H}\hat{T}_g = \hat{T}_g\hat{H}. \quad (5.2a)$$

Пусть $\psi_E(x)$ — собственная функция оператора \hat{H} , соответствующая собственному значению E . Тогда $\hat{T}_g\psi_E(x)$ — также собственная

функция оператора \hat{H} , соответствующая тому же собственному значению, т. е.

$$\hat{H}\hat{T}_g\psi_E = E\hat{T}_g\psi_E.$$

Но

$$E\hat{T}_g\psi_E = \hat{T}_g\hat{H}\psi_E.$$

Таким образом, для любой собственной функции оператора \hat{H} мы имеем

$$\hat{H}\hat{T}_g\psi_E = \hat{T}_g\hat{H}\psi_E.$$

Очевидно, что это равенство справедливо также для любой функции, которая может быть разложена по собственным функциям оператора \hat{H} .

Условие (5.2) инвариантности гамильтониана можно также записать в матричной форме. Если использовать некоторую полную систему ортонормированных функций $\psi_i(x)$, то из (5.2а) получим

$$\sum_k H_{ik}D_{kj}(g) = \sum_s D_{is}(g)H_{sj}, \quad (5.26)$$

где $H_{ik} = \int \bar{\psi}_i \hat{H} \psi_k dx$, $D_{is} = \int \bar{\psi}_i \hat{T}_g \psi_s dx$.

Практически при решении квантовомеханической задачи часто приходится ограничиваться некоторой неполной и неортонормированной системой функций. Докажем, что в этом случае условие инвариантности (5.2) сохранит свой вид, если только на выбранной системе функций реализуется унитарное представление группы G . Предположим, что для любого элемента g имеет место равенство

$$\hat{T}_g \psi_i(x) = \psi_i(g^{-1}x) = \sum_k D_{ki}(g) \psi_k(x). \quad (5.3)$$

Покажем, что матрицы $D(g)$ образуют представление группы. С этой целью рассмотрим два преобразования g_1 и g_2 , и пусть $g_1 g_2 = g_3$. Мы имеем, с одной стороны,

$$\psi_i((g_1 g_2)^{-1}x) = \psi_i(g_3^{-1}x) = \sum_k D_{ki}(g_3) \psi_k(x); \quad (5.4)$$

с другой стороны,

$$\begin{aligned} \psi_i((g_1 g_2)^{-1}x) &= \psi_i(g_2^{-1} g_1^{-1}x) = \\ &= \sum_j D_{ji}(g_2) \psi_j(g_1^{-1}x) = \sum_j D_{ji}(g_2) \sum_k D_{kj}(g_1) \psi_k(x). \end{aligned} \quad (5.5)$$

Сравнивая результаты (5.4) и (5.5), мы получаем

$$D_{ki}(g_3) = \sum_j D_{kj}(g_1) D_{ji}(g_2),$$

или

$$D(g_1)D(g_2) = D(g_3).$$

Составим теперь матрицу гамильтониана

$$H_{ik} = \int \bar{\psi}_i(x) \widehat{H}(x) \psi_k(x) dx$$

и аналогичную матрицу на штрихованных функциях $\psi'_i(x) = \psi_i(g^{-1}x)$:

$$H'_{ik} = \int \bar{\psi}'_i(x) \widehat{H}(x) \psi'_k(x) dx.$$

Покажем, что в силу инвариантности гамильтониана относительно преобразования g

$$H'_{ik} = H_{ik}. \quad (5.6)$$

Действительно,

$$H'_{ik} = \int \bar{\psi}_i(g^{-1}x) \widehat{H}(x) \psi_k(g^{-1}x) dx.$$

Сделаем замену переменной $g^{-1}x = x'$ ($dx = dx'$). Тогда в силу (5.2) получим

$$H'_{ik} = \int \bar{\psi}_i(x') H(gx') \psi_k(x') dx' = \int \bar{\psi}_i(x) H(x) \psi_k(x) dx = H_{ik}.$$

С другой стороны, согласно (5.3)

$$H'_{ik} = \sum_{l,j} \int \bar{D}_{li}(g) \bar{\psi}_l(x) H(x) D_{jk}(g) \psi_j(x) dx = \sum_{l,j} \bar{D}_{li} H_{lj} D_{jk},$$

т. е.

$$H' = D^+ H D. \quad (5.7)$$

Если матрицы D унитарные, т. е. $D^+ = D^{-1}$, то

$$H' = D^{-1} H D. \quad (5.7a)$$

Но так как $H' = H$, то окончательно получаем

$$D(g)H = HD(g), \quad (5.8)$$

что и требовалось доказать.

Таким образом, условие симметрии квантовомеханической системы относительно группы преобразований может быть выражено как условие коммутации матрицы гамильтониана с матрицами унитарного представления этой группы.

2. Симметрия системы частиц, совершающих малые колебания

Энергия системы N частиц, совершающих малые колебания, представляется в виде суммы квадратичных форм для кинетической и потенциальной энергий:

$$T = \sum_{i=1}^{3N} \frac{m_i \dot{x}_i^2}{2}, \quad V = \frac{1}{2} \sum_{i, k=1}^{3N} v_{ik} x_i x_k, \quad (5.9)$$

где m_i — массы частиц, а x_i — декартовы составляющие смещений из положений равновесия. Величина $m_i \dot{x}_i$ при классическом рассмотрении обозначает составляющую импульса, а при квантовом — составляющую оператора импульса, имеющую вид $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i}$. Как известно, решение задачи на малые колебания значительно упрощается в результате одновременной диагонализации матриц этих двух квадратичных форм. Матрица $\|v_{ik}\|$ является вещественной эрмитовой матрицей. Если ввести новые переменные $y_i = \sqrt{m_i} x_i$, то кинетическая энергия выразится в виде суммы квадратов:

$$T = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \dot{y}_i^2, \quad (5.10)$$

и следовательно, задача сводится теперь к диагонализации матрицы квадратичной формы потенциальной энергии, которая в новых переменных примет вид

$$V = \frac{1}{2} \sum_{i, k} \bar{v}_{ik} y_i y_k, \quad \bar{v}_{ik} = \frac{v_{ik}}{\sqrt{m_i m_k}}. \quad (5.11)$$

Матрица $\|\bar{v}_{ik}\|$, так же как и $\|v_{ik}\|$, эрмитова. Поэтому ее можно привести к диагональному виду с помощью унитарного преобразования u :

$$u^{-1} \bar{v} u = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{3N}],$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{3N}$ — собственные значения матрицы \bar{v} . Если мы введем новые переменные

$$q_i = \sum_k u_{ik} y_k, \quad (5.12)$$

то получим

$$V = \frac{1}{2} \sum_i \lambda_i q_i^2. \quad (5.13)$$

При этом матрица кинетической энергии в силу унитарности преобразования (5.12) сохранит свой вид:

$$T = \frac{1}{2} \sum_i \dot{q}_i^2. \quad (5.14)$$

Если система устойчива, т. е. в положении равновесия потенциальная энергия имеет минимум, то собственные значения λ_i должны быть неотрицательны и могут быть представлены в виде

$$\lambda_i = \omega_i^2. \quad (5.15)$$

Функция Лагранжа, записанная в переменных q_i ,

$$L = T - V = \frac{1}{2} \sum_i (\dot{q}_i^2 - \omega_i^2 q_i^2), \quad (5.16)$$

приводит к системе независимых уравнений движения:

$$\ddot{q}_i + \omega_i^2 q_i = 0. \quad (5.17)$$

Отсюда следует, что величины $q_i(t)$ описывают независимые осцилляторы с частотами ω_i . Переменные q_i называют *нормальными координатами* системы. При квантовомеханическом описании рассматриваемой системы ее оператор Гамильтона $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ в нормальных координатах принимает вид

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N} \left(-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q_i^2} + \omega_i^2 q_i^2 \right) \quad (5.16a)$$

и уравнение Шрёдингера приводится к системе $3N$ независимых уравнений

$$-\frac{1}{2} \hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial q_i^2} \psi(q_i) + \frac{\omega_i^2}{2} q_i^2 \psi(q_i) = E \psi(q_i). \quad (5.17a)$$

Предположим теперь, что положения равновесия частиц, совершающих малые колебания, образуют некоторую симметричную конфигурацию, например являются вершинами правильного шестигульника, куба и т. п. При использовании обозначения для смещений из положений равновесия мы должны помнить, что значок i нумерует не только различные частицы, но и декартовы составляющие смещения одной частицы. Рассмотрим теперь поворот (или поворот с инверсией), который совмещает положения равновесия эквивалентных частиц. При этом, очевидно, сохраняются взаимные расстояния между частицами. Совокупность всех таких преобразований образует группу симметрии G нашей системы. Фиксируем теперь конфигурацию частиц, которая характеризуется смещениями x_1, x_2, \dots, x_{3N} . Для каждой частицы введем

систему декартовых осей с началом координат в положении равновесия. Соответственные оси для всех частиц будем считать параллельными. Если мы теперь рассмотрим совокупность $3N$ ортов e_j , то смещениям x_1, x_2, \dots, x_{3N} можно сопоставить вектор в $3N$ -мерном пространстве

$$\mathbf{x} = x_1 \mathbf{e}_1 + x_2 \mathbf{e}_2 + \dots + x_{3N} \mathbf{e}_{3N}. \quad (5.18)$$

Произведем теперь поворот g , который совмещает положения равновесия эквивалентных частиц. Этот поворот переводит каждый орт e_i в некоторый другой орт или в линейную комбинацию ортов. Таким образом, каждому повороту g мы можем сопоставить определенный оператор \widehat{T}_g , действующий в $3N$ -мерном пространстве:

$$\widehat{T}_g \mathbf{e}_i = \sum_k D_{ki}(g) \mathbf{e}_k. \quad (5.19)$$

При действии оператором \widehat{T}_g на вектор \mathbf{x} мы получим

$$\widehat{T}_g \mathbf{x} = \mathbf{x}' = \sum_i x_i \widehat{T}_g \mathbf{e}_i = \sum_k x_i D_{ki}(g) \mathbf{e}_k,$$

или

$$x'_k = \sum_i D_{ki}(g) x_i. \quad (5.20)$$

Ясно, что операторы \widehat{T}_g , так же как и матрицы $D(g)$, образуют представление нашей группы. Конфигурация $\{x'_1, \dots, x'_{3N}\}$ получается из конфигурации $\{x_1, \dots, x_{3N}\}$ в результате поворота g всей системы частиц и последующей перенумерации частиц, соответствующей обратному повороту g^{-1} (рис. 1):

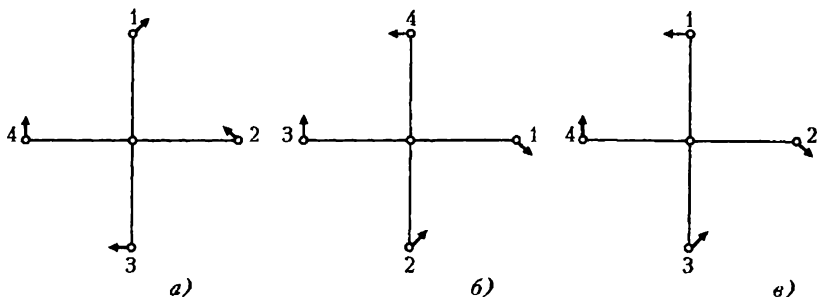


Рис. 1.

Для того чтобы написать явный вид матрицы $D(g)$, удобно ввести нумерацию смещений с помощью двух индексов: $x_{i\alpha}$. Первый индекс

будет обозначать номер частицы, второй — номер декартовой составляющей смещения. Соответственно элементы матрицы D теперь будут иметь вид $D_{i\alpha, k\beta}(g)$. Определим положение равновесия i -й частицы вектором $\mathbf{R}_i^{(0)}$, а произвольное положение этой же частицы — вектором \mathbf{R}_i , проведенными из центра инерции системы. Тогда вектор смещения i -й частицы можно представить в виде

$$\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i^{(0)}.$$

Обозначим через $A(g)$ матрицу преобразования g в трехмерном пространстве. Если при преобразовании g вектор $\mathbf{R}_k^{(0)}$ переходит в $\mathbf{R}_i^{(0)}$, то мы можем написать

$$\mathbf{r}'_i \equiv \widehat{T}_g \mathbf{r}_k = A(g)\mathbf{R}_k - A(g)\mathbf{R}_k^{(0)} = A(g)\mathbf{r}_k. \quad (5.21)$$

Следовательно,

$$D_{i\alpha, k\beta}(g) = R_{ik} A(g)_{\alpha\beta}, \quad (5.22)$$

или

$$D = R(g) \times A(g), \quad (5.22a)$$

где матрица $R(g)$ состоит из нулей и единиц, причем если положение равновесия k -й частицы при операции g переходит в положение равновесия i -й частицы, то

$$R_{ik}(g) = 1, \quad R_{ij}(g) = 0, \quad \text{если } j \neq k.$$

Напишем теперь выражение энергии системы для конфигурации смещений (5.20). Для упрощения записи мы возвратимся к прежней нумерации смещений с помощью одного индекса. Будем предполагать, что кинетическая энергия уже приведена к сумме квадратов. Тогда подстановка (5.20), соответствующая ортогональному преобразованию, сохранит ее вид. Для потенциальной энергии мы получим

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij} \sum_k D_{ik} x_k \sum_l D_{jl} x_l = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \{D^*\}_{ki} v_{ij} D_{jl} x_k x_l = \frac{1}{2} \sum_{k,l} v'_{kl} x_k x_l, \end{aligned}$$

где

$$v'_{kl} = \sum_{i,j} \{D^*\}_{ki} v_{ij} D_{jl}.$$

Матрицу $V' = \{v'_{kl}\}$ можно, следовательно, представить в виде

$$V' = D^* V D$$

или, в силу ортогональности матрицы D ,

$$V' = D^{-1}VD. \quad (5.23)$$

Но, с другой стороны, ясно, что энергия для конфигурации $\{x'\}$ должна совпадать с энергией для конфигурации $\{x\}$, так как энергия рассматриваемой системы зависит только от взаимного расположения частиц, которое одинаково для обеих конфигураций. Следовательно, мы имеем

$$\frac{1}{2} \sum_{k,l} v'_{kl} x_k x_l = \frac{1}{2} \sum_{k,l} v_{kl} x_k x_l,$$

откуда получаем

$$v'_{kl} = v_{kl}.$$

Поэтому условие инвариантности системы относительно преобразования g может быть записано согласно (5.23) в виде

$$VD(g) = D(g)V, \quad (5.24)$$

т. е. в виде условия коммутативности матрицы потенциальной энергии с матрицами представлений группы симметрии.

3. Теорема Вигнера

Теперь мы докажем теорему Вигнера и получим следствия этой теоремы для задач, рассмотренных в п. 1 и 2.

Пусть $D(g)$ — некоторое, вообще говоря, приводимое представление группы G . Выберем базисные элементы этого представления так, чтобы оно распалось на неприводимые части. Тогда матрица $D(g)$ будет иметь квазидиагональный вид

$$D(g) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(g) & & & \\ & D^{(2)}(g) & & \\ & & D^{(3)}(g) & \\ & & & \ddots \end{pmatrix},$$

где $D^{(i)}(g)$ — матрица i -го неприводимого представления группы G . Если представление $D^{(i)}$ входит в представление D τ_i раз, то мы можем написать

$$D(g) = \sum_i^{\oplus} E_{\tau_i} \times D^i(g), \quad (5.25)$$

где E_{τ_i} — единичная матрица порядка τ_i . Пусть, далее, некоторая матрица H коммутирует со всеми матрицами $D(g)$:

$$HD(g) = D(g)H. \quad (5.26)$$

Докажем, что матрица H должна иметь вид

$$H = \sum_i^{\oplus} H^{(i)} \times E_{l_i}, \quad (5.27)$$

где $H^{(i)}$ — некоторая матрица порядка r_i , E_{l_i} — единичная матрица порядка l_i , а l_i — порядок неприводимого представления $D^{(i)}$. Это утверждение и составляет содержание теоремы Зигнера.

Будем рассматривать квазидиагональную матрицу D как диагональную суперматрицу с элементами

$$D_{ik} = D^{(i)} \delta_{ik}. \quad (5.28)$$

Матрицу H также представим в виде суперматрицы с аналогичной структурой:

$$H = \begin{pmatrix} H_{11} & H_{12} & H_{13} & & \\ H_{21} & H_{22} & H_{23} & & \\ H_{31} & H_{32} & H_{33} & & \\ & & & & \\ & & & & \end{pmatrix}$$

Так как суперматрицы соответствующей структуры можно перемножать, как обычные матрицы (см. упр. 4.2), то условие коммутативности (5.26) можно представить в виде

$$\sum_i D_{is}(g) H_{sk} = \sum_i H_{is} D_{ik}(g)$$

или, учитывая (5.28),

$$D^{(i)}(g) H_{ik} = H_{ik} D^{(k)}(g). \quad (5.29)$$

Матрицы $D^{(i)}(g)$ и $D^{(k)}(g)$ — матрицы неприводимых представлений группы G . Поэтому на основании первой и второй леммы Шура мы можем утверждать, что H_{ik} — нулевая матрица, если $D^{(i)}$ и $D^{(k)}$ — неэквивалентные представления, и H_{ik} кратна единичной, если представления $D^{(i)}$ и $D^{(k)}$ совпадают. (Подчеркнем, что в последнем случае недостаточно, чтобы представления $D^{(i)}$ и $D^{(k)}$ были эквивалентными; матрицы этих представлений должны тождественно совпадать.)

Для того чтобы представить себе явный вид матрицы H , удобно ввести нумерацию элементов базиса представления D с помощью трех значков: i, ν, α . Первый значок i нумерует неприводимые представления; индекс ν нумерует базисы эквивалентных неприводимых представлений; значок α нумерует элементы базиса неприводимого представления. Соответственно матричные элементы матриц D и H мы будем нумеровать с помощью шести индексов:

$i, \nu, \alpha; i', \nu', \alpha'$. Тогда элементы матрицы H могут быть представлены в виде

$$H_{i\nu\alpha; i'\nu'\alpha'} = H_{\nu\nu'}^{(i)} \delta_{ii'} \delta_{\alpha\alpha'}. \quad (5.30)$$

Отсюда непосредственно следует, что матрица H действительно может быть представлена в виде (5.27). Например, если матрица D имеет вид

$$D = \left(\begin{array}{c|c|c} D^{(1)} & 0 & 0 \\ \hline 0 & D^{(1)} & 0 \\ \hline 0 & 0 & D^{(2)} \end{array} \right),$$

то матрица H будет иметь вид

$$H = \left(\begin{array}{c|c|c} H_{11}^{(1)} & H_{12}^{(1)} & 0 \\ & H_{12}^{(1)} & \\ & H_{11}^{(1)} & H_{12}^{(1)} \\ \hline H_{21}^{(1)} & H_{22}^{(1)} & 0 \\ & H_{21}^{(1)} & \\ & \dots & \\ & H_{21}^{(1)} & H_{22}^{(1)} \\ \hline & & H_{11}^{(2)} \\ & & H_{11}^{(2)} \\ & 0 & \\ & 0 & \\ & & H_{11}^{(2)} \end{array} \right).$$

Если каждое неприводимое представление группы G входит в представление D не более одного раза, то матрица H согласно (5.30) будет диагональной. Если же какое-либо неприводимое представление встречается в разложении представления D несколько раз, то, как мы видим, для полной диагонализации матрицы H недостаточно соображений симметрии. Необходимо еще дополнительное преобразование в подпространстве всех базисных векторов, соответствующих одинаковым неприводимым представлениям. Следует, однако, заметить, что это дополнительное преобразование не изменяет квазидиагонального

вида матрицы D и осуществляется с помощью диагонализации матриц $H^{(i)}$. В самом деле, легко проверить, что матрица вида $\sum_i U^{(i)} \times E_i$, где $U^{(i)}$ — матрица порядка r_i , диагонализующая матрицу $H^{(i)}$, коммутирует с матрицей представления

$$D = \sum_i E_{r_i} \times D^{(i)}.$$

Если матрица H будет полностью диагонализирована, то она может быть записана в виде

$$H = \sum_i \tilde{H}^{(i)} \times E_i, \quad (5.31)$$

где $\tilde{H}^{(i)}$ — диагональные матрицы. Если все собственные значения всех матриц $\tilde{H}^{(i)}$ различны, т. е. нет случайного вырождения, то мы можем утверждать, что собственные векторы матрицы H , принадлежащие одному собственному значению, преобразуются по одному из неприводимых представлений группы G . Следовательно, кратности вырождения собственных значений матрицы H в этом случае должны совпадать с порядками неприводимых представлений группы G .

Рассмотрим теперь некоторые следствия, вытекающие из доказанной теоремы.

Полученные результаты могут быть непосредственно применены к задаче о малых колебаниях. Действительно, условие симметрии системы, совершающей малые колебания, может быть выражено как условие коммутативности матрицы V потенциальной энергии с матрицами представления $D(g)$, которое реализуется на смещениях. Напомним, что такая форма условия инвариантности потенциальной энергии имеет место только в силу ортогональности матриц упомянутого представления. Если мы построим *симметризованные* смещения, т. е. линейные комбинации смещений, преобразующиеся по неприводимым представлениям рассматриваемой группы, то соответствующая им матрица потенциальной энергии примет вид, определяемый формулой (5.27):

$$V = \sum_i^{\oplus} V^{(i)} \times E_i. \quad (5.32)$$

Мы видим, что построение симметризованных смещений значительно упрощает диагонализацию матрицы потенциальной энергии, а в тех случаях, когда в разложении представления D каждое неприводимое представление встречается не более одного раза, решает эту задачу полностью. *Если нет дополнительного вырождения, то каждой собственной частоте соответствуют нормальные координаты, которые*

преобразуются по одному из неприводимых представлений группы G . Возможность дополнительного вырождения связана со случайным совпадением собственных значений матриц $V^{(i)}$. Изменением параметров задачи, не приводящим к изменению ее симметрии, можно всегда добиться того, чтобы случайное вырождение было снято. Поэтому утверждение о соответствии собственных частот системы неприводимым представлениям ее группы симметрии иногда делают без оговорки о возможности случайного вырождения, которое в большинстве случаев действительно отсутствует.

К аналогичным заключениям можно прийти и для квантовомеханической задачи, которая была рассмотрена в п. 1. Здесь, однако, следует еще раз подчеркнуть, что условие коммутативности (5.8) выполняется только в том случае, если на выбранной системе функций реализуется унитарное представление рассматриваемой группы симметрии. Выбирая в качестве системы функций некоторую полную ортонормированную систему, мы приходим к заключению, что *при отсутствии случайного вырождения каждому собственному значению оператора энергии соответствует неприводимое представление, по которому преобразуются его собственные функции.*

Если базис представления ортонормирован и скалярное произведение инвариантно относительно групповых операций, то представление унитарно. Однако если известно, что представление унитарно, то нельзя еще утверждать, что его базис ортонормирован. Теорема Вигнера позволяет получить некоторые сведения об ортогональности и нормировке элементов базиса унитарного представления D , если оно разложено на неприводимые части. Обозначим элементы базиса приведенного представления через $\varphi_{i\nu\alpha}$. Значки i, ν, α имеют прежний смысл. Введем матрицу $\|S_{i\nu\alpha, i'\nu'\alpha'}\|$, определив ее элементы равенством

$$S_{i\nu\alpha, i'\nu'\alpha'} = (\varphi_{i\nu\alpha}, \varphi_{i'\nu'\alpha'}), \quad (5.33)$$

где скобками обозначено инвариантное скалярное произведение. Если представление, реализующееся на элементах $\varphi_{i\nu\alpha}$, унитарно, то так же, как и для матрицы гамильтониана, условие инвариантности может быть записано в виде

$$SD(g) = D(g)S, \quad (5.34)$$

откуда согласно (5.30) мы получим

$$S_{i\nu\alpha, i'\nu'\alpha'} = (\varphi_{i\nu\alpha}, \varphi_{i'\nu'\alpha'}) = S_{\nu\nu'}^{(i)} \delta_{ii'} \delta_{\alpha\alpha'}, \quad (5.35)$$

где $\|S_{\nu\nu'}^{(i)}\|$ — некоторая матрица, порядок которой равен кратности i -го неприводимого представления в представлении D . Соотношение (5.35) выражает свойство ортогональности элементов базисов, соответствующих неэквивалентным представлениям, и различных элементов базиса каждого неприводимого представления. Неортогональными могут остаться лишь соответственные элементы базисов эквивалентных

неприводимых представлений, причем скалярные произведения всех соответственных элементов двух эквивалентных неприводимых представлений должны совпадать. Заметим, что ортогональность элементов базисов неэквивалентных неприводимых представлений сохранится также и для неунитарного представления.

Глава VI

Точечные группы

Точечными группами называют конечные подгруппы группы $O(3)$, группы ортогональных преобразований в трехмерном пространстве. В физических приложениях точечные группы используются для описания симметрии молекул. Кроме того, знание точечных групп необходимо для исследования свойств симметрии кристаллов. Наши наглядные представления о симметрии геометрических фигур (призмы, куба, тетраэдра и т. д.) связаны со свойством совместимости этих фигур при преобразованиях, принадлежащих точечным группам. В этой главе мы рассмотрим точечные группы и их неприводимые представления. Полученные результаты будут применены для классификации электронных и колебательных состояний молекул.

1. Элементы точечных групп

Элементами точечных групп являются некоторые вращения трехмерного пространства, а также вращения, сопровождаемые инверсией. Мы знаем (см. упр. 1.1), что любой элемент группы вращений можно представить как поворот на некоторый угол φ вокруг определенной оси. Если группе принадлежит поворот на угол φ , то ей принадлежит и поворот на угол $k\varphi$, где k — произвольное целое положительное или отрицательное число. Поэтому в конечной группе угол φ должен быть рациональной частью 2π . Если наименьший угол поворота вокруг некоторой оси равен $\frac{2\pi}{n}$, то такую ось называют осью n -го порядка. Преобразование поворота на угол $\frac{2\pi}{n}$ обозначают через C_n или $C_k\left(\frac{2\pi}{n}\right)$, где k — единичный вектор, направленный вдоль оси. Ясно, что если группа содержит поворот C_n , то она содержит также повороты $C_n^2, C_n^3, \dots, C_n^{n-1}$ на углы

$$\frac{2\pi}{n} \cdot 2, \frac{2\pi}{n} \cdot 3, \dots, \frac{2\pi}{n} (n-1). \quad (6.1)$$

Эти преобразования вместе с единичным элементом группы образуют абелеву подгруппу точечной группы.

Рассмотрим теперь элементы точечных групп, содержащие инверсию i . Преобразование инверсии переводит каждый вектор \mathbf{r} в вектор $-\mathbf{r}$. Так как матрица этого преобразования кратна единичной, то оно коммутирует с любым другим ортогональным преобразованием.

Составим преобразование $iC_k(\pi)$. Очевидно, что последовательное применение инверсии и поворота на угол π вокруг некоторой оси эквивалентно зеркальному отражению в плоскости, перпендикулярной к оси вращения. Преобразование отражения в плоскости, перпендикулярной к вектору k , обозначают обычно через σ_k . Для произвольного поворота на угол φ , сопровождаемого инверсией, мы имеем

$$iC_k(\varphi) = iC_k(\pi + (\varphi - \pi)) = \sigma_k C_k(\varphi - \pi). \quad (6.2)$$

Преобразование $\sigma_k C_k(\varphi)$ называют *зеркальным поворотом* и обозначают через $S_k(\varphi)$. Таким образом, элементами точечных групп являются повороты и зеркальные повороты.

Рассмотрим теперь, какие элементы точечной группы могут входить в один класс. С этой целью составим элемент, сопряженный с элементом $C_k(\varphi)$:

$$gC_k(\varphi)g^{-1}, \quad (6.3)$$

где g — произвольный элемент точечной группы (т. е. поворот или зеркальный поворот). Рассмотрим сначала случай, когда g — поворот. Пусть

$$gk = f \quad (6.4)$$

и, следовательно,

$$g^{-1}f = k. \quad (6.5)$$

Поворот g^{-1} всегда можно представить себе как поворот $R(k, f)$, совмещающий вектор f с вектором k , вокруг оси, перпендикулярной к плоскости этих векторов, и последующий поворот на некоторый угол α вокруг вектора k :

$$g^{-1} = C_k(\alpha)R(k, f). \quad (6.6)$$

Поэтому элемент, сопряженный с элементом $C_k(\varphi)$, может быть записан в виде

$$\begin{aligned} gC_k(\varphi)g^{-1} &= R^{-1}(k, f)C_k^{-1}(\alpha)C_k(\varphi)C_k(\alpha)R(k, f) = \\ &= R^{-1}(k, f)C_k(\varphi)R(k, f). \end{aligned} \quad (6.7)$$

Это преобразование можно интерпретировать как первоначальное совмещение оси f с осью k , затем поворот вокруг оси k на угол φ и затем обратный переход от оси k к оси f . В результате мы, таким образом, получаем преобразование поворота на угол φ вокруг оси f :

$$gC_k(\varphi)g^{-1} = C_f(\varphi) = C_{gk}(\varphi). \quad (6.8)$$

Аналогично можно показать, что

$$gS_k(\varphi)g^{-1} = S_{gk}(\varphi). \quad (6.9)$$

Если же g — зеркальный поворот, то мы имеем следующие равенства:

$$\left. \begin{aligned} gC_k(\varphi)g^{-1} &= C_{-gk}(\varphi), \\ gS_k(\varphi)g^{-1} &= S_{-gk}(\varphi). \end{aligned} \right\} \quad (6.10)$$

Из рассмотрения этих соотношений можно сделать следующие выводы:

1) Каждый класс точечной группы состоит из поворотов или зеркальных поворотов на один и тот же угол.

2) В каждый класс входят лишь те повороты или зеркальные повороты на один и тот же угол, оси которых могут быть совмещены с помощью преобразований, принадлежащих группе. При этом следует иметь в виду, что если g — зеркальный поворот, то ось k переходит в ось $-gk$. В частности, отсюда следует, что повороты на углы φ и $-\varphi$ вокруг некоторой оси принадлежат одному и тому же классу, если группа содержит плоскость отражения, проходящую через ось.

2. Классификация точечных групп

Каждой точечной группе можно сопоставить некоторое геометрическое тело, обладающее соответствующей симметрией. К таким телам относятся, в частности, правильные многогранники, т. е. многогранники, все грани которых представляют собой одинаковые правильные многоугольники. Из всего множества правильных n -угольников только треугольник, квадрат и пятиугольник могут служить гранями правильного многогранника. Существует пять правильных многогранников: тетраэдр, куб, октаэдр, додекаэдр и икосаэдр. Тетраэдр образован четырьмя треугольниками, куб — шестью квадратами, октаэдр — восемью треугольниками, додекаэдр — двенадцатью пятиугольниками и, наконец, икосаэдр — двадцатью треугольниками. Этим исключительным фигурам соответствуют, однако, не пять точечных групп, а лишь три. Куб и октаэдр так же, как додекаэдр и икосаэдр, взаимно сопряжены, т. е. могут быть получены друг из друга соединением середин смежных граней. Ясно, что каждой такой паре сопряженных многогранников соответствует одна и та же группа. Эти три группы не исчерпывают всей совокупности точечных групп, полную классификацию которых, следуя Вейлю¹⁾, мы получим далее.

Ограничимся сначала подгруппами собственной ортогональной группы, т. е. группы вращений. Будем характеризовать каждое вращение осью и углом поворота. Рассмотрим сферу, центр которой совпадает с центром вращения. Очевидно, что для любого вращения две точки этой сферы, через которые проходит ось вращения, будут оставаться на месте. Назовем эти точки *полюсами*, соответствующими

¹⁾ Weyl H. Symmetry. Princeton Univ. Press. — Princeton, New Jersey, 1952 (Вейль Г. Симметрия. М.: Наука, 1961).

данному вращению. Если ось вращения является осью n -го порядка, то ее полюсы будем называть *полюсами n -го порядка*.

Сколько полюсов может иметь точечная группа и каковы их порядки? Решение этой задачи позволит получить классификацию точечных групп, состоящих из собственных вращений.

Пусть точечная группа G имеет полюс P порядка n . Обозначим циклическую подгруппу группы G , состоящую из вращений вокруг оси, проходящей через этот полюс, через H .

Разложим группу G на сопряженные совокупности по подгруппе H (см. (2.3)):

$$G = \{H, g_1H, g_2H, \dots, g_{m-1}H\}. \quad (6.11)$$

Любой из элементов группы G либо оставляет полюс P на месте, либо переводит в некоторый другой полюс. Очевидно, что каждый из элементов сопряженной совокупности g_iH переводит полюс P в один и тот же полюс P_i , причем все полюсы P_i различны. Действительно, если бы оказалось, например, что $P_1 = P_2$, то $g_1^{-1}g_2 \in H$ и, следовательно, $g_1 \in g_2H$, что невозможно (см. п. 4 главы II). Подгруппа $g_iHg_i^{-1}$, оставляющая на месте полюс P_i , подобна подгруппе H . Будем говорить, что полюсы P, P_1, \dots, P_{m-1} образуют *звезду эквивалентных полюсов*, порожденную полюсом P . Ясно, что все полюсы, составляющие звезду, имеют одинаковый порядок. Теперь легко получить связь между числом m полюсов в звезде и их порядком n . В соответствии с (6.11) имеем:

$$mn = N, \quad (6.12)$$

где N — порядок группы G .

Рассмотрим пары (P, g) , первый элемент которых обозначает полюс, второй — преобразование, отличное от тождественного, оставляющее этот полюс на месте. Подсчитаем число таких пар. Это можно сделать двумя способами. Так как каждое преобразование g имеет только два полюса, то искомое число равно $2(N - 1)$. С другой стороны, для каждой звезды эквивалентных полюсов число таких пар будет, очевидно, равно $(n_k - 1)m_k$, где значок k нумерует различные звезды полюсов, принадлежащие группе G . Поэтому имеет место равенство

$$(N - 1) \cdot 2 = \sum_k (n_k - 1)m_k. \quad (6.13)$$

Принимая во внимание (6.12), получим

$$2 - \frac{2}{N} = \sum_k \left(1 - \frac{1}{n_k}\right). \quad (6.14)$$

Так как числа N и n не могут быть меньше 2, то сумма в правой части равенства (6.14) может содержать только два или три слагаемых.

Поэтому точечная группа вращений может иметь только две или три звезды полюсов.

Если группа имеет две звезды эквивалентных полюсов, то уравнение (6.14) преобразуется к виду

$$\frac{2}{N} = \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2}. \quad (6.15)$$

Единственным решением этого уравнения будет $n_1 = n_2 = N$. Число полюсов в каждой из двух звезд, согласно (6.12), равно 1, и, следовательно, всего имеем два полюса. Соответствующая группа C_n состоит из поворотов вокруг одной оси на углы, кратные $2\pi/N$.

Если группа имеет три звезды полюсов, то из (6.14) получаем

$$1 + \frac{2}{N} = \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3}. \quad (6.16)$$

Очевидно, что по крайней мере одно из чисел n_i должно быть равно 2. Действительно, если все n_i были бы больше или равны 3, то сумма в правой части (6.16) не могла бы быть больше 1. Не нарушая общности, будем считать, что $n_1 \leq n_2 \leq n_3$. Следовательно, $n_1 = 2$. Таким образом, имеем

$$\frac{1}{2} + \frac{2}{N} = \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3}. \quad (6.17)$$

Из этого равенства следует, что $n_2 \leq 3$. Теперь нетрудно перечислить все решения уравнения (6.16):

1. $n_1 = 2, \quad n_2 = 2, \quad n_3 = N/2, \quad N - \text{четное};$
 2. $n_1 = 2, \quad n_2 = 3, \quad n_3 = 3, \quad N = 12;$
 3. $n_1 = 2, \quad n_2 = 3, \quad n_3 = 4, \quad N = 24;$
 4. $n_1 = 2, \quad n_2 = 3, \quad n_3 = 5, \quad N = 60.$
- (6.18)

Первому решению соответствует группа симметрии правильной n -угольной призмы. Она имеет два полюса, через которые проходит ось порядка $n = N/2$ и две звезды полюсов по $N/2$ полюса в каждой, через которые проходят оси второго порядка, перпендикулярные к оси призмы (группа D_n).

Второе решение соответствует группе вращений тетраэдра (группа T): четыре оси третьего порядка и три оси второго порядка.

Третье решение дает нам группу вращений куба или октаэдра (группа O): шесть осей второго порядка, четыре оси третьего порядка и три оси четвертого порядка.

Наконец, последнее решение соответствует группе додекаэдра или икосаэдра (группа Y): пятнадцать осей второго порядка, соединяющих

середины противоположных ребер, десять осей третьего порядка, соединяющих противоположные вершины, и шесть осей пятого порядка, соединяющих середины противоположных граней додекаэдра.

Таким образом, мы получаем классификацию всех конечных подгрупп собственных ортогональных преобразований:

C_n — группа симметрии правильной n -угольной пирамиды, $N = n$;

D_n — группа симметрии правильной n -угольной призмы, $N = 2n$;

T — группа симметрии тетраэдра, $N = 12$;

O — группа симметрии октаэдра, $N = 24$;

Y — группа симметрии икосаэдра и додекаэдра, $N = 60$.

Проведем теперь классификацию всех несобственных точечных групп. Ясно, что собственные преобразования такой точечной группы A_1, A_2, \dots, A_q образуют одну из рассмотренных выше собственных групп. Пусть B_1, B_2, \dots, B_p — совокупность всех несобственных преобразований данной точечной группы. Очевидно, что число элементов в совокупностях A и B должно совпадать, т. е. $p = q$. Действительно, умножением всех элементов совокупностей A и B на любой из несобственных элементов мы меняем эти совокупности местами. Если среди элементов B имеется инверсия i , то вся группа может быть представлена в виде прямого произведения $A \times I$, где I — группа инверсии, которая состоит из двух элементов: E и i . Если же среди элементов B инверсии нет, то элементы B могут быть представлены в виде $B = iM$, причем совокупности A и M образуют вместе одну из точечных групп G собственных преобразований, для которых группа A является подгруппой индекса 2. Группы такого типа удобно обозначать как пару собственных точечных групп (G, A) . Таким образом, наряду с собственными точечными группами C_n, D_n, T, O, Y , мы имеем несобственные точечные группы следующих типов:

$$C_n \times I, \quad D_n \times I, \quad T \times I, \quad O \times I, \quad Y \times I, \\ (C_{2n}, C_n), \quad (D_n, C_n), \quad (D_{2n}, D_n), \quad (O, T).$$

Поскольку инверсия коммутирует с любым преобразованием, то очевидно, что группа (G, A) изоморфна группе G . Подводя итог, можно сформулировать следующую теорему:

Любая точечная группа (собственная или несобственная) изоморфна либо одной из собственных точечных групп (C_n, D_n, T, O, Y) , либо прямому произведению одной из указанных групп на группу инверсии.

3. Неприводимые представления точечных групп

Установив число классов группы, мы одновременно определяем число ее неприводимых представлений. Порядки их можно найти из соотношения (3.81). Для определения характеров неприводимых

представлений могут быть использованы соотношения ортогональности (3.86) и уравнения (3.107). Ниже мы приведем таблицы характеров неприводимых представлений точечных групп, встречающихся в приложениях. Мы будем обозначать неприводимые представления первого порядка буквами A и B , представление второго порядка — буквой E , представление третьего порядка — буквой F . Комплексно сопряженные представления первого порядка мы будем объединять в пары и каждую пару также обозначать буквой E .

I. Группа C_n . В эту группу входят повороты C_n^k на углы $\frac{2\pi}{n}k$ относительно некоторой оси n -го порядка. Группа C_n является одной из реализаций абстрактной циклической группы n -го порядка. Так как C_n — абелева группа, то все ее неприводимые представления первого порядка. Они определяются числами

$$1, \varepsilon_1, \varepsilon_1^2, \dots, \varepsilon_1^{n-1},$$

где $\varepsilon_1 = \exp \frac{2\pi i}{n}$ есть l -й корень уравнения $\varepsilon^n = 1$. Приведем таблицы характеров неприводимых представлений для групп C_2 , C_3 и C_4 :

C_2	E	C_2	C_3	E	C_3	C_3^2	C_4	E	C_4	C_4^2	C_4^3
A_1	1	1	A	1	1	1	A	1	1	1	1
A_2	1	-1	E	1	ε_1	ε_1^2	B	1	-1	1	-1
				1	ε_1^2	ε_1	E	1	i	-1	- i
								1	- i	-1	i

Группа C_2 изоморфна группе инверсии I . Четное (A_1) и нечетное (A_2) неприводимые представления последней обозначают через A_g и A_u (значки g и u происходят от немецких слов «gerade» и «ungerade» — четный, нечетный).

II. Группа C_{nh} . Кроме элементов группы C_n в нее входит отражение σ_h в плоскости, перпендикулярной к оси вращения, и всевозможные произведения вращений на это отражение; всего $2n$ элементов. Элементы E и σ_h образуют подгруппу σ_h группы C_{nh} , изоморфную группе I . Абелева группа C_{nh} может рассматриваться как прямое произведение группы C_n и группы σ_h : $C_{nh} = C_n \times \sigma_h$. В соответствии с правилом построения неприводимых представлений прямого произведения групп, рассмотренном в п. 4 главы IV, неприводимые представления группы C_{nh} могут быть получены из неприводимых представлений группы C_n прямым умножением последних на A_g либо A_u . В результате число неприводимых представлений удваивается и они подразделяются на два класса — четные и нечетные. Таким образом, группа C_{nh} имеет $2n$ неприводимых представлений первого порядка. Смотри по тому, с каким из двух неприводимых представлений группы σ_h (четным или нечетным) перемножаются представления

группы C_n , обозначениям неприводимых представлений группы C_{nh} приписываются индексы g или u . Например, для группы C_{2h} мы имеем следующие неприводимые представления:

C_{2h}	E	C_2	σ_h	$\sigma_h \cdot C_2$
A_g	1	1	1	1
B_g	1	-1	-1	1
A_u	1	1	-1	-1
B_u	1	-1	1	-1

Эта таблица получается из таблицы характеров группы C_2 добавлением двух столбцов, соответствующих классам, содержащим отражение. Характеры этих классов такие же, как характеры классов группы C_2 для четных представлений, и отличаются знаком для нечетных. Если n — четное число, то инверсия $i = C(\pi)\sigma_h$ является элементом группы C_{nh} , и в этом случае $C_{nh} = C_n \times i$. При n — нечетном, C_{nh} представляется как пара (C_{2n}, C_n) и, следовательно, изоморфна группе C_{2n} . При этом повороте на угол $\frac{2\pi}{n}m$, сопровождаемому отражением, $C(\frac{2\pi}{n}m)\sigma_h$ в группе C_{nh} сопоставляется поворот $C(\frac{\pi}{n}(2m+1))$ в группе C_{2n} .

III. Группа C_{nv} . Кроме элементов, входящих в C_n , она содержит еще отражения σ_{vs} , $s = 1, 2, \dots, n$, в n плоскостях, проходящих через ось n -го порядка и образующих угол $\frac{\pi}{n}$ друг с другом. Это группа симметрии правильной n -угольной пирамиды, высота которой служит осью симметрии n -го порядка. Группа C_{nv} неабелева. Действительно, легко показать, что

$$C_n^k \sigma_v = \sigma_v C_n^{-k}, \quad (6.19)$$

где σ_v — отражение относительно любой из n плоскостей. Согласно классификации несобственных точечных групп, проведенной в п. 2 этой главы, группа σ_v может быть представлена как пара (D_n, C_n) и, следовательно, изоморфна группе D_n . При этом отражению σ_v в группе D_n сопоставляется поворот вокруг оси второго порядка.

Подсчитаем число классов группы C_{nv} . Элементы C_n^k и C_n^{-k} входят в один класс, и поэтому, если n четное, то элементы подгруппы C_n распадаются на $\frac{n}{2} + 1$ классов, а если n нечетное, то на $\frac{n+1}{2}$ классов. Все отражения входят в один класс, если n нечетное. В этом случае все плоскости отражения могут быть получены из одной поворотами на $\frac{2\pi}{n}$.

Если n четное, то поворотами на $\frac{2\pi}{n}$ мы получим только половину всех плоскостей отражения, и, следовательно, отражения распадаются на два класса. Таким образом, в случае четного n элементы группы распадаются на $\frac{n}{2} + 3$ классов, а в случае нечетного n — на $\frac{n+3}{2}$ классов.

Неприводимые представления группы можно построить следующим образом. Рассмотрим базисные элементы ψ_l ($l = 0, 1, 2, \dots, n-1$)

неприводимых представлений первого порядка группы C_n . Обозначая оператор представления, соответствующий элементу C_n^k , через \widehat{C}_n^k , мы можем написать

$$\widehat{C}_n^k \psi_l = e^{\frac{2\pi k l}{n}} \psi_l. \quad (6.20)$$

Наряду с элементами ψ_l рассмотрим элементы ψ_{-l} , определив их соотношением

$$\sigma_v \psi_l = \psi_{-l}. \quad (6.21)$$

Элементы ψ_l и ψ_{-l} образуют двумерное инвариантное подпространство для группы C_{nv} . Действительно, используя (6.19), легко показать, что $\widehat{C}_n^k \psi_{-l} = e^{-\frac{2\pi k l}{n}} \psi_{-l}$. Следовательно, элемент ψ_{-l} линейно независим с ψ_l , если $l \neq 0$ и $l \neq \frac{n}{2}$ при n четном и если $l \neq 0$ при n нечетном. Таким образом, в случае четного n имеется $n - 2$ двумерных представлений группы C_{nv} , даваемых матрицами

$$\left. \begin{aligned} E &\sim \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & C_n^k &\sim \begin{pmatrix} e^{i\frac{2\pi k l}{n}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{2\pi k l}{n}} \end{pmatrix}, \\ \sigma_v &\sim \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & l &= 1, 2, \dots, \frac{n}{2} - 1, \frac{n}{2} + 1, \dots, n - 1. \end{aligned} \right\} \quad (6.22)$$

Очевидно, совокупности матриц, соответствующих элементам C_n^k и C_n^{-k} , входящим в один класс, совпадают в m -м и в $(n - m)$ -м представлениях, и, следовательно, мы таким путем получаем $\frac{n}{2} - 1$ неэквивалентных представлений второго порядка. Оставшиеся четыре неприводимых представления — первого порядка.

Если n нечетное, то из (6.22) мы получаем $n - 1$ двумерных неприводимых представлений, среди которых $\frac{n-1}{2}$ неэквивалентных.

Кроме того, в этом случае будем иметь два неприводимых представления первого порядка. Для иллюстрации приведем таблицы характеров неприводимых представлений групп C_{3v} и C_{4v} :

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$	C_{4v}	E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma'_v$
A_1	1	1	1	A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	0	B_1	1	1	-1	1	-1
				B_2	1	1	-1	-1	1
				E	2	-2	0	0	0

IV. Группа S_{2n} . Элементами этой группы являются степени зеркального поворота $S_{2n} = \sigma_h C \left(\frac{\pi}{n} \right)$:

$$E, S_{2n}, S_{2n}^2, \dots, S_{2n}^{2n-1}. \quad (6.23)$$

Таким образом, S_{2n} — циклическая группа порядка $2n$. Четные степени S_{2n} образуют подгруппу, совпадающую с группой C_n . В целом группа S_{2n} (как циклическая) изоморфна группе C_{2n} . При нечетном n она содержит инверсию,

$$\sigma_h \left[C \left(\frac{\pi}{n} \right) \right]^n = \sigma_h C(\pi) = i,$$

и ее можно также представить в виде прямого произведения $C_{2n} \times I$. При нечетном n группа S_{2n} представима в виде пары (C_{2n}, C_n) .

V. Группа D_n . Кроме элементов группы C_n в нее входят повороты на угол π относительно n осей, перпендикулярных к оси n -го порядка. Это группа поворотов, совмещающих правильную n -угольную призму саму с собой. Как уже отмечалось выше, группа D_n изоморфна группе C_{nv} . Повороту второго порядка в группе D_n соответствует отражение в плоскости в группе C_v . Следовательно, неприводимые представления этих групп совпадают.

VI. Группа D_{nh} — группа симметрии правильной n -угольной призмы. Кроме поворотов, входящих в группу D_n , она содержит еще n зеркальных поворотов вокруг оси n -го порядка и n отражений в плоскостях, проходящих через ось n -го и оси второго порядка; всего $4n$ элементов. Легко написать таблицу характеров этой группы, приняв во внимание, что

$$D_{nh} = D_n \times \sigma_h, \quad \text{если } n \text{ нечетное}$$

и

$$D_{nh} = D_n \times i, \quad \text{если } n \text{ четное.}$$

При нечетном n группа D_{nh} представима как пара (D_{2n}, D_n) и поэтому изоморфна группе D_{2n} .

VII. Группа D_{nd} — группа симметрии тела, состоящего из двух правильных n -угольных призм, поставленных друг на друга и повернутых одна относительно другой на угол $\frac{\pi}{n}$. При нечетном n имеем

$$D_{nd} = D_n \times I.$$

При четном n

$$D_{nd} = (D_{2n}, D_n).$$

Следовательно, в последнем случае группа D_{nd} изоморфна группе D_{2n} .

VIII. Группа T содержит все повороты, совмещающие правильный тетраэдр сам с собой. Через вершины тетраэдра (и центр противоположной грани) проходят оси третьего порядка, а через середины каждой пары непересекающихся ребер — оси второго порядка. Двенадцать элементов группы — единичный элемент, четыре поворота на $\frac{2\pi}{3}$,

четыре поворота на $\frac{4\pi}{3}$ и три поворота на π — распадаются на четыре класса. Поэтому группа T имеет четыре неприводимых представления, порядки которых удовлетворяют соотношению (3.81):

$$1^2 + 1^2 + 1^2 + 3^2 = 12.$$

T	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$
A	1	1	1	1
E	1	1	ϵ	ϵ^2
F	3	-1	0	0

Здесь $\epsilon = e^{\frac{2\pi i}{3}}$.

IX. Группа O содержит все повороты, совмещающие куб сам с собой. 24 элемента этой группы распадаются на пять классов: элемент E ; три поворота на угол π вокруг осей, проходящих через середины противоположных граней; шесть поворотов на углы $\pm \frac{\pi}{2}$ относительно тех же осей; шесть поворотов на угол π вокруг осей, проходящих через середины противоположных ребер; восемь поворотов на угол $\frac{2\pi}{3}$ вокруг осей, проходящих через противоположные вершины куба. Таким образом, группа O имеет пять неприводимых представлений, порядки которых удовлетворяют соотношению

$$1^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 = 24.$$

Таблица характеров этих представлений имеет вид

O	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$
T_d	E	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$	$8C_3$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1	1
E	2	2	0	0	-1
F_1	3	-1	1	-1	0
F_2	3	-1	-1	1	0

X. Группа T_d — группа симметрии тетраэдра. Она состоит из 24 элементов, распадающихся на пять классов. Кроме поворотов, входящих в группу T , группа T_d содержит шесть отражений в плоскостях, проходящих через две вершины и середину третьей стороны, и шесть зеркальных поворотов относительно трех осей второго порядка. Группа T_d может быть представлена как пара (O, T) и, следовательно, изоморфна группе O . Поэтому неприводимые представления этих групп совпадают, что отражено в выше приведенной таблице характеров.

XI. Группа $T_h = T \times i$.

XII. Группа O_h — группа симметрии куба — представляет собой прямое произведение группы O на группу инверсии:

$$O_h = O \times I. \quad (6.24)$$

Поэтому группа O_h имеет 48 элементов и 10 неприводимых представлений. Пять из них являются прямым произведением матриц неприводимых представлений группы O на матрицы тождественного представления группы I . Эти представления, симметричные по отношению к инверсии, обозначают через $A_1^{(g)}, A_2^{(g)}, E^{(g)}, F_1^{(g)}, F_2^{(g)}$ или Γ_i , $i = 1, 2, \dots, 5$. Остальные пять представлений получаем, умножая представления группы O на антисимметричное представление группы I . Эти антисимметричные по отношению к инверсии представления обозначают через $A_1^{(u)}, A_2^{(u)}, E^{(u)}, F_1^{(u)}, F_2^{(u)}$ или через Γ'_i , $i = 1, 2, \dots, 5$.

Мы не будем здесь останавливаться на описании неприводимых представлений групп Y и $Y_h = Y \times I$ ввиду их ограниченного применения в физике.

В заключение этого параграфа приведем сводный список всех точечных групп.

Собственные точечные группы

$$C_n, D_n, T, O, Y$$

Несобственные точечные группы

$$\begin{array}{ll} C_{nh} = C_n \times I & \text{при } n \text{ четном,} & C_{nh} = (C_{2n}, C_n) & \text{при } n \text{ нечетном,} \\ S_{2n} = C_n \times I & \text{при } n \text{ нечетном,} & S_{2n} = (C_{2n}, C_n) & \text{при } n \text{ четном,} \\ D_{nh} = D_n \times I & \text{при } n \text{ четном,} & C_{nv} = (D_n, C_n), & \\ D_{nd} = D_n \times I & \text{при } n \text{ нечетном,} & D_{nd} = (D_{2n}, D_n) & \text{при } n \text{ четном,} \\ T_h = T \times I, & & D_{nh} = (D_{2n}, D_n) & \text{при } n \text{ нечетном,} \\ O_h = O \times I, & & T_d = (O, T) & \\ Y_h = Y \times I, & & & \end{array}$$

Принимая во внимание изоморфизм группы, представляемой парой, первому компоненту пары и правило получения представлений групп, имеющих структуру прямого произведения, можно заключить, что для построения неприводимых представлений всех точечных групп фактически достаточно знание неприводимых представлений только собственных точечных групп.

4. Классификация нормальных колебаний и электронных состояний молекулы

В предыдущей главе мы показали, что электронные состояния квантовомеханической системы, а также нормальные координаты системы,

совершающей малые колебания, можно классифицировать по неприводимым представлениям групп симметрии этих систем.

Рассмотрим задачу о классификации нормальных колебаний молекулы. Мы будем рассматривать молекулу как систему материальных частиц (ядер), совершающих малые колебания относительно положений равновесия, образующих некоторую симметричную конфигурацию. Мы знаем, что нормальные координаты такой системы, соответствующие одной собственной частоте, преобразуются по неприводимым представлениям группы симметрии, в нашем случае точечной группы молекулы. Порядок вырождения частот равен порядку соответствующего неприводимого представления. Для определения свойств симметрии нормальных координат и кратности вырождения собственных частот надо представление D , по которому преобразуются составляющие смещений частиц x_i , разложить на неприводимые части. Мы знаем, что число, показывающее, сколько раз неприводимое представление матрицами $D^{(i)}$ содержится в данном приводимом представлении, определяется по формуле

$$r_i = \frac{1}{m} \sum_g \bar{\chi}(g) \chi^{(i)}(g), \quad (6.25)$$

где $\chi^{(i)}(g)$ — характер неприводимого представления $D^{(i)}$ точечной группы, который можно считать известным, $\chi(g)$ — характер приводимого представления, а m — порядок группы.

Как найти характеры приводимого представления D , которое реализуется на смещениях x_i ?

Очевидно, для этого нам надо подсчитать следы матриц преобразования смещений x_1, x_2, \dots, x_{3N} (N — число ядер молекулы) в смещения $x'_1, x'_2, \dots, x'_{3N}$ при применении к ним операций g из группы симметрии молекулы. Вид матриц D был определен нами в главе V (см. формулу (5.22)). Если положение равновесия ядра «а» переходит при некотором преобразовании симметрии в положение равновесия другого, эквивалентного ему ядра «б», то ясно, что на диагонали в строках матрицы представления, соответствующих смещениям ядра «а», мы получим нули. Отличный от нуля вклад дадут лишь те ядра, которые при этом преобразовании переходят сами в себя. При этом, если преобразование g представляет собой поворот на угол φ , то декартовы составляющие смещения каждого из таких ядер будут преобразовываться (с точностью до подобного преобразования) с помощью матрицы

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (6.26)$$

след которой равен $1 + 2 \cos \varphi$.

Для зеркального поворота на угол φ матрица преобразования имеет вид

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad (6.27)$$

след ее равен $-1 + 2 \cos \varphi$.

Суммируя эти результаты, можно сделать заключение, что характер представления, соответствующий элементу g точечной группы, равен

$$\left. \begin{aligned} \chi(g) &= n_g(1 + 2 \cos \varphi), & \text{если } g \text{ — поворот,} \\ \chi(g) &= n_g(-1 + 2 \cos \varphi), & \text{если } g \text{ — зеркальный поворот,} \end{aligned} \right\} \quad (6.28)$$

где n_g — число ядер, остающихся на месте при рассматриваемом преобразовании g . Подставляя эти выражения для характеров в формулу (6.25), мы выясним, по каким приводимым представлениям точечной группы преобразуются нормальные координаты рассматриваемой молекулы. Зная порядок каждого неприводимого представления, определим порядки вырождения собственных частот.

Среди рассмотренных $3N$ степеней свободы три степени свободы описывают поступательное движение молекулы и три степени свободы — вращение молекулы как целого. Так как мы рассматриваем малые смещения ядер, то соответственно мы имеем малое поступательное движение и малый поворот молекулы. Эти степени свободы и соответствующие им представления должны быть исключены из нашего рассмотрения. Смещения ядер молекулы, соответствующие этим степеням свободы, могут быть представлены в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_i &= \mathbf{a} && \text{(поступательное движение),} \\ \mathbf{r}_i &= [\varphi \mathbf{R}_i^{(0)}] && \text{(малый поворот),} \end{aligned}$$

где \mathbf{a} — вектор поступательного смещения; φ — аксиальный вектор малого поворота относительно оси, проходящей через начало координат; вектор $\mathbf{R}_i^{(0)}$ определяет положение равновесия i -го ядра. Составляющие векторов \mathbf{a} и φ можно рассматривать как нормальные координаты, соответствующие поступательному движению и повороту молекулы как целого. При преобразованиях вращения вектор \mathbf{a} и вектор φ преобразуются как обычные векторы трехмерного пространства. Характеры соответствующих матриц преобразования равны

$$1 + 2 \cos \varphi.$$

При зеркальном повороте характеры преобразований векторов \mathbf{a} и φ соответственно равны

$$\begin{aligned} -1 + 2 \cos \varphi & \quad \text{(для вектора } \mathbf{a}), \\ -1 - 2 \cos \varphi & \quad \text{(для аксиального вектора } \varphi). \end{aligned}$$

Если учесть эти замечания, то для характера представления, которое соответствует только колебательным степеням свободы, мы получаем

$$\left. \begin{aligned} \chi(g) &= (n_g - 2)(1 + 2 \cos \varphi), & \text{если } g \text{ — поворот,} \\ \chi(g) &= n_g(-1 + 2 \cos \varphi), & \text{если } g \text{ — зеркальный поворот.} \end{aligned} \right\} (6.29)$$

Теперь вкратце остановимся на вопросе о классификации электронных состояний молекулы.

Если написать уравнение Шрёдингера для молекулы, считая ядра фиксированными в положениях равновесия, то можно утверждать, что собственные функции этого уравнения, т. е. многоэлектронные волновые функции, принадлежащие одному собственному значению, преобразуются по неприводимому представлению точечной группы молекулы. Кратность вырождения электронных уровней должна быть равна порядку неприводимого представления. Так, например, молекула NH_3 с симметрией C_{3v} имеет только или простые, или двукратно вырожденные электронные уровни.

Здесь мы ограничимся этим общим замечанием; конкретное применение теории представлений точечных групп к задаче рассмотрения электронных состояний молекулы связано с введением некоторых приближений. Мы вернемся к этому вопросу в следующей главе.

Упражнения

6.1. Определить типы симметрии нормальных координат и вырождение собственных частот для молекулы NH_3 , имеющей симметрию C_{3v} (рис. 2).

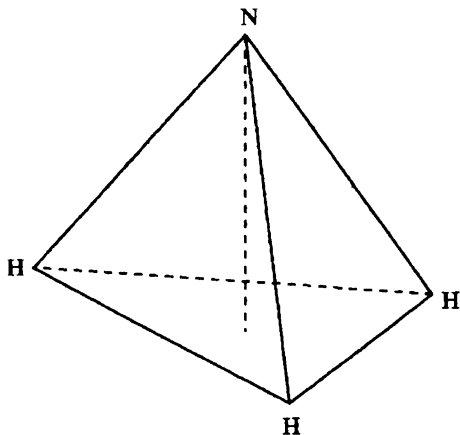


Рис. 2.

6.2. Написать таблицу характеров неприводимых представлений группы O_h .

Глава VII

Разложение приводимого представления на неприводимые

В предыдущей главе мы научились определять неприводимые представления, по которым должны преобразовываться нормальные координаты симметричной молекулы. Однако во многих задачах необходимо также знать явные выражения этих нормальных координат через смещения ядер. Задача определения нормальных координат значительно упрощается, если мы предварительно из смещений x_i ядер построим симметризованные смещения, т. е. найдем линейные комбинации смещений, преобразующиеся по неприводимым представлениям. Очевидно, набор таких линейных комбинаций, соответствующих одному неприводимому представлению, определяет некоторое инвариантное подпространство в пространстве переменных x_i . Таким образом, мы должны разложить базисное пространство некоторого приводимого представления на подпространства, неприводимые относительно преобразований группы симметрии системы. Аналогичная задача возникает в квантовой механике при построении приближенных волновых функций молекул. Покажем, как решается эта задача. Наше рассмотрение имеет общий характер, т. е. относится не только к точечным, но и к любым конечным группам.

1. Построение базисов неприводимых представлений

Пусть совокупность элементов $\{\psi_i\}$ (волновых функций или смещений) образует базис некоторого приводимого представления D группы G . Выберем из этого базиса один элемент, например ψ_1 , и применим к нему все операции \hat{T}_g , соответствующие преобразованиям g из группы G . Тогда мы получим цепочку элементов, преобразующихся друг через друга. Затем из совокупности $\{\psi_i\}$ элементов выберем элемент, который не содержится в этой цепочке (или, точнее, выберем элемент базиса, который был бы линейно независимым от элементов построенной цепочки). По этому новому элементу аналогично построим вторую цепочку и т. д.

Таким образом, мы получим некоторое предварительное разложение представления D . Это не будет полным разложением, так как представление, реализующееся в цепочке, вообще говоря, является приводимым. Поэтому теперь задача сводится к разложению представлений,

реализующихся в цепочках. Из построения цепочек следует, что такие представления не могут быть шире регулярного (см. главу III). Рассмотрим сначала случай, когда представление, реализующееся на цепочке, является регулярным. Действуя на базисный элемент ψ_1 всеми операциями симметрии, мы получим цепочку, состоящую из m линейно независимых элементов, где m — порядок группы G :

$$\widehat{T}_g \psi_1 = \psi_g \quad (\psi_1 = \psi_E). \quad (7.1)$$

Мы знаем, что в регулярное представление входят все неприводимые представления группы G , причем неприводимое представление $D^{(j)}$ порядка l_j входит l_j раз. Найдем ортонормированные базисы, преобразующиеся по неприводимому унитарному представлению $D^{(j)}$. Для этого построим оператор

$$\widehat{P}_{ik}^{(j)} = \sqrt{\frac{l_j}{m}} \sum_g \overline{D}_{ik}^{(j)}(g) \widehat{T}_g, \quad (7.2)$$

где $D_{ik}^{(j)}(g)$ — элемент матрицы этого представления, соответствующей операции g .

Покажем, что элементы

$$\varphi_{ik}^{(j)} = \widehat{P}_{ik}^{(j)} \psi_1 = \sqrt{\frac{l_j}{m}} \sum_g \overline{D}_{ik}^{(j)}(g) \psi_g \quad (7.3)$$

при фиксированном значке k образуют базис неприводимого представления $D^{(j)}$. Действительно, мы имеем

$$\begin{aligned} \widehat{T}_g \varphi_{ik}^{(j)} &= \widehat{T}_g \sqrt{\frac{l_j}{m}} \sum_{g'} \overline{D}_{ik}^{(j)}(g') \widehat{T}_{g'} \psi_1 = \sqrt{\frac{l_j}{m}} \sum_{g'} \overline{D}_{ik}^{(j)}(g') \widehat{T}_g \widehat{T}_{g'} \psi_1 = \\ &= \sqrt{\frac{l_j}{m}} \sum_{g''} \overline{D}_{ik}^{(j)}(g^{-1} g'') \widehat{T}_{g''} \psi_1 = \\ &= \sqrt{\frac{l_j}{m}} \sum_{g''} \sum_n \overline{D}_{in}^{(j)}(g^{-1}) \overline{D}_{nk}^{(j)}(g'') \widehat{T}_{g''} \psi_1 = \\ &= \sum_{n=1}^{l_j} \overline{D}_{in}^{(j)}(g^{-1}) \sqrt{\frac{l_j}{m}} \sum_{g''} \overline{D}_{nk}^{(j)}(g'') \widehat{T}_{g''} \psi_1 = \\ &= \sum_{n=1}^{l_j} \overline{D}_{in}^{(j)}(g^{-1}) \varphi_{nk}^{(j)} = \sum_{n=1}^{l_j} D_{ni}^{(j)}(g) \varphi_{nk}^{(j)}. \end{aligned} \quad (7.4)$$

Мы видим, что под действием операторов \widehat{T}_g элементы $\varphi_{1k}^{(j)}, \varphi_{2k}^{(j)}, \dots, \varphi_{l,k}^{(j)}$ преобразуются друг через друга с матрицами $D^{(j)}(g)$. Так как в силу свойств ортогональности матричных элементов неприводимых представлений матрица перехода от элементов ψ к элементам φ в формуле (7.3) является унитарной и, следовательно, неособой, то из независимости всех элементов цепочки следует независимость элементов $\varphi_{ik}^{(j)}$. Более того, если элементы ψ_g ортонормированы, то этим же свойством в силу унитарности преобразования будут обладать элементы $\varphi_{ik}^{(j)}$. Придавая значку k значения $1, 2, \dots, l_j$, мы получим l_j независимых базисов, преобразующихся по представлению $D^{(j)}$.

Если число независимых элементов ψ_g в цепочке меньше m , т. е. если представление, реализующееся на цепочке, уже, чем регулярное, то не все полученные базисы неприводимых представлений будут независимыми. Выделение независимых базисов представляет некоторую дополнительную задачу. Однако в случае точечных групп эта задача оказывается тривиальной. Упрощение задачи в этом случае связано с тем, что порядки неприводимых представлений точечных групп, встречающихся в приложениях, не превышают 3. Если неприводимое представление одномерно, то оно может встретиться в представлении не более одного раза и соответствующий ему базисный элемент находится с помощью единственного возможного оператора $\widehat{P}_{11}^{(j)}$. Двумерное неприводимое представление может встретиться не более двух раз. Если оно встретится два раза, то остается в силе рассмотрение, относящееся к регулярному представлению. Если один раз, то для получения базиса этого представления можно взять любую пару операторов $\widehat{P}_{11}^{(j)}, \widehat{P}_{21}^{(j)}$ или $\widehat{P}_{12}^{(j)}, \widehat{P}_{22}^{(j)}$, не приводящую к нулю при действии на выбранный элемент. Трехмерное представление может встретиться в D не более трех раз. Если оно встречается три раза, то необходимо использовать все три тройки операторов

$$\widehat{P}_{i1}^{(j)}, \widehat{P}_{i2}^{(j)}, \widehat{P}_{i3}^{(j)} \quad (i = 1, 2, 3).$$

Если оно встречается один раз, то достаточно взять ту тройку операторов, результат действия которых на элемент ψ дает отличный от нуля результат. Если же представление содержится два раза, то для получения базиса можно использовать любые две тройки операторов, дающие линейно независимые элементы.

Заметим, что для практического применения этого метода разложения приводимого представления на неприводимые требуется знание матриц неприводимых представлений соответствующей группы ¹⁾.

¹⁾ Таблицы матриц неприводимых представлений точечных групп см. в работе: Ледовская Е. М., Трифонов Е. Д. Вестник ЛГУ, № 10 (1962), 21.

2. Определение симметризованных смещений ядер молекулы

Для иллюстрации рассмотренного метода применим его для определения симметризованных смещений ядер молекулы UF_6 , обладающей симметрией группы O_h (рис. 3). Такая молекула имеет 21 степень свободы и, следовательно, 15 нормальных координат, соответствующих колебаниям. Применяя изложенный в предыдущей главе способ определения характеров представления D , которое реализуется на смещениях x_i, y_i, z_i , мы получим следующую таблицу ²⁾:

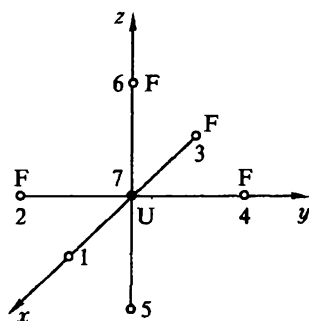


Рис. 3.

E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	i	$3C_4^2i$	$6C_4i$	$6C_2i$	$8C_3i$
21	-3	3	-1	0	-3	5	-1	3	0

Используя формулу (6.25) для определения структуры приводимого представления, мы с помощью таблицы характеров неприводимых представлений группы O_h (см. с. 77) находим

$$D = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_4' + 3\Gamma_5' + \Gamma_5. \quad (7.5)$$

Заметим, что в этом разложении содержатся также представления, по которым преобразуются координаты, описывающие смещения и поворот системы как целого.

Обратим внимание также на то, что симметризованные смещения для всех неприводимых представлений, кроме Γ_5' , будут одновременно и нормальными координатами, так как в разложение D каждое из неприводимых представлений, кроме Γ_5' , входит не более одного раза. Теперь мы можем приступить к нахождению симметризованных смещений. Вместо того чтобы рассматривать всю группу O_h , мы можем ограничиться рассмотрением подгруппы O , если предварительно заменить смещения x_i, y_i, z_i их симметричными и антисимметричными

²⁾ Здесь под смещениями x_i, y_i, z_i мы будем понимать единичные смещения, или орты, которые в главе V были обозначены через e_i .

относительно инверсии комбинациями:

Симметричные (четные) смещения			Антисимметричные (нечетные) смещения		
$x_1 - x_3$	$x_4 - x_2$	$x_6 - x_5$	$x_1 + x_3$	$x_2 + x_4$	$x_5 + x_6$
$y_1 - y_3$	$y_4 - y_2$	$y_5 - y_6$	$y_1 + y_3$	$y_2 + y_4$	
$z_1 - z_3$	$z_4 - z_2$	$z_6 - z_5$	$y_5 + y_6$	$z_1 + z_3$	
			$z_2 + z_4$	$z_5 + z_6$	
			x_7	y_7	z_7

(7.6)

Тогда базисные векторы четных представлений мы будем получать при действии операторов $\widehat{P}_{ik}^{(j)}$ на четные смещения, а базисные векторы нечетных представлений — при действии операторов $\widehat{P}_{ik}^{(j)}$ на нечетные смещения.

Таблица матриц неприводимых представлений группы O дана в приложении.

Подействуем операциями группы O на смещения (7.6), тогда мы получим следующие пять цепочек:

- I. $x_1 - x_3, z_6 - z_5, y_4 - y_2.$
- II. $y_1 - y_3, z_1 - z_3, y_5 - y_6, x_4 - x_2, z_4 - z_2, x_6 - x_5.$
- III. $x_7, y_7, z_7.$
- IV. $y_1 + y_3, z_1 + z_3, y_5 + y_6, x_4 + x_2, z_4 + z_2, x_5 + x_6.$
- V. $x_1 + x_3, z_6 + z_5, y_4 + y_2.$

Рассмотрим первую цепочку. Построим оператор $\widehat{P}_{11}^{(1)}$, соответствующий тождественному представлению Γ_1 :

$$\widehat{P}_{11}^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{24}} \sum_g \widehat{T}_g. \quad (7.7)$$

Действие этого оператора на любой из элементов первой цепочки, например $x_1 - x_3$, дает

$$\widehat{P}_{11}^{(1)}(x_1 - x_3) = \frac{1}{\sqrt{6}}(x_1 - x_3 + z_6 - z_5 + y_4 - y_2) \equiv q_1. \quad (7.8)$$

В главе V было показано, что связь между смещениями $\sqrt{m_k}x_k$ и координатами q_k осуществляется с помощью унитарного преобразования. Поэтому, если мы имеем

$$q_i = \sum_k b_{ik} x_k \sqrt{m_k} \quad (7.9)$$

(где для простоты записи значок k нумерует как атомы, так и декартовы составляющие), то

$$\mathbf{x}_k = \frac{1}{\sqrt{m_k}} \sum_i b_{ik} \mathbf{q}_i. \quad (7.10)$$

Из равенства (7.10) мы можем получить величины смещений атомов, которые соответствуют отдельным нормальным координатам. Полагая все координаты \mathbf{q}_i , кроме \mathbf{q}_s , равными нулю, мы получим

$$\bar{\mathbf{x}}_k = \frac{1}{\sqrt{m_k}} b_{sk} \mathbf{q}_s. \quad (7.11)$$

Так как атомы, соответствующие одной цепочке смещений, эквивалентны и, следовательно, имеют одинаковые массы, то по известным соотношениям (7.9) мы можем найти (с точностью до множителя $1/\sqrt{m}$) смещения (7.11). В частности, используя равенство (7.8), мы находим, что нормальная координата \mathbf{q}_1 соответствует полностью симметричному смещению, которое изображено на рис. 4.

Из трех независимых смещений первой цепочки можно построить еще две нормальные координаты, которые могут быть только базисными векторами двумерного представления Γ_3 , так как в разложении (7.5) нет больше симметричных одномерных или двумерных неприводимых представлений. Для определения этих двух нормальных координат подействуем на смещение $\mathbf{z}_6 - \mathbf{z}_5$ операторами $\hat{P}_{11}^{(3)}$ и $\hat{P}_{21}^{(3)}$. С помощью таблицы матричных элементов неприводимых представлений мы находим

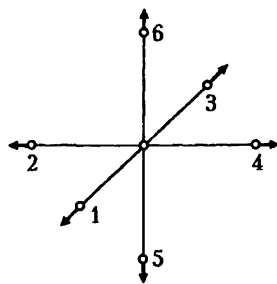


Рис. 4.

$$\hat{P}_{11}^{(3)}(\mathbf{z}_6 - \mathbf{z}_5) = \frac{1}{2}(\mathbf{z}_6 - \mathbf{z}_5 + \mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_4) = \mathbf{q}_2, \quad (7.12)$$

$$P_{21}^{(3)}(\mathbf{z}_6 - \mathbf{z}_5) = \frac{\sqrt{3}}{6}[2(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_3) + \mathbf{z}_5 - \mathbf{z}_6 + \mathbf{y}_2 - \mathbf{y}_4] = \mathbf{q}_3. \quad (7.13)$$

Смещения, соответствующие нормальным координатам \mathbf{q}_2 и \mathbf{q}_3 , изображены на рис. 5.

У нас осталась еще одна цепочка (II), в которой должны реализоваться симметричные представления Γ_4 и Γ_5 . Для определения соответствующих нормальных координат построим операторы $\hat{P}_{11}^{(4)}$

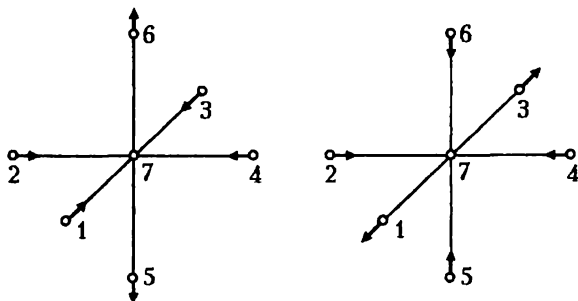


Рис. 5.

и $\widehat{P}_{i1}^{(5)}$ ($i = 1, 2, 3$) и подействуем ими, например, на смещение $y_6 - y_5$:

$$\left. \begin{aligned} \widehat{P}_{11}^{(4)}(y_6 - y_5) &= \frac{1}{2}(y_6 - y_5 + z_4 - z_2) = q_4, \\ \widehat{P}_{21}^{(4)}(y_6 - y_5) &= \frac{1}{2}(x_6 - x_5 + z_1 - z_3) = q_5, \\ \widehat{P}_{31}^{(4)}(y_6 - y_5) &= \frac{1}{2}(y_1 - y_3 + x_4 - x_2) = q_6; \end{aligned} \right\} \quad (7.14)$$

$$\left. \begin{aligned} \widehat{P}_{11}^{(5)}(y_6 - y_5) &= \frac{1}{2}(y_6 - y_5 + z_2 - z_4) = q_7, \\ \widehat{P}_{21}^{(5)}(y_6 - y_5) &= \frac{1}{2}(x_5 - x_6 + z_1 - z_3) = q_8, \\ \widehat{P}_{31}^{(5)}(y_6 - y_5) &= \frac{1}{2}(y_3 - y_1 + x_4 - x_2) = q_9. \end{aligned} \right\} \quad (7.15)$$

Соответствующие смещения изображены на рис. 6. Координаты q_7 , q_8 , q_9 , преобразующиеся по представлению Γ_5 , описывают поворот молекулы как целого.

Теперь перейдем к цепочкам, состоящим из антисимметричных смещений.

Для цепочки III нет необходимости применять наш метод, так как всякий вектор преобразуется по неприводимому представлению Γ'_5 . Мы имеем:

$$x_7 = q_{10}, \quad y_7 = q_{11}, \quad z_7 = q_{12}. \quad (7.16)$$

Координаты q_{10} , q_{11} , q_{12} не являются нормальными координатами, так как представление Γ'_5 входит в разложение 3 раза. Элементы цепочки IV преобразуются по представлениям Γ'_4 и Γ'_5 . Действуя операторами $\widehat{P}_{i1}^{(4)}$ на смещение $x_2 + x_4$, получаем следующие нормальные

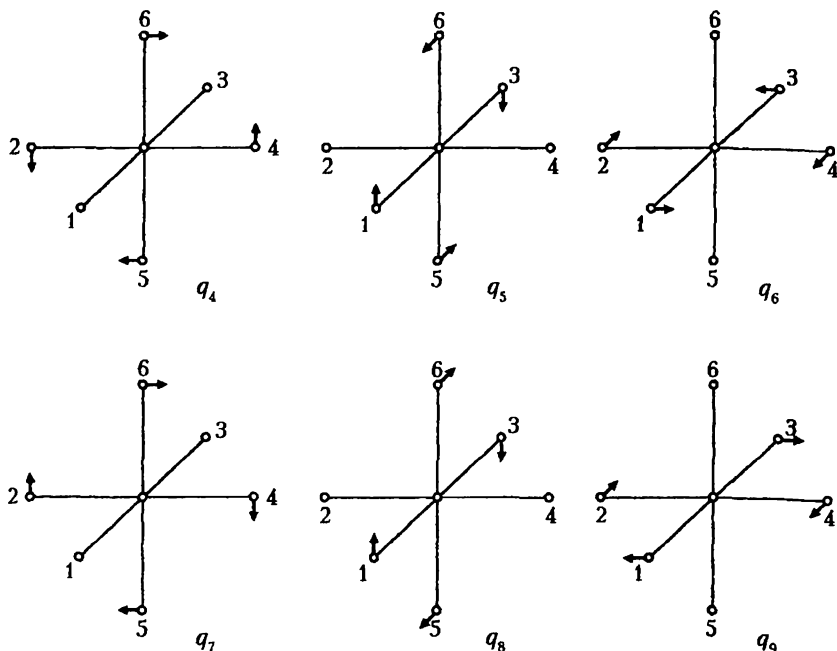


Рис. 6.

координаты:

$$\left. \begin{aligned} \widehat{P}_{11}^{(4)}(\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4) &= \frac{1}{2}(-x_6 - x_5 + x_2 + x_4) = q_{13}, \\ \widehat{P}_{21}^{(4)}(\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4) &= \frac{1}{2}(y_6 + y_5 - y_1 - y_3) = q_{14}, \\ \widehat{P}_{31}^{(4)}(\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4) &= \frac{1}{2}(z_1 + z_3 - z_4 - z_2) = q_{15}. \end{aligned} \right\} \quad (7.17)$$

Соответствующие смещения изображены на рис. 7.

При действии оператора $\widehat{P}_{11}^{(5)}$ на $\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4$ получаем следующие базисные элементы:

$$\left. \begin{aligned} \widehat{P}_{11}^{(5)}(\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4) &= \frac{1}{2}(\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4 + \mathbf{x}_5 + \mathbf{x}_6) = q_{16}, \\ \widehat{P}_{21}^{(5)}(\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4) &= \frac{1}{2}(\mathbf{y}_1 + \mathbf{y}_3 + \mathbf{y}_5 + \mathbf{y}_6) = q_{17}, \\ \widehat{P}_{31}^{(5)}(\mathbf{x}_2 + \mathbf{x}_4) &= \frac{1}{2}(\mathbf{z}_4 + \mathbf{z}_2 + \mathbf{z}_3 + \mathbf{z}_1) = q_{18}, \end{aligned} \right\} \quad (7.18)$$

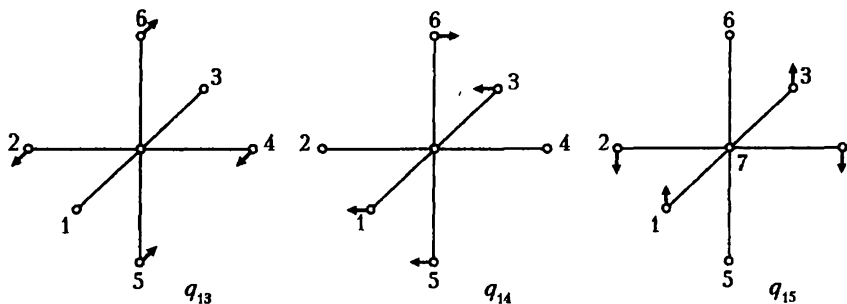


Рис. 7.

которые также не являются еще нормальными координатами. Наконец, для последней цепочки V, состоящей из трех смещений, остается неприводимое представление Γ'_5 , и мы имеем еще три координаты:

$$x_1 + x_3 = q_{19}, \quad z_6 + z_5 = q_{20}, \quad y_4 + y_5 = q_{21}. \quad (7.19)$$

Из девяти координат, преобразующихся по представлению, которое трижды содержит неприводимое представление Γ'_5 , нужно выделить координаты, которые соответствуют смещению молекулы как целого. Это легко сделать. Очевидно, что три координаты поступательного движения имеют вид

$$\left. \begin{aligned} X &= \frac{\sum m_i x_i}{\sum m_i}, \\ Y &= \frac{\sum m_i y_i}{\sum m_i}, \\ Z &= \frac{\sum m_i z_i}{\sum m_i}. \end{aligned} \right\} \quad (7.20)$$

Для того чтобы из оставшихся шести координат построить нормальные координаты, надо решить вековое уравнение второго порядка для матрицы потенциальной энергии (см. главу V, с. 64).

3. Метод линейной комбинации атомных орбит

Второй пример применения рассмотренного в п. 1 метода относится к исследованию электронных состояний молекулы.

Мы остановимся здесь лишь на постановке задачи, так как ее решение аналогично рассмотрению в п. 2. При исследовании стационарных состояний молекулы часто используют так называемое адиабатическое приближение: электроны молекулы рассматриваются в электростатическом поле ядер, образующих некоторую симметричную конфигурацию.

Задача определения состояния электронов молекулы, т. е. задача определения собственной функции оператора электронной энергии молекулы, может быть приближенно сведена к одноэлектронной задаче; при этом каждый электрон рассматривается в некотором эффективном поле, которое создают остальные электроны и ядра. Можно приближенно предполагать, что это эффективное поле обладает той же симметрией, что и конфигурация ядер.

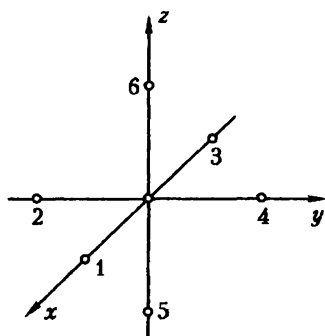
Далее используют следующие рассуждения. Если бы атомы или ионы, образующие молекулу, находились на достаточно большом расстоянии друг от друга, то одноэлектронные функции молекулы совпадали бы с ионными или атомными одноэлектронными функциями. При этом одноэлектронные уровни энергии были бы вырожденными, одинаковые волновые функции, локализованные около разных, но эквивалентных атомов, соответствовали бы одному и тому же значению энергии. В действительности атомы в молекуле находятся на таких расстояниях, при которых влияние одного атома на другой имеет существенное значение; поэтому одноэлектронные функции свободных атомов или ионов не будут решениями уравнения Шрёдингера для одноэлектронных состояний молекулы. Однако можно предположить, что набор таких функций образует систему, достаточно полную для приближенного решения нашей задачи. Практически число функций в этом наборе конечно, и на функциях этого набора реализуется некоторое приводимое представление D точечной группы G .

В главе V было показано, что задача диагонализации матрицы гамильтониана значительно упрощается, если предварительно выбрать функции так, чтобы они образовывали базисы неприводимых представлений. Построение таких базисов аналогично выполненному в предыдущем пункте. Рассматриваемая «полная» система функций разбивается на цепочки функций, и в каждой цепочке с помощью операторов $\hat{P}_{ik}^{(j)}$ строятся базисы неприводимых представлений. Если какое-нибудь неприводимое представление встречается в разложении только один раз, то построенные волновые функции будут собственными функциями нашей задачи. Если неприводимое представление $D^{(i)}$ встречается r_j раз, то после построения базисов этого неприводимого представления для нахождения собственных функций приходится решать вековое уравнение порядка r_j . Этот метод нахождения одноэлектронных приближенных решений для молекулярной задачи носит название метода *линейной комбинации атомных орбит*.

Упражнение

7.1. Для кубического комплекса (типа F -центра в щелочногалогидном кристалле) построить волновые функции, преобразующиеся по неприводимым

представлениям группы куба O_h . Считается, что полная система функций состоит из шести s -функций, локализованных в окрестностях точек 1, 2, ..., 6 (рис. 8).



Глава VIII

Пространственные группы и их неприводимые представления

Группой симметрии идеального кристалла или *пространственной группой* называют совокупность преобразований трехмерного пространства, переводящих любую точку кристалла в эквивалентную. Важно отметить, что при этом кристалл или предполагают бесконечным, или заменяют моделью, в которой отождествляются противоположные грани образца. В последнем случае кристалл топологически эквивалентен трехмерному тору.

1. Подгруппа трансляций

Характерной чертой симметрии кристаллов, отличающей их от молекул, является наличие трансляционной симметрии: идеальный кристалл представляет собой периодическое повторение определенной совокупности частиц. Трансляционную симметрию можно определить с помощью трех некопланарных векторов:

$$\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3,$$

называемых *основными* векторами решетки. Трансляция на вектор

$$\mathbf{a} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (8.1)$$

где n_1, n_2, n_3 — целые положительные или отрицательные числа, связывает эквивалентные точки \mathbf{r} и \mathbf{r}' кристалла:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{a}. \quad (8.2)$$

Вектор \mathbf{a} называют *вектором решетки*. Если из одной точки (начала координат) отложить все векторы \mathbf{a} , то их концы образуют так называемую *решетку Браве*, или «пустую» решетку, соответствующую данному кристаллу. Концы векторов при таком построении называют узлами решетки. Три основных вектора решетки обладают тем очевидным свойством, что внутри элементарного параллелепипеда, построенного на них, нет ни одного узла решетки. Заметим, что выбор основных векторов решетки не является однозначным. Однако при любом возможном выборе этих векторов объемы элементарных параллелепипедов должны быть одинаковыми. На рис. 9 показано, как

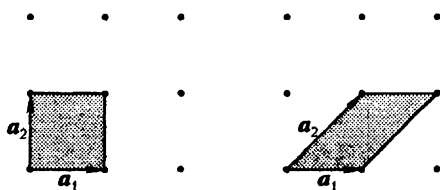


Рис. 9.

можно выбрать основные векторы в случае квадратной двумерной решетки. Обычно в качестве основных векторов берут наиболее короткие из возможных.

Элементарные параллелепипеды называют также *элементарными ячейками* кристалла.

Таким образом, в пространственной группе содержится в качестве подгруппы группа трансляций (8.2) на векторы решетки. Мы будем обозначать эту группу через T_a .

2. Сингонии

Решетки Браве обладают определенной симметрией относительно поворотов и отражений. Для каждой решетки Браве существует точечная группа K преобразований, которые переводят вектор решетки в вектор решетки. Ортогональное преобразование трехмерного пространства, принадлежащее группе K , будем обозначать через R . Существует семь систем (*сингоний*) кристаллических решеток, различающихся точечной группой K . Оказывается, не всякая точечная группа может быть группой симметрии решетки. Требование, чтобы одновременно с a вектор Ra также был вектором решетки, ограничивает круг допустимых точечных групп. Выясним, каковы эти ограничения.

Прежде всего отметим, что группа K должна содержать инверсию: вместе с трансляцией на вектор a в группу T_a всегда входит трансляция на вектор $-a$. Теперь установим, какие оси симметрии может иметь группа K . Выберем в качестве базиса пространства векторов a основные векторы решетки a_1, a_2, a_3 и запишем преобразование R в новом базисе, в котором все векторы решетки имеют целочисленные составляющие. Если матрицу ортогонального преобразования R в этом базисе обозначить через \tilde{R} , то мы будем иметь

$$\tilde{R} = U^{-1}RU,$$

где U — матрица перехода от первоначального ортонормированного базиса к базису a_1, a_2, a_3 . Если R — поворот (или зеркальный поворот) на угол φ , то след матрицы R , так же как и след матрицы \tilde{R} , равен

$$\text{Sp } \tilde{R} = \text{Sp } R = \pm 1 + 2 \cos \varphi. \quad (8.3)$$

Однако из условия, что преобразование R должно переводить вектор решетки a в вектор решетки $a' = \tilde{R}a$, следует, что все элементы матрицы \tilde{R} , а следовательно, и ее след должны быть целочисленными.

Сингония	Тип	Относительные длины	Относительные расположения
триклинная S_2	простой	любые	любое
моноклинная C_{2h}	простой с центрированными основаниями	»	$a_3 \perp \sigma_{12}$ $c_{32} \perp \sigma_{12}$
ромбическая D_{2h}	простой с центрированными основаниями объемноцентрированный гранецентрированный	» » » »	$a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1$ $c_{32} \perp \sigma_{12} a_1 \perp a_2$ $g_{321} \perp \sigma_{21} a_1 \perp a_2$ $c_{21} \perp a_1 \perp c_{31}$
тетрагональная D_{4h}	простой объемноцентрированный	$a_1 = a_2$ $a_1 = a_2$	$a_1 \perp a_2 \perp a_3 \perp a_1$ $g_{312} \perp a_2 \perp a_1$
ромбоэдрическая D_{3d}	простой	$a_1 = a_2$	$g_{312} \perp \sigma_{21} \widehat{a_1 a_2} = \frac{2\pi}{3}$
гексагональная D_{6h}	простой	$a_1 = a_2$	$a_3 \perp \sigma_{12} \widehat{a_1 a_2} = \frac{2\pi}{3}$
кубическая O_h	простой гранецентрированный объемноцентрированный	$a_1 = a_2 = a_3$ $a_1 = a_2$ $g_{312} = \frac{1}{\sqrt{2}} a_1$ $a_1 = a_2$ $g_{312} = \frac{1}{2} a_1$	$a_1 \perp a_2 \perp a_3$ $a_1 \perp a_2 \perp g_{312} \perp a_1$ $a_1 \perp a_2 \perp g_{312} \perp a_1$

Обозначения: $c_{ik} = a_i - \frac{1}{2} a_k$, $g_{ikj} = a_i - \frac{1}{2}(a_k + a_j)$;
 σ_{ik} — вектор, лежащий в плоскости векторов a_i , a_k .

Отсюда вытекает, что $\cos \varphi$ может принимать лишь значение:

$$\cos \varphi = \cos \frac{2\pi n}{m} = \pm 1, \pm \frac{1}{2}, 0. \quad (8.4)$$

Следовательно, группа K может содержать только оси второго, третьего, четвертого и шестого порядков. Наконец, можно показать, что если группа K содержит подгруппу C_n , $n > 2$, то она содержит также и подгруппу C_{nv} . Сформулированные выше три ограничения приводят к тому, что роль точечной группы кристалла могут играть лишь 7 точечных групп, а именно:

$$S_2, C_{2h}, D_{2h}, D_{4h}, D_{3d}, D_{6h}, O_h.$$

Это и является причиной того, что существует только 7 сингоний: триклинная, моноклинная, ромбическая, ромбоэдрическая, тетрагональная, гексагональная, кубическая.

Точечная группа решетки Браве накладывает определенные ограничения на возможное расположение и относительные длины основных векторов решетки. Мы не будем проводить здесь соответствующего рассмотрения. Однако для полноты картины приведем таблицу, дающую более полные сведения о решетках Браве.

3. Общий элемент пространственной группы

Общий элемент симметрии пустой решетки может быть записан в виде $t_a R$; действие этой операции на трехмерный вектор x определяется формулой

$$t_a R x = R x + a. \quad (8.5)$$

Очевидно, мы будем иметь

$$t_{a_1} R_1 t_{a_2} R_2 x = R_1 R_2 x + a_1 + R_1 a_2, \quad (8.6)$$

$$(t_a R)^{-1} x = R^{-1} x - R^{-1} a. \quad (8.7)$$

Операции t_a и R не коммутируют; мы имеем

$$t_a R = R t_{R^{-1} a}. \quad (8.8)$$

Отметим, что точечную группу K решетки удобнее всего определять, рассмотрев все операции, переводящие векторы $a_1, a_2, a_3, -a_1, -a_2, -a_3$ друг в друга.

До сих пор мы рассматривали симметрию «пустых» решеток. Вернемся теперь к рассмотрению симметрии кристалла.

Кроме подгруппы трансляций T_a пространственная группа содержит также другие преобразования, вид которых обусловлен, во-первых, симметрией решетки Браве, во-вторых, симметрией компонентов кристалла, т. е. симметрией периодически повторяющейся совокупности частиц, образующей кристалл. Это второе обстоятельство часто приводит к тому, что не все преобразования из точечной группы K входят в группу симметрии кристалла. Не все преобразования, совмещающие узлы решетки, совмещают также компоненты кристалла. Поэтому возможно, что точечная группа кристалла будет только подгруппой точечной группы пустой решетки.

В общем случае преобразование симметрии кристалла, не содержащее трансляции на вектор решетки, имеет вид $t_a R$, где R — некоторое преобразование из точечной группы K , а t_a — трансляция на вектор a , отличный от вектора решетки. Для пояснения таких несобственных трансляций рассмотрим кристаллическую решетку алмаза. Решетку алмаза можно составить из двух гранцентрированных кубических решеток, сдвинутых друг относительно друга вдоль пространственной диагонали куба на $1/4$ ее длины (рис. 10). Выберем в качестве центра симметрии положение какого-нибудь ядра, например точку A . Ближайшие к этому узлу ядра, принадлежащие другой подрешетке и отмеченные буквой B , образуют тетраэдр. Легко убедиться в том, что преобразования из группы тетраэдра будут совмещать

решетку алмаза саму с собой. Преобразование инверсии i относительно точки A не будет элементом симметрии рассматриваемой решетки. Действительно, при таком преобразовании ядро B , расположенное в вершине куба, окажется на середине пространственной диагонали. Однако если после инверсии произвести сдвиг по диагонали на четверть ее длины, то рассматриваемое ядро B займет положение ядра A . Легко убедиться, что инверсия и сдвиг приводят к совмещению подрешеток A и B . То же можно утверждать для любых преобразований из совокупности iT_d . Таким образом, элементами симметрии решетки алмаза будут преобразования

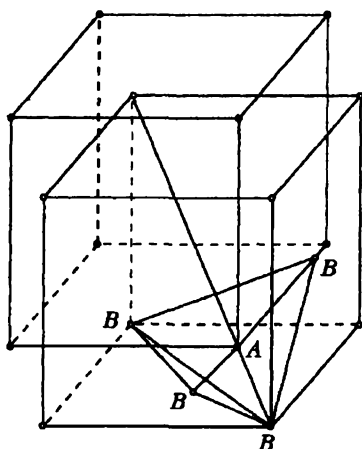


Рис. 10.

точечной группы T_d и преобразования из совокупности iT_d , сопровождающиеся трансляцией t_α , где α — вектор, направленный вдоль диагонали куба и равный $1/4$ ее длины.

Если R — поворот вокруг некоторой оси, а t_α — смещение вдоль направления этой оси, то преобразование $t_\alpha R$ называют вращением вокруг винтовой оси; если R — отражение относительно некоторой плоскости, а t_α — смещение, параллельное этой плоскости, то элемент симметрии $t_\alpha R$ называют плоскостью скольжения (или плоскостью скользящего отражения).

Общий элемент пространственной группы может быть записан в виде

$$g = t_\alpha t_\alpha R = t_{\alpha+\alpha} R. \quad (8.9)$$

Такая запись возможна, несмотря на то что трансляции t_α не коммутируют с преобразованием $t_\alpha R$. Для доказательства этого покажем, что элемент $t_\alpha R t_\alpha$ также может быть представлен в виде (8.9). Действительно,

$$t_\alpha R t_\alpha x = \alpha + R(x + \alpha) = \alpha + Rx + Ra. \quad (8.10)$$

Так как $R \in K$, то Ra — также вектор решетки, и, следовательно,

$$t_\alpha R t_\alpha = t_{Ra+\alpha} R. \quad (8.11)$$

Мы уже отмечали, что преобразования $t_\alpha R$ не образуют группу. В то же время легко убедиться, что преобразования R образуют группу.

Действительно, мы имеем

$$t_\alpha R t_{\alpha'} R' = t_\alpha t_{R\alpha'} R R' = t_{\alpha+R\alpha'} R R'. \quad (8.12)$$

Отсюда следует, что вместе с R и R' всегда имеется преобразование RR' . Так как $R \in K$, то эта группа, которую мы будем в дальнейшем обозначать через F , должна быть подгруппой группы K .

Кристаллы, имеющие одну и ту же группу F , относят к одному классу. Очевидно, число кристаллических классов равняется числу подгрупп в семи группах S_2, \dots, O_h , определяющих сингонии. Легко сосчитать, что эти группы содержат 32 различные подгруппы и, следовательно, существуют 32 кристаллических класса. Отметим, что кристаллы, принадлежащие одному и тому же классу, могут относиться к разным сингониям, а при заданном классе и заданной сингонии кристаллы могут еще отличаться несобственными трансляциями t_a . Установлено, что существует всего 230 различных пространственных групп.

4. Неприводимые представления группы трансляций

Для того чтобы построить неприводимые представления пространственной группы, изучим сначала неприводимые представления ее подгруппы — группы трансляций T_a .

Если трансляции на основные векторы решетки обозначать соответственно через

$$t_{a_1}, t_{a_2}, t_{a_3}, \quad (8.13)$$

то произвольный элемент из группы T_a может быть представлен в виде

$$t_a = t_{a_1}^{n_1} t_{a_2}^{n_2} t_{a_3}^{n_3}, \quad (8.14)$$

где

$$a = n_1 a_1 + n_2 a_2 + n_3 a_3. \quad (8.15)$$

Все трансляции коммутируют друг с другом, и, следовательно, группа трансляций абелева. Рассмотрим кристалл, размеры которого определяются векторами $L_1 a_1$, $L_2 a_2$ и $L_3 a_3$, где L_1 , L_2 , L_3 — целые числа, и наложим на трансляции так называемые циклические условия:

$$t_{a_i}^{L_i+1} = t_{a_i}, \quad i = 1, 2, 3. \quad (8.16)$$

Это мы и подразумевали, говоря, что отождествляем противоположные грани образца.

Поэтому группу трансляций T_a мы можем рассматривать как прямое произведение трех циклических групп T_{a_i} с элементами

$$E, t_{a_i}, t_{a_i}^2, \dots, t_{a_i}^{L_i-1}. \quad (8.17)$$

Как мы знаем, неприводимые представления циклической группы одномерны. Для группы T_{a_i} , имеющей порядок L_i , они определяются числами

$$e^{2\pi i \frac{n}{L_i}}. \quad (8.18)$$

Индекс m классифицирует неприводимые представления и может принимать значения $0, 1, 2, \dots, L_j - 1$. Число n равно степени соответствующего элемента циклической группы (8.17). Поэтому неприводимыми представлениями группы T_a с элементами (8.14) будут числа

$$e^{2\pi i \left(\frac{m_1}{L_1} n_1 + \frac{m_2}{L_2} n_2 + \frac{m_3}{L_3} n_3 \right)}. \quad (8.19)$$

Мы видим, что каждое неприводимое представление группы T_a определяется тройкой чисел (m_1, m_2, m_3) , а число различных неприводимых представлений равно произведению $L_1 L_2 L_3$.

Введем в рассмотрение три вектора b_1, b_2, b_3 , определив их условиями

$$(a_i b_k) = 2\pi \delta_{ik}, \quad i, k = 1, 2, 3. \quad (8.20)$$

Очевидно, что

$$b_1 = \frac{2\pi [a_2 a_3]}{(a_1 [a_2 a_3])}, \quad b_2 = \frac{2\pi [a_3 a_1]}{(a_2 [a_3 a_1])}, \quad b_3 = \frac{2\pi [a_1 a_2]}{(a_3 [a_1 a_2])}.$$

Рассмотрим вектор

$$k = \frac{m_1}{L_1} b_1 + \frac{m_2}{L_2} b_2 + \frac{m_3}{L_3} b_3. \quad (8.21)$$

Вектор k задан в пространстве, определяемом векторами b_1, b_2, b_3 и называемом пространством *обратной решетки* (по отношению к решетке, определяемой векторами a_1, a_2 и a_3). Очевидно, числа (8.19), дающие неприводимые представления группы T_a , можно записать в виде

$$e^{i(ka)}. \quad (8.22)$$

Таким образом, каждое неприводимое представление группы T_a характеризуется своим вектором k . Мы будем обозначать эти представления через Γ_k . Если q_k — орт представления Γ_k и \hat{t}_a — оператор трансляции на вектор a , то

$$\hat{t}_a q_k = e^{i(ka)} q_k. \quad (8.23)$$

Два вектора k и k' пространства обратной решетки, различающиеся на вектор

$$b = p_1 b_1 + p_2 b_2 + p_3 b_3, \quad (8.24)$$

где p_i — целые числа, называются *эквивалентными*; очевидно, они характеризуют одно и то же неприводимое представление. В качестве области изменения вектора k , определяющего неприводимые представления группы трансляций, удобно выбрать такую односвязную область в пространстве обратной решетки, которая содержит в себе начало координат и для которой выполняются следующие два условия:

- а) эта область не содержит эквивалентных векторов,
- б) для произвольного вектора пространства обратной решетки в этой области найдется эквивалентный вектор. Эту область называют *приведенной зоной Бриллюэна*.

Можно показать, что группы K_a прямой и K_b обратной решеток Браве совпадают. В самом деле, пусть $R \in K_a$. Тогда наряду с равенством $(ab) = 2\pi n$ мы имеем $(Ra, b) = 2\pi m$, откуда $(a, R^{-1}b) = 2\pi t$. Следовательно, $R^{-1}b$ есть вектор обратной решетки. Но когда преобразование R пробегает всю группу K_a , обратное преобразование R^{-1} также пробегает всю группу. Отсюда можно заключить, что $K_a \subset K_b$. Повторяя рассуждение для $R \in K_b$, мы получим, что $K_b \subset K_a$. Отсюда следует, что группа K_a совпадает с группой K_b .

5. Звезда вектора k

Допустим, что нам известно некоторое неприводимое представление D пространственной группы G . По отношению к подгруппе трансляций T_a оно является, вообще говоря, приводимым. Матрицы представления D , соответствующие трансляциям t_a , коммутируют между собой; поэтому орты базиса представления всегда можно выбрать так, чтобы эти матрицы были диагональными. Эти орты будут ортами неприводимых представлений Γ_k группы трансляций, поэтому их можно обозначить также через q_k , где k — вектор из приведенной зоны Бриллюэна.

Выясним, как связаны между собой векторы k , соответствующие базису данного неприводимого представления D . Пусть q_k — один из ортов этого базиса, тогда согласно (8.23), мы имеем

$$\hat{t}_a q_k = e^{i(ka)} q_k. \quad (8.25)$$

Рассмотрим теперь оператор $\hat{t}_a \hat{t}_\alpha \hat{R}$, соответствующий произвольному элементу группы G . Действуя этим оператором на орт q_k , получим некоторый единичный вектор q' :

$$q' = \hat{t}_a \hat{t}_\alpha \hat{R} q_k. \quad (8.26)$$

Выясним, как преобразуется q' при трансляциях на вектор решетки. Мы имеем

$$\hat{t}_{a'} q' = \hat{t}_{a'} \hat{t}_a \hat{t}_\alpha \hat{R} q_k = \hat{t}_{a'} \hat{t}_\alpha \hat{t}_{a'} \hat{R} q_k. \quad (8.27)$$

Используя соотношение

$$\hat{t}_{a'} \hat{R} = \hat{R} \hat{t}_{R^{-1}a'}, \quad (8.28)$$

получаем

$$\hat{t}_{a'} q' = \hat{t}_{a'} \hat{t}_\alpha \hat{R} \hat{t}_{R^{-1}a'} q_k = e^{i(k, R^{-1}a')} \hat{t}_a \hat{t}_\alpha \hat{R} q_k = e^{i(Rk, a')} q'. \quad (8.29)$$

Отсюда следует, что вектору q' следует приписать значок Rk . Таким образом, общее преобразование $\hat{t}_a \hat{t}_\alpha \hat{R}$ переводит орт q_k в орт q_{Rk} . Следовательно, если в базис неприводимого представления D пространственной группы входит орт q_k , то в него входит также и орт q_{Rk} , где R — преобразование из точечной группы F . Совокупность всех неэкви-

валентных векторов Rk , где $R \in F$, называют звездой вектора k . Если с помощью всех операций $R \in F$ получаются m различных векторов

$$k_1 = k, k_2 = R_1 k, \dots, k_m = R_{m-1} k,$$

то говорят, что вектору k соответствует звезда m -го порядка.

6. Группа вектора k

Пусть k — какой-нибудь вектор из приведенной зоны Бриллюэна. Рассмотрим все преобразования из G , оставляющие вектор k инвариантным. Они образуют подгруппу H_k группы G . Действие преобразования из G на вектор k нужно понимать в смысле равенства (8.29), рассматривая k как индекс базисного вектора, т. е. $\hat{t}_\alpha \hat{t}_\alpha \hat{R} k = Rk$. Очевидно, все преобразования подгруппы T_α оставляют вектор k инвариантным. Если группа G не содержит несобственных трансляций, то кроме трансляций t_α в группу H_k входят еще только некоторые ортогональные преобразования, образующие подгруппу F_k группы F , и произведения этих преобразований на трансляции. Группу H_k будем называть группой вектора k . Если конец вектора k лежит на поверхности зоны Бриллюэна, то в группу H_k входят также элементы, которые переводят k в эквивалентный вектор.

Разложим группу G на совокупности, сопряженные слева относительно подгруппы H_k :

$$g_1 H_k, g_2 H_k, \dots, g_m H_k, \quad (8.30)$$

где g_1 — тождественное преобразование группы. Выясним, какими свойствами обладают элементы g_2, g_3, \dots, g_m в этом разложении. Так как ни один из элементов совокупности $g_2 H_k$ не должен содержаться в подгруппе H_k , то элемент g_2 не может оставлять инвариантным вектор k . Легко убедиться в том, что все преобразования из сопряженной совокупности $g_2 H_k$ переводят вектор k в один и тот же вектор $k_2 = g_2 k$. Аналогично преобразования из других совокупностей переводят вектор k в векторы $k_3 = g_3 k, k_4 = g_4 k, \dots, k_m = g_m k$. Все эти векторы должны быть различными. Действительно, если бы преобразования g_2 и g_3 переводили вектор k в один и тот же вектор $k_2 = k_3$, то совокупность элементов $g_3^{-1} g_2 H_k$ должна была бы оставлять вектор k инвариантным и, следовательно, совпадала бы с группой H_k . Но из $g_3^{-1} g_2 H_k = H_k$ следует $g_2 H_k = g_3 H_k$, чего не может быть, так как сопряженные совокупности не содержат общих элементов. Поскольку сопряженные совокупности исчерпывают всю группу, то векторы k_1, \dots, k_m образуют звезду вектора k . Легко видеть, что группа вектора k_i , принадлежащего этой звезде, может быть представлена в виде

$$H_{k_i} = g_i H_k g_i^{-1}, \quad (8.31)$$

откуда вытекает, что группы векторов звезды изоморфны друг другу.

7. Неприводимые представления пространственной группы

Предположим, что представление D пространственной группы разложено на неприводимые представления подгруппы трансляций, т. е. что матрицы представлений, соответствующие трансляциям, диагональны. Выберем в пространстве σ представления D те орты, на которых реализуется одно и то же представление Γ_k группы T_a . Обозначим через σ_k линейное подпространство, образованное этими ортами. Если к любому вектору подпространства σ_k применить преобразование из группы H_k , то мы опять должны получить вектор, принадлежащий σ_k . На основании этого можно заключить, что в пространстве σ_k должно реализоваться некоторое представление Γ группы H_k . Аналогичным образом из базисного пространства σ представления D можно выделить подпространства σ_{k_i} , в каждом из которых реализуются представления группы соответствующего вектора. Каждое из подпространств σ_{k_i} может быть получено из подпространства σ_k с помощью операций g_i . Ясно также, что в каждом из подпространств σ_{k_i} реализуются эквивалентные представления изоморфных групп H_{k_i} .

Покажем теперь, что из неприводимости представления D вытекает, что в каждом из подпространств σ_{k_i} реализуется также неприводимое представление группы соответствующего вектора k_i . Действительно, предположим противное, т. е. будем считать, что в пространстве σ_k можно выделить подпространство σ'_k , инвариантное относительно группы H_k . Подействуем на σ'_k операциями \hat{g}_i ($i = 1, 2, \dots, m$). Тогда мы получим подпространства

$$\sigma'_k = \hat{g}_i \sigma'_k. \quad (8.32)$$

Покажем, что тогда прямая сумма этих подпространств

$$\sigma' = \sigma'_{k_1} \oplus \sigma'_{k_2} \oplus \dots \oplus \sigma'_{k_m} \quad (8.33)$$

инвариантна относительно всей пространственной группы G . Любой элемент группы G согласно (8.30) может быть представлен в виде

$$g = g_i h_k, \quad h_k \in H_k. \quad (8.34)$$

Тогда мы имеем

$$\hat{g}_j \hat{h}_k \sigma'_k = \hat{g}_j \hat{h}_k \hat{g}_i \sigma'_k = \hat{g}_i \hat{h}'_k \sigma'_k = \sigma'_k. \quad (8.35)$$

Таким образом, при преобразованиях из группы G каждое из подпространств σ'_k переходит либо само в себя, либо в какое-нибудь другое подпространство σ'_k , и пространство σ' оказывается инвариантным относительно преобразований из группы G . Но, с другой стороны, пространство σ' является подпространством пространства σ представления D , которое мы считаем неприводимым. Отсюда следует, что в каждом подпространстве σ_k может реализоваться только

неприводимое представление группы H_k , т. е. представление D_k неприводимо. Таким образом, мы приходим к результату, что каждое неприводимое представление определяется звездой вектора k и некоторым неприводимым представлением $\Gamma^{(\alpha)}$ группы H_k волнового вектора. Эти неприводимые представления пространственной группы будем обозначать $D_k^{(\alpha)}$. Очевидно, порядок $n_{k\alpha}$ представления $D_k^{(\alpha)}$ равен произведению порядка n_α неприводимого представления $\Gamma^{(\alpha)}$ группы волнового вектора на m — число векторов в звезде: $n_{k\alpha} = n_\alpha m$.

8. Неприводимые представления группы вектора k

Мы еще должны выяснить вопрос, какие неприводимые представления $\Gamma^{(\alpha)}$ группы вектора H_k могут реализоваться в пространстве σ_k . Оказывается, что на возможные неприводимые представления группы H_k должны быть наложены некоторые ограничения. Действительно, в группу волнового вектора входят преобразования трансляций на векторы решетки. По определению все подпространство σ_k состоит из собственных векторов трансляций t_α с собственным значением $\exp i(k\alpha)$. Поэтому матрица представления, соответствующая трансляции, должна иметь вид

$$\Gamma^{(\alpha)}(t_\alpha) = e^{i(k\alpha)} E_{n_\alpha}, \quad (8.36)$$

где E_{n_α} — единичная матрица. Таким образом, допустимыми неприводимыми представлениями $\Gamma^{(\alpha)}$ группы H_k будут лишь те, в которых трансляциям на вектор α соответствуют матрицы (8.36). Такие неприводимые представления группы H_k мы будем называть *нормальными*.

Нормальные неприводимые представления легко определить, когда пространственная группа не содержит поворотов с несобственными трансляциями t_α . Тогда группа H_k состоит из всевозможных произведений элементов группы T_α и точечной группы F_k , которая в свою очередь состоит из тех элементов точечной группы F , которые оставляют инвариантным вектор k . Так как все векторы пространства σ_k являются собственными векторами операций трансляции с одним и тем же собственным значением, то из неприводимости представления относительно группы H_k следует неприводимость относительно точечной группы F_k . Таким образом, классификация нормальных неприводимых представлений группы H_k в рассмотренном случае проводится по неприводимым представлениям точечной группы F_k .

9. Пример

Прежде чем переходить к рассмотрению пространственной группы G , содержащей несобственные трансляции, мы проиллюстрируем введенные понятия на простейшем примере пространственной группы

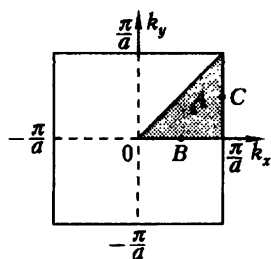


Рис. 11.

одноатомного кристалла с квадратной решеткой. В этом случае точечной группой F будет группа D_4 , имеющая восемь элементов (см. главу VI), зоной Бриллюэна будет квадрат со стороной $2\frac{\pi}{a}$ (a — постоянная решетки кристалла). Так как вектор \mathbf{k} полностью определяет свою звезду, то для классификации неприводимых представлений пространственной группы достаточно рассмотреть $\frac{1}{8}$ этого квадрата (рис. 11).

Рассмотрим сначала вектор \mathbf{k} , не связанный с элементами симметрии зоны Бриллюэна (например, вектор \overline{OA}). Применяя к такому вектору преобразования, входящие в группу D_4 , мы получим звезду, состоящую из восьми векторов (рис. 12). Очевидно, группа $F_{\mathbf{k}}$ преобразований из D_4 , оставляющих этот вектор \mathbf{k} инвариантным, содержит только один элемент E и группа $H_{\mathbf{k}}$ в данном случае совпадает с группой трансляций T_a . Данному вектору \mathbf{k} соответствует одно неприводимое представление $D_{\mathbf{k}1}$ группы G восьмого порядка. В этом представлении матрицы, соответствующие трансляциям t_a будут диагональны: элементами их будут $\exp i(\mathbf{k}; \mathbf{a})$, $j = 1, 2, \dots, 8$ (\mathbf{k} — векторы звезды). Преобразования из группы F производят перестановку ортов базиса представления; поэтому матрицы, соответствующие этим преобразованиям, имеют только по одному элементу (недиагональному), отличному от нуля и равному единице.

Теперь рассмотрим вектор \mathbf{k} , конец которого лежит на оси симметрии (например, вектор \overline{OB} на рис. 11). В этом случае группа $F_{\mathbf{k}}$ содержит кроме тождественного элемента E еще одну операцию σ_y (отражение в плоскости XZ) и изоморфна группе C_2 , имеющей два неприводимых представления первого порядка. Звезда вектора \mathbf{k} состоит из четырех векторов (рис. 12, б). Отметим, что из четырех векторов будет также состоять звезда вектора, оканчивающегося на границе зоны Бриллюэна (например, вектора \overline{OC} на рис. 11). Остальные четыре вектора, получающиеся при применении к вектору \overline{OC} преобразований из группы D_4 , будут эквивалентны приведенным на рисунке. Рассматриваемому вектору \mathbf{k} будут соответствовать два неприводимых представления четвертого порядка: $D_{\mathbf{k}}^{(1)}$ и $D_{\mathbf{k}}^{(2)}$. В этих представлениях матрицы, соответствующие трансляциям, совпадают; элементы других матриц в этих представлениях могут отличаться только знаком.

Наконец, для вектора $\mathbf{k} = 0$ группа $F_{\mathbf{k}}$ совпадает с D_4 . Поэтому вектору $\mathbf{k} = 0$ соответствует столько различных неприводимых представлений $D_0^{(a)}$, сколько их имеется у группы D_4 (четыре представления

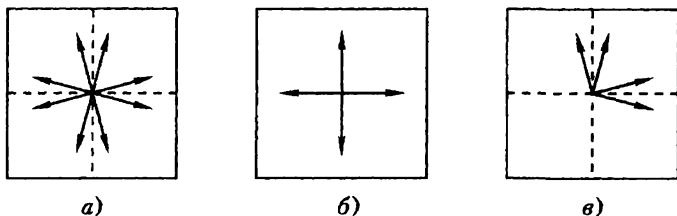


Рис. 12.

первого и одно второго порядка). Порядки представлений $D_0^{(\alpha)}$ будут совпадать с порядками представлений группы D_4 . Трансляциям t_{α} в представлениях $D_0^{(\alpha)}$ соответствуют единичные матрицы; $D_0^{(\alpha)}(R)$ совпадают с соответствующими матрицами неприводимых представлений группы D_4 . Очевидно, тождественным представлением пространственной группы будет одно из неприводимых представлений, соответствующих $\mathbf{k} = 0$.

10. Неприводимые представления пространственной группы, содержащей несобственные трансляции

Рассмотрим теперь случай, когда группа вектора \mathbf{k} содержит несобственные трансляции. Осложнение, которое возникает здесь, связано с тем, что преобразования Rt_{α} не образуют группы: произведение двух таких элементов может содержать трансляцию на вектор решетки. Однако, как мы сейчас увидим, классификация неприводимых представлений группы $H_{\mathbf{k}}$, когда вектор \mathbf{k} лежит внутри приведенной зоны Бриллюэна, также проводится по неприводимым представлениям точечной группы $F_{\mathbf{k}}$. Между представлениями групп $H_{\mathbf{k}}$ и $F_{\mathbf{k}}$ в этом случае можно установить однозначное соответствие. Пусть $\Gamma(h)$ — матрица представления группы $H_{\mathbf{k}}$, соответствующая элементу $h = t_{\alpha}t_{\alpha}R \in H_{\mathbf{k}}$. Покажем, что матрицы

$$\tilde{\Gamma}(R) = \Gamma(h)e^{-i[\mathbf{k}(\alpha+\alpha)]} \quad (8.37)$$

дают представление группы $F_{\mathbf{k}}$. Действительно, мы имеем

$$\tilde{\Gamma}(R_1)\tilde{\Gamma}(R_2) = \Gamma(h_1)\Gamma(h_2)e^{-i[\mathbf{k}(\alpha_1+\alpha_1)]}e^{-i[\mathbf{k}(\alpha_2+\alpha_2)]}. \quad (8.38)$$

Далее,

$$\begin{aligned} \Gamma(h_1h_2) &= \Gamma(t_{\alpha_1}t_{\alpha_1}R_1t_{\alpha_2}t_{\alpha_2}R_2) = \Gamma(t_{\alpha_1}t_{\alpha_1}t_{R_2\alpha_2}t_{R_2\alpha_1}R_1R_2) = \\ &= \tilde{\Gamma}(R_1R_2)e^{i[\mathbf{k}(\alpha_1+\alpha_1+R_1\alpha_2+R_1\alpha_2)]}. \end{aligned} \quad (8.39)$$

Подставляя (8.39) в (8.38), получим

$$\begin{aligned} \tilde{\Gamma}(R_1)\tilde{\Gamma}(R_2) &= \tilde{\Gamma}(R_1R_2)e^{i[\mathbf{k}(R_1\alpha_2+R_1\alpha_2)]-i[\mathbf{k}(\alpha_2+\alpha_2)]} = \\ &= \tilde{\Gamma}(R_1R_2)e^{i(R_1^{-1}\mathbf{k}-\mathbf{k}, \alpha_2+\alpha_2)}. \end{aligned} \quad (8.40)$$

Так как вектор \mathbf{k} по условию лежит внутри приведенной зоны Бриллюэна, а преобразование $R_1 \in F_{\mathbf{k}}$, то

$$R_1^{-1} \mathbf{k} = \mathbf{k}, \quad (8.41)$$

и окончательно мы получаем

$$\tilde{\Gamma}(R_1) \tilde{\Gamma}(R_2) = \tilde{\Gamma}(R_1 R_2). \quad (8.42)$$

Наоборот, можно показать, что по любому представлению группы $F_{\mathbf{k}}$ можно построить с помощью соотношения (8.37) представление группы $H_{\mathbf{k}}$. Существование такой взаимно однозначной связи между представлениями приводит к тому, что если представление $\tilde{\Gamma}(R)$ неприводимо, то $\Gamma(\mathbf{h})$ также неприводимо. Подчеркнем еще раз, что все проведенное здесь рассмотрение справедливо лишь для вектора \mathbf{k} , лежащего внутри зоны Бриллюэна.

Пусть теперь вектор \mathbf{k} лежит на поверхности приведенной зоны Бриллюэна. Тогда в группе $H_{\mathbf{k}}$ обязательно содержатся такие преобразования, которые переводят вектор \mathbf{k} в вектор, отличающийся от \mathbf{k} на вектор обратной решетки. Поэтому формула (8.41) оказывается в этом случае несправедливой. Если вектор \mathbf{k} лежит на поверхности зоны Бриллюэна, то он либо равен рациональной части вектора обратной решетки, либо может быть разложен на два вектора, один из которых — рациональная часть вектора обратной решетки, а второй лежит внутри зоны Бриллюэна. Рассмотрим отдельно эти два случая.

а) \mathbf{k} — рациональная часть вектора обратной решетки. В этом случае обязательно существуют три целых числа n_1, n_2, n_3 такие, что

$$\Gamma(t_{\mathbf{a}}^{n_i+1}) = E \quad (8.43)$$

(практически каждое из чисел n_i не больше 3). Соотношение (8.43) является следствием того, что матрицы нормального представления Γ группы $H_{\mathbf{k}}$ имеют вид

$$\Gamma(t_{\mathbf{a}}) = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a})} E. \quad (8.44)$$

Построим абелеву группу T_{n_1, n_2, n_3} , гомоморфную группе трансляций $T_{\mathbf{a}}$. Элементы τ группы T_{n_1, n_2, n_3} мы определим в виде

$$\tau = \tau_1^{s_1} \tau_2^{s_2} \tau_3^{s_3},$$

где s_1, s_2, s_3 принимают значения соответственно от 1 до $n_i + 1$, $i = 1, 2, 3$, причем $\tau_i^{n_i+1} = e$, где e — единичный элемент этой группы. Соответствие между элементами этих групп определим следующим образом:

$$t_{\mathbf{a}}, t_{\mathbf{a}}^{(n_i+1)\mathbf{l}} \rightarrow \tau_i, \quad (8.45)$$

где l — произвольное целое число. Важно то, что в случае (8.43) нормальные представления группы $H_{\mathbf{k}}$ изоморфны представлениям группы $\bar{H}_{\mathbf{k}}$, которая состоит из всевозможных произведений элементов $t_{\alpha}R$ и $\tau_1^{s_1}\tau_2^{s_2}\tau_3^{s_3}$. Поэтому, для того чтобы найти неприводимые представления группы $H_{\mathbf{k}}$, нужно найти все неприводимые представления группы $\bar{H}_{\mathbf{k}}$ и из них отобрать те, у которых матрицы, соответствующие элементам τ_1, τ_2, τ_3 , имеют вид (8.44).

б) Пусть теперь $\mathbf{k} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$, где \mathbf{k}_1 — рациональная часть вектора обратной решетки, а вектор \mathbf{k}_2 лежит внутри зоны Бриллюэна. В этом случае для нахождения неприводимых представлений группы $H_{\mathbf{k}}$ поступаем следующим образом. Находим три наименьших целых числа n_1, n_2, n_3 таких, что

$$e^{i[\mathbf{k}_1 \mathbf{a}, (n_i+1)]} = 1. \quad (8.46)$$

Строим конечную группу $\bar{H}_{\mathbf{k}_1}$ (гомоморфную группе $H_{\mathbf{k}_1}$), в которой элементам τ_j соответствуют элементы $t_{\alpha}, (t_{\alpha})^{(n_j+1)}$. Тогда можно показать, что неприводимые представления групп $\bar{H}_{\mathbf{k}_1}$ и $H_{\mathbf{k}}$ связаны формулой

$$\bar{\Gamma}(\tau_1^{s_1}\tau_2^{s_2}\tau_3^{s_3}t_{\alpha}R) = \Gamma(\mathbf{h})e^{i[\mathbf{k}_2(\mathbf{a}+\alpha)]},$$

где представление $\bar{\Gamma}$ должно обладать тем свойством, что его матрицы, соответствующие элементам τ_j , должны иметь вид (8.44).

Упражнения

8.1. Доказать, что подгруппа трансляций является нормальным делителем пространственной группы.

8.2. Доказать, что если вектор \mathbf{k} лежит в приведенной зоне Бриллюэна, то вектор $R\mathbf{k}$, где $R \in K$, также принадлежит приведенной зоне.

8.3. Построить зоны Бриллюэна для простой, гранецентрированной и объемноцентрированной кубических решеток. Основные векторы этих решеток изображены на рис. 13.

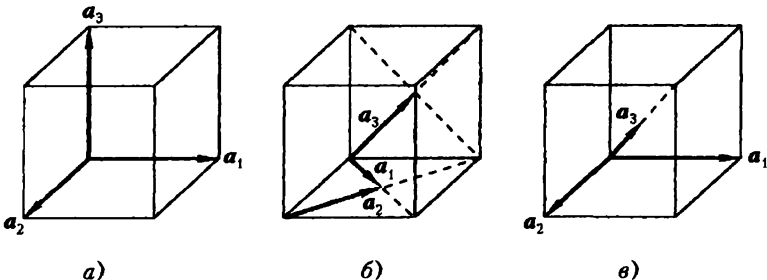


Рис. 13.

Глава IX

Классификация колебательных и электронных состояний кристалла

Используем теперь сведения о неприводимых представлениях пространственных групп для классификации колебательных и электронных состояний кристалла. Мы будем предполагать здесь, что: 1) нормальные координаты кристалла, соответствующие одной частоте, преобразуются по неприводимым представлениям пространственной группы; 2) собственные функции уравнения Шрёдингера электронной задачи, принадлежащие одному и тому же собственному значению при фиксированных равновесных положениях ядер, также преобразуются по неприводимым представлениям пространственной группы¹⁾.

Рассмотрим теперь классификацию колебательных и электронных состояний кристалла более детально. Для простоты мы ограничимся такими пространственными группами, которые не содержат несобственных трансляций.

1. Классификация нормальных колебаний

Мы будем рассматривать кристалл как систему материальных частиц, совершающих малые колебания относительно своих положений равновесия. Будем предполагать, что положения равновесия частиц образуют конфигурацию, обладающую симметрией пространственной группы G . Тогда, как известно (см. главу VI, п. 3), декартовы составляющие смещений частиц из положений равновесия преобразуются по некоторому приводимому представлению этой группы. Перейдем от декартовых смещений \mathbf{x}_i к нормальным координатам \mathbf{q}_j ²⁾. Если под переменной \mathbf{x}_i понимать смещение, умноженное на корень из массы соответствующего ядра, то, как мы знаем, декартовы смещения \mathbf{x}_i и нормальные координаты \mathbf{q}_j связаны унитарным преобразованием

$$\mathbf{x}_i = \sum_j c_{ij} \mathbf{q}_j, \quad (9.1)$$

¹⁾ В некоторых случаях может быть дополнительное вырождение, связанное с инвариантностью относительно обращения времени (см. главу XIII). Подробнее об этом см. [5], § 26. ИЛ, 1963.

²⁾ Здесь под смещениями \mathbf{x}_i , так же как в главе VII, мы будем понимать единичные смещения, или орты.

$$\mathbf{q}_j = \sum_i \bar{c}_{ij} \mathbf{x}_i, \quad (9.2)$$

где $\|c_{ij}\|$ — унитарная матрица. Нормальные координаты, соответствующие одной частоте, должны преобразовываться по неприводимому представлению пространственной группы. Их всегда можно выбрать так, чтобы они были собственными векторами оператора трансляции \hat{t}_a на вектор решетки. Будем считать, что это сделано. Тогда согласно (8.3) мы имеем

$$\hat{t}_a \mathbf{q}_j = e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{a})} \mathbf{q}_j, \quad (9.3)$$

где \mathbf{k}_j — вектор, определяющий неприводимое представление группы трансляций T_a , по которому преобразуется нормальная координата \mathbf{q}_j . Если же операцию трансляции применить к некоторому смещению \mathbf{x}_i , то мы получим смещение $\mathbf{x}_{i'}$ эквивалентного ядра в элементарной ячейке, сдвинутой на вектор \mathbf{a} по отношению к исходной ячейке. Поэтому, применяя оператор трансляции \hat{t}_a к обеим частям равенства (9.1), мы получим

$$\hat{t}_a \mathbf{x}_i = \sum_j c_{ij} \hat{t}_a \mathbf{q}_j, \quad \mathbf{x}_{i'} = \sum_j c_{ij} e^{i(\mathbf{k}_j \cdot \mathbf{a})} \mathbf{q}_j. \quad (9.4)$$

Напомним, что величина \mathbf{q}_j изменяется с течением времени по гармоническому закону

$$\mathbf{q}_j = \mathbf{q}_j^{(0)} e^{i\omega_j t}.$$

Таким образом, мы видим, что смещения \mathbf{x}_i представляют собой суперпозицию гармонических колебаний. Колебания с одной частотой эквивалентных атомов в разных ячейках в силу (9.4) оказываются периодически сдвинутыми по фазе. Длина волны каждого колебания, очевидно, равна $\lambda_j = 2\pi |\mathbf{k}_j|^{-1}$. Другими словами, каждому нормальному колебанию, выбранному так, чтобы оно преобразовывалось по неприводимому представлению группы трансляций, соответствует плоская волна с волновым вектором, равным вектору \mathbf{k} этого представления.

Сколько имеется независимых волн с одним и тем же волновым вектором \mathbf{k} ? Для этого нам надо узнать, сколько раз неприводимое представление группы трансляций, соответствующее этому значению \mathbf{k} , содержится в представлении D , которое реализуется на всех смещениях \mathbf{x}_i . Заметим, что преобразование трансляций связывает составляющие смещений только эквивалентных атомов в различных ячейках кристалла. Если число атомов в ячейке равно s , то все многообразие смещений $\{\mathbf{x}_i\}$ можно разбить на $3s$ многообразий, на каждом из которых будет реализоваться регулярное представление группы трансляций. Мы знаем, что неприводимые представления группы трансляций одномерны и поэтому в регулярном представлении могут встретиться лишь по одному разу. Поэтому в представлении D

каждое неприводимое представление содержится точно $3s$ раз. Таким образом, мы получаем ответ на поставленный вопрос: число различных нормальных колебаний, или число различных плоских волн с одним и тем же волновым вектором, всегда равно $3s$.

Среди всех нормальных колебаний особый интерес представляют так называемые предельные колебания с волновым вектором $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Их число также равно $3s$. Из формул (9.4) видно, что при этих колебаниях движения эквивалентных атомов в различных элементарных ячейках происходят в фазе. Если представить себе кристалл состоящим из подрешеток эквивалентных атомов, то можно сказать, что предельным колебаниям соответствуют колебания подрешеток друг относительно друга. Различные предельные колебания отличаются друг от друга как фазами, так и частотами колебаний подрешеток. Ясно, что среди них должны быть три степени свободы, которые описывают синфазные движения всех подрешеток, т. е. движение кристалла как целого.

Нормальные координаты, соответствующие одному и тому же значению волнового вектора, должны преобразовываться по некоторому (приводимому) представлению группы $H_{\mathbf{k}}$ этого волнового вектора. Представление Γ , как было показано в главе VIII, при отсутствии несобственных трансляций определяется представлением точечной группы $F_{\mathbf{k}}$. Нормальные колебания, преобразующиеся по неприводимому представлению группы $F_{\mathbf{k}}$, должны иметь одинаковую частоту. Найдем представление Γ . С этой целью рассмотрим смещения атомов, принадлежащих некоторой фиксированной (нулевой) ячейке:

$$\mathbf{x}_i^{(0)} = \sum_j c_{ij} \mathbf{q}_j, \quad i = 1, 2, \dots, 3s. \quad (9.5)$$

Смещения атомов ячейки, отстоящей от данной на вектор решетки \mathbf{a} , согласно (9.4) имеют вид

$$\mathbf{x}_i^{(\mathbf{a})} = \sum_j c_{ij} e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{a})} \mathbf{q}_j. \quad (9.6)$$

Рассмотрим теперь некоторые специальные смещения $\tilde{\mathbf{x}}_i^{(0)}$ и $\tilde{\mathbf{x}}_i^{(\mathbf{a})}$, которые получаются из (9.5) и (9.6), если положить равными нулю все нормальные координаты \mathbf{q}_j , кроме тех, для которых $\mathbf{k}_j = \mathbf{k}$. Мы можем написать

$$\tilde{\mathbf{x}}_i^{(0)} = \sum_{\substack{j=1 \\ (\mathbf{k}_j = \mathbf{k})}}^{3s} c_{ij} \mathbf{q}_j, \quad (9.5a)$$

$$\tilde{\mathbf{x}}_i^{(\mathbf{a})} = e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{a})} \sum_{\substack{j=1 \\ (\mathbf{k}_j = \mathbf{k})}}^{3s} c_{ij} \mathbf{q}_j = e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{a})} \tilde{\mathbf{x}}_i^{(0)}. \quad (9.6a)$$

Выясним закон преобразования смещений $\tilde{x}_i^{(0)}$. Очевидно, величины q_j ($k_j = k$) будут преобразовываться подобно величинам $\tilde{x}_i^{(0)}$.

При преобразовании из точечной группы F_k смещения $\tilde{x}_i^{(0)}$ могут переходить либо в линейные комбинации смещений атомов этой же ячейки, либо в линейные комбинации смещений атомов соседних ячеек. Однако для рассматриваемых специальных смещений $\tilde{x}_i^{(0)}$ в силу (9.6а) можно всегда ограничиться линейными комбинациями смещений атомов одной ячейки. Вычислить характеры преобразования величин $\tilde{x}_i^{(0)}$ можно с помощью обобщения способа, рассмотренного в главе VI. Если при преобразовании g из группы F_k атом нулевой ячейки переходит в атом ячейки a , то соответствующий вклад в характер равен

$$\left. \begin{aligned} (1 + 2 \cos \varphi) e^{i(ka)}, & \text{ если } g \text{ — поворот;} \\ (-1 + 2 \cos \varphi) e^{i(ka)}, & \text{ если } g \text{ — зеркальный поворот.} \end{aligned} \right\} \quad (9.7)$$

В результате мы получаем следующие формулы для характеров представления, которое реализуется на смещениях $\tilde{x}_i^{(0)}$:

$$\chi = (1 + 2 \cos \varphi) \sum_a n_a e^{i(ka)} \quad \text{для поворота,} \quad (9.8)$$

$$\chi = (-1 + 2 \cos \varphi) \sum_a n_a e^{i(ka)} \quad \text{для зеркального поворота,} \quad (9.9)$$

где n_a — число атомов нулевой ячейки, переходящих при соответствующем преобразовании в ячейку a .

Ясно, что такие же характеры имеет представление Γ , по которому преобразуются координаты q_j с волновым вектором $k_j = k$.

Теперь, применяя формулу (3.88), основанную на свойстве ортогональности характеров неприводимых представлений, мы получим разложение представления Γ на неприводимые.

Резюмируем полученные результаты. Нормальные колебания кристалла классифицируются с помощью волнового вектора k , лежащего в бриллюэновской зоне. Каждому вектору k соответствуют $3s$ нормальных координат, где s — число атомов в элементарной ячейке. Нормальные координаты, преобразующиеся по неприводимому представлению группы F_k , имеют одинаковую частоту. Такую же частоту имеют соответствующие нормальные координаты, принадлежащие другим векторам звезды вектора k .

Мы провели наше рассмотрение для кристаллов, пространственные группы которых не содержат несобственных трансляций. Однако все результаты могут быть аналогичным образом получены и для более сложных групп. При этом классификация нормальных координат, соответствующих одному значению волнового вектора, должна

проводиться не по представлениям группы F_k , а по представлениям группы H_k .

При получении сведений о нормальных колебаниях кристалла мы опирались только на соображения симметрии. Однако картина будет недостаточно полной, если мы не выясним некоторые дополнительные свойства спектра собственных частот кристалла. В гармоническом приближении смещения атомов кристалла удовлетворяют уравнениям

$$\ddot{x}_i^{(a)} = \sum_{j=1}^{3s} \sum_a b_{ij}^{(aa')} x_j^{(a')}. \quad (9.10)$$

Будем искать решение, соответствующее вкладу одного нормального колебания, т. е. положим

$$x_j^{(a)} = c_j e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a}) - i\omega t}. \quad (9.11)$$

Тогда система (9.10) сведется к системе $3s$ линейных однородных уравнений для коэффициентов c_i . Условием существования нетривиального решения этой системы будет условие равенства нулю ее определителя. Мы получим алгебраическое уравнение степени $3s$ относительно величин ω^2 . Решения этого уравнения и дадут собственные частоты нормальных колебаний для данного значения волнового вектора \mathbf{k} , симметрию которых мы только что определяли. Мы получим $3s$ корней $\omega_1(\mathbf{k}), \omega_2(\mathbf{k}), \dots, \omega_{3s}(\mathbf{k})$. Рассматриваемые как функции вектора \mathbf{k} величины $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_{3s}$ называют ветвями упругого спектра. Значения этих функций при $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ называют предельными частотами. Раньше мы показали, что при $\mathbf{k} = \mathbf{0}$ имеется три нормальные координаты, которые описывают смещение кристалла как целого (поступательные степени свободы). Очевидно, этим координатам соответствуют частоты, равные нулю. Поэтому мы можем утверждать, что три из ветвей спектра должны начинаться со значения ω , равного нулю. Эти три ветви называют *акустическими* ветвями спектра. Остальные $3s - 3$ ветвей называют *оптическими*.

Выше мы показали, что нормальные координаты, соответствующие одному волновому вектору и преобразующиеся по неприводимому представлению группы волнового вектора, соответствуют одной и той же частоте. Поэтому, если порядок неприводимого представления группы волнового вектора больше единицы, то в данной точке \mathbf{k} зоны Бриллюэна имеет место вырождение частоты или, как говорят, происходит «слипание ветвей». Слипание ветвей может происходить как в отдельных симметричных точках, так и вдоль осей симметрии зоны Бриллюэна.

2. Классификация электронных состояний кристалла

Рассмотрим теперь электронные состояния кристалла, предполагая, что ядра атомов фиксированы в узлах решетки. Оператор Гамильтона многоэлектронной системы, находящейся в поле этих ядер, очевидно, инвариантен относительно преобразований соответствующей пространственной группы. Поэтому собственные функции этого оператора, соответствующие одному и тому же собственному значению, преобразуются по неприводимому представлению $D_k^{(\alpha)}$ группы симметрии кристалла, и их можно выбрать так, чтобы они были также собственными функциями оператора трансляции на вектор решетки. Мы будем обозначать такие функции через $\Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, а собственное значение энергии через $E_{k\alpha}$. Здесь индекс k обозначает один из векторов звезды неприводимого представления, значок α нумерует неприводимые представления группы волнового вектора, а значок j — орты базиса α -го представления. Мы имеем

$$\begin{aligned} \hat{t}_a \Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= \Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{r}_N + \mathbf{a}) = \\ &= e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a})} \Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \end{aligned} \quad (9.12)$$

Из соотношения (9.12) следует, что функция

$$U_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R})} \Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (9.13)$$

где $\mathbf{R} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mathbf{r}_i$, инвариантна относительно трансляций. Действительно,

$$\begin{aligned} \hat{t}_a U_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) &= U_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{r}_N + \mathbf{a}) = \\ &= e^{-i(\mathbf{k}, \mathbf{R} + \mathbf{a})} \Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{a}, \dots, \mathbf{r}_N + \mathbf{a}) = \\ &= e^{-i(\mathbf{k}, \mathbf{R} + \mathbf{a})} e^{i\mathbf{k}\mathbf{a}} \Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = \\ &= e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{R})} \Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = U_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N). \end{aligned}$$

Отсюда следует, что собственные функции нашей задачи всегда могут быть представлены в виде

$$\Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N) = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{R})} U_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N), \quad (9.14)$$

где $U_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ — периодическая функция. Функции $U_{k\alpha j}$, соответствующие одному и тому же собственному значению энергии, преобразуются по неприводимому представлению группы волнового вектора k . Если теперь функцию $U_{k\alpha j}$ представить в виде ряда, расположенного по некоторой полной системе периодических функций, и подставить функцию $\Psi_{k\alpha j}(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$, определенную соотношением (9.14), в уравнение Шрёдингера, то мы получим линейную систему уравнений для определения коэффициентов разложения. Корни

соответствующего векового уравнения дадут нам собственные значения энергии как функции волнового вектора

$$E_1(\mathbf{k}), E_2(\mathbf{k}), \dots$$

Говорят, что каждая из этих функций определяет энергетическую зону кристалла. В симметричных точках зоны Бриллюэна, на осях или плоскостях симметрии, значения некоторых из этих функций E_i могут совпадать. Тогда говорят о слипании энергетических зон. Это слипание обусловлено вырождением энергии для данного значения \mathbf{k} , о котором мы говорили выше.

3. Одноэлектронное приближение

Практически метод теории групп применяется к упрощенным моделям рассматриваемой задачи. Успех этих приближений в значительной мере связан с тем, что в них учтены свойства симметрии точного решения.

Основным методом приближенного рассмотрения является метод самосогласованного поля, в котором задача о взаимодействующих электронах сводится к одноэлектронной. Взаимодействие электронов приближенно заменяется некоторым эффективным полем, обладающим симметрией кристалла. Тогда собственные функции одноэлектронного оператора энергии, обладающего группой симметрии кристалла, могут быть записаны так:

$$\Psi_{\mathbf{k}\alpha j}(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r})} U_{\mathbf{k}\alpha j}(\mathbf{r}), \quad (9.15)$$

где $U_{\mathbf{k}\alpha j}(\mathbf{r})$ — периодическая функция:

$$U_{\mathbf{k}\alpha j}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = U_{\mathbf{k}\alpha j}(\mathbf{r}). \quad (9.16)$$

Волновые функции (9.15), являющиеся базисными функциями некоторых неприводимых представлений пространственной группы, называют функциями Блоха. Эти функции могут рассматриваться как обобщенные плоские волны с переменной периодической амплитудой $U_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Вектор \mathbf{k} называют *квазиимпульсом* электрона. Собственное значение энергии $E = E(\mathbf{k})$, как функция волнового вектора \mathbf{k} , определяет одноэлектронную энергетическую зону.

Один из возможных методов решения одноэлектронной задачи состоит в разложении функции $\Psi_{\mathbf{k}\alpha j}$ по одноэлектронным волновым функциям атомов или ионов, образующих кристалл. Фактически этот метод представляет собой обобщение метода линейных комбинаций атомных орбит, который был рассмотрен в главе VII.

Условимся обозначать положение ячейки вектором \mathbf{a} , а положение атома в ячейке — вектором \mathbf{l} . Таким образом, положение l -го атома в ячейке \mathbf{a} будет определяться вектором $\mathbf{a} + \mathbf{l}$. Обозначим через $\varphi_j(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \mathbf{l})$ волновые функции l -го атома, находящегося в ячейке \mathbf{a} .

Из этих функций легко построить линейные комбинации, которые преобразуются по неприводимым представлениям группы трансляций:

$$\Phi_{jk}^{(l)}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{a}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a})} \varphi_j^{(l)}(\mathbf{r} - \mathbf{a} - \mathbf{l}). \quad (9.17)$$

Действительно, мы имеем

$$\hat{t}_{\mathbf{a}} \Phi_{jk}^{(l)} = \Phi_{jk}^{(l)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = \sum_{\mathbf{a}'} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a}')} \varphi_j^{(l)}(\mathbf{r} + \mathbf{a}' - \mathbf{a} - \mathbf{l}). \quad (9.18)$$

Введем обозначение $\mathbf{a}'' = \mathbf{a} - \mathbf{a}'$. Переходя от суммирования по \mathbf{a} к суммированию по \mathbf{a}'' , мы получим

$$\hat{t}_{\mathbf{a}'} \Phi_{jk}^{(l)}(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{a}''} e^{i(\mathbf{k}(\mathbf{a}'' + \mathbf{a}'))} \varphi_j^{(l)}(\mathbf{r} - \mathbf{a}'' - \mathbf{l}) = e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a}')} \Phi_{jk}^{(l)}(\mathbf{r}). \quad (9.19)$$

Функцию $\Psi_{\mathbf{k}\alpha j}(\mathbf{r})$ мы можем представить в виде

$$\Psi_{\mathbf{k}\alpha j}(\mathbf{r}) = \sum_{l,j} b_{\mathbf{k}lj} \Phi_{jk}^{(l)}(\mathbf{r}), \quad (9.20)$$

где коэффициенты $b_{\mathbf{k}lj}$ подлежат определению. Практически в разложении функции $\Psi_{\mathbf{k}\alpha j}$ ограничиваются конечным числом волновых функций атомов в каждой ячейке и, следовательно, конечным числом функций $\Phi_{jk}^{(l)}$ в сумме (9.20). Корни соответствующего векового уравнения дадут нам приближенные одноэлектронные энергетические зоны.

Решение векового уравнения можно упростить, предварительно построив из функций $\Phi_{jk}^{(l)}$ линейные комбинации $\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}\alpha j}$, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы волнового вектора \mathbf{k} . Это построение можно выполнить с помощью метода, который был изложен в главе VII. Однако для этого сначала надо выяснить, как преобразуются функции $\Phi_{jk}^{(l)}$ при преобразованиях из группы $F_{\mathbf{k}}$. Пусть преобразование $g \in F_{\mathbf{k}}$. Действуя на функцию $\Phi_{jk}^{(l)}$ оператором \hat{T}_g , мы получим

$$\hat{T}_g \Phi_{jk}^{(l)} = \sum_{\mathbf{a}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a})} \varphi_j(g^{-1}\mathbf{r} - \mathbf{a} - \mathbf{l}) = \sum_{\mathbf{a}} e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a})} \varphi_j(g^{-1}(\mathbf{r} - g\mathbf{a} - g\mathbf{l})). \quad (9.21)$$

Ясно, что вектор $g\mathbf{a}$ — снова вектор решетки:

$$g\mathbf{a} = \mathbf{a}'. \quad (9.22)$$

Если при преобразовании g l -й атом нулевой ячейки переходит в эквивалентный l' -й атом ячейки \mathbf{a}_1 , то мы можем написать

$$g\mathbf{l} = \mathbf{a}_1 + \mathbf{l}'. \quad (9.23)$$

Таким образом, мы получим

$$\widehat{T}_g \Phi_{jk}^{(l)} = \sum_a e^{i(ka)} \varphi_j(g^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{a}' - \mathbf{a}_1 - \mathbf{l}')). \quad (9.24)$$

Предположим теперь, что закон преобразования атомных волновых функций для операции g нам известен, т. е.

$$\varphi_j^{(l)}(g^{-1} \mathbf{r}) = \sum_i c_{ij}(g) \varphi_i^{(l)}(\mathbf{r}). \quad (9.25)$$

Используя это соотношение, мы найдем

$$\widehat{T}_g \Phi_{jk}^{(l)} = \sum_a e^{i(ka)} \sum_i c_{ij}(g) \varphi_i^{(l)}(\mathbf{r} - \mathbf{a}''), \quad (9.26)$$

где

$$\mathbf{a}'' = \mathbf{a}' + \mathbf{a}_1 = g\mathbf{a} + \mathbf{a}_1. \quad (9.27)$$

Перейдя от суммирования по \mathbf{a} к суммированию по \mathbf{a}'' , мы получим

$$\widehat{T}_g \Phi_{jk}^{(l)} = \sum_{\mathbf{a}''} e^{i(k, g^{-1}(\mathbf{a}'' - \mathbf{a}_1))} \sum_i c_{ij}(g) \varphi_i^{(l)}(\mathbf{r} - \mathbf{a}''). \quad (9.28)$$

Воспользуемся теперь тем, что ортогональное преобразование g принадлежит группе волнового вектора. Следовательно,

$$e^{i(k, g^{-1}(\mathbf{a}'' - \mathbf{a}_1))} = e^{i(g\mathbf{k}, (\mathbf{a}'' - \mathbf{a}_1))} = e^{i(\mathbf{k}, (\mathbf{a}'' - \mathbf{a}_1))}.$$

В результате мы получим

$$\widehat{T}_g \Phi_{jk}^{(l)} = e^{-i(k\mathbf{a})} \sum_i c_{ij}(g) \Phi_{ik}^{(l)}. \quad (9.29)$$

Таким образом, функции $\Phi_{jk}^{(l)}$ при преобразованиях из группы F_k преобразуются так же, как атомные функции в молекулярной задаче, с тем лишь отличием, что если при данном преобразовании g l -й атом нулевой ячейки переходит в l -й атом ячейки \mathbf{a} , то функции $\Phi_{ik}^{(l)}$, в линейную комбинацию которых переходит функция $\Phi_{jk}^{(l)}$, дополнительно приобретают множитель $e^{-i(k\mathbf{a})}$.

Если решетка одноатомная, т. е. в каждой элементарной ячейке имеется только один атом, то построение функций $\widetilde{\Psi}_{k\alpha i}$, преобразующихся по неприводимым представлениям группы F_k , сводится к построению линейных комбинаций $\varphi_{\alpha i}$ атомных функций, которые преобразуются по этим неприводимым представлениям. Действительно, легко проверить, что в этом случае функции $\widetilde{\Psi}_{k\alpha i}$ могут быть представлены в виде

$$\widetilde{\Psi}_{k\alpha i}(\mathbf{r}) = \sum_a e^{i(k\mathbf{a})} \varphi_{\alpha i}(\mathbf{r} - \mathbf{a}). \quad (9.30)$$

Если в разложении представления группы $F_{\mathbf{k}}$, по которому образуются функции $\Phi_{j\mathbf{k}}^{(l)}$, какое-нибудь неприводимое представление содержится только один раз, то соответствующие ему функции $\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}\alpha i}$ будут приближенными одноэлектронными волновыми функциями рассмотренной задачи. В общем случае, когда некоторое неприводимое представление $\Gamma^{(\alpha)}$ содержится в упомянутом представлении несколько раз, для определения волновых функций $\tilde{\Psi}_{\mathbf{k}\alpha i}$ надо решать вековое уравнение, порядок которого равен кратности представления $\Gamma^{(\alpha)}$.

Упражнение

9.1. Получить классификацию нормальных колебаний для двухатомного кристалла с простой кубической решеткой (рис. 14).

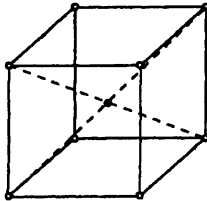


Рис. 14.

Глава X

Непрерывные группы

До сих пор мы рассматривали конечные группы. Теперь мы перейдем к изучению бесконечных непрерывных групп.

1. Непрерывные группы линейных преобразований

Мы будем рассматривать группы линейных преобразований, элементы матриц которых являются аналитическими функциями вещественных параметров. Пусть $g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)$ — элемент нашей группы. Параметры $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r$ выбираются таким образом, что существует однозначное соответствие между окрестностью начала координат в r -мерном пространстве параметров и окрестностью единичного элемента группы. Если

$$g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)g(\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_r) = g(\alpha''_1, \alpha''_2, \dots, \alpha''_r), \quad (10.1)$$

то

$$\alpha''_k = \varphi_k(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r; \alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_r). \quad (10.2)$$

Функции φ_k , определяющие закон умножения в группе, предполагаются дифференцируемыми по всем своим аргументам. Кроме того, на них должны быть наложены определенные ограничения, обусловленные общими групповыми постулатами. Рассматриваемые нами группы линейных преобразований, удовлетворяющие перечисленным требованиям, принадлежат к классу непрерывных групп Ли. Если параметры α изменяются в некоторой ограниченной области r -мерного пространства, то группу называют *компактной*.

Перечислим некоторые группы Ли линейных преобразований:

1) Полная линейная группа $GL(n)$ состоит из неособых комплексных матриц порядка n . Элементы этой группы зависят от $2n^2$ вещественных параметров.

2) Унимодулярная группа $SL(n)$ состоит из всех комплексных матриц n -го порядка, определитель которых равен 1. Для этой группы $r = 2n^2 - 2$. Ее вещественная подгруппа зависит от $n^2 - 1$ параметров.

3) Унитарная группа $U(n)$ состоит из унитарных матриц n -го порядка. Так как на элементы унитарной матрицы накладываются n^2 условий ортогональности и нормировки, то число параметров, определяющих произвольный элемент группы $U(n)$, равно $2n^2 - n^2 = n^2$.

Унитарная группа является компактной, поскольку сумма квадратов модулей элементов унитарной матрицы n -го порядка равна n . Преобразования из унитарной группы сохраняют неизменной квадратичную форму

$$x_1 \bar{x}_1 + x_2 \bar{x}_2 + \dots + x_n \bar{x}_n.$$

4) Унитарная унимодулярная группа $SU(n)$ является подгруппой группы $U(n)$; она состоит из унитарных матриц с определителем, равным 1. Число ее параметров $r = n^2 - 1$.

5) Ортогональная группа $O(n)$ является вещественной подгруппой группы $U(n)$. На элементы произвольной ортогональной матрицы накладываются $n + \frac{n(n-1)}{2}$ условий ортогональности и нормировки. Поэтому число параметров в этой группе равно $\frac{n(n-1)}{2}$. Определитель ортогональной матрицы равен 1 или -1 .

6) Группа вращений $O^+(n)$ состоит из ортогональных матриц n -го порядка с определителем, равным 1. Ясно, что число параметров в этой группе также равно $\frac{n(n-1)}{2}$. Особый интерес для физических приложений представляет группа $O^+(3)$ трехмерных вращений.

2. Общие свойства групп Ли

Рассмотрим группу G линейных преобразований с матричными элементами $g_{ik} = g_{ik}(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)$. Введем в рассмотрение производные от этих матриц по параметрам α_i в точке $\alpha_k = 0$ ($k = 1, 2, \dots, r$), т. е. введем матрицы I_i с элементами

$$\{I_i\}_{ik} = \left(\frac{\partial g_{ik}}{\partial \alpha_i} \right)_0. \quad (10.3)$$

Матрицы I_i мы будем называть *инфинитезимальными* матрицами группы G ¹⁾.

Каждый элемент матрицы g мы можем разложить в ряд по степеням α_i . Удерживая в этих разложениях только линейные относительно α_i члены, мы сможем представить общий элемент группы в окрестности единичного элемента группы в виде

$$g = E + \sum_{i=1}^r \alpha_i I_i. \quad (10.4)$$

В выборе параметров группы имеется известный произвол. Действительно, мы всегда можем перейти к новым параметрам, взяв

¹⁾ В литературе для инфинитезимальных матриц также употребляется термин *генераторы*

в качестве их любые однозначные функции параметров $\alpha_1, \dots, \alpha_r$:

$$\begin{aligned}\bar{\alpha}_1 &= \bar{\alpha}_1(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r), \\ &\dots \\ \bar{\alpha}_r &= \bar{\alpha}_r(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r),\end{aligned}$$

для которых функциональный определитель $\left| \frac{\partial \bar{\alpha}_i}{\partial \alpha_j} \right| \neq 0$. В частности, если каждый из параметров α_i умножить на число λ_i , т. е. положить

$$\bar{\alpha}_i = \lambda_i \alpha_i,$$

то для новых инфинитезимальных матриц, соответствующих параметрам $\bar{\alpha}_i$, мы получим

$$\bar{I}_i = \frac{1}{\lambda_i} I_i.$$

В общем случае мы будем иметь

$$\bar{I}_i = \sum_j I_j \left(\frac{\partial \alpha_j}{\partial \bar{\alpha}_i} \right)_0. \quad (10.5)$$

Составим теперь сопряженный с g' элемент $gg'g^{-1}$ группы. Если g' — бесконечно малое преобразование (10.4), то с точностью до линейных членов по α_i мы можем написать

$$gg'g^{-1} = E + \sum_{i=1}^r g I_i g^{-1} \alpha_i. \quad (10.6)$$

Мы видим, что преобразование $gg'g^{-1}$ можно характеризовать теми же значениями параметров α_i , что и преобразование g' , если в качестве инфинитезимальных матриц выбрать матрицы

$$\bar{I}_i = g I_i g^{-1}. \quad (10.7)$$

Преобразованию (10.6) согласно (10.2), очевидно, соответствует следующее преобразование параметров:

$$\bar{\alpha}_k = \varphi_k(\gamma; \varphi(\alpha, \bar{\gamma})),$$

где γ и $\bar{\gamma}$ обозначают совокупности значений параметров, соответствующих матрицам g и g^{-1} . Предположим теперь, что параметры γ также являются малыми величинами. Тогда с точностью до членов более высокого порядка малости по γ мы можем написать

$$g = E + \sum_k \gamma_k I_k, \quad g^{-1} = E - \sum_k \gamma_k I_k. \quad (10.8)$$

Подставляя (10.8) в (10.7), получим

$$\tilde{I}_s = I_s + \sum_k (I_k I_s - I_s I_k) \gamma_k + \text{члены, содержащие более высокие степени } \gamma_k. \quad (10.9)$$

В левой части этого равенства согласно (10.5) стоит линейная комбинация инфинитезимальных матриц. Поэтому в силу независимости членов с разными степенями параметров γ_k мы можем утверждать, что коммутатор $I_k I_s - I_s I_k$ также есть линейная комбинация инфинитезимальных матриц. Таким образом, мы имеем

$$I_k I_s - I_s I_k = \sum_l c_{ksl} I_l. \quad (10.10)$$

Коэффициенты c_{ksl} называют *структурными постоянными* группы.

Инфинитезимальные матрицы однозначно определяют группу, т. е., зная эти матрицы, мы можем определить любой конечный элемент группы. Справедливость этого утверждения мы покажем для того случая, когда элемент группы матриц $g(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r)$ одновременно является элементом однопараметрической подгруппы этой группы¹⁾. Итак, рассмотрим однопараметрическую подгруппу группы G . Ее образует некоторая совокупность матриц g , параметры которых могут рассматриваться как дифференцируемые функции параметра θ : $\alpha_i = \alpha_i(\theta)$. Параметр θ предполагаем выбранным таким образом, что

$$g(\theta_1)g(\theta_2) = g(\theta_1 + \theta_2), \quad (10.11)$$

$$g(0) = E. \quad (10.12)$$

Продифференцируем обе части равенства (10.11) по θ_1 и положим затем $\theta_1 = 0$, $\theta_2 = \theta$. Тогда получим

$$\frac{dg}{d\theta} = I_\theta g(\theta), \quad (10.13)$$

где $I_\theta = \left(\frac{dg}{d\theta} \right)_{\theta=0}$ есть инфинитезимальная матрица, соответствующая параметру θ . Уравнение (10.13) представляет собой систему обыкновенных дифференциальных уравнений для элементов матрицы $g(\theta)$, которая имеет единственное решение, удовлетворяющее начальному условию (10.12). Это решение можно записать в виде

$$g(\theta) = \exp I_\theta \theta, \quad (10.14)$$

¹⁾ В теории непрерывных групп доказывается, что любой элемент группы либо является элементом однопараметрической подгруппы, либо может быть представлен как произведение таких элементов (см., например, Л. Эйзенхарт. Непрерывные группы преобразований. ИЛ. 1947, гл. 1).

где через $\exp I_\theta$ обозначен ряд

$$\exp I_\theta = E + I_\theta + \frac{1}{2}(I_\theta)^2 + \frac{1}{3!}(I_\theta)^3 + \dots \quad (10.15)$$

Используя формулу (10.5), мы можем написать

$$I_\theta = \sum_j I_j \left(\frac{d\alpha_j}{d\theta} \right)_{\theta=0},$$

откуда

$$g(\theta) = \exp I_\theta = \exp \sum_{j=1}^r I_j \left(\frac{d\alpha_j}{d\theta} \right)_{\theta=0} \theta. \quad (10.14a)$$

Полученные нами результаты (формулы (10.10) и (10.14)) относились к элементам группы линейных преобразований. Очевидно, что они справедливы также для любой группы матриц $D(g)$, дающих представление группы G . Инфинитезимальные матрицы представления D определяются по формуле

$$A_s = \frac{\partial}{\partial \alpha_s} D(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_r) \Big|_{\alpha=0}. \quad (10.16)$$

Для инфинитезимальных матриц представления выполняются те же перестановочные соотношения, что и для инфинитезимальных матриц группы. Это объясняется тем, что структурные постоянные группы однозначно определяются законом группового умножения (10.2), который одинаков для группы и для всех ее представлений.

Некоторые из свойств представлений конечных групп, рассмотренных в предыдущих главах (например, леммы Шура), не были связаны с конечностью группы и поэтому справедливы также и для бесконечных групп. Однако доказательство унитарности представлений, свойства ортогональности матричных элементов неприводимых представлений и все вытекающие из них следствия основаны на возможности суммирования по группе, которое было определено нами для конечных групп. Для непрерывных групп суммирование по группе должно быть заменено интегрированием по параметрам группы. Оказывается, что интегрирование по группе можно ввести только для компактных групп. Поэтому упомянутые выше свойства конечных групп могут быть распространены только на компактные группы.

3. Инфинитезимальные преобразования и законы сохранения

В главе V мы выяснили, что условие инвариантности физической системы относительно преобразований ее группы симметрии G может

быть записано в виде

$$\widehat{H}\widehat{T}_g = \widehat{T}_g\widehat{H} \quad (10.17)$$

или в матричной форме:

$$HD(g) = D(g)H. \quad (10.17a)$$

Здесь \widehat{H} — оператор Гамильтона системы, \widehat{T}_g — элемент группы операторов, изоморфной группе G , а $D(g)$ — матрица представления группы G .

Если группа преобразований G есть непрерывная группа, то для того, чтобы выполнялось условие (10.17), необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$HA_i = A_iH, \quad (10.18)$$

где A_i — инфинитезимальные матрицы представления группы G . Необходимость этого условия очевидна: если для всех элементов группы G выполняется условие (10.17), то в силу определения инфинитезимальных матриц A_i условие (10.18) также выполняется. Легко убедиться и в достаточности условия (10.18). Мы показали справедливость формул (10.14). Поэтому, если выполняется условие (10.18), т. е. H коммутирует с матрицами A_i , то H коммутирует также со всеми членами ряда, соответствующего произвольному элементу группы G .

Вместо инфинитезимальных матриц A_j введем матрицы $B_j = -iA_j$. Докажем, что если представление унитарно, то матрицы B_j эрмитовы. Действительно, напишем условие унитарности представления $D(g)$ с точностью до членов, линейных по параметрам группы. Мы получим

$$E = D^+(g)D(g) = \left(E - i \sum_j B_j^+ \alpha_j\right) \left(E + i \sum_j B_j \alpha_j\right),$$

откуда находим

$$\sum_j \alpha_j (B_j^+ - B_j) = 0$$

или, в силу независимости параметров α_j ,

$$B_j^+ = B_j. \quad (10.19)$$

Эрмитовы матрицы B_j также коммутируют с матрицей H :

$$HB_j = B_jH. \quad (10.18a)$$

В квантовой механике эрмитовы матрицы или операторы сопоставляются физическим величинам, а соотношение коммутации (10.18a) означает, что соответствующая физическая величина является интегралом движения. Таким образом, законы сохранения в квантовой механике можно рассматривать как следствие симметрии гамильтониана относительно некоторой непрерывной группы преобразований.

4. Группа двумерных вращений $O^+(2)$

Элементами этой группы являются вращения в трехмерном пространстве относительно некоторой оси или, что то же, вращения в плоскости, перпендикулярной к этой оси, вокруг начала координат. Если мы примем ось вращения за ось Oz , то элементами группы $O^+(2)$ будут преобразования

$$x' = x \cos \varphi - y \sin \varphi, \quad y' = x \sin \varphi + y \cos \varphi, \quad (10.20)$$

где φ — угол поворота, $0 \leq \varphi < 2\pi$. Таким образом, группа $O^+(2)$ является однопараметрической компактной группой. Так как она является абелевой, то все ее неприводимые представления первого порядка в силу компактности группы унитарны. Поэтому мы можем утверждать, что в неприводимом представлении каждому элементу группы сопоставляется число $\chi(\varphi)$, по модулю равное единице. Кроме того, должны выполняться условия

$$\chi(\varphi_1)\chi(\varphi_2) = \chi(\varphi_1 + \varphi_2), \quad \chi(0) = \chi(2\pi), \quad (10.21)$$

откуда легко заключить, что

$$\chi(\varphi) = \exp i m \varphi, \quad \text{где } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (10.22)$$

Группу $O^+(2)$ можно рассматривать как предельный случай точечной группы C_n при $n \rightarrow \infty$. Поэтому ее иногда обозначают через C_∞ . Физический интерес представляют группа $C_{\infty v} = C_\infty \times \sigma_v$ (группа симметрии двухатомной молекулы с различными ядрами) и группа $D_{\infty h} = C_{\infty v} \times i$ (группа симметрии двухатомной молекулы с одинаковыми ядрами). Стационарные состояния и энергетические уровни таких молекул классифицируются по неприводимым представлениям этих групп. Характеры неприводимых представлений этих групп могут быть получены тем же способом, что и характеры неприводимых представлений групп C_{nv} и C_{nh} (см. главу VI).

5. Группа трехмерных вращений $O^+(3)$

Перейдем к рассмотрению группы $O^+(3)$ вращений в трехмерном пространстве. Как мы знаем, эта группа является трехпараметрической. В качестве ее параметров возьмем сейчас три составляющие $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ вектора α , направленного по оси вращения и равного по длине углу поворота. Направление поворота определяется по правилу буравчика. Очевидно, что всегда можно считать $|\alpha| \leq \pi$. Поэтому областью изменения параметров α_i является шар с радиусом π , и, следовательно, группа $O^+(3)$ компактна. Обратим внимание на то, что различным внутренним точкам шара соответствуют различные вращения, в то время как любым двум точкам поверхности шара, лежащим на противоположных концах диаметра, соответствует одно и то же вращение (на угол π).

Найдем инфинитезимальные матрицы I_i группы вращения. Очевидно, при дифференцировании матрицы $g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$, являющейся элементом группы $O^+(3)$, по одному из параметров мы можем положить остальные параметры равными нулю. Поэтому для вычисления I_1 рассмотрим матрицу, соответствующую вектору $\alpha(\alpha_1, 0, 0)$, т. е. вращению на угол α_1 относительно оси Ox . Это будет матрица

$$g(\alpha_1, 0, 0) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \alpha_1 & -\sin \alpha_1 \\ 0 & \sin \alpha_1 & \cos \alpha_1 \end{pmatrix},$$

и, следовательно,

$$I_1 = \left. \frac{\partial g(\alpha_1, 0, 0)}{\partial \alpha_1} \right|_{\alpha_1=0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Таким же образом находим

$$I_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad I_3 = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Легко поверить, что эти матрицы удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} I_1 I_2 - I_2 I_1 &= I_3, \\ I_2 I_3 - I_3 I_2 &= I_1, \\ I_3 I_1 - I_1 I_3 &= I_2. \end{aligned} \right\} \quad (10.23)$$

Покажем, что приращение произвольного вектора при повороте на бесконечно малый угол вокруг определенной оси может быть выражено через матрицы I_i . Для этого рассмотрим вектор

$$\mathbf{r}' = g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)\mathbf{r} = \mathbf{r} + \delta\mathbf{r}.$$

Здесь матрица $g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ — произвольный элемент группы $O^+(3)$. При малых значениях параметров мы можем воспользоваться формулой (10.4) и написать

$$\mathbf{r}' = \{E + \alpha_1 I_1 + \alpha_2 I_2 + \alpha_3 I_3\}\mathbf{r}. \quad (10.24)$$

В случае вращения вокруг одной из координатных осей, например Ox , с точностью до членов первого порядка малости относительно α_1 мы будем иметь

$$\delta\mathbf{r} = \alpha_1 I_1 \mathbf{r} = \begin{pmatrix} 0 \\ -\alpha_1 x_3 \\ \alpha_1 x_2 \end{pmatrix}, \quad (10.25)$$

и, следовательно, изменение вектора \mathbf{r} при вращении на малый угол относительно оси, соответствующей параметру α_i , определяется матрицей $\alpha_i I_i$.

Покажем теперь, каким образом можно любую матрицу, соответствующую вращению с заданными значениями параметров α_1 , α_2 и α_3 , выразить через инфинитезимальные матрицы. Для этого рассмотрим однопараметрическую группу поворотов относительно оси, направленной по вектору $\alpha(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$. Интересующая нас матрица соответствует повороту относительно этой оси на угол $\alpha = \sqrt{\alpha_1^2 + \alpha_2^2 + \alpha_3^2}$, причем, очевидно,

$$\alpha_1 = \alpha \cos(\widehat{Ox, \alpha}), \quad \alpha_2 = \alpha \cos(\widehat{Oy, \alpha}), \quad \alpha_3 = \alpha \cos(\widehat{Oz, \alpha}). \quad (10.26)$$

Используя формулу (10.14a), мы можем написать

$$\begin{aligned} g(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) &= \exp I_\alpha \alpha = \\ &= \exp \{ (I_1 \cos(\widehat{Ox, \alpha}) + I_2 \cos(\widehat{Oy, \alpha}) + I_3 \cos(\widehat{Oz, \alpha})) \alpha \} = \\ &= \exp(I_1 \alpha_1 + I_2 \alpha_2 + I_3 \alpha_3). \end{aligned} \quad (10.27)$$

Упражнения

10.1. Найти матрицы неприводимых представлений группы $C_{\text{оов}}$.

10.2. Найти матрицы неприводимых представлений группы $D_{\text{ооh}}$.

Глава XI

Неприводимые представления группы трехмерных вращений

В этой главе мы найдем все неприводимые представления группы $O^+(3)$. Для этой цели нами будет использован метод, основанный на рассмотрении инфинитезимальных преобразований группы.

1. Инфинитезимальные матрицы представлений группы $O^+(3)$

В предыдущей главе мы нашли инфинитезимальные матрицы группы $O^+(3)$ и показали, что они удовлетворяют перестановочным соотношениям (10.23), левые части которых можно условно записать в форме векторного произведения:

$$[I, J] = I. \quad (11.1)$$

Мы знаем, что инфинитезимальные матрицы представлений группы должны удовлетворять таким же перестановочным соотношениям. Эти матрицы мы будем обозначать буквами A_1, A_2, A_3 .

Из результатов, полученных в предыдущей главе, следует, что если известны инфинитезимальные матрицы A_i некоторого представления, то матрица представления, соответствующая произвольному повороту с параметрами $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, может быть записана в виде

$$D(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = \exp[\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3]. \quad (11.2)$$

Таким образом, отыскание представлений группы $O^+(3)$ сводится к нахождению матриц A_1, A_2, A_3 , удовлетворяющих перестановочным соотношениям (11.1).

Выясним некоторые свойства матриц A_i . Группа вращений является компактной, и, следовательно, любое ее представление эквивалентно унитарному. Поэтому мы можем ограничиться рассмотрением только унитарных представлений. Пусть $D(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ — унитарное представление, т. е.

$$D^+(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) D(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = E. \quad (11.3)$$

Записывая это равенство с точностью до линейных членов по α_i , мы получим

$$(E + \alpha_1 A_1^+ + \alpha_2 A_2^+ + \alpha_3 A_3^+)(E + \alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3) = E,$$

откуда

$$A_i^+ = -A_i. \quad (11.4)$$

Таким образом, матрицы A_i являются антиэрмитовыми.

Для дальнейшего удобно вместо матриц A_i рассматривать их линейные комбинации:

$$H_+ = iA_1 - A_2, \quad H_- = iA_1 + A_2, \quad H_3 = iA_3. \quad (11.5)$$

Легко видеть, что матрица H_3 эрмитова, а матрицы H_+ и H_- эрмитово сопряжены. Используя соотношения (11.1), можно показать, что эти матрицы удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} H_+ H_- - H_- H_+ &= 2H_3, \\ H_- H_3 - H_3 H_- &= H_-, \\ H_3 H_+ - H_+ H_3 &= H_+. \end{aligned} \right\} \quad (11.6)$$

Выясним, какими свойствами обладают собственные векторы матрицы H_3 . Прежде всего покажем, что если v_λ — собственный вектор матрицы H_3 , соответствующий собственному значению λ , то $H_+ v_\lambda$ будет собственным вектором матрицы H_3 , соответствующим собственному значению $\lambda + 1$. Действительно, пусть

$$H_3 v_\lambda = \lambda v_\lambda. \quad (11.7)$$

Тогда,

$$H_3 H_+ v_\lambda = (H_+ H_3 + H_+) v_\lambda = (\lambda + 1) H_+ v_\lambda. \quad (11.8)$$

Аналогично доказывается, что $H_- v_\lambda$ есть собственный вектор матрицы H_3 , соответствующий собственному значению $\lambda - 1$. Мы имеем

$$H_3 H_- v_\lambda = (H_- H_3 - H_-) v_\lambda = (\lambda - 1) H_- v_\lambda. \quad (11.9)$$

Так как матрица H_3 эрмитова, то все ее собственные значения вещественны, а собственные векторы, соответствующие различным собственным значениям, ортогональны друг другу.

Покажем теперь, что все собственные значения матрицы H_3 будут целыми или полужелыми числами, различающимися на единицу, причем если наибольшее собственное значение равно j , то наименьшее собственное значение равно $-j$.

Будем считать все собственные векторы v_λ матрицы H_3 нормированными на единицу. Тогда в силу (11.8) и (11.9) мы можем написать

$$H_- v_\lambda = \beta_\lambda v_{\lambda+1}, \quad (11.10)$$

$$H_- v_\lambda = \alpha_\lambda v_{\lambda-1}, \quad (11.11)$$

где β_λ и α_λ — некоторые вещественные числа, которые мы найдем, используя условие нормированности векторов v_λ . Так как матрицы H_+ и H_- эрмитово сопряжены, то мы имеем

$$\begin{aligned} (H_+ v_k, v_{k+1}) &= \beta_k (v_{k+1}, v_{k+1}) = \beta_k = \\ &= (v_k, H_- v_{k+1}) = \alpha_{k+1} (v_k, v_k) = \alpha_{k+1}. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\beta_k = \alpha_{k+1}. \quad (11.12)$$

Для того чтобы получить явные выражения для этих коэффициентов, найдем рекуррентное соотношение для коэффициентов β_k . Если $k < j$, то мы можем написать

$$\begin{aligned} H_+ v_{k-1} &= \frac{1}{\alpha_k} H_+ H_- v_k = \frac{1}{\alpha_k} (H_- H_+ + 2H_3) v_k = \\ &= \frac{1}{\alpha_k} (\alpha_{k+1} \beta_k + 2k) v_k = \beta_{k-1} v_k. \end{aligned}$$

Отсюда, учитывая (11.12), получаем

$$\beta_k^2 + 2k = \beta_{k-1}^2. \quad (11.13)$$

Если же $k = j$, то $H_+ v_k = 0$, и, следовательно,

$$\beta_{j-1}^2 = 2j. \quad (11.14)$$

Используя соотношения (11.13) и (11.14), мы по индукции получаем

$$\beta_k^2 = j(j+1) - k(k+1). \quad (11.15)$$

Отсюда, используя (11.12), находим, что

$$\alpha_k^2 = j(j+1) - k(k-1). \quad (11.16)$$

Таким образом, матрицы H_+ , H_- , H_3 действуют на нормированные векторы v_k следующим образом:

$$\left. \begin{aligned} H_3 v_k &= k v_k, \\ H_- v_k &= \sqrt{j(j+1) - k(k-1)} v_{k-1}, \\ H_+ v_k &= \sqrt{j(j+1) - k(k+1)} v_{k+1}. \end{aligned} \right\} \quad (11.17)$$

Действуя последовательными степенями матрицы H_- на собственный вектор v_j , мы получим набор собственных векторов

$$v_j, v_{j-1}, v_{j-2}, \dots \quad (11.18)$$

В силу (11.17) последним вектором в этом наборе будет собственный вектор v_{-j} , так как $H_- v_{-j} = 0$. Отсюда следует, что наименьшее собственное значение матрицы H_3 равно $-j$. Число всех собственных векторов, очевидно, будет равно $2j + 1$, и, значит, j может быть либо *целым*, либо *полуцелым* числом.

2. Неприводимые представления группы $O^+(3)$

Ортонормированные собственные векторы

$$v_j, v_{j-1}, v_{j-2}, \dots, v_{-j}$$

матрицы H_3 образуют базис пространства R_{2j+1} . Этот базис в дальнейшем мы будем называть *каноническим*. Из формул (11.17) следует, что пространство R_{2j+1} инвариантно по отношению к преобразованиям с матрицами H_+ , H_- , H_3 , и, следовательно, в нем реализуется некоторое представление группы $O^+(3)$. Покажем, что это представление неприводимо. Для этого докажем, что пространство R_{2j+1} не имеет инвариантных подпространств по отношению к преобразованиям с матрицами $D(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ этого представления. Допустим противное, т. е. предположим, что существует подпространство $R' \subset R_{2j+1}$, инвариантное относительно всех преобразований $D(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$. Но тогда это подпространство должно быть инвариантно также относительно инфинитезимальных преобразований A_i (или H_+ , H_- , H_3). Пусть $h \in R'$ — собственный вектор матрицы H_3 , соответствующий наибольшему собственному значению. Так как $R' \subset R_{2j+1}$, то вектор h может быть представлен в виде линейной комбинации векторов v_k :

$$h = \sum_{k=-j}^j c_k v_k. \quad (11.19)$$

Очевидно, что

$$H_+ h = 0. \quad (11.20)$$

Следовательно, мы получаем

$$H_+ h = \sum_{k=-j}^j c_k H_+ v_k = \sum_{k=-j}^j c_k \beta_k v_{k+1} = 0, \quad (11.21)$$

откуда в силу линейной независимости векторов v_k

$$c_{-j} = c_{-j+1} = \dots = c_{j-1} = 0. \quad (11.22)$$

Таким образом, мы получаем, что

$$\mathbf{h} = c_j \mathbf{v}_j, \quad (11.23)$$

и, следовательно, $\mathbf{v}_j \in R'$. Но тогда все векторы $\mathbf{v}_{j-1}, \mathbf{v}_{j-2}, \dots, \mathbf{v}_{-j}$ также должны принадлежать R' , и, значит, R' совпадает с пространством R_{2j+1} . Таким образом, неприводимость представления, реализующегося в пространстве R_{2j+1} , доказана.

Мы видим, что неприводимое представление группы $O^+(3)$ определяется заданием наибольшего собственного значения j матрицы H_3 . Число j называется *весом* неприводимого представления. Неприводимое представление с весом j мы будем обозначать через $D^{(j)}$. Порядок представления $D^{(j)}$, очевидно, равен $2j + 1$.

Докажем, что все орты базиса неприводимого представления являются собственными векторами матрицы

$$A^2 = A_1^2 + A_2^2 + A_3^2, \quad (11.24)$$

соответствующими собственному значению $-j(j+1)$. Выражая матрицу A^2 через матрицы H_+, H_-, H_3 , мы будем иметь

$$A^2 \mathbf{v}_k = -(H_+ H_- - H_3 + H_3^2) \mathbf{v}_k = -(\alpha_k^2 - k + k^2) \mathbf{v}_k,$$

откуда

$$A^2 \mathbf{v}_k = -j(j+1) \mathbf{v}_k \quad (k = -j, -j+1, \dots, j). \quad (11.25)$$

Определим теперь вид инфинитезимальных матриц A_i неприводимого представления $D^{(j)}$ в каноническом базисе. Из формул (11.5) и (11.17) мы получаем

$$\left. \begin{aligned} A_1 \mathbf{v}_k &= -\frac{i}{2} \{ \alpha_k \mathbf{v}_{k-1} + \alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1} \}, \\ A_2 \mathbf{v}_k &= \frac{1}{2} \{ \alpha_k \mathbf{v}_{k-1} - \alpha_{k+1} \mathbf{v}_{k+1} \}, \\ A_3 \mathbf{v}_k &= -ik \mathbf{v}_k. \end{aligned} \right\} \quad (11.26)$$

Отсюда

$$\left. \begin{aligned} \{A_1\}_{kl} &= (\mathbf{v}_l, A_1 \mathbf{v}_k) = -\frac{i}{2} \{ \alpha_k \delta_{l, k-1} + \alpha_{k+1} \delta_{l, k+1} \}, \\ \{A_2\}_{kl} &= (\mathbf{v}_l, A_2 \mathbf{v}_k) = \frac{1}{2} \{ \alpha_k \delta_{l, k-1} - \alpha_{k+1} \delta_{l, k+1} \}, \\ \{A_3\}_{kl} &= (\mathbf{v}_l, A_3 \mathbf{v}_k) = -ik \delta_{lk}, \\ &k, l = -j, -j+1, \dots, j, \end{aligned} \right\} \quad (11.27)$$

и, следовательно, матрицы A_i имеют вид

$$\begin{aligned}
 A_1 &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2}\alpha_{-j+1} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ -\frac{i}{2}\alpha_{-j+1} & 0 & -\frac{i}{2}\alpha_{-j+2} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{i}{2}\alpha_{-j+2} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & -\frac{i}{2}\alpha_{j-1} & 0 & -\frac{i}{2}\alpha_j \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & -\frac{i}{2}\alpha_j & 0 \end{pmatrix}, \\
 A_2 &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2}\alpha_{-j+1} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2}\alpha_{-j+1} & 0 & -\frac{1}{2}\alpha_{-j+2} & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{2}\alpha_{-j+2} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & & \frac{1}{2}\alpha_{j-1} & 0 & -\frac{1}{2}\alpha_j \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & \frac{1}{2}\alpha_j & 0 \end{pmatrix}, \\
 A_3 &= \begin{pmatrix} ij & 0 & \dots & 0 \\ 0 & i(j-1) & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & -ij \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{11.28}$$

Для определения матриц $D^{(j)}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)$ можно воспользоваться формулой (11.2):

$$D^{(j)}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = e^{\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2 + \alpha_3 A_3}. \tag{11.29}$$

Определим, например, вид матрицы $D^{(j)}(0, 0, \alpha_3)$ в каноническом базисе. Согласно (11.29) мы имеем

$$D^{(j)}(0, 0, \alpha_3) = e^{\alpha_3 A_3}. \tag{11.30}$$

Так как в каноническом базисе матрица A_3 имеет диагональный вид (см. (11.28)), то все степени этой матрицы также будут диагональными матрицами, и, следовательно, представляя (11.30) в виде ряда и затем суммируя ряды, соответствующие одинаковым элементам матриц, мы сможем написать

$$D^{(j)}(0, 0, \alpha_3) = \begin{pmatrix} e^{ij\alpha_3} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i(j-1)\alpha_3} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-ij\alpha_3} \end{pmatrix}. \tag{11.31}$$

С помощью (11.31) легко сосчитать характеры неприводимого представления $D^{(j)}$. Действительно, в один класс группы вращений входят повороты вокруг различных осей на один и тот же угол. Класс определяется лишь углом поворота, и в качестве представителя класса можно выбрать поворот на угол φ вокруг оси Oz . Из (11.31) следует, что характер класса вращений на угол φ равен

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \sum_{i=-j}^j e^{i i \varphi} = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\varphi}{\sin \frac{\varphi}{2}}. \quad (11.32)$$

3. Двухзначные представления

Матрица (11.31) соответствует повороту на угол α_3 вокруг оси Oz . Единичному элементу группы $O^+(3)$ в представлении матрицами $D^{(j)}$ соответствует единичная матрица E_{2j+1} . Поворот на 2π вокруг оси Oz также является единичным элементом группы $O^+(3)$, но, в то время как при j целом $D^{(j)}(0, 0, 2\pi) = E_{2j+1}$, при j полуцелом $D^{(j)}(0, 0, 2\pi) = -E_{2j+1}$. Таким образом, при полуцелом j единичному элементу группы $O^+(3)$ соответствуют две матрицы E и $-E$ и, следовательно, каждому элементу группы $O^+(3)$ соответствуют две матрицы $D^{(j)}$ и $-D^{(j)}$, элементы которых различаются знаками. Говорят, что в случае полуцелого j матрицы $D^{(j)}$ дают «двухзначное представление» группы $O^+(3)$. Двухзначные представления играют весьма важную роль в физических приложениях: они используются, как мы увидим ниже, при описании частиц с полуцелым спином.

Получим явный вид матриц двухзначного представления $D^{(1/2)}$. Для этого заметим, что всякое вращение можно осуществить в результате трех последовательных поворотов: поворота вокруг оси Oz на угол φ_1 , поворота вокруг оси Ox на угол θ , поворота вокруг оси Oz на угол φ_2 (рис. 15). Поэтому матрица $D^{(1/2)}[\varphi_1, \theta, \varphi_2]$, очевидно, может быть представлена в виде

$$D^{(1/2)}[\varphi_1, \theta, \varphi_2] = D^{(1/2)}(0, 0, \varphi_2)D^{(1/2)}(\theta, 0, 0)D^{(1/2)}(0, 0, \varphi_1). \quad (11.33)$$

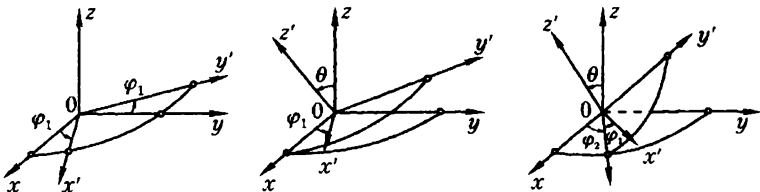


Рис. 15.

Параметры φ_1 , θ , φ_2 называют углами Эйлера.

Согласно формуле (11.31) матрица $D^{(1/2)}(0, 0, \varphi)$, соответствующая вращению вокруг оси Oz на угол φ , имеет вид

$$D^{(1/2)}(0, 0, \varphi) = \begin{pmatrix} e^{i\frac{\varphi}{2}} & 0 \\ 0 & e^{-i\frac{\varphi}{2}} \end{pmatrix}. \quad (11.34)$$

Матрицу $D^{(1/2)}(\theta, 0, 0)$, соответствующую повороту вокруг оси Ox на угол θ , можно найти, решая систему дифференциальных уравнений, аналогичную системе (10.13):

$$\frac{dD}{d\theta} = A_1 D \quad (11.35)$$

с начальным условием $D(0) = E$. Так как инфинитезимальная матрица A_1 для представления $D^{(1/2)}$ согласно (11.28) равна

$$A_1 = -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

то система (11.35) может быть представлена в виде

$$\left. \begin{aligned} \frac{dD_{11}}{d\theta} &= -\frac{i}{2} D_{21}, & \frac{dD_{12}}{d\theta} &= -\frac{i}{2} D_{22}, \\ \frac{dD_{21}}{d\theta} &= -\frac{i}{2} D_{11}, & \frac{dD_{22}}{d\theta} &= -\frac{i}{2} D_{12}, \end{aligned} \right\} \quad (11.36)$$

а начальные условия — в виде

$$D_{11}(0) = D_{22}(0) = 1, \quad D_{12}(0) = D_{21}(0) = 0.$$

Легко проверить, что решение этой системы, удовлетворяющее начальным условиям, дает

$$D^{(1/2)}(\theta, 0, 0) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} & -i \sin \frac{\theta}{2} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} & \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (11.37)$$

Подставляя (11.34) и (11.37) в (11.33), мы получим матрицу $D^{(1/2)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$ для произвольного вращения:

$$D^{(1/2)}[\varphi_1, \theta, \varphi_2] = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}} & -i \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi_2 - \varphi_1}{2}} \\ -i \sin \frac{\theta}{2} e^{i\frac{\varphi_2 - \varphi_1}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{-i\frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}} \end{pmatrix}. \quad (11.38)$$

Матрица (11.38) унитарна, и, кроме того, ее определитель равен 1. Легко проверить, что в таком виде можно представить любую унитарную унимодулярную матрицу второго порядка. Отсюда можно сделать вывод, что всякой унитарной матрице второго порядка с определителем, равным единице, соответствует вращение в трехмерном пространстве. Наоборот, всякому вращению трехмерного пространства соответствуют две матрицы, элементы которых отличаются знаками. Таким образом, группа вращений $O^+(3)$ гомоморфна группе $SU(2)$ унитарных унимодулярных матриц второго порядка.

4. Разложение любого представления группы $O^+(3)$ на неприводимые

Покажем, каким образом в базисном пространстве любого унитарного представления D группы $O^+(3)$ следует выбрать орты, чтобы в новом базисе представление матрицами $D(g)$ распалось на неприводимые представления матрицами $D^{(j)}$.

Пусть R_n — базисное пространство представления матрицами D порядка n . Для этого представления определим матрицы H_+ , H_- и H_3 и найдем наибольшее собственное значение j' матрицы H_3 . С помощью матрицы H_- образуем цепочку собственных векторов $v_{j'}$, $v_{j'-1}$, ..., $v_{-j'}$ матрицы H_3 , соответствующих собственным значениям, различающимся на единицу. Примем эти векторы за первые $2j'+1$ ортов в новом базисе пространства R_n ; остальные орты этого базиса, определяющие подпространство R' , возьмем пока произвольно. Пространство R_n можно рассматривать как прямую сумму подпространств $R_{2j'+1}$ и R' :

$$R_n = R_{2j'+1} \oplus R'$$

Матрицы D в новом базисе принимают вид

$$U^{-1}DU = \begin{pmatrix} D^{(j')} & 0 \\ 0 & D' \end{pmatrix}.$$

Теперь найдем наибольшее собственное значение матрицы H_3 и соответствующий ему собственный вектор в пространстве R' ; пусть это будут j'' и $v_{j''}$. Если j' было вырождено, то, очевидно, $j'' = j'$; если же j' — простое собственное значение, то $j'' < j'$. образуем снова цепочку собственных векторов H_3 , начиная с вектора $v_{j''}$:

$$v_{j''}, v_{j''-1}, \dots, v_{-j''},$$

и, считая первые $2j'+1$ ортов нового базиса фиксированными, принимаем векторы этой цепочки за следующие $2j''+1$ ортов нового базиса в пространстве R_n . Остальные $n - (2j'+1) - (2j''+1)$ ортов, взятые произвольно, определяют подпространство R'' . Теперь мы будем иметь

$$R_n = R_{2j'+1} \oplus R_{2j''+1} \oplus R'',$$

а матрицы D примут вид

$$U^{-1}DU = \begin{pmatrix} D^{(j')} & 0 & 0 \\ 0 & D^{(j'')} & 0 \\ 0 & 0 & D'' \end{pmatrix}.$$

Продолжая этот процесс дальше, мы после конечного числа шагов исчерпаем пространство R_n . В окончательном базисе матрицы D будут квазидиагональными матрицами, составленными из матриц $D^{(j)}$ найденных нами неприводимых представлений.

5. Неприводимые представления ортогональной группы $O(3)$

В заключение этой главы остановимся вкратце на группе $O(3)$ — группе ортогональных преобразований в трехмерном пространстве.

Полная ортогональная группа $O(3)$ представляет собой прямое произведение группы вращений $O^+(3)$ и группы инверсии:

$$O(3) = O^+(3) \times i. \quad (11.39)$$

Группа i имеет, как известно, два неприводимых представления первого порядка: тождественное и знакопеременное. Поэтому группа $O(3)$ имеет по два неприводимых представления порядка $2l + 1$ для каждого целого l . Эти представления мы будем обозначать $D_g^{(l)}$ и $D_u^{(l)}$. Матрицы, соответствующие вращениям в этих представлениях, совпадают, а элементы матриц, соответствующие вращениям, сопровождаемым отражениями, различаются знаком. Таким образом, число представлений нечетного порядка группы $O(3)$ в два раза больше, чем у группы $O^+(3)$.

Иначе обстоит дело с двузначными представлениями группы $O^+(3)$, в которых каждому элементу $g[\varphi_1, \theta, \varphi_2]$ этой группы соответствуют две матрицы, элементы которых различаются знаками. Очевидно, представления группы $O(3)$, полученные умножением двузначного представления на тождественное представление группы и умножением на знакопеременное представление, будут совпадать: в каждом из них как элементу g , так и элементу ig будут соответствовать две матрицы, различающиеся знаком. Поэтому группа $O(3)$, так же как и группа $O^+(3)$, имеет по одному двузначному представлению $D^{(j)}$ для каждого $j = \frac{2n+1}{2}$.

Глава XII

Свойства неприводимых представлений группы вращений

В этой главе мы рассмотрим конкретные базисы представлений группы и получим правило разложения композиции неприводимых представлений на неприводимые части.

1. Сферические функции как базисы неприводимых представлений группы $O^+(3)$

До сих пор, исследуя представление группы $O^+(3)$, мы не конкретизировали пространство, в котором оно реализуется. Сейчас мы рассмотрим случай, когда пространством представления является пространство дифференцируемых функций $f(\mathbf{n}) = f(\theta, \varphi)$, определенных на поверхности сферы единичного радиуса. Здесь \mathbf{n} — единичный вектор, задаваемый полярными углами θ и φ . При вращении g вектор \mathbf{n} переходит в вектор $g\mathbf{n}$. Соответствующее преобразование функций $f(\mathbf{n})$ определяется унитарным оператором \widehat{T}_g :

$$\widehat{T}_g f(\mathbf{n}) = f(g^{-1}\mathbf{n}). \quad (12.1)$$

Мы знаем, что операторы \widehat{T}_g образуют представление группы $O^+(3)$ ¹⁾. Найдем инфинитезимальные операторы \widehat{A}_i этого представления. Они будут определять приращение функции $f(\mathbf{n})$, линейное относительно параметров вращения α_i . Для поворота вокруг оси Oz на угол α мы имеем

$$\widehat{T}_g f(\theta, \varphi) = f(\theta, \varphi - \alpha) = f(\theta, \varphi) - \alpha \frac{\partial f(\theta, \varphi)}{\partial \varphi} + \dots \quad (12.2)$$

Следовательно,

$$\widehat{A}_3 f(\theta, \varphi) = -\frac{\partial f(\theta, \varphi)}{\partial \varphi}. \quad (12.3)$$

¹⁾ См. главу III, п. 3.

Для произвольного поворота, определяемого параметрами $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, мы имеем

$$\begin{aligned} \widehat{T}_g f(\theta, \varphi) &= f(\theta', \varphi') = \\ &= f(\theta, \varphi) + \sum_{i=1}^3 \left\{ \frac{\partial f}{\partial \theta} \left(\frac{\partial \theta'}{\partial \alpha_i} \right)_0 + \frac{\partial f}{\partial \varphi} \left(\frac{\partial \varphi'}{\partial \alpha_i} \right)_0 \right\} \alpha_i + \dots, \end{aligned} \quad (12.4)$$

откуда

$$\widehat{A}_i = a_i(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \theta} + b_i(\theta, \varphi) \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (12.5)$$

где

$$a_i(\theta, \varphi) = \left(\frac{\partial \theta'}{\partial \alpha_i} \right)_0, \quad b_i(\theta, \varphi) = \left(\frac{\partial \varphi'}{\partial \alpha_i} \right)_0. \quad (12.6)$$

Рассмотрим поворот вокруг оси Ox :

$$n'_1 = n_1, \quad n'_2 = n_2 \cos \alpha + n_3 \sin \alpha, \quad n'_3 = -n_2 \sin \alpha + n_3 \cos \alpha. \quad (12.7)$$

Отсюда имеем

$$\left. \frac{dn'_1}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = 0, \quad \left. \frac{dn'_2}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = n_3, \quad \left. \frac{dn'_3}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = -n_2. \quad (12.8)$$

Так как

$$n_1 = \sin \theta \cos \varphi, \quad n_2 = \sin \theta \sin \varphi, \quad n_3 = \cos \theta,$$

то из (12.8) мы находим

$$\left. \begin{aligned} \cos \theta \cos \varphi \left(\frac{d\theta'}{d\alpha} \right)_0 - \sin \theta \sin \varphi \left(\frac{d\varphi'}{d\alpha} \right)_0 &= 0, \\ \cos \theta \sin \varphi \left(\frac{d\theta'}{d\alpha} \right)_0 - \sin \theta \cos \varphi \left(\frac{d\varphi'}{d\alpha} \right)_0 &= \cos \theta, \\ -\sin \theta \left(\frac{d\theta'}{d\alpha} \right)_0 &= -\sin \theta \sin \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (12.9)$$

Из этих соотношений мы без труда получаем

$$\left. \begin{aligned} a_1(\theta, \varphi) &= \left(\frac{d\theta'}{d\alpha} \right)_0 = \sin \varphi, \\ b_1(\theta, \varphi) &= \left(\frac{d\varphi'}{d\alpha} \right)_0 = \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi. \end{aligned} \right\} \quad (12.10)$$

Следовательно,

$$\widehat{A}_1 f(\theta, \varphi) = \sin \varphi \frac{\partial f}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \cos \varphi \frac{\partial f}{\partial \varphi}. \quad (12.11)$$

Совершенно таким же способом находим

$$\widehat{A}_2 f = -\cos \varphi \frac{\partial f}{\partial \theta} + \operatorname{ctg} \theta \sin \varphi \frac{\partial f}{\partial \varphi}. \quad (12.12)$$

Найдем теперь в пространстве функций $f(\theta, \varphi)$ базис неприводимого представления веса j . Мы знаем, что любой элемент базиса неприводимого представления группы вращений должен удовлетворять уравнению

$$(\widehat{A}_1^2 + \widehat{A}_2^2 + \widehat{A}_3^2) f(\theta, \varphi) = -j(j+1) f(\theta, \varphi). \quad (12.13)$$

Если мы хотим найти канонический базис, то, кроме того, должны потребовать, чтобы

$$i\widehat{A}_3 f(\theta, \varphi) = m f(\theta, \varphi), \quad m = -j, -j+1, \dots, j. \quad (12.14)$$

После подстановки (12.3), (12.11) и (12.12) в (12.13) и (12.14) мы получим

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial f}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \varphi^2} + j(j+1) f = 0, \quad (12.15)$$

$$-i \frac{\partial f}{\partial \varphi} = m f. \quad (12.16)$$

Уравнения (12.15) и (12.16) совпадают с уравнениями для сферических функций и имеют однозначное конечное решение только при целых значениях $j = l$. Число линейно независимых решений этих уравнений равно $2l+1$ и, следовательно, совпадает с порядком неприводимого представления $D^{(l)}$. Таким образом, орты канонического базиса неприводимого представления с целым весом l в пространстве непрерывных функций $f(\theta, \varphi)$ имеют вид

$$Y_l^m(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta), \quad (12.17)$$

где P_l^m — нормированная присоединенная функция Лежандра, определяемая формулой

$$P_l^m(x) = (-1)^m \sqrt{\frac{(l-|m|)!}{(l+|m|)!}} \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{1}{2^l l!}} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{l+|m|}(x^2-1)^l}{dx^{l+|m|}} \quad (12.18)$$

$$(P_l^{-m}(x) = (-1)^m P_l^m(x)).$$

Напишем преобразование сферических функций при вращении. Зная инфинитезимальные матрицы A_i неприводимого представления, мы

можем найти матрицы этого представления для произвольных вращений. Однако более простые выражения получаются, если в качестве параметров вращения выбрать углы Эйлера $\varphi_1, \theta_1, \varphi_2$. Не проводя вычислений, напишем сразу результат¹⁾. Пусть вращение $g[\varphi_1, \theta_1, \varphi_2]$ переводит вектор $\mathbf{n}'(\theta', \varphi')$ в вектор $\mathbf{n}(\theta, \varphi)$: $g^{-1}\mathbf{n}'(\theta', \varphi') = \mathbf{n}(\theta, \varphi)$. Тогда

$$\widehat{T}_g Y_l^m(\theta, \varphi) = Y_l^m(\theta', \varphi') = \sum_{m'=-l}^l D_{mm'}^{(l)}[\varphi_1, \theta_1, \varphi_2] Y_l^{m'}(\theta, \varphi), \quad (12.19)$$

где

$$D_{mm'}^{(l)}[\varphi_1, \theta_1, \varphi_2] = \sqrt{\frac{(l+m)!(l-m)!}{(l+m')!(l-m')!}} e^{i(m\varphi_1+m'\varphi_2)} \times \\ \times \left[\cos \frac{\theta}{2} \right]^{m+m'} \left[\sin \frac{\theta}{2} \right]^{m-m'} P_{l-m}^{(m-m', m+m')}(\cos \theta), \quad (12.20)$$

$P_n^{(a,b)}(\cos \theta)$ — полиномы Якоби:

$$P_n^{(a,b)}(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!} (1-x)^{-a} (1+x)^{-b} \frac{d^n}{dx^n} \times [(1-x)^{a+n} (1+x)^{b+n}].$$

2. Композиция неприводимых представлений группы $O^+(3)$

Рассмотрим два неприводимых представления $D^{(j)}$ и $D^{(j')}$ группы $O^+(3)$, которые реализуются в пространствах R_{2j+1} и $R_{2j'+1}$. Обозначим канонические базисы этих представлений соответственно через

$$\mathbf{u}_k^{(j)} \quad (k = -j, -j+1, \dots, j)$$

и

$$\mathbf{v}_m^{(j')} \quad (m = -j', -j'+1, \dots, j').$$

Образует теперь композицию $D^{(j)} \times D^{(j')}$ неприводимых представлений $D^{(j)}$ и $D^{(j')}$. Построенное представление будет реализоваться в пространстве $R_{(2j+1)(2j'+1)}$, которое является прямым произведением пространств R_{2j+1} и $R_{2j'+1}$. В качестве ортов в пространстве $R_{(2j+1)(2j'+1)}$ мы выберем всевозможные произведения ортов $\mathbf{u}_k^{(j)} \mathbf{v}_m^{(j')}$, которые будем обозначать через $\mathbf{w}_{km}^{(jj')}$. Преобразование ортов $\mathbf{w}_{km}^{(jj')}$ определится

¹⁾ См., например, [9], с. 150.

формулой

$$\begin{aligned} \widehat{T}_g w_{km}^{(jj')} &= \sum_{s=-j}^j D_{ik}^{(j)}(g) u_s^{(j)} \sum_{r=-j'}^{j'} D_{rm}^{(j')}(g) v_r^{(j')} = \\ &= \sum_{s,r} \left\{ D^{(j)}(g) \times D^{(j')}(g) \right\}_{sr, km} w_{sr}^{(jj')}. \end{aligned} \quad (12.21)$$

Найдем инфинитезимальные матрицы прямого произведения. Разлагая каждую из матриц $D^{(j)}$ и $D^{(j')}$ по степеням параметров α_i , мы получим

$$\begin{aligned} D^{(j)} \times D^{(j')} &= (E_{2j+1} + \alpha_1 A_1^{(j)} + \dots)(E_{2j'+1} + \alpha_1 A_1^{(j')} + \dots) = \\ &= E_{2j+1} E_{2j'+1} + \alpha_1 (A_1^{(j)} \times E_{2j'+1} + E_{2j+1} \times A_1^{(j')}) + \dots \end{aligned} \quad (12.22)$$

Отсюда следует, что инфинитезимальные матрицы нашего представления имеют вид

$$A_i^{(jj')} = A_i^{(j)} \times E_{2j'+1} + E_{2j+1} \times A_i^{(j')}. \quad (12.23)$$

Покажем теперь, что орты $w_{km}^{(jj')}$ пространства $R_{(2j+1)(2j'+1)}$ будут собственными векторами матрицы $H_3^{(jj')} = i A_3^{(jj')}$ с собственными значениями $k + m$. Действительно,

$$\left. \begin{aligned} H_3^{(j')} w_{km} &= (H_3^{(j)} \times E_{2j'+1} + E_{2j+1} \times H_3^{(j')}) w_{km}, \\ H_3^{(j)} u_k \times E_{2j'+1} v_m + E_{2j+1} u_k \times H_3^{(j')} v_m &= \\ &= k u_k v_m + u_k m v_m = (k + m) u_k v_m = (k + m) w_{km}. \end{aligned} \right\} \quad (12.24)$$

Так как число k может принимать $2j+1$ значений $-j, \dots, j$, а число m может принимать $2j'+1$ значений $-j', \dots, j'$, то их сумма $M = k + m$ может принимать $2(j+j')+1$ различных значений: $-j'-j \leq M \leq j+j'$.

Поскольку число ортов $w_{km}^{(jj')}$ равно $(2j+1)(2j'+1)$, то некоторые из собственных значений M будут вырожденными (если только j или j' не равны нулю). Отсюда следует, что, за исключением случая, когда $j = 0$ или $j' = 0$, представление $D^{(j)} \times D^{(j')}$ является приводимым и, следовательно, может быть разложено на неприводимые части. Это разложение, называемое разложением Клебша—Гордана (см. главу IV), мы можем получить, если разобьем пространство $R_{(2j+1)(2j'+1)}$ на инвариантные ортогональные подпространства, в каждом из которых реализуется одно из неприводимых представлений группы вращений. Для этой цели удобно воспользоваться таблицей (с. 143), по которой можно определить кратность вырождения собственных значений оператора $H_3^{(jj')}$. Для определенности будем считать, что $j' \geq j$. Рассмотрим

наибольшее собственное значение матрицы $H_3^{(jj')}$. Оно не вырождено и равно $j + j'$. Действуя на соответствующий орт $w_{jj'}^{(jj')}$ последовательными степенями матрицы $H_-^{(jj')}$, мы получим цепочку собственных векторов матрицы $H_3^{(jj')}$:

$$w_{jj'}^{(jj')}, H_-^{(jj')} w_{jj'}^{(jj')}, \dots, (H_-^{(jj')})^{2(j+j')} w_{jj'}^{(jj')}. \quad (12.25)$$

Эти векторы согласно п. 2 главы XI должны образовывать базис неприводимого представления веса $J = j + j'$. Пространство, в котором реализуется это представление, обозначим через $R_{2(j+j')+1}$. Рассмотрим теперь в пространстве $R_{(2j+1)(2j'+1)}$ ортогональное дополнение к пространству $R_{2(j+j')+1}$. Как следует из таблицы, в этом дополнении имеется лишь один вектор с собственным значением $j + j' - 1$. Действуя на этот вектор последовательными степенями матрицы $H_-^{(jj')}$, получим цепочку из $2(j + j' - 1) + 1$ векторов. Эти векторы образуют базис неприводимого представления $D^{(j+j'-1)}$. В ортогональном дополнении к пространству $R_{2(j+j'-1)+1}$ мы найдем один вектор с максимальным собственным значением $j + j' - 2$. Повторяя рассуждение, мы в результате представим пространство $R_{(2j+1)(2j'+1)}$ в виде прямой суммы ортогональных подпространств:

$$R_{(2j+1)(2j'+1)} = R_{2(j+j')+1} \oplus R_{2(j+j'-1)+1} \oplus \dots \oplus R_{2(j-j')}. \quad (12.26)$$

Следовательно, разложение Клебша—Гордана для группы $O^+(3)$ имеет вид

$$D^{(j)} \otimes D^{(j')} = D^{(j+j')} \oplus D^{(j+j'-1)} \oplus \dots \oplus D^{(|j-j'|)}. \quad (12.27)$$

Таким образом, мы имеем следующий результат: прямое произведение неприводимых представлений с весами j и j' разлагается на неприводимые представления с весами $j + j', j + j' - 1, \dots, |j - j'|$, причем каждое из этих неприводимых представлений встречается в разложении только один раз.

Из этого правила непосредственно вытекает, что тождественное представление входит в представление $D^{(j)} \times D^{(j')}$ только в том случае, если $j = j'$. Из (12.27) также следует, что произведение двух двузначных представлений (j и j' — полуцелые числа) является однозначным представлением.

Орты $w_M^{(j)}$ канонического базиса, в котором представление $D^{(j)} \times D^{(j')}$ распадается на неприводимые, будут линейными комбинациями ортов $w_{km}^{(jj')} = u_k^{(j)} v_m^{(j')}$:

$$w_M^{(j)} = \sum_{m, m'} c_{mm'M}^{(jj'J)} u_m^{(j)} v_{m'}^{(j')}. \quad (12.28)$$

Таблица собственных значений (с. з.) и собственных векторов (с. в.) матрицы $H_3^{(jj')}$ ($j' \geq j$)

С. з. матрицы $H_3^{(jj')}$	С. в. матрицы $H_3^{(jj')}^*)$	Кратность с. з.
$j + j'$	$w_{jj'}$	1
$j + j' - 1$	$w_{j-1j'}, w_{jj'-1}$	2
.....
$j' - j + 1$	$w_{-j+1j'}, w_{-j+2j'-1}, \dots, w_{jj'-2j+1}$	$2j$
$j' - j$	$w_{-jj'}, w_{-j+1j'-1}, \dots, w_{jj'-2j}$	$2j + 1$
$j' - j - 1$	$w_{-jj'-1}, w_{-j+1j'-2}, \dots, w_{jj'-2j-1}$	$2j + 1$
.....
$-(j' - j)$	$w_{-j-j'+2j}, w_{-j+1-j'+2j-1}, \dots, w_{j-j'}$	$2j + 1$
$-(j' - j) - 1$	$w_{-j-j'+2j-1}, \dots, w_{j-1-j'}$	$2j$
.....
$-j - j'$	$w_{-j-j'}$	1

^{*} Верхние индексы векторов $w_{km}^{(jj')}$ для кратности опущены.

Коэффициенты $c_{mm'J}^{(jj'J)}$ называют коэффициентами Клебша—Гордана или коэффициентами Вигнера для группы $O^+(3)$ ¹⁾. Матрица $C^{(jj')}$ с элементами $c_{mm'J}^{(jj'J)}$ (индексы J, M нумеруют строки, а индексы m, m' — столбцы) является унитарной матрицей порядка $(2j + 1)(2j' + 1)$. Матрица $C^{(jj')}$ приводит представление $D^{(j)} \times D^{(j')}$ к квазидиагональному виду:

$$(C^{(jj')})^{-1} (D^{(j)} \times D^{(j')}) C^{(jj')} = \begin{pmatrix} D^{(j+j')} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D^{(j+j'-1)} & \dots & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & D^{(j-j'+1)} \end{pmatrix}. \quad (12.29)$$

В некоторых задачах приходится рассматривать произведение не двух, а трех неприводимых представлений $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j_3)}$, которое реализуется в пространстве $R = R_{j_1} \times R_{j_2} \times R_{j_3}$. При построении канонического базиса в этом пространстве мы можем сначала построить канонические орты $w_{m_{12}}^{(j_{12})}$ в пространстве $R_{j_1} \times R_{j_2}$ и затем комбинировать их с ортами $w_{m_3}^{(j_3)}$ пространства R_{j_3} . Полученные таким образом орты обозначим через $w_m^{((j_{12})j)}$. Однако можно было избрать и другой путь построения канонического базиса в R . Сначала построим

¹⁾ Таблицы коэффициентов Вигнера см. в [5], с. 468.

орты $w_m^{(j_{23})}$ и затем будем комбинировать их с ортами $w_m^{(j_1)}$. В результате мы получим орты $w_m^{((j_{23})j)}$. Ясно, что орты $w_m^{((j_{12})j)}$ являются линейной комбинацией ортов $w_m^{((j_{23})j)}$:

$$w_m^{((j_{12})j)} = \sum_{j_{23}} \langle j_1 j_2(j_{12}) j_3 j \mid j_1 j_2 j_3(j_{23}) j \rangle w_m^{((j_{23})j)}. \quad (12.30)$$

Коэффициенты $\langle j_1 j_2(j_{12}) j_3 j \mid j_1 j_2 j_3(j_{23}) j \rangle$ называют коэффициентами Рака. Можно показать, что

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2(j_{12}) j_3 j \mid j_1 j_2 j_3(j_{23}) j \rangle &= \\ &= \sum_{m_1 + m_2 + m_3 = m} C_{m_1 m_2 m_{12}}^{(j_1 j_2 j_{12})} C_{m_1 m_2 m_3 m}^{(j_1 j_2 j_3 j)} C_{m_2 m_3 m_{23}}^{(j_2 j_3 j_{23})} C_{m_1 m_{23} m}^{(j_1 j_{23} j)}. \end{aligned} \quad (12.31)$$

3. Тензорные и спинорные представления группы вращений

Введем понятие *тензора* n -го ранга в трехмерном пространстве. Мы будем говорить, что нам задан *тензор* n -го ранга, если в каждой ортогональной системе координат определена совокупность 3^n чисел $T_{i_1 i_2 \dots i_n}$, которая при переходе от одной системы координат к другой преобразуется по закону

$$T'_{i'_1 i'_2 \dots i'_n} = \sum_{i_1=1}^3 \sum_{i_2=1}^3 \dots \sum_{i_n=1}^3 g_{i'_1 i_1} g_{i'_2 i_2} \dots g_{i'_n i_n} T_{i_1 i_2 \dots i_n}, \quad (12.32)$$

где матрица $\|g_{ik}\|$ связывает орты «старой» и «новой» систем координат:

$$e'_i = \sum_{k=1}^3 g_{ki} e_k. \quad (12.33)$$

Мы видим, что матрица преобразования компонент тензора совпадает с матрицей представления, которое является прямым произведением n «векторных» представлений. Такое представление мы будем называть *тензорным* представлением n -го ранга. Тензорные представления являются, конечно, приводимыми. Разложение его на неприводимые представления можно получить по правилу Клебша—Гордана. Тензорное представление любого ранга является однозначным.

Аналогично можно ввести понятие *спинора* n -го ранга и *спинорного* представления группы вращений. В то время как при определении тензорного представления основным было векторное представление (12.33), определение спинорного представления основано на двузначном неприводимом представлении $D^{(1/2)}$. Матрица этого

представления, выраженная через углы Эйлера, имеет вид (см. (11.38)):

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}, \quad (12.34)$$

где

$$\alpha = \pm \cos \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}}, \quad \beta = \mp i \sin \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\varphi_2 - \varphi_1}{2}}.$$

Мы будем говорить, что нам задан *спинор* n -го ранга, если в каждой ортогональной системе координат определена совокупность 2^n комплексных чисел $\chi_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n}$ ($\lambda_i = 1, 2$), которые при переходе от одной системы координат к другой преобразуются по закону¹⁾

$$\chi'_{\lambda'_1 \lambda'_2 \dots \lambda'_n} = \sum_{\lambda_1, \dots, \lambda_n} \alpha_{\lambda'_1 \lambda_1} \alpha_{\lambda'_2 \lambda_2} \dots \alpha_{\lambda'_n \lambda_n} \chi_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n}. \quad (12.35)$$

Этот закон преобразования определяет представление группы вращений, которое является прямым произведением n неприводимых представлений $D^{(1/2)}$. Такое представление мы будем называть *спинорным представлением* n -го ранга. Разложение спинорного представления на неприводимые также можно найти с помощью правила Клебша—Гордана, установленного в предыдущем пункте. Ясно, что спиноры четного ранга преобразуются по однозначным представлениям, а спиноры нечетного ранга — по двужначным.

Так как матрица преобразования (12.35) может быть записана в виде прямого произведения n матриц $\|\alpha_{i\lambda}\|$ представления $D^{(1/2)}$:

$$\|\alpha_{\lambda'_1 \lambda_1}\| \times \|\alpha_{\lambda'_2 \lambda_2}\| \times \dots \times \|\alpha_{\lambda'_n \lambda_n}\|, \quad (12.36)$$

то инфинитезимальные матрицы спинорного представления можно представить в следующей форме (ср. с формулой (12.23)):

$$A_i = \sum E_2 \times E_2 \times \dots \times E_2 \times A_i^{(1/2)} \times E_2 \times \dots \times E_2, \quad (12.37)$$

где $A_i^{(1/2)}$ — инфинитезимальные матрицы неприводимого представления $D^{(1/2)}$, а суммирование проводится по всем положениям этого множителя в произведении.

Введем спинор $\chi_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n}$, у которого в данной системе координат отлична от нуля только одна компонента $\chi_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n}$.

¹⁾ Формула (12.35) определяет закон преобразования контравариантного спинора. Наряду с контравариантным спинором вводится понятие ковариантного спинора, закон преобразования которого получается из (12.35) заменой $\alpha_{\lambda'_i \lambda_i}$ на комплексно сопряженные величины (см. п. 4).

Рассмотрим действие на такой спинор инфинитезимальной матрицы $H_3 = iA_3$. Напомним, что матрица $iA_3^{(1/2)}$ имеет вид

$$iA_3^{(1/2)} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \quad (12.38)$$

Учитывая это, мы получим

$$H_3 \chi_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n} = \left(\frac{p}{2} - \frac{q}{2} \right) \chi_{\lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_n}, \quad (12.39)$$

где p — число значков данной компоненты спинора, равных 1, а q — число значков, равных 2. Если вместо индексов λ_i ввести индексы $\sigma_i = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}$, то мы сможем написать

$$H_3 \chi_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n} = (\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) \chi_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n}. \quad (12.40)$$

Таким образом, спинор $\chi_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n}$ является собственным спинором матрицы H_3 , соответствующим собственному значению, равному сумме спинорных значков σ_i .

4. Комплексно сопряженные представления

Мы будем говорить, что нам задан j -вектор, если каждой ортогональной системе координат сопоставлена совокупность $2j+1$ чисел ξ_m , $m = -j, -j+1, \dots, j$, которые при переходе от одной системы координат к другой преобразуются по закону

$$\xi'_m = \sum_{m'=-j}^j D_{mm'}^{(j)}(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) \xi_{m'}, \quad (12.41)$$

где $\|D_{mm'}^{(j)}\|$ — матрицы неприводимого представления. Сопоставим теперь каждой системе координат совокупность комплексно сопряженных чисел $\bar{\xi}'_m$, где ξ'_m определены формулами (12.41). Ясно, что числа $\bar{\xi}'_m$ и $\bar{\xi}_m$ связаны с помощью комплексно сопряженных матриц:

$$\bar{\xi}'_m = \sum_{m'=-j}^j \bar{D}_{mm'}^{(j)} \bar{\xi}_{m'}. \quad (12.42)$$

Матрицы $\bar{D}^{(j)}$, так же как и матрицы $D^{(j)}$, образуют представление группы вращений. Так как представление $D^{(j)}$ неприводимо, то представление $\bar{D}^{(j)}$ также неприводимо. Поскольку эти представления имеют одинаковый порядок, то они должны быть эквивалентными:

$$\bar{D}^{(j)} = V D^{(j)} V^{-1}. \quad (12.43)$$

Матрица V определяется этим равенством с точностью до множителя. Действительно, предположим, что имеются две матрицы V и W такие, что

$$\bar{D}^{(j)} = VD^{(j)}V^{-1} = WD^{(j)}W^{-1}.$$

Тогда мы можем написать

$$D^{(j)}V^{-1}W = V^{-1}WD^{(j)}.$$

Поэтому матрица $V^{-1}W$ кратна единичной:

$$V^{-1}W = \lambda E. \quad (12.44)$$

Следовательно,

$$W = \lambda V. \quad (12.45)$$

Равенство (12.43) означает, что компоненты $\bar{\xi}_m$ комплексно сопряженного вектора преобразуются по тому же закону, по которому преобразуются линейные комбинации $\sum v_{ik}\xi_k$ составляющих исходного j -вектора. Найдем матрицу V . Для этого напишем равенство (12.43) с точностью до линейных членов по параметрам α_i :

$$\begin{aligned} E + \alpha_1 \bar{A}_1 + \alpha_2 \bar{A}_2 + \alpha_3 \bar{A}_3 &= \\ &= E + \alpha_1 VA_1V^{-1} + \alpha_2 VA_2V^{-1} + \alpha_3 VA_3V^{-1}. \end{aligned} \quad (12.46)$$

Отсюда следует, что

$$\bar{A}_i = VA_iV^{-1} \quad (i = 1, 2, 3). \quad (12.47)$$

Используя явный вид (11.28) матриц $A_i^{(j)}$, мы получим:

$$\left. \begin{aligned} -A_1^{(j)} &= VA_1^{(j)}V^{-1}, \\ A_2^{(j)} &= VA_2^{(j)}V^{-1}, \\ -A_3^{(j)} &= VA_3^{(j)}V^{-1}. \end{aligned} \right\} \quad (12.48)$$

Ясно, что в качестве матрицы V можно выбрать матрицу представления поворота на 180° вокруг оси Oy . Следовательно,

$$V = e^{A_2\pi}. \quad (12.49)$$

Найдем выражение матрицы V для представления $D^{(1/2)}$. Для этого воспользуемся следующим свойством матрицы $A_2^{(1/2)}$:

$$\left(2iA_2^{(1/2)}\right)^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (12.50)$$

Представляя экспоненту (12.49) в виде ряда, мы находим

$$V^{(1/2)} = e^{-i(2iA_2^{(1/2)})\frac{\pi}{2}} = \cos \frac{\pi}{2} - \left(i \sin \frac{\pi}{2}\right) (2iA_2^{(1/2)}) = 2A_2^{(1/2)}.$$

Следовательно,

$$V^{(1/2)} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (12.51)$$

Пусть нам задан спинор $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$. Введем комплексно сопряженный спинор $\begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{pmatrix}$. Согласно доказанному мы можем утверждать, что величина

$$\begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{pmatrix} = (2A_2^{(1/2)})^{-1} \begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{a} \\ \bar{b} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{b} \\ -\bar{a} \end{pmatrix} \quad (12.52)$$

преобразуется, как спинор. Наоборот, величина

$$(2A_2^{(1/2)}) \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -b \\ a \end{pmatrix} \quad (12.53)$$

преобразуется, как комплексно сопряженный спинор. Комплексно сопряженный спинор называют также *ковариантным* спинором.

Упражнения

12.1. Используя свойства унитарности матриц $C^{(j)}$, доказать равенство (12.31).

12.2. Найти разложение на неприводимые представления тензорных представлений третьего и четвертого рангов.

12.3. Доказать, что разложение тензорного представления на неприводимые можно найти с помощью следующего рекуррентного правила:

$$\chi_n^{(l)} = \chi_{n-1}^{(l-1)} + \chi_{n-1}^{(l)} + \chi_{n-1}^{(l+1)},$$

где $\chi_n^{(l)}$ — число, показывающее, сколько раз неприводимое представление веса l содержится в тензорном представлении n -го ранга.

12.4. Доказать, что разложение спинорного представления на неприводимые части можно получить с помощью следующего рекуррентного правила:

$$\eta_n^{(j)} = \eta_{n-1}^{(j-\frac{1}{2})} + \eta_{n-1}^{(j+\frac{1}{2})},$$

где $\eta_n^{(j)}$ — число, показывающее, сколько раз неприводимое представление веса j содержится в спинорном представлении n -го ранга. Используя эту формулу, найти разложения спинорных представлений для $n = 1, 2, \dots, 6$.

Глава XIII

Некоторые приложения теории представлений группы вращений к квантовомеханическим задачам

Среди групп, имеющих приложение в квантовой механике, группа вращений занимает центральное место. Инвариантность уравнения Шрёдингера относительно группы вращений отражает свойство изотропности трехмерного пространства. Следствием этой симметрии является существование такого важного интеграла движения, как момент импульса. В частности, анализ неприводимых представлений группы вращений доказывает возможность существования собственного (внутреннего) момента импульса частиц — спина. В данной главе рассматриваются некоторые общие свойства неприводимых представлений группы вращений, которые используются при исследовании движения электрона в центральном поле.

1. Частица в центральном поле.

Орбитальный момент количества движения

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для одной частицы в центральном поле

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r) \right\} \psi(r) = E\psi(r). \quad (13.)$$

Так как потенциал $V(r)$ зависит только от относительной величины радиус-вектора, то гамильтониан \hat{H} этой системы инвариантен относительно группы $O^+(3)$. Мы знаем (см. главу V), что это условие инвариантности может быть записано в виде

$$\hat{T}_g \hat{H} = \hat{H} \hat{T}_g, \quad (13.)$$

где операторы \hat{T}_g , образующие представление группы вращений, определяются формулой

$$\hat{T}_g \psi(r) = \psi(g^{-1}r). \quad (13.)$$

Найдем инфинитезимальные операторы $\hat{A}_1, \hat{A}_2, \hat{A}_3$ этого представления, соответствующие поворотам вокруг осей Ox_1, Ox_2, Ox_3 . Инфинитезимальные операторы \hat{A}_i определяют приращение функции $\psi(r)$

обусловленное поворотом радиус-вектора, линейное по параметрам α_1 , α_2 , α_3 . Поэтому мы можем написать

$$\delta_i \psi = \alpha_i \widehat{A}_i \psi = \sum_{\mu=1}^3 \delta_i x_\mu \frac{\partial}{\partial x_\mu} \psi, \quad (13.4)$$

где согласно (10.25)

$$\left. \begin{aligned} \delta_1 x_1 &= 0, & \delta_1 x_2 &= \alpha_1 x_3, & \delta_1 x_3 &= -\alpha_1 x_2, \\ \delta_2 x_1 &= -\alpha_2 x_3, & \delta_2 x_2 &= 0, & \delta_2 x_3 &= \alpha_2 x_1, \\ \delta_3 x_1 &= \alpha_3 x_2, & \delta_3 x_2 &= -\alpha_3 x_1, & \delta_3 x_3 &= 0. \end{aligned} \right\} \quad (13.5)$$

Отсюда мы получаем

$$\left. \begin{aligned} \widehat{A}_1 &= x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3}, \\ \widehat{A}_2 &= -x_3 \frac{\partial}{\partial x_1} + x_1 \frac{\partial}{\partial x_3}, \\ \widehat{A}_3 &= x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2}. \end{aligned} \right\} \quad (13.6)$$

Так как с точностью до линейных членов оператор \widehat{T}_g можно представить в виде

$$\widehat{T}_g = \widehat{E} + \alpha_1 \widehat{A}_1 + \alpha_2 \widehat{A}_2 + \alpha_3 \widehat{A}_3, \quad (13.7)$$

то из условия коммутации (13.2) следует

$$\widehat{A}_i \widehat{H} = \widehat{H} \widehat{A}_i. \quad (13.8)$$

Наоборот, поскольку оператор \widehat{T}_g можно представить согласно (12.2) в виде ряда

$$\begin{aligned} \widehat{T}_g &= \exp(\alpha_1 \widehat{A}_1 + \alpha_2 \widehat{A}_2 + \alpha_3 \widehat{A}_3) = \\ &= \widehat{E} + (\alpha_1 \widehat{A}_1 + \alpha_2 \widehat{A}_2 + \alpha_3 \widehat{A}_3) + \\ &\quad + \frac{1}{2} (\alpha_1 \widehat{A}_1 + \alpha_2 \widehat{A}_2 + \alpha_3 \widehat{A}_3)^2 + \dots, \end{aligned} \quad (13.9)$$

то из (13.8) следует (13.2). Таким образом, равенства (13.8) являются необходимыми и достаточными условиями инвариантности гамильтониана относительно группы вращений. Операторы \widehat{A}_j являются антиэрмитовыми. Введем эрмитовы операторы $\widehat{H}_j = i\widehat{A}_j$, которые можно рассматривать как квантовомеханические операторы, соответствующие некоторым физическим наблюдаемым. Действительно, операторы \widehat{H}_j

с точностью до размерного множителя \hbar совпадают с операторами \widehat{L}_j составляющих момента количества движения $\widehat{L}_j = \hbar \widehat{H}_j$, например:

$$\widehat{L}_1 = \hbar \widehat{H}_1 = i\hbar \widehat{A}_1 = i\hbar \left(x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3} \right) = x_2 \widehat{p}_3 - x_3 \widehat{p}_2, \quad (13.10)$$

где \widehat{p}_j — составляющая оператора импульса: $\widehat{p}_j = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x_j}$. В силу (13.8) операторы \widehat{L}_j коммутируют с гамильтонианом \widehat{H} нашей системы и, следовательно, являются операторами интегралов движения.

Таким образом, мы показали, что операторы составляющих момента количества движения с точностью до множителя совпадают с инфинитезимальными операторами представления группы вращений и, если уравнение Шрёдингера инвариантно относительно этой группы, они являются интегралами движения.

Рассмотрим теперь, какие заключения можно сделать о свойствах симметрии решений уравнения (13.1). Собственные функции этого уравнения, принадлежащие одному собственному значению энергии, должны образовывать базис неприводимого представления группы вращений. Из предыдущей главы мы знаем, что в пространстве функций могут реализовываться только представления $D^{(l)}$ с целыми l . При этом функции, преобразующиеся по неприводимому представлению $D^{(l)}$, должны удовлетворять уравнению

$$(\widehat{H}_1^2 + \widehat{H}_2^2 + \widehat{H}_3^2)\psi(\mathbf{r}) = l(l+1)\psi(\mathbf{r})$$

или

$$(13.11)$$

$$(\widehat{L}_1^2 + \widehat{L}_2^2 + \widehat{L}_3^2)\psi(\mathbf{r}) = \hbar^2 l(l+1)\psi(\mathbf{r}).$$

Если функции, соответствующие вырожденному собственному значению, образуют канонический базис представления $D^{(l)}$, то они удовлетворяют также уравнению

$$\widehat{H}_3\psi(\mathbf{r}) = m\psi(\mathbf{r}) \quad (13.12)$$

или

$$\widehat{L}_3\psi(\mathbf{r}) = \hbar m\psi(\mathbf{r}) \quad (m = -l, -l+1, \dots, l).$$

В главе XII был получен явный вид функций, образующих базис неприводимого представления группы вращений. Поэтому мы можем утверждать, что решения уравнения Шрёдингера (13.1) имеют вид

$$\psi_{lm}(\mathbf{r}) = R(\mathbf{r})Y_l^{(m)}(\theta, \varphi). \quad (13.13)$$

Мы получаем, таким образом, следующий результат. Собственные функции уравнения Шрёдингера (13.1) с данным собственным

значением образуют базис неприводимого представления группы вращений $D^{(l)}$ с целым l . Кратность вырождения уровня E_l равна $2l + 1$. Соответствующие ему собственные функции являются также собственными функциями оператора квадрата момента количества движения. Их всегда можно выбрать так, чтобы они были еще и собственными функциями оператора \hat{L}_3 .

Следует еще отметить, что полной группой симметрии рассматриваемой задачи является группа $O(3) = O^+(3) \times i$. В зависимости от того, является ли волновая функция симметричной относительно инверсии i или меняет знак, соответствующему состоянию приписывается квантовое число четности $w = \pm 1$. Очевидно, что для одной частицы в силу (13.13)

$$w = (-1)^l.$$

Для доказательства этого соотношения достаточно вспомнить связь сферических функций Y_{lm} с однородными полиномами степени l переменных x, y, z . Таким образом, для одной частицы классификация по собственному значению орбитального момента содержит в себе уже классификацию по четности. Впоследствии мы увидим (см. главу XIX), что для многоэлектронных систем эта зависимость отсутствует.

2. Правило сложения моментов количества движения

В предыдущем пункте мы показали, что операторы составляющих момента количества движения с точностью до множителя совпадают с инфинитезимальными операторами группы вращений. Используя эту связь, докажем правило сложения моментов количества движения.

Пусть имеются две невзаимодействующие частицы, каждая из которых находится в центральном поле, т. е. описывается уравнением Шрёдингера типа (13.1). Волновые функции частиц обозначим соответственно через $\varphi_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1)$ и $\psi_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2)$. Для того чтобы не усложнять сейчас рассмотрение учетом принципа тождественности частиц (см. главу XVII), будем считать, что это частицы различной природы (например, электрон и протон). Тогда волновые функции рассматриваемой системы могут быть записаны в виде произведений

$$\varphi_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2). \quad (13.14)$$

Задача, которую мы хотим решить, заключается в определении возможных собственных значений $\hbar^2 L(L+1)$ оператора квадрата полного момента количества движения $\hat{L}^2 = (\hat{L}^{(1)} + \hat{L}^{(2)})^2$ для состояний (13.14). Действие оператора $\hat{L}^{(1)} + \hat{L}^{(2)}$ определяется по формуле

$$(\hat{L}^{(1)} + \hat{L}^{(2)}) \varphi_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2) = \psi_{l_2 m_2} \hat{L}^{(1)} \varphi_{l_1 m_1} + \varphi_{l_1 m_1} \hat{L}^{(2)} \psi_{l_2 m_2}. \quad (13.15)$$

Сравнивая (13.15) с (12.23), мы видим, что в рассматриваемом случае составляющие оператора полного момента количества движения совпадают (с точностью до множителя) с инфинитезимальными операторами прямого произведения представлений $D^{(l_1)}$ и $D^{(l_2)}$. Поэтому наша задача просто сводится к разложению прямого произведения двух неприводимых представлений группы вращений на неприводимые представления. Применяя правило Клебша—Гордана, мы получаем, что квантовое число L может принимать значения $l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1, \dots, |l_1 - l_2|$. Собственные функции операторов \widehat{L}^2 и \widehat{L} согласно (12.28) имеют вид

$$\Psi_{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{m_1, m_2} c_{m_1, m_2, M}^{(l_1, l_2, L)} \varphi_{l_1, m_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{l_2, m_2}(\mathbf{r}_2), \quad (13.16)$$

где $c_{m_1, m_2, M}^{(l_1, l_2, L)}$ — коэффициенты Клебша—Гордана.

3. Спин

В п. 1 для описания состояния частицы в центральном поле мы использовали решения уравнения (13.1), которые преобразуются по однозначным представлениям группы вращений. Вопрос о том, насколько хороши такие решения (а также и само уравнение) для описания реальной физической частицы, должен решаться сравнением с экспериментом. Как показывает опыт, уравнение (13.1) не может объяснить некоторых наблюдаемых свойств электрона. В частности, было обнаружено, что нарушение сферической симметрии в результате включения внешнего магнитного поля приводит к расщеплению основного уровня энергии E_0 ($l = 0$), который согласно разбитой в п. 1 теории должен быть невырожденным. Однако это противоречие снимается, если предположить, что волновая функция электрона преобразуется при вращении по двузначному представлению группы $O^+(3)$.

В нерелятивистской квантовой механике волновую функцию электрона полагают двухкомпонентной величиной $\begin{pmatrix} \chi_1(\mathbf{r}) \\ \chi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}$, которая при вращении системы координат преобразуется по закону

$$\chi'_i(\mathbf{r}') = \sum_j \alpha_{ij}(g) \chi_j(\mathbf{r}) \quad (\mathbf{r}' = g\mathbf{r}), \quad (13.17)$$

где \mathbf{r} и \mathbf{r}' — координаты одной и той же точки в разных системах координат, а коэффициенты α_{ij} образуют матрицу представления $D^{(1/2)}$ группы вращений (см. (12.34)). Такую двухкомпонентную величину, заданную в каждой точке трехмерного пространства, называют *спинорным* полем.

Вероятность того, что электрон находится в элементе объема dv около точки \mathbf{r} , определяется теперь выражением

$$(|\chi_1(\mathbf{r})|^2 + |\chi_2(\mathbf{r})|^2) dv. \quad (13.18)$$

Так как матрица $\|\alpha_{ik}\|$ является унитарной, то величина (13.18) представляет собой инвариант относительно преобразования (13.17):

$$|\chi'_1(\mathbf{r}')|^2 + |\chi'_2(\mathbf{r}')|^2 = |\chi_1(\mathbf{r})|^2 + |\chi_2(\mathbf{r})|^2. \quad (13.19)$$

Найдем вид инфинитезимальных операторов для спинорного поля. Закон преобразования (13.17) мы можем представить в виде

$$\chi'_i(\mathbf{r}) = \sum_j \alpha_{ij} \chi_j(g^{-1}\mathbf{r}) \quad (13.20)$$

или

$$\chi(\mathbf{r}) = D^{(1/2)} \chi(g^{-1}\mathbf{r}).$$

Рассматривая, например, поворот вокруг оси Ox_3 , мы можем с точностью до линейных членов по параметру α_3 написать

$$\chi'(\mathbf{r}) = (\widehat{E} + \widehat{A}_3^{(1/2)} \alpha_3) \chi + \alpha_3 \left(x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2} \right) \chi, \quad (13.21)$$

где $\widehat{A}_3^{(1/2)}$ — инфинитезимальный оператор неприводимого представления $D^{(1/2)}$ группы вращений. Отсюда следует, что инфинитезимальный оператор \widehat{A}_3 для спинорного поля имеет вид

$$\widehat{A}_3 = \widehat{A}_3^{(1/2)} + x_2 \frac{\partial}{\partial x_1} - x_1 \frac{\partial}{\partial x_2}. \quad (13.22a)$$

Аналогично для \widehat{A}_1 и \widehat{A}_2 мы получаем

$$\widehat{A}_1 = \widehat{A}_1^{(1/2)} + x_3 \frac{\partial}{\partial x_2} - x_2 \frac{\partial}{\partial x_3}, \quad (13.22б)$$

$$\widehat{A}_2 = \widehat{A}_2^{(1/2)} + x_1 \frac{\partial}{\partial x_3} - x_3 \frac{\partial}{\partial x_1}. \quad (13.22в)$$

Предположим теперь, что гамильтониан электрона \widehat{H} обладает сферической симметрией. Условие инвариантности относительно группы вращений теперь может быть записано в виде

$$\widehat{A}_i \widehat{H} - \widehat{H} \widehat{A}_i = 0, \quad (13.23)$$

где операторы \widehat{A}_i определяются формулами (13.22). Введем эрмитовы операторы

$$\widehat{J}_k = i\hbar \widehat{A}_k \quad (k = 1, 2, 3). \quad (13.24)$$

Эти операторы, являющиеся в силу (13.23) интегралами движения, называют операторами составляющих *полного* момента количества движения. Оператор $\hat{\mathcal{J}}$ состоит из двух слагаемых: введенного нами ранее оператора орбитального момента количества движения $\hat{\mathcal{L}}$ и оператора $\hat{\mathcal{S}} = i\hbar\hat{\mathbf{A}}^{(1/2)}$, который называют *спиновым* моментом количества движения. Согласно (11.28) в представлении, в котором оператор $\hat{\mathcal{S}}_3$ диагонален, оператор $\hat{\mathcal{S}}$ может быть представлен в виде

$$\left. \begin{aligned} \hat{\mathcal{S}}_1 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_1, \\ \hat{\mathcal{S}}_2 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_2, \\ \hat{\mathcal{S}}_3 &= \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \sigma_3. \end{aligned} \right\} \quad (13.25)$$

Матрицы σ_1 , σ_2 и σ_3 называют матрицами Паули. При действии оператора $\hat{\mathcal{S}}_3$ на спинор χ мы получим

$$\hat{\mathcal{S}}_3 \chi = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \chi_1 \\ -\frac{1}{2} \chi_2 \end{pmatrix}. \quad (13.26)$$

Отсюда следует, что спиноры $\begin{pmatrix} \chi_1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $\begin{pmatrix} 0 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$ являются собственными векторами оператора $\hat{\mathcal{S}}_3$ с собственными значениями $\frac{\hbar}{2}$ и $-\frac{\hbar}{2}$. Так как произвольное состояние электрона можно представить в виде суперпозиции таких состояний:

$$\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \chi_1 \\ 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 \\ \chi_2 \end{pmatrix}, \quad (13.27)$$

то величина $|\chi_1|^2 dv$ определяет вероятность того, что электрон, находясь в объеме dv , имеет проекцию спина на ось Oz , равную $\frac{\hbar}{2}$, а величина $|\chi_2|^2 dv$ имеет тот же смысл для проекции спина $-\frac{\hbar}{2}$.

Рассмотрим приближение, соответствующее уравнению (13.1), когда в гамильтониане можно пренебречь спиновыми операторами. Тогда волновую функцию электрона можно представить в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \varphi(\mathbf{r}) \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}, \quad (13.28)$$

где $\begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}$ — постоянный спинор, а функция $\varphi(\mathbf{r})$ является решением уравнения Шрёдингера. Значки компонент спинора удобно выбирать равными соответствующим собственным значениям оператора $i\hat{A}_3 = \frac{1}{\hbar}\hat{S}_3$, т. е. равными $\frac{1}{2}$ и $-\frac{1}{2}$. Иногда их рассматривают как аргументы функции, которая может принимать лишь два значения:

$$\varphi(\mathbf{r}, \sigma) = \varphi(\mathbf{r})\chi(\sigma) = \begin{cases} \varphi(\mathbf{r})\chi_{1/2}, & \sigma = \frac{1}{2}; \\ \varphi(\mathbf{r})\chi_{-1/2}, & \sigma = -\frac{1}{2}. \end{cases} \quad (13.29)$$

Если уравнение Шрёдингера для нашей задачи инвариантно относительно группы вращений, то его собственные функции должны преобразовываться по неприводимым представлениям группы вращений $D^{(l)}$. Тогда с учетом спинового состояния каждый уровень энергии окажется $2(2l+1)$ -кратно вырожден и соответствующие волновые функции могут быть выбраны в виде

$$\varphi_{lm}(\mathbf{r}) \delta_{\sigma, 1/2}, \quad \varphi_{lm} \delta_{\sigma, -1/2}$$

или

$$\begin{pmatrix} \varphi_{lm} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_{lm} \end{pmatrix} \quad (m = -l, -l+1, \dots, l). \quad (13.30)$$

Ясно, что функции (13.30) преобразуются по приводимому представлению, которое является прямым произведением $D^{(l)} \times D^{(1/2)}$. Согласно правилу Клебша—Гордана мы имеем

$$D^{(l)} \times D^{(1/2)} = D^{(l-1/2)} \oplus D^{(l+1/2)}. \quad (13.31)$$

Из функций (13.30) мы можем построить с помощью коэффициентов Клебша—Гордана функции, преобразующиеся по неприводимым представлениям, или, другими словами, собственные функции операторов \hat{J}^2 и \hat{J}_3 . Мы получим

$$\begin{aligned} \Psi_{JM} &= c_{M-1/2, 1/2, M}^{(l, 1/2, J)} \begin{pmatrix} \varphi_{l, M-1/2}(\mathbf{r}) \\ 0 \end{pmatrix} + c_{M+1/2, -1/2, M}^{(l, 1/2, J)} \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_{l, M+1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} c_{M-1/2, 1/2, M}^{(l, 1/2, J)} \varphi_{l, M-1/2}(\mathbf{r}) \\ c_{M+1/2, -1/2, M}^{(l, 1/2, J)} \varphi_{l, M+1/2}(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (13.32)$$

4. Теорема Крамерса

Теорема Крамерса. Если гамильтониан электрона коммутирует с оператором

$$\hat{\Theta} = \frac{2}{\hbar} \hat{S}_2 K, \quad (13.33)$$

где K — операция комплексного сопряжения, а \hat{S}_2 — оператор проекции спинового момента на ось Ox_2 , то уровни энергии электрона будут двукратно вырождены¹⁾. Если рассматриваемая система обладает еще дополнительной симметрией и связанным с ней вырождением, то полная кратность вырождения уровней должна быть обязательно четной.

Покажем сначала, что коммутативность с оператором $\hat{\Theta}$ имеет место, если только гамильтониан не содержит члена, описывающего взаимодействие с магнитным полем. Действительно, в этом случае к гамильтониану \hat{H}_0 уравнения Шрёдингера (13.1) мы должны добавить лишь член спин-орбитального взаимодействия, который имеет вид²⁾

$$\hat{H}_{s0} = \frac{1}{2m^2c^2} \left(\frac{1}{r} \frac{dV}{dr} \right) (\hat{L}, \hat{S}). \quad (13.34)$$

Поскольку гамильтониан \hat{H}_0 вещественен и не содержит спиновых операторов, то очевидно, что

$$\hat{\Theta} \hat{H}_0 = \hat{H}_0 \hat{\Theta}. \quad (13.35)$$

Докажем, что для оператора \hat{H}_{s0} также выполняется условие коммутации

$$\hat{\Theta} \hat{H}_{s0} = \hat{H}_{s0} \hat{\Theta}. \quad (13.36)$$

Действительно, согласно (13.10) оператор \hat{L} чисто мнимый. Поэтому

$$\hat{\Theta} \hat{L} = -\hat{L} \hat{\Theta}. \quad (13.37)$$

Используя явный вид матрицы S_i , легко показать, что для оператора \hat{S} имеет место такое же соотношение:

$$\hat{\Theta} \hat{S} = -\hat{S} \hat{\Theta}. \quad (13.38)$$

Из (13.37) и (13.38) мы получаем равенство (13.36).

¹⁾ Теорема Крамерса доказана для системы, состоящей из нечетного числа электронов. В этом случае оператор $\hat{\Theta} = \left(\frac{2}{\hbar} \hat{S}_2^{(1)} \right) \dots \left(\frac{2}{\hbar} \hat{S}_2^{(n)} \right) K$, где оператор $\hat{S}_2^{(i)}$ относится к i -му электрону.

²⁾ Гамильтониан \hat{H}_0 и оператор (13.34) для определенности написаны для сферически симметричного потенциала $V(r)$. Это ограничение, однако, несущественно для дальнейшего доказательства.

Если же нашу систему поместить в магнитное поле \mathbf{H} , то в гамильтониане появится дополнительный член

$$-\frac{e}{2mc}\mathbf{H}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}), \quad (13.39)$$

который, как это следует из (13.37) и (13.38), не коммутирует с оператором $\hat{\Theta}$.

На основании соотношений (13.37) и (13.38), а также легко проверяемых соотношений

$$\hat{\Theta}\hat{p} = -\hat{p}\hat{\Theta}, \quad \hat{\Theta}\mathbf{r} = \mathbf{r}\hat{\Theta} \quad (13.40)$$

оператор $\hat{\Theta}$ называют оператором *обращения времени*.

Перейдем теперь к доказательству теоремы Крамерса. Легко проверить, что

$$\hat{\Theta}^2 = -1. \quad (13.41)$$

Рассмотрим два электронных состояния, которые описываются спинами

$$\Psi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}) \\ \psi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad \Phi(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}) \\ \varphi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (13.42)$$

Определим их скалярное произведение в виде

$$(\Psi, \Phi) = \psi_1\bar{\varphi}_1 + \psi_2\bar{\varphi}_2. \quad (13.43)$$

Используя свойство эрмитовости оператора \hat{S}_2 , мы можем написать

$$(\hat{\Theta}\Psi, \hat{\Theta}\Phi) = \overline{(\Psi, \Phi)} = (\Phi, \Psi). \quad (13.44)$$

Поэтому имеют место следующие равенства:

$$(\Psi, \hat{\Theta}\Psi) = \overline{(\hat{\Theta}\Psi, \hat{\Theta}^2\Psi)} = (\hat{\Theta}^2\Psi, \hat{\Theta}\Psi) = -(\Psi, \hat{\Theta}\Psi), \quad (13.45)$$

откуда

$$(\Psi, \hat{\Theta}\Psi) = 0. \quad (13.46)$$

На основании равенства (13.46) мы приходим к заключению, что состояния Ψ и $\hat{\Theta}\Psi$ ортогональны, а следовательно, линейно независимы. С другой стороны, оба состояния, Ψ и $\hat{\Theta}\Psi$, в силу (13.33) должны принадлежать одному и тому же уровню энергии. Теорема доказана.

Сделаем одно важное замечание. Если рассматриваемая система обладает пространственной симметрией, то обусловленное ею вырождение может включать в себя и крамерсово вырождение. Тогда инвариантность относительно «обращения времени» не приведет к дополнительному вырождению. В качестве такого примера рассмотрим случай, когда группа симметрии системы совпадает с группой вращений $O^+(3)$. Мы знаем, что в такой задаче состояние электрона

характеризуется полным моментом J и собственное значение энергии вырождено $2J + 1$ раз по собственному значению M проекции этого момента. С помощью (13.32) мы можем написать наиболее общий вид волновой функции:

$$\Psi_{JM}(\mathbf{r}) = R_{J-\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} c_{M-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, M}^{(J-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} Y_{J-\frac{1}{2}}^{(M-\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \\ c_{M+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, M}^{(J-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} Y_{J-\frac{1}{2}}^{(M+\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} + \\ + R_{J+\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} c_{M-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, M}^{(J+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} Y_{J+\frac{1}{2}}^{(M-\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \\ c_{M+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, M}^{(J+\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} Y_{J+\frac{1}{2}}^{(M+\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} \quad (13.47)$$

$$(M = -J, -J + 1, \dots, J).$$

Здесь $R_{J-\frac{1}{2}}(\mathbf{r})$ и $R_{J+\frac{1}{2}}(\mathbf{r})$ — некоторые вещественные функции, которые зависят только от $|\mathbf{r}|$. Напомним, что $Y_l^{(m)} = P_l^{(m)} e^{im\varphi}$, $P_l^{(-m)} = (-1)^m P_l$. Коэффициенты Клебша—Гордана также вещественны и обладают рядом свойств, из которых нам понадобится следующее:

$$c_{m_1 m_2 M}^{(l_1 l_2 J)} = c_{-m_1, -m_2, -M}^{(l_1 l_2 J)} \quad (13.48)$$

Поддействуем на функцию $\Psi_{JM}(\mathbf{r})$ оператором $\hat{\Theta}$, который в нашем случае имеет вид

$$\hat{\Theta} = \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{i} \\ -\mathbf{i} & 0 \end{pmatrix} K. \quad (13.49)$$

Мы будем рассматривать только первое слагаемое. Преобразование второго слагаемого аналогично. Используя определение сферических функций и свойство (13.48) коэффициентов Клебша—Гордана, мы получим

$$\hat{\Theta} R_{J-\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} c_{M-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, M}^{(J-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} Y_{J-\frac{1}{2}}^{(M-\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \\ c_{M+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, M}^{(J-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} Y_{J-\frac{1}{2}}^{(M+\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} = \\ = R_{J-\frac{1}{2}}(\mathbf{r}) \begin{bmatrix} \mathbf{i} c_{M+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, M}^{(J-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} \bar{Y}_{J-\frac{1}{2}}^{(M+\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \\ -\mathbf{i} c_{M-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, M}^{(J-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)} \bar{Y}_{J-\frac{1}{2}}^{(M-\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \end{bmatrix} =$$

$$= R_{J-\frac{1}{2}}(\mathbf{r})i(-1)^{M+\frac{1}{2}} \begin{bmatrix} c^{(J-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, J)}_{-(M+\frac{1}{2}), \frac{1}{2}, -M} Y_{J-\frac{1}{2}}^{-(M+\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \\ c^{(J, -\frac{1}{2}, \frac{1}{2})}_{-(M-\frac{1}{2}), -\frac{1}{2}, -M} Y_{J-\frac{1}{2}}^{-(M-\frac{1}{2})}(\theta, \varphi) \end{bmatrix}. \quad (13.50)$$

Таким образом, мы имеем

$$\hat{\Theta} \Psi_{JM}(\mathbf{r}) = i(-1)^{M+\frac{1}{2}} \Psi_J^{-M}(\mathbf{r}). \quad (13.51)$$

Мы видим, что оператор $\hat{\Theta}$ связывает состояния с противоположными значениями проекции полного момента и в рассмотренном случае действительно не приводит к дополнительному вырождению.

5. Теорема Вигнера—Эккарта

В п. 3 главы V была доказана теорема Вигнера, лежащая в основе большого числа приложений. Формально эта теорема дает выражение (5.30) для матричного элемента оператора энергии \hat{H} (или любого другого инвариантного оператора) на функциях, преобразующихся по неприводимым представлениям группы симметрии этого оператора. Воспользовавшись дираковскими обозначениями для волновых функций и матричных элементов операторов, перепишем (5.30) в виде

$$\langle i, \alpha, \nu | \hat{H} | i', \alpha', \nu' \rangle = \delta_{ii'} \delta_{\alpha\alpha'} H_{\nu\nu'}. \quad (13.52)$$

Здесь первый индекс i нумерует тип неприводимого представления, второй α — элементы базиса неприводимого представления, третий индекс ν различает эквивалентные неприводимые представления. В частности, для единичного оператора имеет место равенство

$$\langle i, \alpha, \nu | i', \alpha', \nu' \rangle = \delta_{ii'} \delta_{\alpha\alpha'} S_{\nu\nu'}, \quad (13.53)$$

выражающее свойство ортогональности базисных функций неприводимых представлений. Отличие матричного элемента $S_{\nu\nu'}$ от символа Кронекера указывает на возможную неортогональность одинаковых элементов базисов эквивалентных неприводимых представлений.

Существует более общая теорема, теорема Вигнера—Эккарта, которая дает выражение для матричного элемента оператора, преобразующегося по некоторому неприводимому представлению рассматриваемой группы. Примером такого оператора может служить оператор момента количества движения $\hat{L}(\hat{L}_1 \hat{L}_2 \hat{L}_3)$. При вращениях в трехмерном пространстве компоненты этого оператора преобразуются как компоненты вектора

$$\hat{T}_g \hat{L}_\alpha \hat{T}_g^{-1} = \sum_{\beta=1}^g g_{\alpha\beta} \hat{L}_\beta, \quad \alpha = 1, 2, 3, \quad (13.54)$$

где $\|g_{\alpha\beta}\|$ — матрица вращения в трехмерном пространстве.

Приступим к доказательству теоремы Вигнера—Эккарта. Пусть задан некоторый многокомпонентный оператор $\widehat{N}_\gamma^{(j)}$, компоненты которого при преобразованиях из группы G преобразуются по неприводимому представлению $D^{(j)}$ этой группы:

$$\widehat{T}_g \widehat{N}_\gamma^{(j)} \widehat{T}_g^{-1} = \sum_\gamma D_{\gamma\gamma}^{(j)}(g) \widehat{N}_\gamma^{(j)}. \quad (13.55)$$

Найдем выражение для матричного элемента $\langle i, \alpha, \nu | \widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle$. Для этого подействуем на функцию $\widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle$ оператором \widehat{T}_g :

$$\begin{aligned} \widehat{T}_g \widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle &= \widehat{T}_g \widehat{N}_\gamma^{(j)} \widehat{T}_g^{-1} \widehat{T}_g | i', \alpha', \nu' \rangle = \\ &= \sum_\gamma D_{\gamma\gamma}^{(j)}(g) \widehat{N}_\gamma^{(j)} \sum_{\beta'} D_{\beta'\alpha'}^{(j)}(g) | i', \beta', \nu' \rangle. \end{aligned} \quad (13.56)$$

Отсюда следует, что функции $\widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle$ преобразуются по прямому произведению $D^{(j)} \times D^{(j)}$. Разложим это представление на неприводимые:

$$D^{(j)} \times D^{(j)} = \sum^{\oplus} D^{(k)}. \quad (13.57)$$

Соответственно функция $\widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle$ может быть представлена в виде разложения

$$\widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle = \sum_{k\delta\tau} C_{\gamma\alpha'\delta}^{j i' k \tau} | k, \delta, \tau \rangle, \quad (13.58)$$

где $C_{\gamma\alpha'\delta}^{j i' k \tau}$ — коэффициенты Клебша—Гордона, а индекс τ нумерует кратные неприводимые представления, встречающиеся в разложении прямого произведения (13.57) при фиксированном значении ν . Тогда матричный элемент оператора $N_\gamma^{(j)}$ принимает вид

$$\langle i, \alpha, \nu | \widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle = \sum_\tau C_{\gamma\alpha'\alpha}^{j i' i \tau} S_{\nu\nu' \tau}. \quad (13.59)$$

Здесь мы воспользовались свойством ортогональности (13.53).

Особенно простой результат получается, если разложение прямого произведения представлений (13.57) не содержит кратных представлений, как это имеет место для группы трехмерных вращений. В этом случае в правой части (13.59) будет только одно слагаемое, и индекс τ может быть заменен на ν' :

$$\langle i, \alpha, \nu | \widehat{N}_\gamma^{(j)} | i', \alpha', \nu' \rangle = C_{\gamma\alpha'\alpha}^{j i' i} S_{\nu\nu'}. \quad (13.60)$$

Полученная таким образом факторизация выражения для матричного элемента оператора и представляет собой содержание теоремы Вигнера—Эккарта. Отметим, что первый множитель в (13.60) определяется только трансформационными свойствами рассматриваемых функций и оператора.

Рассмотрим важный пример применения теоремы Вигнера—Эккарта. Пусть имеется система частиц, для каждой из которых определен оператор момента $\hat{j}^{(s)}$ (s — номер частицы).

Введем оператор полного момента:

$$\hat{J} = \sum_s \hat{j}^{(s)}. \quad (13.61)$$

Пусть нам известны собственные функции квадрата полного момента и проекции полного момента на ось z :

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |J, M\rangle &= \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle, \\ \hat{J}_z |J, M\rangle &= \hbar M |J, M\rangle. \end{aligned} \quad (13.62)$$

Согласно теореме Вигнера—Эккарта (13.60), мы можем утверждать, что выполняется соотношение

$$\langle J, M | \hat{J} |J, M'\rangle = a_s \langle J, M | \hat{j}^{(s)} |J, M'\rangle, \quad (13.63)$$

где a_s — некоторая константа. Следовательно, все матричные элементы одночастичного момента на таком базисе пропорциональны соответствующим матричным элементам полного момента. Аналогичное соотношение пропорциональности имеет место для матричных элементов спинового и орбитального моментов системы частиц:

$$\begin{aligned} \langle J, M | \hat{S} |J, M'\rangle &\sim \langle J, M | \hat{J} |J, M'\rangle, \\ \langle J, M | \hat{L} |J, M'\rangle &\sim \langle J, M | \hat{J} |J, M'\rangle. \end{aligned} \quad (13.64)$$

Мы воспользуемся этим свойством при рассмотрении эффекта Зеемана в п. 3 главы XX.

Глава XIV

Дополнительное вырождение в сферически симметричном поле

В предыдущей главе мы исследовали классификацию собственных функций уравнения Шрёдингера с произвольным сферически симметричным потенциальным полем. Однако известны два типа сферически симметричного потенциала, для которых имеет место дополнительное вырождение, и, следовательно, рассмотренная классификация состояний не является полной. Это кулоновское поле $U \sim \frac{1}{r}$ и поле изотропной упругой силы $U = kr^2$. В этой главе мы покажем, что дополнительное вырождение связано с инвариантностью соответствующих уравнений Шрёдингера относительно определенных групп преобразований, для которых группа вращений является только подгруппой.

1. Дополнительное вырождение

Наличие дополнительного вырождения для указанных полей известно из решений соответствующих уравнений Шрёдингера.

Рассмотрим уравнение Шрёдингера с кулоновским потенциалом, т. е. уравнение Шрёдингера для атома водорода. В атомных единицах ($e = 1$, $m = 1$, $\hbar = 1$) оно имеет вид

$$\left(-\frac{1}{2} \Delta - \frac{1}{r}\right) \psi(r) = E\psi(r). \quad (14.1)$$

Известно, что собственные значения этого уравнения, соответствующие связанным состояниям, определяются главным квантовым числом n :

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{1}{n^2}. \quad (14.2)$$

При заданном значении n азимутальное квантовое число может принимать значения $l = n - 1, n - 2, \dots, 1, 0$. Это означает, что волновые функции, соответствующие вырожденному уровню E_n , преобразуются по приводимому представлению группы вращений, которое распадается на неприводимые представления $D^{(n-1)}, D^{(n-2)}, \dots, D^{(0)}$.

Дополнительное вырождение имеет место также для уровней энергии изотропного гармонического осциллятора, уравнение Шрёдингера

которого имеет вид (в атомных единицах)

$$\left(-\frac{1}{2\mu} \Delta + \frac{\mu\omega^2}{2} r^2\right) \psi(r) = E\psi(r). \quad (14.3)$$

Положим для упрощения записи $\mu = \omega = 1$. Будем искать решение уравнения (14.3) в виде

$$\varphi(r) = Y_{lm}(\theta, \varphi) \frac{1}{r} f(r) e^{-r^2/2}, \quad f(0) = 0. \quad (14.4)$$

Для функции $f(r)$ мы получим уравнение

$$f'' - 2rf' + \left[2n + 2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right] f = 0, \quad (14.5)$$

где

$$n = E - \frac{3}{2}. \quad (14.6)$$

Решение этого уравнения, удовлетворяющего граничному условию в нуле, может быть выражено через вырожденную гипергеометрическую функцию

$$f(r) = r^{l+1} F\left(-\frac{n-l}{2}, l + \frac{3}{2}, r^2\right). \quad (14.7)$$

Для того чтобы волновая функция стремилась к нулю при $r \rightarrow \infty$, ряд для гипергеометрической функции должен обрываться. Это возможно только в том случае, если $\frac{n-l}{2}$ — целое число или нуль. Отсюда следует, что число n должно быть целым. При фиксированном значении n , которое определяет собственное значение энергии, азимутальное число l может принимать значения $n, n-2, n-4, \dots$. Поэтому соответствующие волновые функции будут преобразовываться по приводимому представлению группы вращений, которое распадается на неприводимые представления $D^{(n)}, D^{(n-2)}, \dots$

2. Связь с классической механикой

Исключительный характер рассмотренных потенциальных полей проявляется также и в классической механике. Напомним, что согласно классической механике движение частицы в центральном поле потенциала $U(r)$ происходит в плоскости, перпендикулярной к вектору момента количества движения $\mathbf{L} = [\mathbf{r}, \mathbf{p}]$. Если в этой плоскости ввести полярные координаты, поместив начало координат в силовой центр, то полярный угол φ и радиус-вектор \mathbf{r} нашей частицы будут

связаны соотношением

$$\varphi = \int \frac{L dr}{r^2 \sqrt{2\mu(E - U(r)) - \frac{L^2}{r^2}}} + \text{const}, \quad (14.8)$$

где E — энергия, μ — масса частицы.

Неравенство

$$U(r) + \frac{L^2}{2\mu r^2} < E \quad (14.9)$$

определяет область изменения радиуса-вектора r . Эта область во всяком случае ограничена снизу значениями $r = r_{\min}$, так как в левой части неравенства содержится растущий при $r \rightarrow 0$ центробежный член $\frac{L^2}{2\mu r^2}$. Если, кроме того, имеется и верхняя граница $r = r_{\max}$, то движение называется финитным и его траектория должна целиком лежать в кольце с внешним и внутренним радиусами, соответственно равными r_{\max} и r_{\min} . Для произвольного центрального поля траектория бесконечное число раз касается внутренней и внешней окружности этого кольца и является незамкнутой (рис. 16).

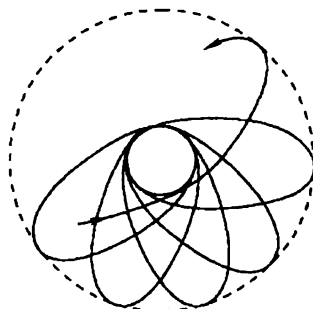


Рис. 16.

Это происходит потому, что величина

$$\Delta\varphi = \int_{r_{\min}}^{r_{\max}} \frac{L dr}{r^2 \sqrt{2\mu[E - U(r)] - \frac{L^2}{r^2}}}$$

в общем случае не является рациональной частью 2π . Однако для кулоновского поля притяжения и поля изотропной упругой силы траектории движения будут замкнутыми. Для кулоновского поля $\Delta\varphi = \pi$, для изотропного осциллятора $\Delta\varphi = \frac{\pi}{2}$, при любых значениях E и L .

3. Группа симметрии атома водорода

Группа симметрии уравнения Шрёдингера для атома водорода была исследована В. А. Фоком в 1935 году¹⁾. Преобразования из этой группы не сводятся к преобразованиям в обычном трехмерном пространстве. Кроме того, группы симметрии этого уравнения для связанных состояний ($E < 0$) и для сплошного спектра ($E > 0$) оказываются различными. Мы рассмотрим сейчас более подробно случай дискретного спектра.

¹⁾ Фок В. А. Изв. АН СССР, ОТН (1935), с. 169–179.

Уравнение Шрёдингера (14.1) для атома водорода в импульсном представлении имеет вид

$$\frac{1}{2}p^2\varphi(\mathbf{p}) + \frac{1}{2\pi} \int \frac{\varphi(\mathbf{p}') d\mathbf{p}'}{(\mathbf{p} - \mathbf{p}')^2} = -\frac{p_0^2}{2}\varphi(\mathbf{p}), \quad (14.10)$$

где

$$\varphi(\mathbf{p}) = (2\pi)^{-3/2} \int \psi(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{p}\mathbf{r})} d\mathbf{r}, \quad -\frac{p_0^2}{2} = E. \quad (14.11)$$

Сопоставим каждой точке \mathbf{p} в импульсном пространстве точку на единичной сфере в четырехмерном пространстве с координатами ξ, η, ζ, χ :

$$\left. \begin{aligned} \xi &= \frac{2p_0 p_x}{p_0^2 + p^2}, & \zeta &= \frac{2p_0 p_z}{p_0^2 + p^2}, \\ \eta &= \frac{2p_0 p_y}{p_0^2 + p^2}, & \chi &= \frac{p_0^2 - p^2}{p_0^2 + p^2}, \\ \xi^2 + \eta^2 + \zeta^2 + \chi^2 &= 1. \end{aligned} \right\} \quad (14.12)$$

Если теперь ввести функцию

$$\Phi(\mathbf{p}) = \frac{\pi}{\sqrt{8}} p_0^{-5/2} (p_0^2 + p^2)^2 \varphi(\mathbf{p}) = \Psi(\xi, \eta, \zeta, \chi), \quad (14.13)$$

то уравнение (14.11) может быть преобразовано к виду

$$\Psi(\xi, \eta, \zeta, \chi) = \frac{1}{2\pi^2 p_0} \int \frac{\Psi(\xi', \eta', \zeta', \chi') d\Omega}{|\xi - \xi'|^2 + |\eta - \eta'|^2 + |\zeta - \zeta'|^2 + |\chi - \chi'|^2}, \quad (14.14)$$

где $d\Omega$ — элемент поверхности сферы единичного радиуса в четырехмерном пространстве, по которой проводится интегрирование. Уравнение (14.14) инвариантно относительно вращений в четырехмерном пространстве, и, следовательно, его группой симметрии будет группа $O^+(4)$. На основании теоремы Вигнера мы можем утверждать, что собственные функции этого уравнения должны преобразовываться по неприводимым представлениям группы $O^+(4)$. Неприводимые представления группы $O^+(4)$ мы получим в главе XXI. Мы сможем тогда убедиться, что классификация состояний по этим представлениям группы $O^+(4)$ совпадает с обычной классификацией состояний атома водорода и объясняет дополнительное вырождение.

Интересно получить явные выражения инфинитезимальных операторов представлений группы четырехмерных вращений¹⁾. Для нашей задачи они являются квантовомеханическими интегралами движения.

¹⁾ Добронравов Ю. А. Вестник ЛГУ, № 10 (1957), с. 5.

В четырехмерном евклидовом пространстве можно рассмотреть шесть независимых двумерных плоскостей: $\xi\eta$, $\xi\zeta$, $\xi\chi$, $\eta\zeta$, $\eta\chi$, $\zeta\chi$. Поэтому в качестве шести параметров, от которых зависит произвольная вещественная ортогональная матрица четвертого порядка, можно выбрать параметры поворотов в этих двумерных плоскостях. Бесконечно малым поворотам в этих плоскостях соответствуют преобразования

$$\left. \begin{aligned} \left\{ \begin{aligned} \xi' &= \xi - \alpha_3\eta, \\ \eta' &= \alpha_3\xi + \eta; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} \xi' &= \xi + \alpha_2\zeta, \\ \zeta' &= -\alpha_2\xi + \zeta; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} \eta' &= \eta - \alpha_1\zeta, \\ \zeta' &= \alpha_1\eta + \zeta; \end{aligned} \right. \\ \left\{ \begin{aligned} \xi' &= \xi + \beta_1\chi, \\ \chi' &= -\beta_1\xi + \chi; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} \eta' &= \eta + \beta_2\chi, \\ \chi' &= -\beta_2\eta + \chi; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} \zeta' &= \zeta + \beta_3\chi, \\ \chi' &= -\beta_3\zeta + \chi. \end{aligned} \right. \end{aligned} \right\} \quad (14.15)$$

В пространстве импульсов этим поворотам соответствуют согласно (14.12) следующие преобразования:

$$\left. \begin{aligned} \left\{ \begin{aligned} p'_y &= p_y - \alpha_1 p_z, \\ p'_z &= \alpha_1 p_y + p_z; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} p'_x &= p_x + \alpha_2 p_z, \\ p'_z &= -\alpha_2 p_x + p_z; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} p'_x &= p_x - \alpha_3 p_y, \\ p'_y &= \alpha_3 p_x + p_y; \end{aligned} \right. \\ \left\{ \begin{aligned} p'_x &= p_x + \frac{2p_x^2 + p_0^2 - p^2}{2p_0} \beta_1, \\ p'_y &= p_y + \frac{p_y p_x}{p_0} \beta_1, \\ p'_z &= p_z + \frac{p_z p_x}{p_0} \beta_1; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} p'_x &= p_x + \frac{p_x p_y}{p_0} \beta_2, \\ p'_y &= p_y + \frac{2p_y^2 + p_0^2 - p^2}{2p_0} \beta_2, \\ p'_z &= p_z + \frac{p_z p_y}{p_0} \beta_2; \end{aligned} \right. & \left\{ \begin{aligned} p'_x &= p_x + \frac{p_x p_z}{p_0} \beta_3, \\ p'_y &= p_y + \frac{p_y p_z}{p_0} \beta_3, \\ p'_z &= p_z + \frac{2p_z^2 + p_0^2 - p^2}{2p_0} \beta_3. \end{aligned} \right. \end{aligned} \right\} \quad (14.16)$$

Преобразования (14.16) в свою очередь индуцируют бесконечно малые преобразования в пространстве функций

$$\delta\Phi = \frac{\partial\Phi}{\partial p_x} \delta p_x + \frac{\partial\Phi}{\partial p_y} \delta p_y + \frac{\partial\Phi}{\partial p_z} \delta p_z. \quad (14.17)$$

Учитывая связь функций $\Phi(\mathbf{p})$ и $\varphi(\mathbf{p})$, для последней получим

$$\delta_{\alpha_1} \varphi = \alpha_1 \left(-p_x \frac{\partial\varphi}{\partial p_y} + p_y \frac{\partial\varphi}{\partial p_x} \right), \quad (14.18)$$

$$\delta_{\beta_1} \varphi = \beta_1 \left[\frac{p_x^2 - p_y^2 - p_z^2 + p_0^2}{2p_0} \frac{\partial \varphi(\mathbf{p})}{\partial p_x} + \frac{p_x p_y}{p_0} \frac{\partial \varphi(\mathbf{p})}{\partial p_y} + \frac{p_x p_z}{p_0} \frac{\partial \varphi(\mathbf{p})}{\partial p_z} + 2 \frac{p_x}{p_0} \varphi(\mathbf{p}) \right] \quad (14.19)$$

и еще четыре равенства, получаемые круговой перестановкой x, y, z .

Мы написали инфинитезимальные операторы, соответствующие бесконечно малым преобразованиям (14.15) в пространстве волновых функций $\varphi(\mathbf{p})$, принадлежащих уровню $E = -\frac{p_0^2}{2}$. Чтобы получить инфинитезимальные операторы группы четырехмерных вращений, действующие на любую функцию, разложимую по собственным функциям дискретного спектра, мы должны величину p_0 заменить на оператор $\sqrt{-2\hat{H}}$. Заменяя также производные $\frac{\partial}{\partial p_x}$, $\frac{\partial}{\partial p_y}$, $\frac{\partial}{\partial p_z}$ соответственно на $i\hat{x}$, $i\hat{y}$, $i\hat{z}$, мы получаем окончательные выражения для шести инфинитезимальных операторов:

$$\left. \begin{aligned} \hat{L}_x &= \hat{p}_z \hat{y} - \hat{p}_y \hat{z}, \\ \hat{L}_y &= \hat{p}_x \hat{z} - \hat{p}_z \hat{x}, \\ \hat{L}_z &= \hat{p}_y \hat{x} - \hat{p}_x \hat{y}; \end{aligned} \right\} \quad (14.20)$$

$$\left. \begin{aligned} \hat{N}_x &= \frac{1}{2} \left[\frac{[\hat{p}, \hat{L}]_x - [\hat{L}, \hat{p}]_x}{2} - \frac{x}{r} \right] \sqrt{\frac{2}{-\hat{H}}}, \\ \hat{N}_y &= \frac{1}{2} \left[\frac{[\hat{p}, \hat{L}]_y - [\hat{L}, \hat{p}]_y}{2} - \frac{y}{r} \right] \sqrt{\frac{2}{-\hat{H}}}, \\ \hat{N}_z &= \frac{1}{2} \left[\frac{[\hat{p}, \hat{L}]_z - [\hat{L}, \hat{p}]_z}{2} - \frac{z}{r} \right] \sqrt{\frac{2}{-\hat{H}}}. \end{aligned} \right\} \quad (14.21)$$

Первые три инфинитезимальных оператора совпадают с тремя составляющими оператора момента количества движения. Эти интегралы, как мы знаем, имеют место для всех сферически симметричных потенциалов. Интегралы (14.21) присущи только кулоновскому полю. Их можно записать в векторной форме:

$$\hat{N} = \frac{1}{2} \left[\frac{[\hat{p}, \hat{L}] - [\hat{L}, \hat{p}]}{2} - \frac{\mathbf{r}}{r} \right] \sqrt{\frac{2}{-\hat{H}}}. \quad (14.22)$$

Соответствующая величина в классической механике совпадает с радиус-вектором второго фокуса эллипса. Таким образом, смысл этого интеграла уравнений движения заключается в фиксировании направления перигелия орбиты, что связано с ее замкнутостью.

В. А. Фоком было показано, что для состояний сплошного спектра уравнение (14.1) инвариантно относительно группы преобразований, изоморфной группе Лоренца.

4. Группа симметрии изотропного осциллятора

После того как было объяснено дополнительное вырождение состояний атома водорода, естественно было попытаться определить полную группу симметрии изотропного осциллятора. Эта группа была независимо найдена Демковым, Хиллом и Яухом¹⁾.

Задача о трехмерном осцилляторе является частным случаем задачи об n -мерном изотропном осцилляторе. Так как наше рассмотрение группы симметрии не будет зависеть от размерности осциллятора, то естественно обсудить общий случай.

Гамильтониан изотропного n -мерного осциллятора (в атомных единицах) имеет вид

$$H = \sum_{k=1}^n \left(\frac{p_k^2}{2} + \frac{\omega^2}{2} q_k^2 \right). \quad (14.23)$$

Для простоты мы считаем, что масса $m = 1$. Введем в рассмотрение операторы

$$\left. \begin{aligned} a_k &= (2\omega)^{-1/2} (\omega q_k + i p_k), \\ a_k^+ &= (2\omega)^{-1/2} (\omega q_k - i p_k). \end{aligned} \right\} \quad (14.24)$$

Из перестановочных соотношений для p_k и q_k легко получить перестановочные соотношения для операторов a_k и a_k^+ . Они имеют вид

$$a_k a_l - a_l a_k = 0, \quad a_k^- a_l^+ - a_l^+ a_k^+ = 0, \quad a_k a_l^+ - a_l^- a_k = \delta_{kl}. \quad (14.25)$$

Гамильтониан (14.23) теперь может быть представлен в виде

$$H = \omega \sum_{k=1}^n \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right). \quad (14.26)$$

Вместо операторов a_k можно ввести новые операторы a_k' , которые связаны со старыми произвольным унитарным преобразованием:

$$a_k' = \sum_s u_{ks} a_s, \quad a_k'^+ = \sum_s u_{sk}^+ a_s^+. \quad (14.27)$$

Легко проверить, что в силу унитарности матрицы $\|u_{ik}\|$ операторы a_k' и $a_k'^+$ удовлетворяют прежним перестановочным соотношениям.

¹⁾ Демков Ю. П. Вестник ЛГУ, № 11 (1953); F. L. Hill, J. M. Juch. Phys. Rev. 57 (1950), 641. Здесь мы будем следовать работе Бейкера (Baker C. A. Phys. Rev. 103 (1956), 1119).

Действительно, мы имеем

$$\left. \begin{aligned} a'_k a'_i - a'_i a'_k &= \sum_{i,j} u_{ki} u_{ij} (a_i a_j - a_j a_i) = 0, \\ a'_k a_i^+ - a_i^+ a'_k &= \sum_{i,j} u_{kj} u_{ii}^+ (a_j a_i^+ - a_i^+ a_j) = \sum_{i,j} u_{kj} u_{ji}^+ = \delta_{ki}. \end{aligned} \right\} \quad (14.28)$$

Ясно также, что гамильтониан (14.26) должен быть инвариантен относительно преобразования (14.27). Действительно,

$$a_k = \sum_s u_{ks}^- a'_s, \quad a_k^+ = \sum_r u_{rk}^+ a_r^+; \quad (14.29)$$

$$\begin{aligned} H &= \omega \sum_k \left(a_k^+ a_k + \frac{1}{2} \right) = \omega \sum_k \left\{ \sum_{s,r} \left(a_r^+ a'_s u_{ks}^+ u_{rk} + \frac{1}{2} \right) \right\} = \\ &= \omega \sum_{s,r} \left(a_r^+ a'_s \delta_{rs} + \frac{1}{2} \right) = \omega \sum_r \left(a_r^+ a'_r + \frac{1}{2} \right). \end{aligned} \quad (14.30)$$

Отсюда следует, что группой симметрии n -мерного изотропного осциллятора является n -мерная унитарная группа $U(n)$.

Для трехмерного осциллятора группой симметрии является, следовательно, трехмерная унитарная группа $U(3)$, которая содержит группу вращений в качестве вещественной подгруппы. Действительно, если мы будем считать матрицу $\|u_{ik}\|$ вещественной, то преобразования (14.27) могут быть записаны в виде

$$a'_k = \sum_{s=1}^3 u_{ks} a_s, \quad a_k^+ = \sum_{s=1}^3 u_{ks} a_s^+. \quad (14.31)$$

Такому преобразованию операторов a_s, a_s^+ соответствуют одинаковые преобразования операторов q_k и p_k :

$$q'_k = \sum_s u_{ks} q_s, \quad p'_k = \sum_s u_{ks} p_s, \quad (14.32)$$

которые представляют собой обычные вращения в трехмерном пространстве.

Обратимся снова к n -мерному изотропному осциллятору и найдем представления, по которым преобразуются его вырожденные волновые функции. Изотропный n -мерный осциллятор можно рассматривать как совокупность n одинаковых одномерных осцилляторов. Поэтому его волновая функция может быть представлена в виде произведения

$$\Phi_{m_1, \dots, m_n} = \varphi_{m_1}(q_1) \varphi_{m_2}(q_2) \dots \varphi_{m_n}(q_n), \quad (14.33)$$

где φ_{m_i} — волновая функция одномерного осциллятора с собственным значением энергии $\omega \left(m_i + \frac{1}{2} \right)$. Волновая функция (14.33) соответствует собственному значению энергии

$$E = \omega \left(m_1 + m_2 + \dots + m_n + \frac{n}{2} \right). \quad (14.34)$$

Ясно, что этому значению энергии соответствуют все функции $\Phi_{m'_1, \dots, m'_n}$, для которых выполняется равенство

$$\omega \left(m'_1 + m'_2 + \dots + m'_n + \frac{n}{2} \right) = E. \quad (14.35)$$

Основное состояние нашего осциллятора описывается единственной функцией

$$\Phi_{0\dots 0} = \varphi_0(q_1) \dots \varphi_0(q_n). \quad (14.36)$$

Можно доказать, что функция $\Phi_{0\dots 0}$ преобразуется по тождественному представлению унитарной группы. Волновые функции возбужденных состояний можно, как известно, построить, действуя на функции основного состояния операторами a_k^+ . Опуская нормировочные множители, мы можем написать

$$\Phi_{m_1 \dots m_n} = (a_1^+)^{m_1} (a_2^+)^{m_2} \dots (a_n^+)^{m_n} \Phi_{0\dots 0} \quad (14.37)$$

и, следовательно, собственные функции, соответствующие собственному значению $m + \frac{n}{2}$, представимы в виде

$$a_{i_1}^+ a_{i_2}^+ \dots a_{i_m}^+ \Phi_{0\dots 0}. \quad (14.38)$$

Так как порядок расположения операторов a_i^+ несущественен, то при преобразованиях (14.27) эти функции преобразуются, как компоненты симметричного тензора m -го ранга в n -мерном пространстве.

В теории представлений унитарной группы доказывается, что такие представления, реализующиеся на компонентах симметричного тензора, являются неприводимыми¹⁾. Эти представления, однако, не исчерпывают всех неприводимых представлений унитарной группы. Мы лишены здесь возможности проанализировать этот вопрос более подробно и ограничимся лишь подсчетом порядка представления, которое реализуется на компонентах симметричного тензора m -го ранга в n -мерном пространстве. Мы знаем, что порядок представления равен кратности вырождения соответствующего уровня энергии. Подсчитаем число независимых компонент симметричного тензора ранга m в n -мерном пространстве. Пусть $\Phi_{j_1 \dots j_m}$ — компонента такого тензора. Значки j_1, j_2, \dots, j_m в силу симметрии тензора всегда можно расположить в неубывающем порядке:

$$j_1 \leq j_2 \leq \dots \leq j_m.$$

¹⁾ См., например, Вейль Г. Классические группы, ИЛ, 1947, гл. VII.

В этом случае всегда будут выполняться неравенства

$$i_1 < i_2 < \dots < i_m,$$

где $i_k = j_k + k - 1$. Числа i_k все различны и могут принимать значения от 1 до $n + m - 1$. Поэтому число различных компонент симметричного тензора равно числу различных сочетаний из $n + m - 1$ значений по m . Таким образом, кратность вырождения уровня $E = m + \frac{n}{2}$ изотропного n -мерного осциллятора равна

$$\frac{(n + m - 1)!}{m!(n - 1)!}. \quad (14.39)$$

Так как мы уже значительно вышли за рамки задачи о трехмерном осцилляторе, то позволим себе вкратце остановиться на свойствах симметрии волновых функций n -мерного изотропного осциллятора, если его координаты преобразуются представлению некоторой группы симметрии, например точечной группы, как это имеет место в задачах о нормальных колебаниях молекул. Опираясь на проведенное выше рассмотрение, мы можем утверждать, что волновые функции, принадлежащие собственному значению энергии $m + \frac{n}{2}$, будут преобразовываться по представлению, которое реализуется на компонентах симметричного тензора ранга m в n -мерном пространстве. Такое представление называют m -кратной симметричной степенью векторного представления (более подробно о симметризованных степенях представлений, в том числе о симметричной степени, см. главу XVI).

Глава XV

Группа перестановок

В этой главе мы рассмотрим группу S_n перестановок n символов и получим ее неприводимые представления. Конкретной реализацией этой группы в квантовой механике является группа перестановок переменных, описывающих тождественные частицы. Для того чтобы с самого начала была ясна цель нашего рассмотрения, начнем с постановки квантовомеханической задачи.

1. Квантовомеханическое описание системы тождественных частиц

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для системы, состоящей из n одинаковых частиц:

$$H(q_1, q_2, \dots, q_n)\Psi(q_1, \dots, q_n) = E\Psi(q_1, q_2, \dots, q_n). \quad (15.1)$$

Здесь q_i — совокупность переменных, относящихся к i -й частице. Так как гамильтониан $H(q_1, q_2, \dots, q_n)$ должен быть инвариантен относительно перестановок переменных q_i , то решение уравнения (15.1) должно преобразовываться по неприводимому представлению этой группы.

Для того чтобы теория согласовывалась с экспериментальными результатами, необходимо потребовать, чтобы волновая функция системы частиц с полуцелым спином была антисимметричной относительно перестановки любой пары частиц, а волновая функция системы частиц с целым спином — симметричной:

$$\left. \begin{aligned} \Psi(q_1, q_2, \dots, q_n) &= -\Psi(q_2, q_1, \dots, q_n) \\ &\text{для частиц с полуцелым спином,} \\ \Psi(q_1, q_2, \dots, q_n) &= \Psi(q_2, q_1, \dots, q_n) \\ &\text{для частиц с целым спином.} \end{aligned} \right\} \quad (15.2)$$

В квантовой теории поля эта связь получила объяснение в теореме Паули. Таким образом, для описания симметрии волновых функций системы тождественных частиц в действительности из всей совокупности неприводимых представлений группы перестановок используются два простейших одномерных представления: антисимметричное и симметричное. В дальнейшем, как правило, мы будем иметь дело с системами электронов и, следовательно, с антисимметричными

волновыми функциями. Основное применение теории представлений группы перестановок в квантовой механике многих частиц связано с приближением, в котором гамильтониан системы предполагается не зависящим от спинов.

Тогда стационарное уравнение Шрёдингера для многоэлектронной системы имеет вид

$$H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = E\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n). \quad (15.3)$$

Полная «антисимметричная» волновая функция может быть построена путем антисимметризации произведения решения этого уравнения и спиновой функции $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \sigma_1, \dots, \mathbf{r}_n, \sigma_n) = \sum_p (-1)^{\varepsilon(p)} \psi(\mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{p_2}, \dots, \mathbf{r}_{p_n}) \chi(\sigma_{p_1}, \dots, \sigma_{p_n}), \quad (15.4)$$

где $\varepsilon(p)$ — четность перестановки p , а суммирование проводится по всем перестановкам n индексов. Координатная волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$, являющаяся решением уравнения Шрёдингера (15.3), не обязательно должна быть антисимметричной относительно перестановки своих аргументов. Так как гамильтониан $H(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ инвариантен относительно перестановки переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$, то волновая функция $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ согласно теореме Вигнера должна преобразовываться по одному из неприводимых представлений группы перестановок S_n . Единственное ограничение, которое накладывается на класс допустимых неприводимых представлений, заключается в том, что результат антисимметризации в формуле (15.4) должен быть отличен от нуля. В главе XVI мы подробно рассмотрим вопрос о построении волновой функции многоэлектронной системы, а сейчас перейдем к изучению группы S_n и всех ее неприводимых представлений.

2. Группа перестановок n символов

Элементами группы перестановок S_n являются $n!$ операций перестановок n символов. Перестановка s , которая на место символа с номером i ставит символ с номером s_i , записывается в виде

$$s = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ s_1 & s_2 & \dots & s_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} i \\ s_i \end{pmatrix}. \quad (15.5)$$

Произведением двух перестановок $s = \begin{pmatrix} i \\ s_i \end{pmatrix}$ и $t = \begin{pmatrix} j \\ t_j \end{pmatrix}$ называют перестановку

$$ts = \begin{pmatrix} i \\ t_{s_i} \end{pmatrix}. \quad (15.6)$$

Тождественным элементом группы является перестановка $\begin{pmatrix} i \\ i \end{pmatrix}$, а обратной для перестановки s является перестановка

$$s^{-1} = \begin{pmatrix} s_1 \\ i \end{pmatrix}. \quad (15.7)$$

Особый интерес представляет циклическая перестановка m символов ($m \leq n$), в которой символ с номером f_k заменяется на символ с номером f_{k+1} , если $k < m$, а символ с номером f_m заменяется на символ с номером f_1 . Такую перестановку мы будем записывать в виде скобки (f_1, f_2, \dots, f_m) . Произвольную перестановку можно выразить с помощью произведения циклических перестановок. Поясним это на примере. Действительно,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 \\ 2 & 4 & 6 & 1 & 5 & 7 & 3 & 8 \end{pmatrix} = (124)(367)(5)(8). \quad (15.8)$$

Циклическую структуру перестановки будем характеризовать совокупностью чисел $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$, где число α_l показывает, сколько циклических перестановок из l символов содержится в данной перестановке. Например, циклическая структура тождественной перестановки характеризуется следующей совокупностью:

$$\alpha_1 = n, \quad \alpha_2 = \alpha_3 = \dots = \alpha_n = 0.$$

Циклическая структура перестановки (15.8) определяется следующими значениями:

$$\alpha_1 = 2, \quad \alpha_2 = 0, \quad \alpha_3 = 2, \quad \alpha_4 = \alpha_5 = \dots = \alpha_8 = 0.$$

Так как число переставляемых символов равно n , то всегда имеется равенство

$$\alpha_1 + 2\alpha_2 + \dots + n\alpha_n = n. \quad (15.9)$$

Рассмотрим две перестановки, обладающие одинаковой циклической структурой, например:

$$a = (123)(45)(6), \quad b = (431)(26)(5).$$

Эти перестановки различаются лишь перенумерацией значков, которую можно выполнить с помощью перестановки

$$t = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 4 & 3 & 1 & 2 & 6 & 5 \end{pmatrix},$$

т. е. $a = t^{-1}bt$. Следовательно, a и b принадлежат одному классу. Очевидно, что и, наоборот, перестановки, принадлежащие одному классу, т. е. отличающиеся друг от друга перенумерацией значков, обладают

одинаковой циклической структурой. Таким образом, мы приходим к важному выводу, что перестановки с одинаковой циклической структурой образуют класс и, следовательно, число различных классов равно числу различных циклических структур. Число символов в циклической перестановке будем называть длиной цикла. Если обозначить через $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ ($\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k = n$) длины циклов, на которые разлагается произвольная перестановка, то число различных циклических структур, совпадающее с числом классов, будет равно числу различных возможных разбиений n на целые положительные слагаемые. Из общей теории представлений конечных групп следует, что группа перестановок S_n имеет такое же число различных неприводимых представлений.

3. Неприводимые представления группы S_n

Перейдем теперь к нахождению всех неприводимых представлений группы S_n . Мы уже упоминали о двух одномерных, а следовательно, неприводимых представлениях — симметричном и антисимметричном, по которым преобразуются волновые функции частиц с целым и полуцелым спином соответственно. В симметричном представлении любой перестановке сопоставляется 1, а в антисимметричном $(-1)^{\varepsilon(p)}$, где $\varepsilon(p)$ — четность перестановки p , т. е. в этом представлении всем четным перестановкам сопоставляется 1, а нечетным -1 .

Задачу нахождения неприводимых представлений будем решать следующим образом. Рассмотрим функцию $F(y_1, y_2, \dots, y_n)$, являющуюся произведением n независимых функций, каждая из которых зависит от одного аргумента:

$$F(y_1, y_2, \dots, y_n) = \psi_1(y_1)\psi_2(y_2) \dots \psi_n(y_n). \quad (15.10)$$

Определим теперь операцию перестановки аргументов функции $F(y_1, y_2, \dots, y_n)$ формулой

$$\hat{p}F = F(y_{p_1}, y_{p_2}, \dots, y_{p_n}) \equiv F_p(y_1, \dots, y_n). \quad (15.11)$$

Применяя к функции F все $n!$ перестановок, мы получим $n!$ независимых функций F_p . При действии на функцию F_p произвольной перестановкой q мы получим

$$\begin{aligned} \hat{q}F_p(y_1, y_2, \dots, y_n) &= \hat{q}F(y_{p_1}, y_{p_2}, \dots, y_{p_n}) = \\ &= F(y_{q_{p_1}}, y_{q_{p_2}}, \dots, y_{q_{p_n}}) = F_{qp}. \end{aligned} \quad (15.12)$$

Из формулы (15.12) следует, что функции F_p образуют базис регулярного представления группы перестановок. Напомним, что регулярное представление является приводимым и каждое неприводимое представление порядка l содержится в нем l раз.

Рассмотрим линейное $n!$ -мерное пространство R , элементами которого являются произвольные линейные комбинации функций F_p :

$$\sum_{p \in S_n} c_p F_p. \quad (15.13)$$

Разложение регулярного представления, которое реализуется на функциях F_p , сводится к разложению пространства R на неприводимые инвариантные подпространства относительно группы S_n . Воспользуемся сейчас тем, что функцию F мы выбрали в виде произведения (15.10). Это позволит нам наряду с оператором \hat{p} перестановки аргументов рассматривать также оператор \hat{P} перестановки функций ψ_i , определяемый следующим равенством:

$$\hat{P}F = \psi_{p_1}(y_1)\psi_{p_2}(y_2)\dots\psi_{p_n}(y_n) = \hat{p}^{-1}F. \quad (15.14)$$

Легко видеть, что операторы \hat{q} и \hat{P} коммутируют друг с другом:

$$\hat{q}\hat{P} = \hat{P}\hat{q}. \quad (15.15)$$

Действие оператора \hat{P} на функцию F_q эквивалентно действию на эту функцию оператора $\hat{q}\hat{p}^{-1}\hat{q}^{-1}$. Действительно,

$$\hat{P}F_q = \psi_{p_1}(y_{q_1})\psi_{p_2}(y_{q_2})\dots\psi_{p_n}(y_{q_n}). \quad (15.16)$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} \hat{q}\hat{p}^{-1}\hat{q}^{-1}F_p &= \hat{q}\hat{p}^{-1}\hat{q}^{-1}\psi_1(y_{q_1})\psi_2(y_{q_2})\dots\psi_n(y_{q_n}) = \\ &= \hat{q}\hat{p}^{-1}\psi_1(y_1)\psi_2(y_2)\dots\psi_n(y_n) = \\ &= \hat{q}\psi_{p_1}(y_1)\psi_{p_2}(y_2)\dots\psi_{p_n}(y_n) = \\ &= \psi_{p_1}(y_{q_1})\psi_{p_2}(y_{q_2})\dots\psi_{p_n}(y_{q_n}). \end{aligned} \quad (15.17)$$

Мы видим, что действие оператора \hat{P} на различные функции F_q эквивалентно действию различных перестановок аргументов. Поэтому результат применения оператора \hat{P} к произвольному элементу (15.13) пространства R не может быть выражен с помощью какой-либо перестановки аргументов.

Покажем, как с помощью операторов \hat{P} можно построить инвариантное подпространство пространства R . Выберем, например, из функций ψ_i λ функций. Все перестановки номеров этих функций образуют группу S_λ . Составим оператор симметризации

$$\hat{\Omega}_{S_\lambda} \equiv \sum_{p \in S_\lambda} \hat{P}. \quad (15.18)$$

Если оператором $\widehat{\Omega}_{S\lambda}$ подействовать на все функции F_p , то получим $n!$ функций, симметричных относительно перестановок λ функций ψ_i . Ясно, что не все построенные таким образом функции будут линейно независимыми и, следовательно, они образуют лишь некоторое подпространство R' пространства R . Докажем, что подпространство R' инвариантно относительно любых перестановок аргументов y_1, y_2, \dots, y_n . Действительно, произвольный элемент пространства R' можно представить в виде

$$\widehat{\Omega}_{S\lambda} \sum_{q \in S_n} c_q F_q = \sum_{q \in S_n} c_q \sum_{p \in S_\lambda} \widehat{P} F_p. \quad (15.19)$$

Подействуем на него оператором произвольной перестановки t аргументов. Используя соотношения коммутации (15.15), мы получим

$$\hat{t} \sum_{q \in S_n} c_q \sum_{p \in S_\lambda} \widehat{P} F_p = \sum_{q \in S_n} c_q \sum_{p \in S_\lambda} \widehat{P} F_{tq} = \Omega_{S\lambda} \sum_{q' \in S_n} c'_q F_{q'}, \quad (15.20)$$

где $c'_q = c_{t^{-1}q}$.

Мы видим, что функция, стоящая в правой части этого равенства, принадлежит подпространству R' и, следовательно, подпространство R' инвариантно относительно любых перестановок аргументов. В частности, если $\lambda = n$, то подпространство R' будет состоять из одной функции F_S , симметричной относительно любых перестановок функций ψ_i :

$$F_S = \widehat{\Omega}_{S_n} F = \sum_{p \in S_n} \widehat{P} F. \quad (15.21)$$

Аналогично можно получить инвариантное подпространство, антисимметричное относительно перестановок λ функций ψ_i . Соответствующий оператор антисимметризации имеет вид

$$\widehat{\Omega}_{A\lambda} \equiv \sum_{p \in S_\lambda} (-1)^{\epsilon(p)} \widehat{P}. \quad (15.22)$$

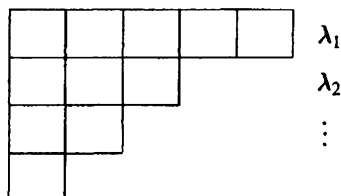
Если $\lambda = n$, то мы получим функцию, антисимметричную относительно группы S_n :

$$F_A = \widehat{\Omega}_{A_n} F = \sum_{p \in S_n} (-1)^{\epsilon(p)} \widehat{P} F. \quad (15.23)$$

Для выделения инвариантных подпространств можно проводить последовательно симметризацию и антисимметризацию по различным наборам функций ψ_i . Нельзя, конечно, проводить антисимметризацию по тем функциям, по которым первоначально была выполнена симметризация (иначе мы получим нуль).

Мы покажем сейчас, что при определенном выборе операций симметризации и антисимметризации можно разбить все пространство R

на инвариантные подпространства, преобразующиеся по неприводимым представлениям. Для того чтобы указать номера функций ψ_i , по которым нужно производить симметризацию и антисимметризацию, составим таблицы (схемы Юнга), состоящие из n клеток. Клетки расставляются в строки по $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$ ($\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k = n$) клеток, а строки располагаются друг под другом в невозрастающем порядке



Клетки схемы Юнга заполним номерами функций ψ_i . Например, для $n = 13$

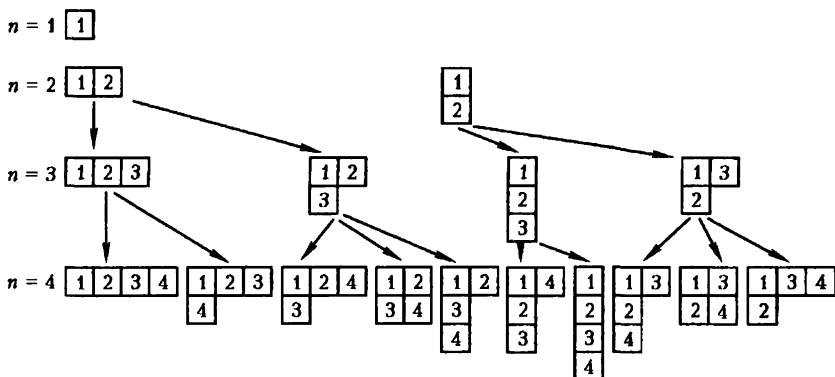
1	2	3	4	5
6	7	8	9	
10	11			
12	13			

Мы условимся сначала проводить антисимметризацию по номерам функций, расположенным в столбцах схемы, и последующую симметризацию — по номерам, расположенным в строках.

Укажем теперь конструктивный прием, позволяющий определить операции симметризации и антисимметризации, которые разбивают пространство R на инвариантные неприводимые подпространства. Этот способ фактически сводится к нахождению соответствующих схем Юнга с определенным заполнением клеток и носит рекуррентный характер. Начнем с $n = 1$, в этом случае можно построить только одну схему Юнга, состоящую из одной клетки. $n = 2$, здесь возможны две схемы Юнга, состоящие из одной строки или из одного столбца. $n = 3$, схемы Юнга получаются добавлением третьей клетки с цифрой 3. $n = 4$, добавляем четвертую клетку и т. д. Описанный способ построения мы иллюстрируем таблицей, представленной на с. 180.

Каждой схеме Юнга мы сопоставим оператор Юнга:

$$\hat{\Omega}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k) = \sum_q \hat{Q} \sum_p (-1)^{\epsilon(p)} \hat{P},$$



и т. д.

где q пробегает все перестановки номеров в каждой строке схемы Юнга, а p — все перестановки в столбцах. На основании предыдущего рассмотрения можно утверждать, что каждый такой оператор Юнга выделяет в пространстве R некоторое инвариантное подпространство. Покажем, что эти инвариантные подпространства независимы. Затем, подсчитав их число и сравнив его с известным числом неприводимых представлений, на которые распадается регулярное представление, мы с необходимостью придем к заключению, что в каждом из построенных подпространств реализуется одно из неприводимых представлений группы S_n .

Итак, докажем, что инвариантные подпространства, построенные с помощью операторов Юнга, схемы которые находятся по указанному рекуррентному способу, не имеют общих элементов. Наше доказательство имеет эвристический характер и основано на двух фактах, в которых читатель может убедиться, рассматривая таблицу юнговских схем:

1. Повторное действие одного и того же оператора Юнга на любой элемент пространства R дает отличный от нуля результат.

2. Последовательное действие двух различных операторов Юнга на любой элемент пространства R дает нуль. Действительно, легко убедиться, что один из этой пары операторов всегда содержит симметризацию по тем функциям, по которым другой производит антисимметризацию.

Если бы соответствующие инвариантные подпространства имели общие элементы, то мы пришли бы к противоречию с высказанными утверждениями.

Наконец, легко понять, что подпространства, соответствующие схемам Юнга с одинаковой структурой $\{\lambda\} = \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k$, но отличающиеся лишь заполнением клеток, преобразуются по эквивалентным

представлениям. Отсюда следует, что число неэквивалентных представлений равно числу схем Юнга с различной структурой или числу разбиений n на целые положительные слагаемые $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k = n$, т. е. как раз равно числу классов. Из рассмотрения нашей таблицы легко видеть, что для чисел $r_{\{\lambda\}}$ эквивалентных представлений всегда выполняются равенства

$$\sum_{\{\lambda\}} r_{\{\lambda\}}^2 = n!. \quad (15.24)$$

Сравнивая это равенство с формулой (3.81), заключаем, что числа $r_{\{\lambda\}}$ равны порядкам неприводимых представлений $l_{\{\lambda\}}$: $r_{\{\lambda\}} = l_{\{\lambda\}}$. На основании теоремы о разложении регулярного представления на неприводимые части можно утверждать, что число содержащихся в нем неприводимых представлений равно $\sum_{\{\lambda\}} l_{\{\lambda\}}$. Но так как $\sum_{\{\lambda\}} l_{\{\lambda\}} = \sum_{\{\lambda\}} r_{\{\lambda\}}$, то это число совпадает с числом построенных нами инвариантных подпространств. Отсюда следует, что в каждом из этих подпространств реализуется одно из неприводимых представлений группы перестановок S_n . Будем обозначать эти неприводимые представления символами $\Delta_{\{\lambda\}}$.

Рассмотрим теперь свойства симметрии функции, принадлежащей базису неприводимого представления $\Delta_{\{\lambda\}}$. Для определенности рассмотрим функцию $F_{\{\lambda\}}$, которая получается в результате действия оператора $\widehat{\Omega}_{\{\lambda\}}$ на функцию $F = \psi_1(y_1) \dots \psi_n(y_n)$:

$$F_{\{\lambda\}} = \widehat{\Omega}_{\{\lambda\}} F = \sum_q \widehat{Q} \sum_p (-1)^{\varepsilon(p)} \widehat{P} F. \quad (15.25)$$

Из этого определения следует, что функция $F_{\{\lambda\}}$ должна быть симметричной по перестановкам функций ψ_i , номера которых расположены в строках схемы Юнга (т. е. относительно операторов \widehat{Q}). Однако, мы не можем утверждать, что функция $F_{\{\lambda\}}$ будет антисимметричной относительно операторов \widehat{P} , поскольку операторы \widehat{P} и \widehat{Q} не коммутируют. Но согласно (15.14) мы можем написать

$$\widehat{P} F = \widehat{p}^{-1} F, \quad (15.26)$$

и поэтому функцию $F_{\{\lambda\}}$ можно также представить в виде

$$F_{\{\lambda\}} = \sum_q \widehat{Q} \sum_p (-1)^{\varepsilon(p)} \widehat{p} F. \quad (15.27)$$

Так как операторы \widehat{Q} и \widehat{p} коммутируют друг с другом, то мы получаем

$$F_{\{\lambda\}} = \sum_p (-1)^{\varepsilon(p)} \widehat{p} \sum_q \widehat{Q} F. \quad (15.28)$$

Наконец, используя еще раз равенство (15.26), можно написать

$$F_{\{\lambda\}} = \sum_p (-1)^{\epsilon(p)} \hat{p} \sum_q \hat{q} F. \quad (15.29)$$

Таким образом, вместо того, чтобы производить антисимметризацию и последующую симметризацию по номерам функций ψ_i , можно произвести сначала симметризацию, а затем антисимметризацию по номерам соответствующих аргументов. Это, в частности, показывает, что сделанное нами в начале предположение о возможности представления функции F в виде произведения не является принципиальным и носит лишь вспомогательный характер. Из формул (15.28) или (15.29) следует, что функция $F_{\{\lambda\}}$ должна быть антисимметричной по перестановкам аргументов, номера которых расположены в столбцах схемы Юнга.

Мы можем теперь резюмировать результаты.

Неприводимое представление $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок определяется разбиением n на целые положительные слагаемые:

$$n = \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_k, \quad \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_k.$$

В линейном пространстве R , образованном функциями $F(y_{p_1}, \dots, y_{p_n})$, где $(p_1 p_2 \dots p_n)$ — всевозможные перестановки чисел $1, 2, \dots, n$, реализуется регулярное представление группы S_n . Не ограничивая общности результатов, можно представить функцию $F(y_1, y_2, \dots, y_n)$ в виде произведения n функций $\psi_1(y_1) \dots \psi_n(y_n)$. Разложение этого представления на неприводимые части можно произвести с помощью операторов Юнга, соответствующих схемам Юнга, которые строятся по указанному выше рекуррентному правилу.

Упражнения

15.1. Убедиться в справедливости утверждений 1 и 2 (с. 180), на примере, когда $n = 3$.

15.2. Доказать, что характеры представлений групп перестановок должны быть вещественными.

15.3. Определить число элементов в классе с циклической структурой $(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m)$.

15.4. Доказать, что четность перестановки, имеющей циклическую структуру $(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m)$, определяется четностью суммы $\alpha_2 + \alpha_4 + \alpha_6 + \dots$.

Глава XVI

Симметризованные степени представлений

В этой главе мы введем понятие симметризованной степени представления, которое будет положено в основу большинства приложений теории группы перестановок к задачам квантовой механики.

1. Векторы и тензоры в n -мерном пространстве

Рассмотрим n -мерное векторное пространство R_n . Компоненты вектора этого пространства в некотором выбранном базисе обозначим через V_i , $i = 1, 2, \dots, n$. Пусть в пространстве R_n задано представление некоторой группы G . Матрицы представлений, соответствующие элементам a, b, \dots группы G , мы будем обозначать через $\|a_{jj'}\|, \|b_{jj'}\|, \dots$. Таким образом, элементу a , например, мы сопоставляем следующее преобразование векторов в R_n :

$$V_j' = \sum_{j'=1}^n a_{jj'} V_{j'} \quad (16.1)$$

Матрицу представления единичного элемента мы будем обозначать через $\|e_{jj'}\|$, $e_{jj'} = \delta_{jj'}$.

Наряду с векторами рассмотрим в пространстве R_n тензор $\mathbf{V}^{(m)}$ m -го ранга, компоненты которого мы будем обозначать через $V_{j_1 j_2 \dots j_m}$, $j_k = 1, 2, \dots, n$. Каждому преобразованию (16.1) соответствует следующее преобразование тензора:

$$V_{j_1 j_2 \dots j_m}' = \sum_{j_1', \dots, j_m'} a_{j_1 j_1'} \dots a_{j_m j_m'} V_{j_1' j_2' \dots j_m'} \quad (16.2)$$

Матрица этого преобразования является m -кратным прямым произведением матрицы $\|a_{jj'}\|$. Мы будем обозначать ее через $(a)^m$ или $\|a_{j_1 j_2 \dots j_m, j_1' j_2' \dots j_m'}\|$, где

$$a_{j_1 j_2 \dots j_m, j_1' j_2' \dots j_m'} = a_{j_1 j_1'} a_{j_2 j_2'} \dots a_{j_m j_m'} \quad (16.3)$$

Матрицы $(a)^m$, так же как и матрицы $\|a_{jj'}\|$, образуют представление группы G .

Для дальнейшего нам будет удобно ввести в рассмотрение матрицу $p(a)^m$ с элементами

$$\{p(a)^m\}_{j_1 j_2 \dots j_m, j'_1 j'_2 \dots j'_m} = a_{j_1 j_2 \dots j_m, j'_1 j'_2 \dots j'_m}, \quad (16.4)$$

где $(p_1 p_2 \dots p_m)$ — некоторая перестановка чисел $1, 2, \dots, m$. Заметим, что матрицы $(a)^m$ обладают следующим свойством:

$$a_{j_1 j_2 \dots j_m, j'_1 j'_2 \dots j'_m} = a_{j_1 j_2 \dots j_m, j'_1 j'_2 \dots j'_m}. \quad (16.5)$$

Действительно, одинаковая перестановка первых и вторых значков элементов матрицы $(a)^m$ сводится к перестановке множителей в формуле (16.3).

2. Матрицы перестановок тензорных значков

Введем тензор $pV^{(m)}$, определив его компоненты равенством

$$pV_{j_1 \dots j_m} = V_{j_{p_1} \dots j_{p_m}}. \quad (16.6)$$

Покажем, что компоненты этого тензора можно выразить через компоненты тензора $V_{j_1 j_2 \dots j_m}$ с помощью матрицы $p(e^m)$, где $\|e_{ik}\|$ — единичная матрица порядка n , а элементы матрицы $(e)^m$, очевидно, имеют вид

$$e_{j_1 j_2 \dots j_m, j'_1 j'_2 \dots j'_m} = \delta_{j_1 j'_1} \delta_{j_2 j'_2} \dots \delta_{j_m j'_m}. \quad (16.7)$$

Действительно, мы можем написать

$$\begin{aligned} \sum_{j'_1 \dots j'_m} \{p(e)^m\}_{j_1 \dots j_m, j'_1 \dots j'_m} V_{j'_1 \dots j'_m} &= \\ &= \sum_{j'_1 \dots j'_m} \delta_{j_1 j'_1} \dots \delta_{j_m j'_m} V_{j'_1 \dots j'_m} = V_{j_1 \dots j_m}. \end{aligned} \quad (16.8)$$

Покажем, что матрицы $p(e)^m$ образуют представление группы перестановок S_n , т. е. что

$$q(e)^m p(e)^m = qp(e)^m, \quad (16.9)$$

где q и p — некоторые произвольные перестановки чисел $1, 2, \dots, m$. В действительности имеет место более общее равенство

$$q(b)^m p(a)^m = qp(ba)^m, \quad (16.10)$$

которое нам понадобится в дальнейшем и которое мы сейчас докажем. Ясно, что (16.9) является частным случаем (16.10) при $a = b = e$. Для доказательства (16.10) напишем $(j_1 j_2 \dots j_m, k_1 k_2 \dots k_m)$ -й элемент матрицы, стоящей в левой части формулы (16.10). Мы получим

$$\begin{aligned} \sum_{j'} q(b)_{j_1 \dots j_m, j'_1 \dots j'_m} p(a)_{j'_1 \dots j'_m, k_1 \dots k_m} &= \\ &= \sum_{j'} b_{j_1 \dots j_m, j'_1 \dots j'_m} a_{j'_1 \dots j'_m, k_1 \dots k_m}. \end{aligned} \quad (16.11)$$

Воспользуемся теперь тем, что одинаковая перестановка первых и вторых значков согласно (16.5) не изменяет матрицу $(b)^m$. Поэтому мы можем написать

$$b_{j_1 \dots j_m, j'_1 \dots j'_m} = b_{j_{q_1} \dots j_{q_m}, j'_{p_1} \dots j'_{p_m}}. \quad (16.12)$$

Тогда равенство (16.11) может быть продолжено следующим образом:

$$\begin{aligned} \sum_j b_{j_{q_1} \dots j_{q_m}, j'_{p_1} \dots j'_{p_m}} a_{j_{p_1} \dots j_{p_m}, k_1 \dots k_m} &= \\ &= (ba)_{j_{i_{p_1} \dots j_{i_{q_m}}, k_1 \dots k_m} = \{qp(ba)\}_{j_1 j_2 \dots j_m, k_1 \dots k_m}. \end{aligned} \quad (16.13)$$

Это выражение представляет собой не что иное, как $(j_1 \dots j_m, k_1 \dots k_m)$ -й элемент матрицы, стоящей в правой части (16.10), и, следовательно, равенство (16.10), а вместе с ним и (16.9) доказаны.

3. Связь между представлениями группы S_n и группы G в тензорном пространстве

Мы определили представление группы перестановок матрицами $p(e)^m$ и представление группы G матрицами $(a)^m$. Базисом этих представлений является базис тензорного пространства, т. е. совокупность n^m тензоров, у которых отлична от нуля и равна единице только одна компонента. Будем обозначать орты этого базиса через

$$\eta_{i_1 i_2 \dots i_m}.$$

Произвольный тензор $V^{(m)}$ с компонентами $V_{j_1 \dots j_m}$ может быть представлен тогда в виде

$$V^{(m)} = \sum_{i_1, \dots, i_m} V_{i_1 \dots i_m} \eta_{i_1 \dots i_m}. \quad (16.14)$$

Покажем теперь, что матрицы $p(e)^m$ и $(a)^m$ коммутируют. Действительно, с помощью (16.10) мы можем получить следующие равенства:

$$q(e)^m (a)^m = q(a)^m, \quad (a)^m q(e)^m = q(a)^m, \quad (16.15)$$

откуда

$$q(e)^m (a)^m = (a)^m q(e)^m. \quad (16.16)$$

Перейдем теперь в тензорном пространстве к новому базису, выбрав его таким образом, чтобы представление группы перестановок распалось на неприводимые части. Матрицы приведенного представления мы можем представить в виде

$$\widetilde{q(e)}^m = \sum_{\{\lambda\}}^{\oplus} \{E_{r(\lambda)} \times \Delta_{\{\lambda\}}(q)\}, \quad (16.17)$$

где $r_{\{\lambda\}}$ — кратность неприводимого представления $\Delta_{\{\lambda\}}$ в представлении $q(e)^m$, $E_{r_{\{\lambda\}}}$ — единичная матрица порядка $r_{\{\lambda\}}$. Матрицы $\overline{q(e)^m}$ определяют закон преобразования компонент тензора, записанного в новом базисе. Орты нового базиса обозначим через $\eta_{\{\lambda\}x\alpha}$; значок $\{\lambda\}$ нумерует неприводимые представления группы перестановок, x различает повторяющиеся эквивалентные неприводимые представления, $x = 1, 2, \dots, r_{\{\lambda\}}$, значок α нумерует орты базиса неприводимого представления, $\alpha = 1, 2, \dots, l_{\{\lambda\}}$. Выразим новые орты через старые:

$$\eta_{\{\lambda\}x\alpha} = \sum_{j_1, j_2, \dots, j_n} T_{j_1 j_2 \dots j_n}^{\{(\lambda)\alpha x\}} \eta_{j_1 j_2 \dots j_n}. \quad (16.18)$$

Коэффициенты $T_{j_1 j_2 \dots j_n}^{\{(\lambda)\alpha x\}}$ можно рассматривать как компоненты тензора $\eta_{\{\lambda\}x\alpha}$ в старом базисе.

Найдем теперь вид матриц $(a)^m$ в новом базисе. Используя свойство коммутативности (16.16), мы с помощью леммы Шура получим (ср. рассмотрение в главе V на с. 62)

$$(\bar{a})^m = \sum_{\{\lambda\}}^{\oplus} \{R^{\{\lambda\}}(a) \times E_{l_{\{\lambda\}}}\} \quad (16.19)$$

или

$$(\bar{a})_{\{\lambda\}x\alpha, \{\lambda'\}x'\alpha'}^m = \delta_{\{\lambda\} \{\lambda'\}} \delta_{\alpha\alpha'} R_{x\alpha'}^{\{\lambda\}}(a). \quad (16.20)$$

Матрицы $R^{\{\lambda\}}(a)$ имеют порядок $r_{\{\lambda\}}$. Они образуют представление группы G в пространстве с базисными ортами $\eta_{\{\lambda\}x\alpha}$, $x = 1, 2, \dots, r_{\{\lambda\}}$ (при фиксированных $\{\lambda\}$ и α). Представление $R^{\{\lambda\}}(a)$ называют *симметризованной m -й степенью* представления a , соответствующей неприводимому представлению $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок.

4. Характеры симметризованной степени представления

В приложениях часто возникает задача разложения представления $R_{\{\lambda\}}(a)$ на неприводимые. Такое разложение мы сможем получить, если нам будут известны характеры этого представления.

Решим сначала вспомогательную задачу. Найдем след матрицы $q(a)^m$. Пусть перестановка q имеет циклическую структуру $(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_m)$. Если бы перестановка q состояла из одного цикла длины m , то мы нашли бы, что

$$\{q(a)\}_{j_1 \dots j_m, j'_1 \dots j'_m} = a_{j_m j_1 j_2 \dots j_{m-1}, j'_1 \dots j'_m} = a_{j_m j'_1} a_{j_1 j'_2} \dots a_{j_{m-1} j'_m}. \quad (16.21)$$

Следовательно,

$$\text{Sp } q(a) = \sum a_{j_m j_1} a_{j_1 j_2} \dots a_{j_{m-1} j_m} = \text{Sp } (a)^m. \quad (16.22)$$

Отсюда нетрудно заключить, что для произвольной перестановки имеет место равенство

$$\text{Sp } q(a)^m = (\text{Sp}(a))^{\alpha_1} (\text{Sp}(a)^2)^{\alpha_2} \dots (\text{Sp}(a)^m)^{\alpha_m}. \quad (16.23)$$

Установим теперь связь между следами матриц $q(a)$ и $R^{(\lambda)}(a)$. Для этого воспользуемся тем, что согласно (16.15)

$$q(a)^m = q(e)^m (a)^m$$

или

$$\widetilde{q(a)^m} = \widetilde{q(e)^m} \widetilde{(a)^m}, \quad (16.24)$$

и, следовательно, с помощью (16.17) и (16.19) мы получим

$$\begin{aligned} \widetilde{q(a)^m} &= \sum_{\{\lambda\}}^{\oplus} \{E_{r(\lambda)} \times \Delta_{\{\lambda\}}(q)\} \{R^{(\lambda)}(a) \times E_{i(\lambda)}\} = \\ &= \sum_{\{\lambda\}}^{\oplus} \{R^{(\lambda)}(a) \times \Delta_{\{\lambda\}}(q)\}. \end{aligned} \quad (16.25)$$

Отсюда мы находим

$$\text{Sp } q(a)^m = \text{Sp } \widetilde{q(a)^m} = \sum_{\{\lambda\}} \text{Sp } R^{(\lambda)}(a) \text{Sp } \Delta_{\{\lambda\}}(q). \quad (16.26)$$

Используя свойство ортогональности характеров $\chi^{(\lambda)}(q)$ неприводимых представлений группы перестановок, мы найдем¹⁾

$$\text{Sp } R_{\{\lambda\}}(q) = \frac{1}{m!} \sum_q \text{Sp } q(a)^m \chi^{(\lambda)}(q). \quad (16.27)$$

Подставляя в (16.20) полученное нами выражение (16.23) для $\text{Sp } q(a)^m$ и переходя от суммирования по элементам группы к суммированию по классам, получим

$$\text{Sp } R^{(\lambda)}(a) = \frac{1}{m!} \sum_{\{\alpha\}} k_{\{\alpha\}} \chi_{\{\alpha\}}^{(\lambda)} (\text{Sp } a)^{\alpha_1} \dots (\text{Sp } a^m)^{\alpha_m}. \quad (16.28)$$

Здесь через $\chi_{\{\alpha\}}^{(\lambda)}$ обозначен характер неприводимого представления $\Delta_{\{\lambda\}}(q)$, соответствующий классу $\{\alpha\}$; $k_{\{\alpha\}}$ — число элементов в этом классе (см. упр. 15.3),

$$k_{\{\alpha\}} = \frac{m!}{\alpha_1! 2^{\alpha_2} \alpha_2! \dots m^{\alpha_m} \alpha_m!}. \quad (16.29)$$

¹⁾ Характеры представлений группы перестановок вещественны (см. упр. 15.1).

Особенно часто приходится иметь дело с *симметричной* или *антисимметричной* степенями представлений, т. е. с представлениями $R_m(a)$ и $R_{\{1 \dots 1\}}(a)$, которые соответствуют тождественному и антисимметричному неприводимым представлениям группы перестановок. Характеры тождественного представления равны единице, $\chi_{\{\alpha\}}^{(m)} = 1$. Следовательно, для характеров симметричной степени мы получим

$$\text{Sp } R_m(a) = \sum_{\{\alpha\}} \frac{(\text{Sp } a)^{\alpha_1} (\text{Sp } a^2)^{\alpha_2} \dots (\text{Sp } a^m)^{\alpha_m}}{\alpha_1! 2^{\alpha_2} \alpha_2! \dots m^{\alpha_m} \alpha_m!}. \quad (16.30)$$

Характеры антисимметричного представления (см. упр. 15.4) могут быть представлены в виде

$$\chi_{\{\alpha\}}^{\{1 \dots 1\}} = (-1)^{\alpha_2 + \alpha_4 + \dots}. \quad (16.31)$$

Подставляя (16.31) в (16.28), мы получим для характеров антисимметричной степени представления следующее выражение:

$$\text{Sp } R_{\{1 \dots 1\}}(a) = \sum_{\{\alpha\}} (-1)^{\alpha_2 + \alpha_4 + \dots} \frac{(\text{Sp } a)^{\alpha_1} (\text{Sp } a^2)^{\alpha_2} \dots (\text{Sp } a^m)^{\alpha_m}}{\alpha_1! 2^{\alpha_2} \alpha_2! \dots m^{\alpha_m} \alpha_m!}. \quad (16.32)$$

Упражнения

16.1. Написать выражения для характеров симметричного и антисимметричного квадратов представления.

16.2. Найти разложение на неприводимые представления симметричной второй и третьей степеней неприводимых представлений группы O . Результаты сравнить с разложением прямых произведений соответствующих представлений.

16.3. Найти представления, по которым преобразуются колебательные волновые функции октаэдрической молекулы, рассмотренной в главе VI, для всех двухквантовых возбужденных состояний.

Глава XVII

Свойства симметрии многоэлектронных волновых функций

В п. 1 главы XV был намечен план теоретико-группового исследования многоэлектронной системы. Мы приступим к реализации этого плана, используя те сведения о представлениях группы перестановок, которые были даны в главах XV и XVI.

1. Постановка задачи

Собственные функции уравнения Шрёдингера

$$H(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n) = E\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n), \quad (17.1)$$

принадлежащие одному собственному значению, должны преобразовываться по некоторому неприводимому представлению $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок переменных $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n$. Однако кратность вырождения собственного значения, равная порядку неприводимого представления, не является еще кратностью вырождения (статистическим весом) соответствующего уровня энергии. Кратность вырождения уровня энергии должна быть определена как число полных (т.е. зависящих также от спиновых переменных) антисимметричных функций, собственных функций уравнения (17.1) с рассматриваемым собственным значением.

Пусть $\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)$ — одна из вырожденных собственных координатных функций уравнения (17.1). Ясно, что

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_n)\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n), \quad (17.2)$$

где $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ — спиновая функция (спинор n -го ранга), также будет собственной функцией уравнения (17.1). Если в (17.2) произвести перестановку аргументов:

$$\Psi(\mathbf{r}_{p_1}, \mathbf{r}_{p_2}, \dots, \mathbf{r}_{p_n})\chi(\sigma_{p_1}, \sigma_{p_2}, \dots, \sigma_{p_n}), \quad (17.3)$$

то мы опять получим собственную функцию уравнения Шрёдингера с тем же собственным значением. Это позволяет нам построить полную антисимметричную волновую функцию, являющуюся собственной функцией нашего гамильтониана, в виде

$$\Psi_A = \sum_P (-1)^{\epsilon(P)} \Psi(\mathbf{r}_{p_1}, \dots, \mathbf{r}_{p_n})\chi(\sigma_{p_1}, \dots, \sigma_{p_n}). \quad (17.4)$$

Однако, как мы увидим ниже, не для всякого решения $\Psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_n)$ уравнения (17.1) можно построить антисимметричную волновую функцию (17.4), отличную от тождественного нуля. Возможность построения полной антисимметричной волновой функции накладывает определенные ограничения на неприводимые представления $\Delta_{\{\lambda\}}$, по которым могут преобразовываться решения уравнения (17.1), имеющие физический смысл. Для того чтобы выяснить эти ограничения, мы должны сначала определить представление $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок, по которым могут преобразовываться спиновые функции $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$. Тогда мы сможем применить следующий критерий: допустимыми неприводимыми представлениями $\Delta_{\{\lambda\}}$ будут такие представления, для которых в прямом произведении $\Delta_{\{\lambda\}} \times \Delta_{\{\lambda'\}}$ содержится антисимметричное неприводимое представление.

2. Свойства симметрии спиновой волновой функции

Спиновая функция $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ n -электронной системы представляет собой спинор n -го ранга относительно вращений трехмерного пространства. Напомним, что при вращении системы координат, определяемом углами Эйлера $\varphi_1, \theta, \varphi_2$, компоненты спинора n -го ранга преобразуются по закону

$$\begin{aligned} \chi'(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) &= \\ &= \sum_{\sigma'} \alpha_{\sigma\sigma'}[\varphi_1, \theta, \varphi_2] \dots \alpha_{\sigma_n\sigma'_n}[\varphi_1, \theta, \varphi_2] \chi(\sigma'_1, \sigma'_2, \dots, \sigma'_n), \end{aligned} \quad (17.5)$$

где матрица $\|\alpha_{\sigma\sigma'}[\varphi_1, \theta, \varphi_2]\|$ — каноническая матрица неприводимого представления $D^{(1/2)}$ группы вращений. Матрицы преобразований (17.5) образуют представление группы вращений, которое является n -кратной степенью представления матрицами α . Очевидно, что спинор $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ может быть рассмотрен как тензор n -го ранга в двумерном пространстве, и к нему применимы все результаты, полученные в предыдущей главе.

В заданной системе координат мы можем рассматривать совокупность 2^n компонент спинора как значения функции от n спиновых переменных σ_i , каждая из которых может принимать два значения: $\frac{1}{2}$ или $-\frac{1}{2}$. В результате некоторой перестановки p аргументов этой функции или значков спинора мы можем получить новую функцию

$$\hat{p}\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \chi(\sigma_{p_1}, \sigma_{p_2}, \dots, \sigma_{p_n}) \equiv \chi_p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n). \quad (17.6)$$

Величины $\chi_p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ преобразуются при вращении трехмерного пространства также по закону, определенному формулой (17.5), и, следовательно, являются компонентами некоторого нового спинора.

Действительно, мы имеем

$$\begin{aligned} \chi'_p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) &\equiv \chi'(\sigma_{p_1}, \dots, \sigma_{p_n}) = \\ &= \sum_{\sigma'} \alpha_{\sigma_{p_1}\sigma'_1} \alpha_{\sigma_{p_2}\sigma'_2} \dots \alpha_{\sigma_{p_n}\sigma'_n} \chi(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n). \end{aligned} \quad (17.7)$$

Так как обозначение значков суммирования произвольно, то мы можем написать

$$\chi'_p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \sum_{\sigma'} \alpha_{\sigma_{p_1}\sigma'_{p_1}} \alpha_{\sigma_{p_2}\sigma'_{p_2}} \dots \alpha_{\sigma_{p_n}\sigma'_{p_n}} \chi(\sigma'_{p_1}, \dots, \sigma'_{p_n}). \quad (17.8)$$

Переставляя множители, окончательно получаем

$$\chi'_p(\sigma_1, \dots, \sigma_n) = \sum_{\sigma'} \alpha_{\sigma_1\sigma'_1} \dots \alpha_{\sigma_n\sigma'_n} \chi_p(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n). \quad (17.9)$$

Ясно, что любая линейная комбинация

$$\sum_{p \in S_n} c_p \chi_p(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) \quad (17.10)$$

также определяет спинор.

Применяя к спинору $\chi(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ все операторы перестановок p , принадлежащие группе S_n , мы получим $n!$ спиноров. Однако не все из них, конечно, будут независимыми. Число независимых спиноров не может превышать числа компонент спинора, равного 2^n . В качестве независимых спиноров мы могли бы взять совокупность 2^n спиноров, у каждого из которых имеется по одной компоненте, отличной от нуля и равной единице. В построенном многообразии спиноров будет реализоваться определенное в главе XVI представление $p(e)^n$ группы перестановок, где (e) — единичная матрица второго порядка.

Разложение представления $p(e)^n$ на неприводимые части может быть выполнено методом, аналогичным тому, который был применен в главе XV для разложения регулярного представления.

Составим таблицу схем Юнга, используя рекуррентное правило добавления клетки (см. с. 180). Каждой схеме Юнга сопоставим оператор

$$\Omega_{\{\lambda\}} = \sum_p (-1)^{c(p)} \hat{p} \sum_q \hat{q}, \quad (17.11)$$

где суммирование по p означает суммирование по всем перестановкам аргументов, номера которых стоят в столбцах схемы Юнга, а суммирование по q — суммирование по всем перестановкам аргументов, номера которых стоят в строках схемы Юнга. Действуя оператором (17.11) на спинор $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$, мы получим спинор $\chi_{\{\lambda\}}$, который принадлежит базису неприводимого представления $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок своих значков. Заметим, что если схема Юнга состоит более чем из двух строк, то спинор $\chi_{\{\lambda\}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ должен обладать антисимметрией

относительно перестановок по крайней мере трех значков. Однако все компоненты такого спинора должны равняться нулю, поскольку из трех значков два обязательно совпадают. Поэтому схемы Юнга, состоящие более чем из двух строк, могут быть исключены из нашего рассмотрения. Допустимые схемы Юнга имеют вид:

$$\begin{array}{cccc} \square & \square & \square & \square \\ \square & \square & \square & \square \end{array} \begin{matrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \end{matrix}$$

Спиноры $\chi_{\{\lambda\}}$, которым соответствуют одинаковые по структуре схемы Юнга, образуют базис неприводимого представления $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок своих значков.

Подсчитаем число $r_{\{\lambda\}}$ независимых компонент спинора $\chi_{\{\lambda\}}$. Так как такой спинор должен быть антисимметричным относительно перестановки значков, номера которых стоят в столбцах соответствующей схемы Юнга, то отличными от нуля будут лишь те его компоненты, у которых эти значки принимают разные значения. При этом все компоненты, отличающиеся лишь значением таких значков, совпадают друг с другом с точностью до знака. Так как по остальным значкам спинор $\chi_{\{\lambda\}}$ симметричен, то независимых компонент будет столько, сколько можно составить различных совокупностей из $\lambda_1 - \lambda_2$ чисел, равных $\frac{1}{2}$ или $-\frac{1}{2}$. Эти совокупности, очевидно, имеют вид

$$\left. \begin{array}{l} \frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \dots \quad \frac{1}{2}, \\ -\frac{1}{2} \quad \frac{1}{2} \quad \dots \quad \frac{1}{2}, \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ -\frac{1}{2} \quad -\frac{1}{2} \quad \dots \quad -\frac{1}{2}. \end{array} \right\} \quad (17.12)$$

Ясно, что их число равно $\lambda_1 - \lambda_2 + 1$. Таким образом, число независимых компонент спинора $\chi_{\{\lambda\}}$ равно $r_{\{\lambda\}} = \lambda_1 - \lambda_2 + 1$. Это означает, что мы будем иметь такое же число независимых спиноров, соответствующих определенному заполнению клеток схемы Юнга. Используя таблицу на с. 180, легко подсчитать, что для каждого значения n мы получим, таким образом, 2^n независимых спиноров.

Независимые компоненты симметризованного спинора $\chi_{\{\lambda\}}$ должны преобразовываться по представлению $R_{\{\lambda\}}(\alpha)$ группы вращений, которое является симметризованной степенью представления α . Найдем разложение представления $R_{\{\lambda\}}(\alpha)$ на неприводимые представления. Мы знаем, что базис неприводимого представления группы вращений $D^{(l)}$ может быть построен из $2l + 1$ собственных векторов инфинитезимального оператора \hat{H}_3 с собственными значениями

$-l, -l+1, \dots, l$. Поэтому для того, чтобы провести разложение представления $R_{\{\lambda\}}(\alpha)$ на неприводимые представления, достаточно установить кратности собственных значений оператора \hat{H}_3 в базисном пространстве представления R . В соответствии с законом преобразования (17.5) спинор, у которого (в данной системе координат) только одна компонента отлична от нуля, будет собственным вектором инфинитезимального оператора \hat{H}_3 , который в данном случае с точностью до множителя совпадает с оператором \hat{S}_3 проекции на ось Oz полного спина:

$$\begin{aligned} \hat{S}_3 \chi(\sigma_1, \dots, \sigma_n) &= \hbar \hat{H}_3 \chi(\sigma_1, \dots, \sigma_n) = \\ &= \hbar(\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) \chi(\sigma_1, \dots, \sigma_n). \end{aligned} \quad (17.13)$$

Учитывая, что «антисимметричные» индексы принимают противоположные по знаку значения, а значения «симметричных» индексов определяются совокупностями (17.12), мы получаем для независимых компонент нашего спинора следующие собственные значения:

$$\frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2), \frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2) - 1, \dots, -\frac{1}{2}(\lambda_1 - \lambda_2). \quad (17.14)$$

Отсюда следует, что компоненты спинора $\chi_{\{\lambda\}}$ преобразуются по неприводимому представлению группы вращений $D^{(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2})}$ и, следовательно, являются собственными векторами оператора $\hat{H}_1^2 + \hat{H}_2^2 + \hat{H}_3^2$:

$$\begin{aligned} (\hat{H}_1^2 + \hat{H}_2^2 + \hat{H}_3^2) \chi_{\{\lambda\}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \\ = \frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} + 1 \right) \chi_{\{\lambda\}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n). \end{aligned} \quad (17.15)$$

Наиболее важными для дальнейшего окажутся следующие результаты. Произвольная спиновая функция $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ может быть разложена по спиновым функциям $\chi_{\{\lambda\}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$, преобразующимся по неприводимым представлениям группы перестановок своих аргументов. При этом допустимыми неприводимыми представлениями будут лишь те, схема Юнга которых состоит не более чем из двух строк, $\{\lambda\} = \{\lambda_1, \lambda_2\}$. Компоненты спиновой функции $\chi_{\{\lambda\}}$ образуют базис неприводимого представления группы вращений с весом $\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2}$ и, следовательно, являются собственными функциями оператора квадрата полного спина с собственным значением

$$\hbar^2 \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} \right) \left(\frac{\lambda_1 - \lambda_2}{2} + 1 \right). \quad (17.16)$$

3. Связь между симметрией спиновой и координатной волновых функций

Мы нашли представление $p(e)^n$ группы S_n , по которому преобразуется спиновая функция. Представление $p(e)^n$ разлагается на непри-

водимые представления, схемы Юнга которых состоят не более чем из двух строк. Неприводимое представление $\Delta_{\{\lambda\}}$, по которому преобразуется координатная волновая функция, должно быть таким, чтобы в прямом произведении $\Delta_{\{\lambda\}} \times p(e)^n$ содержалось антисимметричное представление. Для определения допустимых представлений $\Delta_{\{\lambda\}}$ используем следующую теорему:

Антисимметричное представление содержится в прямом произведении двух неприводимых представлений только в том случае, если соответствующие им схемы Юнга взаимно транспонированы (т. е. получаются друг из друга заменой строк столбцами).

Наметим план доказательства этой теоремы. Рассмотрим прямое произведение $\Delta_{\{\lambda\}} \times \Delta_A$, где Δ_A — антисимметричное неприводимое представление, $\Delta_A \equiv \Delta_{\{1, 1, \dots, 1\}}$, а $\Delta_{\{\lambda\}}$ — произвольное неприводимое представление. Поскольку представление Δ_A одномерно, то представление $\Delta_{\{\lambda\}} \times \Delta_A$ будет неприводимым. Поэтому мы можем написать

$$\Delta_{\{\lambda\}} \times \Delta_A = \Delta_{\{\bar{\lambda}\}}. \quad (17.17)$$

Найдем представление $\Delta_{\{\bar{\lambda}\}}$. Пусть функция $F_{\{\lambda\}}(y_1, y_2, \dots, y_n)$ преобразуется по представлению $\Delta_{\{\lambda\}}$. Согласно (15.29) ее можно считать антисимметричной относительно перестановок аргументов, номера которых стоят в столбцах схемы Юнга $\{\lambda\}$. Пусть функция $F_A(y_1, \dots, y_n)$ антисимметрична относительно перестановок своих аргументов. Тогда функция $F_{\{\lambda\}}F_A$ должна принадлежать базису неприводимого представления $\Delta_{\{\bar{\lambda}\}}$. Ясно, что функция $F_{\{\lambda\}}F_A$ будет симметричной относительно перестановок аргументов, номера которых расположены в столбцах схемы Юнга $\{\lambda\}$. Можно убедиться, что при действии на функцию $F_{\{\lambda\}}F_A$ операторами $\Omega_{\{\lambda'\}}$, мы получим отличный от нуля результат только для того оператора, схема Юнга которого транспонирована относительно схемы Юнга $\{\lambda\}$. Таким образом, мы приходим к результату: схема Юнга $\{\bar{\lambda}\}$ должна быть транспонирована относительно схемы Юнга $\{\lambda\}$.

Рассмотрим теперь два неприводимых представления $\Delta_{\{\lambda\}}$ и $\Delta_{\{\lambda'\}}$ группы S_n . Обозначим характеры этих представлений соответственно через $\chi^{\{\lambda\}}(p)$ и $\chi^{\{\lambda'\}}(p)$. Характер антисимметричного представления Δ_A , очевидно, равен $(-1)^{\epsilon(p)}$. Для того чтобы найти число $r_{\{\lambda\}\{\lambda'\}}^{(A)}$, показывающее, сколько раз представление Δ_A содержится в прямом произведении $\Delta_{\{\lambda\}} \times \Delta_{\{\lambda'\}}$, воспользуемся формулой (3.88)¹⁾:

$$r_{\{\lambda\}\{\lambda'\}}^{(A)} = \frac{1}{n!} \sum_p (-1)^{\epsilon(p)} \chi^{\{\lambda\}}(p) \chi^{\{\lambda'\}}(p). \quad (17.18)$$

¹⁾ Характеры представлений группы перестановок вещественны (см. упр. 15.2).

Но

$$(-1)^{\varepsilon(p)} \chi^{\{\lambda\}}(p) = \chi^{\{\bar{\lambda}\}}(p). \quad (17.19)$$

Следовательно,

$$r_{\{\lambda\}\{\lambda'\}}^{(A)} = \frac{1}{n!} \sum_p \chi^{\{\bar{\lambda}\}}(p) \chi^{\{\lambda'\}}(p). \quad (17.20)$$

Используя свойство ортогональности характеров неприводимых представлений, мы получаем, что $r_{\{\lambda\}\{\lambda'\}}^{(A)} = 1$, если $\{\lambda'\} = \{\bar{\lambda}\}$, и $r_{\{\lambda\}\{\lambda'\}}^{(A)} = 0$ во всех остальных случаях. Таким образом, теорема доказана.

Представление $p(e)^n$, как мы показали в предыдущем пункте, разлагается на неприводимые представления, схемы Юнга которых состоят не более чем из двух строк. Согласно доказанной теореме мы теперь можем утверждать, что допустимые неприводимые представления $\Delta_{\{\lambda\}}$, по которым преобразуются координатные функции, могут иметь схемы Юнга, состоящие не более чем из двух столбцов. Решения уравнения Шрёдингера (17.1), которые преобразуются по другим представлениям группы перестановок, в нашей задаче не имеют физического смысла.

Предположим теперь, что нам известно решение $\Psi_{\{\lambda\}}(r_1, r_2, \dots, r_n)$ уравнения Шрёдингера (17.1), преобразующееся по неприводимому представлению $\Delta_{\{\lambda\}}$, схема Юнга которого состоит не более чем из двух столбцов. Произвольную спиновую функцию $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ можно разложить по симметризованным спиновым функциям $\chi_{\{\lambda\}}(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$, преобразующимся по неприводимым представлениям $\Delta_{\{\lambda'\}}$:

$$\chi(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \sum_{\{\lambda'\}} c_{\{\lambda'\}} \chi_{\{\lambda'\}}(\sigma_1, \dots, \sigma_n). \quad (17.21)$$

Ясно, что при антисимметризации произведения $\Psi_{\{\lambda\}}(r_1, \dots, r_n) \cdot \chi(\sigma_1, \dots, \sigma_n)$ отличный от нуля результат даст лишь та спиновая функция, которая преобразуется по неприводимому представлению с транспонированной схемой Юнга $\{\bar{\lambda}\}$.

Мы знаем, что все компоненты спиновой функции $\chi_{\{\lambda'\}}(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ являются собственными функциями оператора квадрата полного спина:

$$\widehat{S}^2 \chi_{\{\lambda'\}}(\sigma_1, \dots, \sigma_n) = \hbar^2 \left(\frac{\lambda'_1 - \lambda'_2}{2} \right) \left(\frac{\lambda'_1 - \lambda'_2}{2} + 1 \right) \chi_{\{\lambda'\}}(\sigma_1, \dots, \sigma_n). \quad (17.22)$$

Так как полная антисимметричная волновая функция имеет вид линейной комбинации таких функций, то она также будет собственной функцией оператора \widehat{S}^2 с тем же собственным значением.

Таким образом, классификация собственных значений энергии для решений уравнения Шрёдингера (17.1) по неприводимым представлениям группы перестановок в силу принципа Паули оказалась равносильной классификации по собственным значениям квадрата полного спина.

4. Свойства симметрии координатной волновой функции

Координатная волновая функция, являющаяся решением уравнения Шрёдингера (17.1), должна преобразовываться по неприводимому представлению группы перестановок, схема Юнга которого состоит из двух столбцов. Обладающая таким свойством симметрии функция $\Psi_{\{\lambda\}}(r_1, r_2, \dots, r_n)$ может быть построена из произвольной функции $\psi(r_1, r_2, \dots, r_n)$ с помощью симметризации по номерам аргументов, расположенным в строках схемы Юнга, и последующей антисимметризации по номерам аргументов, расположенным в столбцах:

1	$k + 1$
2	$k + 2$
⋮	⋮
⋮	⋮
⋮	n
k	

Построенная таким образом функция $\Psi_{\{\lambda\}}(r_1, r_2, \dots, r_n)$ должна обладать свойством антисимметрии по перестановкам двух групп аргументов, например:

$$\left. \begin{aligned}
 \Psi_{\{\lambda\}}(r_1, r_2, \dots, r_k \mid r_{k+1}, \dots, r_n) &= \\
 &= -\Psi_{\{\lambda\}}(r_2, r_1, r_3, \dots, r_k \mid r_{k+1}, \dots, r_n), \\
 \Psi_{\{\lambda\}}(r_1, r_2, \dots, r_k \mid r_{k+1}, \dots, r_n) &= \\
 &= -\Psi_{\{\lambda\}}(r_1, r_2, \dots, r_k \mid r_{k+2}, r_{k+1}, r_{k+3}, \dots, r_n), \\
 & k \geq n - k.
 \end{aligned} \right\} \quad (17.23)$$

Очевидно, что такую функцию нельзя антисимметризовать более чем по k аргументам, так как для этого мы должны были бы антисимметризовать эту функцию по тем аргументам, по которым вначале была произведена симметризация. Это свойство функции $\Psi_{\{\lambda\}}$ может быть записано, например, в виде следующего равенства:

$$\begin{aligned}
 \Psi_{\{\lambda\}}(r_1, r_2, \dots, r_k \mid r_{k+1}, \dots, r_n) &= \\
 &= \sum_i \Psi_{\{\lambda\}}(r_1, \dots, r_{i-1}, r_{k+1}, r_{i+1}, \dots, r_k \mid r_i, r_{k+2}, \dots, r_n). \quad (17.24)
 \end{aligned}$$

Свойства симметрии (17.23) и (17.24) координатной волновой функции были впервые получены В. А. Фоком¹⁾.

¹⁾ Фок В. А. ЖЭТФ, 10 (1940), с. 388.

В заключение рассмотрим метод построения координатной волновой функции, соответствующей определенному собственному значению оператора \widehat{S}^2 , из независимых одноэлектронных функций $\varphi_1(\mathbf{r}_1), \varphi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \varphi_n(\mathbf{r}_n)$. Если собственное значение оператора \widehat{S}^2 равно $\hbar^2 s(s+1)$, то неприводимое представление, по которому должна преобразовываться координатная волновая функция, определяется схемой Юнга, состоящей из двух столбцов с длинами $\lambda'_1 = \frac{n}{2} + s$, $\lambda'_2 = \frac{n}{2} - s$. Заполним клетки этой схемы Юнга номерами функций φ_i . Затем построим соответствующий оператор $\widehat{\Omega}_{\{\lambda\}}$ и подействуем им на произведение одноэлектронных функций:

$$\widehat{\Omega}_{\{\lambda\}} \varphi_1(\mathbf{r}_1) \dots \varphi_n(\mathbf{r}_n) = \sum_q \widehat{Q} \sum_p (-1)^{\epsilon(p)} \widehat{P} \varphi_1(\mathbf{r}_1) \varphi_2(\mathbf{r}_2) \dots \varphi_n(\mathbf{r}_n). \quad (17.25)$$

В результате антисимметризации по столбцам мы получим

$$\begin{aligned} \sum_p (-1)^{\epsilon(p)} \widehat{P} \varphi_1(\mathbf{r}_1) \dots \varphi_n(\mathbf{r}_n) = \\ = \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1) & \varphi_1(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_1(\mathbf{r}_{\lambda'_1}) \\ \varphi_2(\mathbf{r}_1) & \varphi_2(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_2(\mathbf{r}_{\lambda'_1}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \varphi_{\lambda'_1}(\mathbf{r}_1) & \varphi_{\lambda'_1}(\mathbf{r}_2) & \dots & \varphi_{\lambda'_1}(\mathbf{r}_{\lambda'_1}) \end{vmatrix} \times \\ \times \begin{vmatrix} \varphi_{\lambda'_1+1}(\mathbf{r}_{\lambda'_1+1}) & \dots & \varphi_{\lambda'_1+1}(\mathbf{r}_n) \\ \varphi_{\lambda'_1+2}(\mathbf{r}_{\lambda'_1+1}) & \dots & \varphi_{\lambda'_1+2}(\mathbf{r}_n) \\ \dots & \dots & \dots \\ \varphi_n(\mathbf{r}_{\lambda'_1+1}) & \dots & \varphi_n(\mathbf{r}_n) \end{vmatrix}. \quad (17.26) \end{aligned}$$

Затем полученное произведение двух определителей надо симметризовать по парам функций, номера которых расположены в строках. Поэтому окончательное выражение для многоэлектронной координатной функции будет иметь вид суммы таких произведений.

Упражнения

17.1. Задано шесть различных одноэлектронных функций $\varphi_1(\mathbf{r}_1), \varphi_2(\mathbf{r}_2), \dots, \varphi_6(\mathbf{r}_6)$. С помощью операторов Юнга построить координатные волновые функции системы шести электронов, соответствующие различным возможным собственным значениям квадрата полного спина.

17.2. Доказать, что если одноэлектронные координатные волновые функции системы, состоящей из четного числа электронов, попарно совпадают, то собственное значение квадрата полного спина равно нулю.

Глава XVIII

Свойства симметрии волновых функций системы тождественных частиц с произвольными спинами

В этой главе мы обобщим рассмотрение, проведенное в главе XVII, на случай системы тождественных частиц с произвольными спинами. Таковую систему частиц образуют, например, одинаковые ядра в многоатомной молекуле. Полученные в этой главе результаты будут также использованы в дальнейшем для классификации состояний многоэлектронного атома.

1. Постановка задачи

Опишем сначала постановку задачи. Как и раньше, мы имеем дело с уравнением Шрёдингера для системы тождественных частиц, не содержащим спиновых операторов. Спины частиц будем считать произвольными (т. е. не обязательно равными $\frac{1}{2}$). В этом заключается первое обобщение предыдущего рассмотрения. Кроме того, мы будем предполагать, что в силу некоторых упрощений исходное уравнение Шрёдингера заменяется приближенным, в котором утрачена симметрия относительно перестановок тождественных частиц. Например, для системы тождественных ядер в молекулярной задаче (в адиабатическом приближении) мы имеем уравнение Шрёдингера

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^n \Delta_i + U(\mathbf{R}_1, \dots, \mathbf{R}_n) \right\} \Psi = E\Psi, \quad (18.1)$$

инвариантное относительно перестановок переменных \mathbf{R}_i . В гармоническом приближении, когда потенциальная энергия $U(\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \dots, \mathbf{R}_n)$ заменяется квадратичной формой по малым смещениям из положения равновесия, мы получаем уравнение

$$\left\{ -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^n \Delta_i + \sum_{i,k=1}^n \left(\frac{\partial^2 U}{\partial \mathbf{R}_i \partial \mathbf{R}_k} \right)_{\mathbf{R}=\mathbf{R}^{(0)}} (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i^{(0)}) (\mathbf{R}_k - \mathbf{R}_k^{(0)}) \right\} \Psi = 0. \quad (18.2)$$

Уравнение (18.2) справедливо в малой окрестности точки $\{\mathbf{R}_i^{(0)}\}$ конфигурационного пространства переменных $\{\mathbf{R}_i\}$. Однако если мы

учтем, что на вращательные степени свободы (которые описывают вращение молекулы как целого) не накладывается ограничение малости, то получим, что это уравнение справедливо также в окрестности любой точки $\{g\mathbf{R}_i^{(0)}\}$, где g — произвольное вращение. Для того чтобы получить уравнение, справедливое в другой области, например в окрестности точки $\{\mathbf{R}_2^{(0)}, \mathbf{R}_1^{(0)}, \mathbf{R}_3^{(0)}, \dots, \mathbf{R}_n^{(0)}\}$, где $\mathbf{R}_2^{(0)}$ и $\mathbf{R}_1^{(0)}$ — положения равновесия эквивалентных ядер, мы можем просто выполнить соответствующую перестановку переменных \mathbf{R}_1 и \mathbf{R}_2 в уравнении (18.2). Очевидно, что решения нового уравнения могут быть получены из решения уравнения (18.2) такой же перестановкой. Относительно некоторых перестановок переменных \mathbf{R}_i , описывающих эквивалентные ядра, уравнение (18.2) инвариантно. Именно, оно инвариантно относительно тех перестановок, которые соответствуют поворотам или зеркальным поворотам, совмещающим положение равновесия эквивалентных ядер. Действительно, нетрудно убедиться, что такая перестановка равносильна повороту (или зеркальному повороту) и последующей подстановке смещений, которая была нами рассмотрена в главе V (см. рис. 1). Поэтому мы будем предполагать, что собственные функции приближенного уравнения преобразуются по представлению лишь некоторой подгруппы группы S_n ¹⁾. В этом состоит второе обобщение. Допустим, что (приближенное) уравнение Шрёдингера решено, т. е. найдены его собственные значения и собственные функции. Важная задача, которая при этом возникает, заключается в определении статистических весов каждого уровня. *Статистическим весом* уровня называют число соответствующих ему независимых состояний, или, другими словами, число симметричных (антисимметричных) функций, которые можно построить из найденных собственных функций и произвольной спиновой функции. Под произвольной спиновой функцией мы понимаем спиновую функцию, имеющую $(2s + 1)^n$ независимых компонент, где s — максимальная проекция спина одной частицы, а n — число частиц в системе²⁾.

Наметим план решения этой задачи. 1) Определим представление группы перестановок, которому соответствуют решения приближенного уравнения Шрёдингера. 2) Найдем представление группы пере-

¹⁾ Это один из редких случаев, когда при переходе к более грубой модели происходит не повышение, а понижение симметрии.

²⁾ Если рассматривается молекулярная задача, то следует учесть, что электронная волновая функция также обладает определенной симметрией относительно перестановок \mathbf{R}_i , принадлежащих упомянутой подгруппе. Эти перестановки эквивалентны вращениям или отражениям координат электронов. Поэтому при определении статистического веса уровня нужно рассматривать произведение $\Psi_{эл} \Psi_{яд} \chi_{спин. яд}$. Наше рассмотрение будет относиться к случаю, когда $\Psi_{эл}$ преобразуется по тождественному представлению группы симметрии молекулы.

становок, по которому преобразуется $(2s + 1)^n$ -компонентная спиновая функция. 3) Составим прямое произведение этих представлений и определим, сколько раз в нем содержится симметричное (или антисимметричное) представление. Это число и будет равно статистическому весу данного уровня.

2. Теорема Фробениуса

Обозначим через H группу симметрии приближенного уравнения Шрёдингера. Собственные функции этого уравнения, соответствующие одному собственному значению, образуют многообразие R_0 , инвариантное относительно подгруппы H , но не всей группы S_n . Результаты, которые будут получены в этом пункте, носят общий характер и не связаны со спецификой группы перестановок. Поэтому вместо группы S_n мы будем рассматривать произвольную группу G порядка N .

Разложим группу G на сопряженные совокупности по подгруппе H :

$$H, g_1H, g_2H, \dots, g_mH. \quad (18.3)$$

Преобразования $\hat{g}_1, \hat{g}_2, \dots, \hat{g}_m$ будут переводить пространство R_0 в новые пространства R_i :

$$\hat{g}_i R_0 = R_i.$$

Прямая сумма пространства $R = R_0 \oplus R_1 \oplus \dots \oplus R_m$ инвариантна относительно всей группы G . Действительно, возьмем произвольный элемент из G , например $g = g_i h$, $h \in H$. Тогда

$$\hat{g} R_j = \hat{g}_i h \hat{g}_j R_0 = \hat{g}_k h' R_0, \quad (18.4)$$

где $h' \in H$. Следовательно,

$$\hat{g} R_j = \hat{g}_k R_0 = R_k. \quad (18.5)$$

Обозначим через γ представление группы H , реализующееся в R_0 , и через Γ — представление группы G в пространстве R . Задача заключается в том, чтобы определить характеры представления Γ . Найдем сначала характеры $X(h)$ представления Γ для $h \in H$. Для этого прежде всего найдем условие, при котором подпространство R_j остается инвариантными при преобразованиях из H . Так как

$$\hat{h} R_j = \hat{h} \hat{g}_j R_0 = \hat{g}_j (\hat{g}_j^{-1} \hat{h} \hat{g}_j) R_0, \quad (18.6)$$

то требование инвариантности будет выполнено, если

$$g_j^{-1} h g_j \in H. \quad (18.7)$$

Если это имеет место, то матрица преобразования в пространстве R_j , соответствующая элементу h , будет совпадать с матрицей представления γ , соответствующей элементу $g_j^{-1} h g_j$. Так как g_j не принадлежит H , то элемент $g_j^{-1} h g_j$ может и не принадлежать тому же классу C группы H , что и элемент h , но, конечно, всегда принадлежит классу K

группы G , который содержит C . Фиксируем элемент $h \in H$ и подсчитаем число подпространств R_j , которые при преобразовании \hat{h} преобразуются с матрицами представления γ , соответствующими одному и тому же классу C группы H . Для этого выясним, сколько элементов $g_i^{-1}hg_i$ ($i = 0, \dots, m$) принадлежит одному и тому же классу C группы H . Если для g_j выполняется условие

$$g_j^{-1}hg_j \in C, \quad (18.8)$$

то этот же результат мы получим, если вместо g_j возьмем любой элемент из сопряженной совокупности $g_j\hat{H}$. Поэтому определим сначала, сколько элементов $g^{-1}hg$ при g , пробегающем всю группу G , принадлежит C , а затем поделим результат на порядок группы H . Если g пробегает всю группу G , то в совокупности $g^{-1}hg$ каждый элемент класса K встречается $\frac{N}{k}$ раз, где k — число элементов в классе K . Если c — число элементов в классе C , то в рассматриваемой совокупности мы найдем $N\frac{c}{k}$ элементов, принадлежащих этому классу. Если теперь учесть, что элемент g пробегает не всю группу, а принимает лишь значения g_0, g_1, \dots, g_m , то получим, что искомое число l_C , показывающее, сколько элементов совокупности $g_j^{-1}hg_j$ принадлежит классу C , содержащемуся в классе K , равно

$$l_C = \frac{1}{N_1} \frac{N}{k} c, \quad (18.9)$$

где N_1 — порядок подгруппы H . Если через χ_C обозначить характер представления класса C подгруппы H , которое реализуется в пространстве R_0 , то характер представления класса K группы G , которое реализуется в пространстве R , будет равен

$$\chi_K = \sum_{C \in K} l_C \chi_C = \frac{N}{N_1} \sum_{C \in K} \frac{c}{k} \chi_C, \quad (18.10)$$

где суммирование проводится по тем классам C , которые содержатся в K . Характеры классов K' , у которых нет представителей в H , равны 0, так как при преобразованиях из этих классов ни одно из подпространств R_i не остается инвариантным. Мы будем говорить, что представление γ группы H с характерами χ_C индуцирует представление Γ группы G с характерами χ_K . Если представление γ неприводимое, то представление Γ в общем случае оказывается приводимым. Его разложение на неприводимые представления подчиняется следующей теореме.

Теорема Фробениуса. *Представление Γ группы G , индуцируемое неприводимым представлением $\gamma^{(i)}$ группы H , содержит каждое неприводимое представление $\Gamma^{(\lambda)}$ группы G столько же раз, сколько раз в представлении группы H , даваемом матрицами $\Gamma^{(\lambda)}$, содержится $\gamma^{(i)}$.*

Доказательство этой теоремы теперь не может нас затруднить. Интересующие нас числа определяются по формуле:

$$r_{i\{\lambda\}} = \frac{1}{N} \sum_K k \bar{X}_K^{(i)} X_K^{\{\lambda\}}, \quad (18.11)$$

где $X_K^{(i)}$ — характер представления Γ , а $X_K^{\{\lambda\}}$ — характер неприводимого представления $\Gamma^{\{\lambda\}}$. Подставляя выражения (18.10) для X_K , получим

$$r_{i\{\lambda\}} = \frac{1}{N} \sum_K k \frac{N}{N_1} X_K^{\{\lambda\}} \sum_{C \in K} \frac{c}{k} \bar{\chi}_C^{(i)} = \frac{1}{N_1} \sum_C c \bar{\chi}_C^{(i)} X_C^{\{\lambda\}}, \quad (18.12)$$

что и требовалось доказать.

Возвращаясь к нашей задаче, мы можем сказать, что характер представления группы перестановок, по которому преобразуется рассматриваемая волновая функция, определяется формулой (18.10), а разложение этого представления на неприводимые можно найти с помощью теоремы Фробениуса.

3. s -тензоры

Теперь мы должны сделать следующий шаг и найти представление группы перестановок, по которому преобразуется $(2s+1)^n$ -компонентная спиновая функция. Такую спиновую функцию можно рассматривать как тензор n -го ранга в $2s+1$ -мерном пространстве, поскольку при вращениях трехмерного пространства она преобразуется по закону

$$\chi'(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = \sum_{\sigma} D_{\sigma_1 \sigma'_1} \dots D_{\sigma_n \sigma'_n} \chi(\sigma'_1, \dots, \sigma'_n), \quad (18.13)$$

где $\|D_{\sigma, \sigma'}\|$ — матрица неприводимого представления веса s группы вращений. Для краткости будем называть ее s -тензором n -го ранга. Очевидно, что любой s -тензор n -ранга можно разложить по $(2s+1)^n$ независимым тензорам, образующим базис рассматриваемого тензорного пространства. В этом пространстве мы можем определить представление $\rho(E_{2s+1})^n$ группы перестановок¹⁾. Действие оператора перестановки на s -тензор может быть записано в виде

$$\hat{p}F(\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n) = F(\sigma_{p_1}, \sigma_{p_2}, \dots, \sigma_{p_n}). \quad (18.14)$$

s -тензор n -го ранга можно разложить по тензорам, преобразующимся по неприводимым представлениям группы перестановок. Такие тензоры можно получить с помощью операторов Юнга. Очевидно, что допустимыми операторами будут лишь те, схемы Юнга которых содержат не более $2s+1$ строк. Это связано с тем, что s -тензор, антисимметричный более чем по $2s+1$ знакам, тождественно равен нулю. Можно

¹⁾ См. п. 3 главы XVI.

показать, что кратность допустимых неприводимых представлений $\Delta_{\{\lambda\}}$ в представлении $\rho(E_{2s+1})^n$ равна¹⁾

$$\delta_{\{\lambda\}} = \frac{\prod_{i>k} (l_i - l_k)}{(m-1)!(m-2)! \dots 2!}, \quad (18.15)$$

где $l_j = \lambda_j + m - 1$, $m = 2s + 1$. Величина $\delta_{\{\lambda\}}$ определяет число независимых компонент тензора, преобразующегося по неприводимому представлению $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок (ср. рассмотрение спиноров n -ранга в п. 2 главы XVII).

4. Статистический вес энергетического уровня

После этих предварительных рассмотрений мы можем найти выражение для статистического веса f данного уровня. Для этого воспользуемся тем, что тождественное (симметричное) представление группы перестановок содержится только в прямом произведении эквивалентных неприводимых представлений, а антисимметричное представление содержится в прямом произведении неприводимых представлений с транспонированными схемами Юнга (см. главу XVI). Учитывая это, мы получим

$$\left. \begin{aligned} f &= \sum_{i, \{\lambda\}} k_i \tau_{i, \{\lambda\}} \delta_{\{\lambda\}}, & s & \text{— целое число,} \\ f &= \sum_{i, \{\tilde{\lambda}\}} k_i \tau_{i, \{\tilde{\lambda}\}} \delta_{\{\tilde{\lambda}\}}, & s & \text{— полуцелое число,} \end{aligned} \right\} \quad (18.16)$$

где k_i — число, показывающее, сколько раз неприводимое представление $\gamma^{(i)}$ группы H содержится в представлении, по которому преобразуются решения приближенного уравнения Шрёдингера. Числа $\tau_{i, \{\lambda\}}$ и $\delta_{\{\lambda\}}$ определяются соответственно по формулам (18.12) и (18.15). Символ $\{\tilde{\lambda}\}$ обозначает транспонированную схему Юнга.

Интересно заметить, что хотя само определение статистического веса существенно связано с группой перестановок, статистические веса уровней можно определить без привлечения представлений группы перестановок, рассматривая только точечную группу H . Действительно, мы могли бы рассуждать следующим образом. Поскольку спиновые функции образуют базис представления для группы перестановок, то тем самым они образуют и базис представлений точечной группы H , являющейся подгруппой группы S_n . Можно легко найти характер этого представления. Пусть перестановка p имеет циклическую структуру $(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)$. Отличный от нуля вклад в характер дадут лишь те компоненты спиновой функции, которые при указанной перестановке

¹⁾ См. [7], с. 185.

остаются инвариантными, т. е. которые имеют одинаковые значки для каждого цикла перестановки p . Ясно, что число таких компонент равно характеру представления и может быть записано в виде формулы

$$(2s + 1)^{\alpha_1 + \alpha_2 + \dots + \alpha_n}. \quad (18.17)$$

Если мы составим всевозможные произведения спиновых и координатных функций, то получим некоторый базис Ω представления γ точечной группы. Это представление является прямым произведением представлений, по которым преобразуются спиновые и координатные функции. Рассмотрим представление точечной группы H , которое получается из антисимметричного (симметричного) представления $\Delta_A(\Delta_S)$ группы S_n отбором соответствующих элементов. Обозначим его через $\gamma^{(A)}(\gamma^{(S)})$. Мы покажем, что статистический вес рассматриваемого уровня равен кратности этого представления в представлении γ . В самом деле, расширим пространство, натянутое на базис Ω , так же, как мы делали выше, до пространства, инвариантного относительно группы S_n . В расширенном пространстве реализуется представление группы S_n , которое индуцируется представлением γ группы H . Представление $\Delta_A(\Delta_S)$ согласно теореме Фробениуса может быть индуцировано только представлением $\gamma^{(A)}(\gamma^{(S)})$. Поэтому кратность представления $\Delta_A(\Delta_S)$ в расширенном представлении должна быть равна кратности $\gamma^{(A)}(\gamma^{(S)})$ в представлении γ . Это и доказывает наше утверждение.

5. Собственные значения оператора полного спина

В заключение этой главы мы коснемся вопроса о собственных значениях полного спина системы, соответствующих данному энергетическому состоянию. Мы видели, что для многоэлектронной системы каждому собственному значению бесспинового уравнения Шрёдингера соответствует определенное собственное значение полного спина. В рассматриваемом теперь общем случае такое однозначное сопоставление не имеет места. Каждому энергетическому уровню будет соответствовать в общем случае несколько собственных значений полного спина. Это связано, во-первых, с тем, что s -тензор n -го ранга, соответствующий неприводимому представлению группы перестановок, преобразуется теперь по приводимому представлению группы вращений. (Неприводимость имеет место только для $\frac{1}{2}$ -тензоров или спиноров.) Во-вторых, так как уравнение Шрёдингера обладает симметрией точечной группы, то по отношению к группе перестановок его решение преобразуется в общем случае по приводимому представлению. Это означает, что в полную антисимметричную (или симметричную) функцию дадут отличный от нуля вклад s -тензоры, преобразующиеся по нескольким неприводимым представлениям группы S_n . Поэтому даже при $s = \frac{1}{2}$

данному уровню энергии могут соответствовать состояния с различными полными спинами.

Вопрос об определении представления группы вращений, которое реализуется на компонентах s -тензора с определенной симметрией относительно перестановки, к сожалению, не может быть изложен достаточно компактным образом.

Обозначим через $R^{\{\lambda\}}(D^{(s)})$ представление группы вращений, по которому преобразуются независимые компоненты s -тензора, соответствующего неприводимому представлению $\Delta_{\{\lambda\}}$ группы перестановок. Для того чтобы найти собственные значения квадрата полного спина, надо представление $R^{\{\lambda\}}(D^{(s)})$ разложить на неприводимые части. Характеристики этого представления можно было бы найти по формуле (16.28), однако это требует знания характеров неприводимых представлений группы S_n . Мы ограничимся тем, что приведем без доказательства способ, который позволяет найти разложение представления $R^{\{\lambda\}}(D^{(s)})$, если такое разложение известно для представлений $R^n(D^{(s)})$, соответствующих симметричному представлению группы S_n . Обозначим через $\chi^{(s,n)}$ характер представления $R^n(D^{(s)})$. Он может быть найден, например, по формуле (16.30). Далее условимся считать $\chi^{(s,0)} = 1$ и $\chi^{(s,k)} = 0$, если $k < 0$. Тогда характер $\chi^{(s,\{\lambda\})}$ представления $R^{\{\lambda\}}(D^{(s)})$ равен следующему определителю¹⁾:

$$\chi^{(s,\{\lambda\})} = \chi^{(s,\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_k)} = \begin{vmatrix} \chi^{(s,\lambda_1)} \chi^{(s,\lambda_1+1)} & \dots & \dots & \dots \\ \chi^{(s,\lambda_2-1)} \chi^{(s,\lambda_2)} \chi^{(s,\lambda_2+1)} & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \chi^{(s,\lambda_k-1)} \chi^{(s,\lambda_k)} & \dots \end{vmatrix}. \quad 18.18$$

Так как нас интересует разложение представления $R^{\{\lambda\}}(D^{(s)})$ на неприводимые, то при вычислении этого определителя мы можем воспользоваться правилом Клебша—Гордана.

Упражнения

18.1. Найти статистические веса колебательных уровней октаэдрической молекулы YX_6 для основного и одноквантовых возбужденных состояний. Рассмотреть случаи, когда спин ядра атома X равен

$$a) s = \frac{1}{2}, \quad б) s = 1.$$

18.2. Найти представление группы вращений, по которому преобразуется симметричный 1-тензор n -го ранга.

18.3. Найти представление группы вращений, по которому преобразуется 1-тензор 4-го ранга с различными схемами Юнга.

¹⁾ Трифонов Е. Д. Вестник ЛГУ, № 22 (1958).

Глава XIX

Классификация состояний многоэлектронного атома

В главе XVII мы рассмотрели свойства симметрии многоэлектронной волновой функции, которая является собственной функцией оператора Гамильтона, не содержащего спиновых операторов. Единственным свойством симметрии такого гамильтониана, использованным нами, была инвариантность относительно перестановок координат электронов. Мы видели, что в силу этой инвариантности и принципа Паули состояния многоэлектронной системы классифицируются по собственным значениям квадрата полного спина.

Сейчас мы перейдем к классификации состояний многоэлектронного атома. При рассмотрении этой конкретной квантовомеханической системы мы сделаем ряд дополнительных предположений относительно симметрии гамильтониана по сравнению с общей многоэлектронной задачей, а затем, отказавшись от модели бесспинового гамильтониана, учтем спин-орбитальное взаимодействие.

1. Конфигурация

Приближенно взаимодействие между электронами в атоме можно эффективно заменить некоторым сферически симметричным полем. Тогда каждый электрон можно рассматривать независимо находящимся в этом поле и в поле атомного ядра. Таким образом, мы получаем для атома модель «невзаимодействующих» электронов, обладающую, как мы увидим ниже, максимальной симметрией. Мы будем также пренебрегать сначала спин-орбитальным взаимодействием. Так как потенциальная энергия в этом приближении обладает сферической симметрией, то одноэлектронные состояния, как мы знаем, должны классифицироваться по неприводимым представлениям группы трехмерных вращений, т. е. с помощью азимутального квантового числа l (см. главу XIII).

Для того чтобы различать разные уровни с одним и тем же квантовым числом l , вводят дополнительное квантовое число n , которое является аналогом главного квантового числа в атоме водорода. Значения главного квантового числа, разумеется, могут быть выбраны произвольно. Обычно их принято выбирать так, чтобы выполнялось соответствие с классификацией состояний в кулоновском поле. Каждый

уровень энергии E_{nl} вырожден по проекции момента или по квантовому числу m . Таким образом, одноэлектронные координатные волновые функции можно обозначать через $\psi_{nlm}(\mathbf{r})$. Если атом содержит N электронов, то его состояние будет определяться набором $3N$ одноэлектронных квантовых чисел n_i, l_i, m_i . Совокупность квантовых чисел n_i, l_i , определяющих в нашей модели энергию атома:

$$E = \sum_{i=1}^N E_{n_i, l_i}, \quad (19.1)$$

называется *конфигурацией*. В спектроскопии приняты следующие обозначения. Одноэлектронные состояния с квантовыми числами $l = 0, 1, 2, \dots$ обозначаются соответственно буквами s, p, d, \dots . Перед этим символом пишут главное квантовое число, а число электронов с данными числами n и l записывают в виде показателя степени. Например, обозначение $(1s)^2(2s)^2(2p)^63s$ говорит нам, что данная конфигурация состоит из двух электронов, находящихся в состоянии с квантовыми числами $n = 1, l = 0$, двух электронов в состоянии с квантовыми числами $n = 2, l = 0$, шести электронов с квантовыми числами $n = 2, l = 1$ и одного электрона, находящегося в состоянии с квантовыми числами $n = 3, l = 0$. Каждой конфигурации мы можем сопоставить квантовое число четности $w = \pm 1$, определяющее поведение волновой функции относительно инверсии. Как мы знаем (см. главу XIII), для одного электрона $w = (-1)^l$. Поэтому для многоэлектронной системы мы будем иметь

$$w = (-1)^{\sum_i l_i}.$$

Однако даже в модели невзаимодействующих электронов мы не можем полностью пренебречь их взаимным влиянием, так как должны учесть принцип Паули, запрещающий более чем двум электронам находиться в одном и том же состоянии (без учета спина). Для каждой разрешенной принципом Паули конфигурации можно построить, вообще говоря, несколько антисимметричных полных волновых функций с различными собственными значениями квадрата полного спина. Между конфигурацией и собственным значением квадрата полного спина имеется определенное соответствие, на котором мы остановимся подробнее при рассмотрении более реалистической модели атома. Мы закончим обсуждение модели невзаимодействующих электронов указанием ее группы симметрии. Эта группа, очевидно, может быть представлена в виде прямого произведения N групп трехмерных вращений (точнее, ортогональных групп) и группы перестановок пространственных переменных:

$$G = O(3) \times O(3) \times \dots \times O(3) \times S_n. \quad (19.2)$$

2. Термы

Теперь учтем взаимодействие между электронами непосредственно. Наличие членов типа $\frac{1}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_k|}$ в операторе энергии приводит к тому, что гамильтониан не будет инвариантным при независимых вращениях радиусов-векторов \mathbf{r}_i отдельных электронов. Инвариантность гамильтониана будет иметь место только при одинаковом повороте всех \mathbf{r}_i . Таким образом, группа симметрии этой модели может быть представлена в виде

$$G = O(3) \times S_n. \quad (19.3)$$

Классификация энергетических состояний атома по неприводимым представлениям группы $O(3)$ соответствует классификации по собственным значениям квадрата полного орбитального момента или по квантовому числу L и по квантовому числу четности w . Заметим, что для терма квантовое число четности уже не будет определяться орбитальным квантовым числом, как это было для одного электрона. Классификация по неприводимым представлениям группы перестановок S_n эквивалентна, как мы знаем, классификации по собственным значениям квадрата полного спина или по квантовому числу S . Кратность вырождения уровня энергии E_{LS} в этой модели равна $(2L+1)(2S+1)$. Совокупность вырожденных состояний, соответствующих данным значениям L и S , принято называть *термом*. Термы обозначаются большими латинскими буквами S, P, D, \dots с верхним левым индексом, равным мультиплетности $2S+1$. Например, терм $(L=1, S=\frac{1}{2})$ обозначают через 2P .

Одним из наиболее эффективных и широко распространенных методов решения многоэлектронной задачи является метод Хартри—Фока. В основе этого метода лежит вариационный принцип для энергии. Варьируемые волновые функции строятся из одноэлектронных функций, причем последние для атома берутся в виде

$$\psi_{nlm}(\mathbf{r}) = R_{nl}(r)Y_l^{(m)}(\theta, \varphi), \quad (19.4)$$

где $Y_l^{(m)}(\theta, \varphi)$ — сферические функции. Для функций $R_{nl}(r)$ получается система интегро-дифференциальных уравнений, которая затем решается при помощи метода последовательных приближений. Сейчас нет необходимости подробно рассматривать этот метод решения многоэлектронной задачи. Для нас важно лишь то, что электронные функции выбираются в виде (19.4) и, следовательно, полная волновая функция строится из одноэлектронных функций, принадлежащих определенной конфигурации, т. е. набору квантовых чисел n_i, l_i, m_i . Одноэлектронные состояния с одними и теми же значениями n, l образуют электронный слой. Если электроны занимают

все состояния данного слоя (с учетом двух спиновых состояний), то говорят, что слой заполнен. Взаимодействие между электронами одного слоя, имеющими одну и ту же радиальную функцию, сильнее, чем взаимодействие между электронами, принадлежащими разным слоям. Последнее может быть учтено как некоторое эффективное экранирование поля ядра. В этом приближении задача сводится к построению волновых функций отдельных слоев. С другой стороны, мы видели, что полная волновая функция должна характеризоваться квантовыми числами L и S . Поэтому интересно выяснить, какие значения этих квантовых чисел или, другими словами, какие термы соответствуют заданной конфигурации одноэлектронных состояний. Этот вопрос мы рассмотрим для конфигурации, описывающей один слой.

3. Соответствие между конфигурацией и термами

Пусть в слое l содержится k электронов. Составим произведение координатных одноэлектронных функций этих электронов (для простоты записи мы опускаем индексы n , l):

$$\psi_{m_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{m_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{m_k}(\mathbf{r}_k). \quad (19.5)$$

При подстановке

$$\mathbf{r}_i \rightarrow g^{-1}\mathbf{r}_i, \quad (19.6)$$

где g — произвольное преобразование из группы вращений, каждая из одноэлектронных функций преобразуется по закону

$$\psi_m(g^{-1}\mathbf{r}) = \sum_{m'=-l}^l D_{m'm}^{(l)}(g)\psi_{m'}(\mathbf{r}). \quad (19.7)$$

Матрица $\|D_{m'm}^{(l)}(g)\|$ является матрицей неприводимого представления веса l группы вращений. Из (19.7) следует, что для произведения одноэлектронных функций (19.5) мы получим следующий закон преобразования:

$$\begin{aligned} & \psi_{m_1}(g^{-1}\mathbf{r}_1)\psi_{m_2}(g^{-1}\mathbf{r}_2) \dots \psi_{m_k}(g^{-1}\mathbf{r}_k) = \\ & = \sum_{m'_1} D_{m'_1 m_1}^{(l)}(g) D_{m'_2 m_2}^{(l)}(g) \dots D_{m'_k m_k}^{(l)}(g) \psi_{m'_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{m'_2}(\mathbf{r}_2) \dots \psi_{m'_k}(\mathbf{r}_k). \end{aligned} \quad (19.8)$$

Мы видим, что при преобразованиях из группы вращений произведение одноэлектронных функций, принадлежащих одному слою, преобразуется, как l -тензор. Мы знаем, что координатная волновая функция

многоэлектронной системы должна преобразовываться при перестановке аргументов по одному из неприводимых представлений группы перестановок, схема Юнга которого должна состоять не более чем из двух столбцов. Поэтому построение шредингеровской волновой функции сводится к разложению произвольного l -тензора ранга k на симметризованные тензоры, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы перестановок с разрешенными схемами Юнга (из двух столбцов). Такое разложение было рассмотрено в главе XVIII. Независимые компоненты симметризованного l -тензора преобразуются, как мы знаем, по представлению $R^{(\lambda)}(D^{(l)})$ группы вращений.

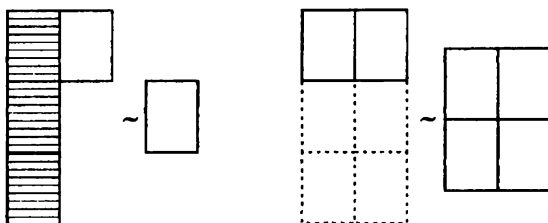
Для того чтобы ответить на поставленный в конце предыдущего пункта вопрос, нужно выяснить, на какие неприводимые представления группы вращений разлагается представление $R^{(\lambda)}(D^{(l)})$. В главе XVIII мы рассмотрели способ решения этой задачи. Используя развитый там метод, мы можем найти значения полного орбитального момента.

Для иллюстрации приведем таблицу возможных собственных значений полного орбитального момента для конфигурации (p^k) . Симметрию относительно перестановок значков соответствующего l -тензора мы будем обозначать разбиением числа k на целые слагаемые.

Таблица возможных собственных значений
полного орбитального момента для конфигурации $(p)^k$

k	$\{\lambda\}$	L
1	1	P
2	2	SD
3	1 + 1	P
	2 + 1	PD
4	1 + 1 + 1	S
	2 + 2	SD
5	2 + 1 + 1	P
	2 + 2 + 1	P
6	2 + 2 + 2	S

Из этой таблицы мы видим, что некоторым схемам Юнга соответствуют одинаковые полные моменты. Эти схемы Юнга получаются друг из друга либо вычеркиванием столбца, содержащего «максимальное» число $(2l + 1)$ клеток (в нашем случае равно 3), либо дополнением схемы Юнга до «максимальной», например:



Это общая закономерность, на доказательстве которой мы, однако, останавливаться не будем¹⁾.

Поскольку симметрия спиновой функции определяется транспонированной схемой Юнга, то для состояний, приведенных в таблице, можно легко определить собственные значения полного спина. Рассмотрим, например, конфигурацию $(p)^4$. Для схемы $\{2, 2\}$ транспонированная схема Юнга также будет задаваться разбиением $\{2, 2\}$. Отсюда для возможного значения полного спина мы получаем $S = \frac{2-2}{2} = 0$. Для схемы $\{2, 1, 1\}$ находим транспонированную схему $\{3, 1\}$ и $S = \frac{3-1}{2} = 1$. Таким образом, для конфигурации $(p)^4$ оказываются возможными следующие термы: 1S , 1D , 3P .

4. Спин-орбитальное взаимодействие

Рассмотрим теперь модель атома, учитывающую спин-орбитальное взаимодействие:

$$\sum \xi_i(\mathbf{r}_i) \hat{s}_i \hat{l}_i, \quad (19.9)$$

где \hat{s}_i и \hat{l}_i — операторы спинового и орбитального моментов i -го электрона, ξ_i — некоторые функции от \mathbf{r}_i (см. главу XIII). Очевидно, что оператор (19.9) не коммутирует отдельно с операторами $\hat{S} = \sum \hat{s}_i$ и $\hat{L} = \sum \hat{l}_i$. Легко проверить, что он коммутирует только с их суммой $\hat{S} + \hat{L}$ ²⁾. Это означает, что если раньше мы могли говорить в отдельности об инвариантности относительно преобразований вращений аргументов координатной функции и относительно индуцированных вращениями преобразований спиновых функций, то теперь остается инвариантность относительно одновременного применения этих преобразований. Уровни энергии будут теперь классифицироваться не по квантовым числам L и S , а по собственным значениям

¹⁾ См., например, [10], с. 461.

²⁾ Оператор спин-орбитального взаимодействия (19.9) коммутирует с каждым из операторов $\hat{s}_i + \hat{l}_i$.

оператора полного момента атома

$$J = L + S = \sum_i (s_i + l_i). \quad (19.10)$$

Если спин-орбитальное взаимодействие можно считать возмущением (случай $L-S$ -связи), то собственные значения полного момента для уровней, на которые расщепится терм, могут быть получены по правилу Клебша—Гордана. Рассмотрим в качестве примера конфигурацию $(p)^4$. Возможные значения квантового числа J для этой конфигурации даны в таблице:

Терм	J	Обозначение уровней энергии
1S	0	1S_0
1D	2	1D_2
3P	0, 1, 2	$^3P_0, ^3P_1, ^3P_2$

В тяжелых атомах спин-орбитальное взаимодействие велико, и его нельзя рассматривать как возмущение. Если оно больше взаимодействия между электронами, то оно должно быть учтено в первую очередь¹⁾. Тогда в нулевом приближении каждый электрон можно рассматривать независимо, и одноэлектронные состояния следует характеризовать собственными значениями оператора полного одноэлектронного момента $\hat{j} = \hat{l}_i + \hat{s}_i$. Затем должно быть учтено взаимодействие между электронами, которое приведет к тому, что уровни энергии всего атома опять будут классифицироваться по собственным значениям полного момента. Это приближение называют $j-j$ -связью. Если спин-орбитальное взаимодействие достаточно велико, так что одноэлектронные уровни энергии с разными значениями j сильно расщеплены, то можно ввести понятие j -оболочки, аналогичное понятию l -слоя. Так как многоэлектронная функция должна быть антисимметричной относительно перестановок электронов, то волновая функция j -оболочки с точки зрения симметрии относительно группы вращений будет антисимметричным j -тензором. Для того чтобы найти возможные собственные значения полного момента, нужно разложить на неприводимые части то представление группы вращений, которое реализуется на компонентах этого тензора. Эта задача может быть решена тем же способом, что и для l -слоя. Практически, однако, нет

¹⁾ Частично взаимодействие между электронами может быть учтено с помощью некоторого эффективного сферически симметричного потенциала. Поэтому величину спин-орбитального взаимодействия надо сравнивать лишь той частью межэлектронного взаимодействия, которая не входит в этот эффективный потенциал.

необходимости каждый раз проводить довольно громоздкую процедуру, так как результаты известны и затабулированы. В заключение в качестве иллюстрации приведем таблицу полных моментов для нескольких j -оболочек. Максимальное число электронов в j -оболочке равно $2j + 1$. В таблице, однако, указаны состояния j -оболочки самое большее для $\frac{2j+1}{2}$ электронов. Это связано с тем, что классификация состояний j -оболочки с k электронами и с $2j + 1 - k$ электронами совпадает в силу правила, изложенного на с. 210.

Таблица состояний для j -оболочек

j	Число электронов	J
$j = \frac{3}{2}$	1	$\frac{3}{2}$
	2	2, 0
$j = \frac{5}{2}$	1	$\frac{5}{2}$
	2	4, 2, 0
	3	$\frac{9}{2}$, $\frac{5}{2}$, $\frac{3}{2}$
$j = \frac{7}{2}$	1	$\frac{7}{2}$
	2	6, 4, 2, 0
	3	$\frac{15}{2}$, $\frac{11}{2}$, $\frac{9}{2}$, $\frac{7}{2}$, $\frac{5}{2}$, $\frac{3}{2}$
$j = \frac{9}{2}$	1	$\frac{9}{2}$
	2	8, 6, 4, 2, 0
	3	$\frac{21}{2}$, $\frac{17}{2}$, $\frac{15}{2}$, $\frac{13}{2}$, $\frac{11}{2}$, $(\frac{9}{2})^2$, $\frac{7}{2}$, $\frac{5}{2}$, $\frac{3}{2}$
	4	12, 10, 9, $(8)^2$, 7, $(6)^3$, 5, $(4)^3$, 3, $(2)^2$, $(0)^2$
	5	$\frac{25}{2}$, $\frac{21}{2}$, $\frac{19}{2}$, $\frac{17}{2}$, $(\frac{19}{2})^2$, $(\frac{15}{2})^2$, $(\frac{13}{2})^2$, $(\frac{11}{2})^2$, $(\frac{9}{2})^3$, $(\frac{7}{2})^2$, $(\frac{5}{2})^2$, $\frac{3}{2}$, $\frac{1}{2}$

Глава XX

Применение теории групп в задачах, связанных с теорией возмущений

Уравнение Шрёдингера, определяющее стационарные состояния квантовомеханической системы, может быть решено точно только в исключительных случаях. Одним из важных методов приближенного решения уравнения Шрёдингера является метод теории возмущений. Применение этой теории возможно в тех случаях, когда оператор Гамильтона удастся представить в виде

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}, \quad (20.1)$$

где \hat{H}_0 — гамильтониан задачи, которая допускает более простое решение, а \hat{V} — оператор возмущения. Учет симметрии невозмущенного оператора \hat{H}_0 и оператора возмущения \hat{V} в ряде случаев значительно облегчает применение теории возмущений к конкретным задачам.

1. Расщепление уровней энергии под влиянием возмущения

Пусть гамильтониан \hat{H}_0 обладает группой симметрии G_0 , а оператор возмущения \hat{V} — группой симметрии G_1 . Обычно требование относительной простоты оператора \hat{H}_0 по сравнению с полным гамильтонианом $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ подразумевает более высокую симметрию \hat{H}_0 по сравнению с симметрией \hat{H} . Рассмотрим два случая: а) группа G_1 совпадает с группой G_0 ; б) группа G_1 является подгруппой группы G_0 .

а) Симметрия полного гамильтониана совпадает с симметрией невозмущенной задачи: $G_0 = G_1$. Мы знаем, что собственные значения уравнений Шрёдингера можно классифицировать по неприводимым представлениям его группы симметрии. Следовательно, классификация и кратность вырождения уровней энергии нашей задачи остаются такими же, как и в невозмущенном случае. Мы можем ожидать лишь смещение собственных значений E_s оператора \hat{H} относительно собственных значений $E_s^{(0)}$ оператора \hat{H}_0 :

$$E_s = E_s^{(0)} + \Delta E_s. \quad (20.2)$$

Таким образом, в этом случае возмущение не может вызвать расщепление вырожденных уровней энергии. Исключение из этого правила может быть только при случайном вырождении, когда собственные функции уровня энергии невозмущенной задачи преобразуются по приводимому представлению группы G_0 .

Если изменять величину возмущения V , сохраняя его симметрию, то смещение ΔE_s собственных значений будут также изменяться, и некоторые уровни энергии E_s , как функции параметров возмущения, могут пересечься. В точках пересечения уровней будет иметь место случайное вырождение, так как собственные функции, соответствующие этому значению энергии, будут преобразовываться по приводимому представлению группы G_0 . Существует, однако, правило, которое в некоторых случаях запрещает пересечение уровней, соответствующих эквивалентным неприводимым представлениям. Рассмотрим для простоты два невырожденных уровня, предполагая, что соответствующие им волновые функции ψ_1 и ψ_2 преобразуются по эквивалентным неприводимым представлениям группы G_0 . Допустим, что при некотором значении возмущения V_1 рассматриваемые уровни энергии E_1 и E_2 почти совпадают. Выясним, может ли отклонение возмущения V от значения V_1 вызвать пересечение этих уровней. Обозначим через V' разность $V - V_1$ и через v_{ik} матричные элементы этого оператора. Новые уровни энергии мы найдем, решая вековое уравнение

$$\begin{vmatrix} E_1 + v'_{11} - E & v'_{12} \\ v'_{21} & E_2 + v'_{22} - E \end{vmatrix} = 0. \quad (20.3)$$

Мы найдем

$$E = \frac{1}{2}(E_1 + E_2 + v'_{11} + v'_{22}) \pm \sqrt{(v'_{11} - v'_{22} + E_1 - E_2)^2 + 4|v'_{12}|^2}. \quad (20.4)$$

Для того чтобы корни векового уравнения совпадали, необходимо одновременное выполнение двух условий:

$$E_1 - E_2 + v'_{11} - v'_{22} = 0, \quad v'_{12} = 0.$$

Эти условия накладывают сравнительно жесткие ограничения на возмущение. Если, например, возмущение определяется только одним параметром, то, вообще говоря, нельзя удовлетворить сразу двум условиям и, следовательно, пересечение уровней невозможно. Если волновые функции рассматриваемых уровней преобразуются по неэквивалентным неприводимым представлениям, то второе условие $v'_{12} = 0$ выполняется тождественно (см. (5.32)) и пересечение может произойти даже в том случае, когда возмущение зависит от одного параметра.

б) Перейдем к рассмотрению случая, когда группа G_1 является подгруппой группы G_0 . Классификацию собственных значений гамильтониана \hat{H} следует теперь проводить по неприводимым представлениям группы G_1 . Так как порядки неприводимых представлений подгруппы не превышают порядков неприводимых представлений группы, то в этом случае может иметь место расщепление уровней невозмущенной задачи. Когда мы говорим о расщеплении уровней, то считаем возмущение настолько малым, что уровни возмущенной задачи можно однозначно сопоставить собственным значениям оператора \hat{H}_0 .

Рассмотрим некоторое собственное значение $E^{(0)}$ оператора \hat{H}_0 . Пусть соответствующие ему собственные функции $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$ при операциях g из группы G_0 преобразуются по неприводимому представлению $\Gamma(g)$. Обозначим через E_i уровни энергии возмущенной задачи, на которых расщепился уровень $E^{(0)}$. Собственные функции $\psi_\alpha^{(i)}$ оператора \hat{H} , соответствующие каждому из собственных значений E_i при операциях из группы G , будут преобразовываться по неприводимым представлениям γ_i группы G_1 . Введем обозначение $\gamma(g) = \sum_i^{\oplus} \gamma_i(g)$, $g \in G_1$. Будем теперь неограниченно

уменьшать возмущение \hat{V} , не изменяя его симметрии. При любом значении возмущения \hat{V} мы можем утверждать, что волновые функции, принадлежащие всем уровням E_i , будут преобразовываться по представлению γ группы G_1 . В пределе $\hat{V} = 0$ мы получим собственные функции невозмущенного оператора, связанные с функциями $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$ некоторым унитарным преобразованием, и поэтому представление $\Gamma(g)$ должно быть эквивалентно представлению $\gamma(g)$ при $g \in G_1$:

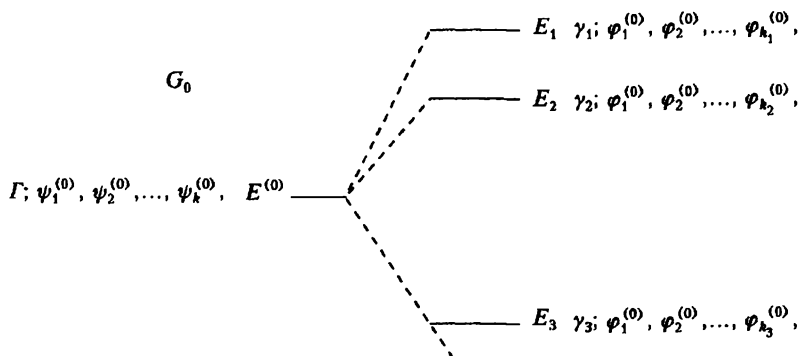
$$\gamma(g) = U^{-1}\Gamma(g)U, \quad g \in G_1,$$

и, следовательно,

$$U^{-1}\Gamma(g)U = \sum_i^{\oplus} \gamma_i(g), \quad g \in G_1. \quad (20.5)$$

Этот результат может быть использован для того, чтобы узнать, на сколько компонент расщепится данный уровень энергии $E^{(0)}$ при включении возмущения. Очевидно, для этого достаточно разложить представление $\Gamma(g)$ на неприводимые представления группы G_1 .

Мы видим, что включение возмущения более низкой симметрии, чем симметрия исходной задачи, приводит к частичному снятию вырождения. Вырождение каждого из новых уровней определяется порядком соответствующего неприводимого представления группы G_1 . Полученные результаты иллюстрируются следующей схемой:



2. Правильные функции нулевого приближения

Рассмотрим какой-нибудь вырожденный уровень $E^{(0)}$ энергии невозмущенной системы. Ортонормированные волновые функции, принадлежащие этому уровню, обозначим через $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$. Как известно, поправки ΔE к энергии в первом порядке теории возмущений определяются из векового уравнения

$$\begin{vmatrix} v_{11} - \Delta E & v_{12} & \dots & v_{1k} \\ v_{21} & v_{22} - \Delta E & \dots & v_{2k} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ v_{k1} & v_{k2} & \dots & v_{kk} - \Delta E \end{vmatrix} = 0, \quad (20.6)$$

где

$$v_{ik} = \int \bar{\psi}_i V \psi_k d\tau. \quad (20.7)$$

Линейные комбинации функций $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$, для которых матрица возмущения диагональна, называются *правильными функциями* нулевого приближения. Как известно, собственные функции возмущенного оператора непрерывно переходят в эти функции при выключении возмущения. Так как оператор возмущения V инвариантен относительно некоторой группы G_1 , то правильные функции нулевого приближения должны преобразовываться по неприводимым представлениям этой группы (см. главу V). Если в разложении представления Γ , по которому преобразуются функции $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$, каждое неприводимое представление группы G_1 встречается не более одного раза, то, построив из функций $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_k$ линейные комбинации, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы G_1 , мы найдем правильные функции нулевого приближения. Если же одно и то же представление

в разложении Γ встречается r раз, то для диагонализации матрицы возмущения нам придется решать вековое уравнение r -й степени. Обычно кратности неприводимых представлений невелики. Поэтому построение функций, преобразующихся по неприводимым представлениям группы G_1 , значительно облегчает решение уравнения (20.6).

3. Атом в однородном магнитном поле

Для иллюстрации общей теории, изложенной в предыдущих пунктах, рассмотрим расщепление энергетических уровней атома, помещенного во внешнее однородное магнитное поле. Ради простоты предположим, что состояние атома определяется состоянием одного валентного электрона, который находится в сферически симметричном поле остова.

а) *Эффект Пашена—Бака*. Предположим, что атом помещен в однородное магнитное поле, направленное вдоль оси z . Оператор взаимодействия валентного электрона с магнитным полем напряженностью H можно представить в виде

$$\hat{V} = -\frac{eH}{2mc}(\hat{l}_z + 2\hat{s}_z), \quad (20.8)$$

где \hat{l}_z и \hat{s}_z — операторы проекций на ось z соответственно орбитального и спинового моментов электрона; e — заряд электрона; m — масса электрона; c — скорость света.

Будем считать, что взаимодействие с магнитным полем сильнее спин-орбитального взаимодействия, и последним будем пренебрегать (так называемый случай сильного магнитного поля). Группой симметрии G_0 невозмущенной задачи в данном случае является группа трехмерных вращений, точнее, прямое произведение группы вращений в трехмерном пространстве и изоморфной ей группы, относящейся к спиновым переменным:

$$G_0 = O(3) \times O(3). \quad (20.9)$$

После включения взаимодействия (20.8) в качестве операций симметрии останутся лишь повороты вокруг оси z и отражения в плоскости (xy) как для пространственных переменных, так и для спиновых. Поэтому группой симметрии возмущенной задачи будет

$$G_1 = C_{\infty} \times C_{\infty}. \quad (20.10)$$

Состояния невозмущенной системы можно классифицировать по неприводимым представлениям группы (20.9), которые представляют собой прямое произведение $D^{(l)} \times D^{(1/2)}$. В соответствии с этим каждый уровень энергии E_l вырожден по магнитному орбитальному m_l и спиновому m_s квантовым числам ($m_l = -l, -l+1, \dots, l$; $m_s = \pm \frac{1}{2}$),

кратность вырождения равна $2(2l + 1)$. Для того, что выяснить, как расщепится этот уровень в магнитном поле, представление $D^{(l)} \times D^{(1/2)}$ следует разложить на неприводимые представления группы (20.10). Это можно сделать независимо для каждой из групп-сомножителей. Мы знаем, что группа $C_{\infty\infty}$ абелева и, следовательно, все ее неприводимые представления одномерны. Разложение неприводимого представления группы вращений на неприводимые представления группы $C_{\infty\infty} \times C_{\infty\infty}$ мы получим, если выберем вырожденные волновые функции так, чтобы они образовывали канонический базис представлений $D^{(l)}$ и $D^{(1/2)}$. Действительно, в этом случае матрицы этих представлений, соответствующие вращениям вокруг оси z на угол ϕ , принимают вид

$$D^{(l)} = \begin{pmatrix} e^{i\phi} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{i(l-1)\phi} & \dots & \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & e^{-i\phi} \end{pmatrix}, \quad (20.11)$$

$$D^{(1/2)} = \begin{pmatrix} e^{i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\phi/2} \end{pmatrix}. \quad (20.12)$$

Таким образом, представление $D^{(l)}$ распадается на $(2l + 1)$ неприводимых представлений $e^{im_l\phi}$ ($m_l = -l, -l + 1, \dots, l$), а представление $D^{(1/2)}$ — на два неприводимых представления $e^{-i\phi m_s}$ ($m_s = \pm \frac{1}{2}$) группы $C_{\infty\infty}$. Поэтому можно ожидать, что уровень энергии E_l расщепится на $2(2l + 1)$ подуровней, каждому из которых соответствуют определенные значения квантовых чисел m_l и m_s . Величина расщепления будет определяться диагональными матричными элементами оператора возмущения (20.8):

$$E_{m_l m_s} = -\frac{eH}{2mc} (m_l + 2m_s). \quad (20.13)$$

Очевидно, что из-за того, что гиромангнитное отношение для спина точно в два раза больше, чем для орбитального момента, некоторые из этих подуровней совпадают. Например, система подуровней для $l = 1$ будет следующей:

$$\begin{aligned} E_{1, \frac{1}{2}} &= -\frac{e\hbar H}{mc}, & E_{0, \frac{1}{2}} &= -\frac{e\hbar H}{2mc}, & E_{-1, \frac{1}{2}} &= E_{1, -\frac{1}{2}} = 0, \\ E_{0, -\frac{1}{2}} &= \frac{e\hbar H}{2mc}, & E_{-1, -\frac{1}{2}} &= \frac{e\hbar H}{mc}. \end{aligned} \quad (20.14)$$

б) *Эффект Зеемана*. Рассмотрим теперь случай, когда спин-орбитальное взаимодействие превалирует над магнитным взаимодействием

(20.8) — случай слабого магнитного поля. Тогда классификация невозмущенных магнитным полем состояний должна проводиться по полному моменту электрона. Так как оператор проекции полного момента на ось z , $\hat{j}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$, коммутирует с оператором возмущения (20.8), то правильными волновыми функциями нулевого приближения будут собственные функции квадрата полного момента и проекции полного момента на ось z :

$$\begin{aligned}\hat{j}^2|j, m_j\rangle &= \hbar^2 j(j+1)|j, m_j\rangle, \\ \hat{j}_z|j, m_j\rangle &= \hbar m_j|j, m_j\rangle.\end{aligned}\quad (20.15)$$

Поэтому расщепление энергетических уровней можно выразить через диагональные матричные элементы оператора возмущения (20.8):

$$\begin{aligned}-\frac{e\hbar H}{2mc}\langle j, m_j | (\hat{l}_z + 2\hat{s}_z) | j, m_j \rangle &= -\frac{e\hbar H}{2mc}\langle j, m_j | (\hat{j}_z + \hat{s}_z) | j, m_j \rangle = \\ &= -\frac{e\hbar H}{2mc}m_j - \frac{e\hbar H}{2mc}\langle j, m_j | \hat{s}_z | j, m_j \rangle.\end{aligned}\quad (20.16)$$

Для вычисления матричного элемента $\langle j, m_j | \hat{s}_z | j, m_j \rangle$ поступим следующим образом. Согласно теореме Вигнера—Экарта (см. п. 5 главы XIII), имеем:

$$\langle j, m_j | \hat{s}_z | j, m'_j \rangle = a \langle j, m_j | \hat{j}_z | j, m'_j \rangle, \quad (20.17)$$

где a — некоторая константа. Для ее определения воспользуемся операторным равенством

$$\hat{l}^2 = (\hat{j} - \hat{s})^2 = \hat{j}^2 + \hat{s}^2 - \hat{j}\hat{s} - \hat{s}\hat{j}. \quad (20.18)$$

Имея в виду случай l - s -связи, получаем

$$\begin{aligned}\langle j, m_j | \hat{l}_z^2 | j, m_j \rangle &= \hbar^2 l(l+1), \\ \langle j, m_j | \hat{j}_z^2 | j, m_j \rangle &= \hbar^2 j(j+1), \\ \langle j, m_j | \hat{s}_z^2 | j, m_j \rangle &= \hbar^2 s(s+1).\end{aligned}\quad (20.19)$$

Далее, используя (20.7), находим

$$\begin{aligned}\langle j, m_j | \hat{j}\hat{s} | j, m_j \rangle &= \langle j, m_j | \hat{s}\hat{j} | j, m_j \rangle = \\ &= \sum_{m'_j} \langle j, m_j | \hat{j} | j, m'_j \rangle \langle j, m'_j | \hat{s} | j, m_j \rangle = \\ &= \sum_{m'_j} \langle j, m_j | \hat{j} | j, m'_j \rangle \langle j, m'_j | \hat{j} | j, m_j \rangle = \\ &= a \langle j, m'_j | \hat{j}^2 | j, m_j \rangle = a \hbar^2 j(j+1).\end{aligned}\quad (20.20)$$

Вычисляя теперь диагональный элемент от обеих частей равенства, получим

$$l(l+1) = j(j+1) + s(s+1) - a2j(j+1). \quad (20.21)$$

Откуда

$$a = \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)}. \quad (20.22)$$

Окончательно для расщепленных уровней получаем

$$\begin{aligned} E_{jm_j} &= -\frac{e\hbar H}{2mc} m_j(1+a) = \\ &= -\frac{e\hbar H}{2mc} m_j \left[1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right] = -\mu g m_j H, \end{aligned} \quad (20.23)$$

где $\mu = \frac{e\hbar}{2mc}$ — магнетон Бора; g — множитель в квадратных скобках, называемый фактором Ланде.

В рассмотренном случае квантовое число полного момента j может принимать два значения: $j = l + \frac{1}{2}$, $j = l - \frac{1}{2}$. Подставив эти значения в (20.23), получим

$$\begin{aligned} E_{l+\frac{1}{2}, m_j} &= -\mu m_j H \left[1 + \frac{1}{2l+1} \right], \\ E_{l-\frac{1}{2}, m_j} &= -\mu m_j H \left[1 - \frac{1}{2l+1} \right]. \end{aligned} \quad (20.24)$$

Формула (20.23) обобщается также на случай многоэлектронного состояния в приближении L - S -связи (вывод аналогичен):

$$E_{J, M_J} = -\mu g M_J H, \quad (20.25)$$

где

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (20.26)$$

в) *Эффект Штарка*. Предположим теперь, что атом помещен в однородное электрическое поле, направленное вдоль оси Oz . Оператор взаимодействия электрона с электрическим полем напряженности $\mathcal{E} = \mathcal{E} e_z$ имеет вид

$$V = e\mathcal{E}z. \quad (20.27)$$

В этом случае оператор также инвариантен относительно вращений вокруг оси Oz . Однако здесь оказывается утраченной симметрия относительно отражения радиуса-вектора в плоскости xy , а вместе с ней — относительно инверсии \hat{i} , которая может быть представлена как отражение в плоскости xy и последующий поворот на 180° вокруг оси Oz .

Таким образом, включение электрического поля приводит к тому, что четность w перестает быть «хорошим» квантовым числом. Помимо инвариантности относительно вращений вокруг оси Oz возмущение (20.27) инвариантно также относительно отражений в плоскостях, проходящих через эту ось. Поэтому группой симметрии возмущения в этом случае будет группа $C_{\infty v}$.

Мы знаем (см. упр. 10.1), что группа $C_{\infty v}$ имеет два одномерных представления и бесконечное множество двумерных. Матрицы этих представлений приведены в таблице.

Элемент группы	A_1	A_2	E_m
$C(\varphi)$	1	1	$\begin{pmatrix} e^{-im\varphi} & 0 \\ 0 & e^{im\varphi} \end{pmatrix}$
σ_v	1	-1	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Для того чтобы выяснить, как расщепляется уровень E_l в электрическом поле, мы должны представление группы $C_{\infty v}$, даваемое матрицами $D^{(l)}$, разложить на ее неприводимые представления. Напишем характер представления $D^{(l)}$ для вращения на угол φ . Используя (20.11), мы получим

$$\text{Sp } D^{(l)}(0, 0, \varphi) = \sum_{k=1}^l 2 \cos k\varphi + 1 = \sum_{k=1}^l \text{Sp } E_k(\varphi) + 1. \quad (20.28)$$

Характер представления $D^{(l)}$, соответствующий операции σ_v , например σ_{yz} , можно вычислить следующим образом:

$$\begin{aligned} \text{Sp } D^{(l)}(\sigma_{yz}) &= \text{Sp } D^{(l)}(C_x(\pi) \times i) = \text{Sp } D^{(l)}(C_x(\pi)) \text{Sp } D^{(l)}(i) = \\ &= (1 + 2 \cos \pi + \dots + 2 \cos l\pi)w = (-1)^l w. \end{aligned}$$

Но в рассматриваемом случае $w = (-1)^l$. Поэтому

$$\text{Sp } D^{(l)}(\sigma_v) = 1. \quad (20.29)$$

Сравнивая (20.28) и (20.29) с характерами неприводимых представлений группы $C_{\infty v}$, мы получаем

$$D^{(l)}(g) = \sum_{k=1}^l E_k(g) \oplus A_1, \quad g \in C_{\infty v}. \quad (20.30)$$

Таким образом, мы приходим к заключению, что в однородном электрическом поле уровень E_l расщепляется на l двукратно вырожденных уровней, соответствующих представлениям E_k ($k = 1, \dots, l$), и один невырожденный уровень, волновая функция которого преобразуется по представлению $A^{(1)}$.

Отметим, что матричные элементы оператора возмущения для функций с одним и тем же азимутальным числом l равны нулю, поскольку произведение двух таких функций является четной функцией, а возмущение меняет знак при преобразовании инверсии. Это приводит к тому, что поправка к энергии в первом порядке теории возмущений оказывается равной нулю. Расщепление уровней проявляется лишь во втором порядке; поэтому величина этого расщепления пропорциональна квадрату напряженности поля. Исключение составляет атом водорода, для которого поправка первого порядка отлична от нуля вследствие дополнительного вырождения энергетических уровней.

4. Атом в кристаллическом поле

Рассмотрим теперь задачу о расщеплении уровней энергии атома, помещенного в поле кристалла. Мы будем предполагать, что влияние кристалла на атом можно рассматривать как малое возмущение. Симметрия этого возмущения определяется симметрией кристалла. Таким образом, в качестве группы G_1 , которая должна быть подгруппой группы вращений, в рассматриваемом случае мы имеем одну из точечных групп. Так как характеры неприводимых представлений точечных групп нам известны (см. главу VI), то схему расщепления уровней энергии атома можно получить при помощи формулы

$$\tau_i = \frac{1}{m} \sum_g \bar{\chi}^{(l)}(g) \chi^{(i)}(g), \quad (20.31)$$

Здесь $\chi^{(l)}(g)$ — характер неприводимого представления группы вращений (или ортогональной группы), определяющего симметрию состояния невозмущенного атома, а $\chi^{(i)}$ — характеры неприводимых представлений Γ_i рассматриваемой точечной группы. Величина τ_i определяет число подуровней, волновые функции которых преобразуются по неприводимому представлению Γ_i .

В качестве примера выясним, как расщепляется уровень с азимутальным квантовым числом l в кристаллическом поле, обладающем симметрией октаэдра. Для этого прежде всего вычислим при помощи формулы (11.31) характеры представления группы O , даваемого матрицами $D^{(l)}$ неприводимых представлений группы $O^+(3)$. Классам C_2

и C_4 группы O (см. главу VI) соответствует $\varphi = \pi$, и, следовательно,

$$\chi_{C_2}^{(l)} = \chi_{C_4}^{(l)} = \frac{\sin\left(l + \frac{1}{2}\right)\pi}{\sin\frac{\pi}{2}} = (-1)^l. \quad (20.32)$$

Классу C_3 соответствует $\varphi = \frac{\pi}{2}$, следовательно,

$$\chi_{C_3}^{(l)} = \frac{\sin\left(\frac{l}{2} + \frac{1}{4}\right)\pi}{\sin\frac{\pi}{4}} = (-1)^{\lfloor \frac{l}{2} \rfloor}. \quad (20.33)$$

Классу C_5 соответствует $\varphi = \frac{2\pi}{3}$, следовательно,

$$\chi_{C_5}^{(l)} = \frac{\sin\left(\frac{2l}{3} + \frac{1}{3}\right)\pi}{\sin\frac{\pi}{3}} = \begin{cases} 1, & l = 3m; \\ 0, & l = 3m + 1; \\ -1, & l = 3m + 2. \end{cases} \quad (20.34)$$

И, наконец, для класса E имеем

$$\chi_E^{(l)} = 2l + 1. \quad (20.35)$$

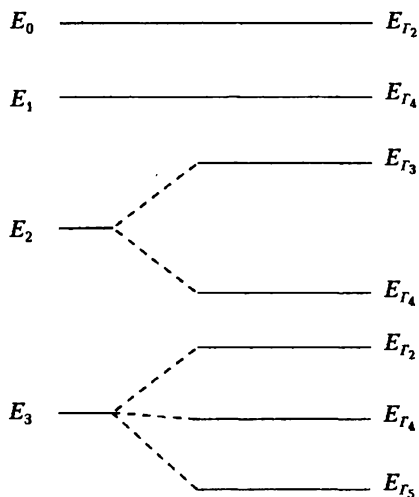
Таким образом, получаем следующую таблицу характеров приводимого представления группы O , даваемого матрицами $D^{(l)}$ для $l = 0, 1, 2, 3$:

l	E	C_4^2	C_4	C_2	C_3
0	1	1	1	1	1
1	3	-1	1	-1	0
2	5	1	-1	1	-1
3	7	-1	-1	-1	1

Рассматривая ее одновременно с таблицей характеров неприводимых представлений группы O , видим, что

$$\left. \begin{aligned} \text{Sp } D^{(0)} &= \text{Sp } \Gamma_1, \\ \text{Sp } D^{(1)} &= \text{Sp } \Gamma_4, \\ \text{Sp } D^{(2)} &= \text{Sp } \Gamma_3 + \text{Sp } \Gamma_5, \\ \text{Sp } D^{(3)} &= \text{Sp } \Gamma_2 + \text{Sp } \Gamma_4 + \text{Sp } \Gamma_5. \end{aligned} \right\} \quad (20.36)$$

Таким образом, схема расщепления уровней валентного электрона атома, помещенного в кристаллическое поле с симметрией октаэдра, может быть представлена в следующем виде:



Задача отыскания приближенных волновых функций, соответствующих расщепленным в кристаллическом поле уровням, значительно облегчается, если известны линейные комбинации $K_{\Gamma p}^{(i)}(\theta, \varphi)$ сферических функций, которые образуют базисы неприводимого представления точечных групп (индекс p нумерует повторяющиеся неприводимые представления, а индекс i нумерует орты базиса этих представлений). Функции $K_{\Gamma p}^{(i)}(\theta, \varphi)$ называют кристаллическими гармониками. В качестве примера мы приводим таблицу кубических гармоник, образующих базисы неприводимых представлений группы куба. Пользуясь кристаллическими гармониками, мы можем представить волновую функцию электрона, соответствующую уровню E_{Γ} , в виде

$$\psi_{\Gamma}^{\Gamma}(\mathbf{r}) = \sum_{i,p} K_{\Gamma p}^{(i)}(\theta, \varphi) R_{\Gamma p}(r), \quad (20.37)$$

где функции $R_{\Gamma p}$ зависят только от абсолютной величины радиуса-вектора.

Таблица вещественных кубических гармоник $K_{l\sigma}^{(k)}(\theta, \varphi)$ ($\int [K_{l\sigma}^{(k)}]^2 d\tau = 2\pi$)

	Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5
1	$K_{1\alpha}$	$K_{1\beta}$	$K_{1\gamma}$	$K_{1\delta}$	$K_{1\epsilon}$
0	$K_{0\alpha} = \frac{1}{\sqrt{2}}$				
1				$K_{1\delta}^{(1)} = P_1^{(0)}$ $K_{1\delta}^{(2)} = \sqrt{2} P_1^{(1)} \cos \varphi$ $K_{1\delta}^{(3)} = \sqrt{2} P_1^{(1)} \sin \varphi$	
2			$K_{2\gamma}^{(1)} = P_2^{(0)}$ $K_{2\gamma}^{(2)} = \sqrt{2} P_2^{(2)} \cos 2\varphi$		$K_{2\epsilon}^{(1)} = \sqrt{2} P_2^{(2)} \sin 2\varphi$ $K_{2\epsilon}^{(2)} = \sqrt{2} P_2^{(2)} \cos \varphi$ $K_{2\epsilon}^{(3)} = \sqrt{2} P_2^{(2)} \sin \varphi$
3		$K_{3\beta} = \sqrt{2} P_3^{(2)} \sin^2 \varphi$		$K_{3\delta}^{(1)} = P_3^{(0)}$ $K_{3\delta}^{(2)} = \sqrt{\frac{5}{4}} P_3^{(3)} \cos 3\varphi -$ $\quad - \sqrt{\frac{3}{4}} P_3^{(1)} \cos \varphi$ $K_{3\delta}^{(3)} = \sqrt{\frac{5}{4}} P_3^{(3)} \sin 3\varphi +$ $\quad + \sqrt{\frac{3}{4}} P_3^{(1)} \sin \varphi$	$K_{3\epsilon}^{(1)} = \sqrt{2} P_3^{(2)} \cos 2\varphi$ $K_{3\epsilon}^{(2)} = \sqrt{\frac{3}{2}} P_3^{(3)} \cos 3\varphi +$ $\quad + \sqrt{\frac{5}{4}} P_3^{(1)} \cos \varphi$ $K_{3\epsilon}^{(3)} = \sqrt{\frac{3}{2}} P_3^{(3)} \sin 3\varphi -$ $\quad - \sqrt{\frac{5}{4}} P_3^{(1)} \sin \varphi$
4	$K_{4\alpha} = \sqrt{\frac{7}{12}} P_4^{(0)} +$ $\quad + \sqrt{\frac{5}{6}} P_4^{(4)} \cos 4\varphi$		$K_{4\gamma}^{(1)} = \sqrt{2} P_4^{(2)} \cos 2\varphi$ $K_{4\gamma}^{(2)} = \sqrt{\frac{5}{12}} P_4^{(0)} -$ $\quad - \sqrt{\frac{7}{6}} P_4^{(4)} \cos 4\varphi$	$K_{4\delta}^{(1)} = \sqrt{2} P_4^{(4)} \sin 4\varphi$ $K_{4\delta}^{(2)} = \sqrt{2} \sqrt{\frac{7}{8}} P_4^{(1)} \cos \varphi -$ $\quad - \sqrt{2} \sqrt{\frac{1}{8}} P_4^{(3)} \cos 3\varphi$ $K_{4\delta}^{(3)} = \sqrt{2} \sqrt{\frac{7}{8}} P_4^{(1)} \sin \varphi +$ $\quad + \sqrt{2} \sqrt{\frac{1}{8}} P_4^{(3)} \sin 3\varphi$	$K_{4\epsilon}^{(1)} = \sqrt{2} P_4^{(2)} \sin 2\varphi$ $K_{4\epsilon}^{(2)} = \sqrt{2} \sqrt{\frac{1}{8}} P_4^{(1)} \cos \varphi +$ $\quad + \sqrt{2} \sqrt{\frac{7}{8}} P_4^{(3)} \cos 3\varphi$ $K_{4\epsilon}^{(3)} = \sqrt{2} \sqrt{\frac{1}{8}} P_4^{(1)} \sin \varphi -$ $\quad - \sqrt{2} \sqrt{\frac{7}{8}} P_4^{(3)} \sin 3\varphi$

Глава XXI

Правила отбора

Одним из важных приложений теории групп к квантовой механике является установление правил отбора. В широком смысле слова под правилами отбора понимают критерий, позволяющий судить, может ли быть отличным от нуля матричный элемент некоторого оператора, если известно, по каким представлениям рассматриваемой группы преобразуются этот оператор и волновые функции. В теории излучения этот критерий применяется к матричному элементу оператора взаимодействия с электромагнитным полем и используется для определения вероятности перехода квантовомеханической системы из одного стационарного состояния в другое.

1. Общая формулировка правил отбора

Пусть нам задана некоторая совокупность операторов \hat{O}_α , $\alpha = 1, 2, \dots, k$ (например, $\hat{p}_x, \hat{p}_y, \hat{p}_z$), которые при преобразовании g из группы G симметрии рассматриваемой квантовомеханической системы преобразуются по закону

$$\hat{T}_g \hat{O}_\alpha \hat{T}_g^{-1} = \sum_{\beta=1}^k D'_{\beta\alpha} \hat{O}_\beta. \quad (21.1)$$

Рассмотрим матричный элемент оператора \hat{O}_α :

$$O_{\alpha ij} = (\psi_i, \hat{O}_\alpha \varphi_j), \quad (21.2)$$

где функции ψ_i и φ_j образуют базисы представлений $D^{(1)}$ и $D^{(2)}$ группы G :

$$\left. \begin{aligned} \hat{T}_g \psi_i &= \sum_n D_{ni}^{(1)}(g) \psi_n, \\ \hat{T}_g \varphi_j &= \sum_m D_{mj}^{(2)}(g) \varphi_m. \end{aligned} \right\} \quad (21.3)$$

Используя унитарность оператора \hat{T}_g , мы можем написать

$$(\psi_i, \hat{O}_\alpha \varphi_j) = (\hat{T}_g \psi_i, \hat{T}_g \hat{O}_\alpha \varphi_j) = (\hat{T}_g \psi_i, \hat{T}_g \hat{O}_\alpha \hat{T}_g^{-1} \hat{T}_g \varphi_j). \quad (21.4)$$

Подставляя в (21.4) равенства (21.1) и (21.3), мы получим

$$O_{\alpha\gamma} = \left(\sum_n D_{n\alpha}^{(1)}(g) \psi_n, \sum_\beta D'_{\beta\alpha}(g) \hat{O}_\beta \sum_m D_{m\gamma}^{(2)}(g) \varphi_m \right) = \\ = \sum_{n, \beta, m} \bar{D}_{n\alpha}^{(1)}(g) D'_{\beta\alpha}(g) D_{m\gamma}^{(2)}(g) O_{\beta nm} \quad (21.5)$$

или

$$O_{\alpha\gamma} = \sum_{n, \beta, m} D_{n\beta m, \alpha\gamma} O_{\beta nm}, \quad (21.6)$$

где матрица $\|D_{n\beta m, \alpha\gamma}\|$ есть матрица прямого произведения представлений $\bar{D}^{(1)} \times D' \times D^{(2)}$. Просуммировав обе части равенства (21.6) по группе и поделив результат на порядок N группы, мы получим

$$O_{\alpha\gamma} = \frac{1}{N} \sum_g \sum_{n, \beta, m} D_{n\beta m, \alpha\gamma}^{(g)} O_{\beta nm}. \quad (21.7)$$

Мы знаем, что сумма по группе матриц любого неприводимого представления, кроме тождественного, равна нулевой матрице (см. упр. 3.7). Предположим, что представление $D = \bar{D}^{(1)} \times D' \times D^{(2)}$ в результате преобразования подобия с некоторой матрицей разложено на неприводимые представления, т. е.

$$VD(g)V^{-1} = \sum_\lambda \oplus D^{(\lambda)}(g), \quad (21.8)$$

где $D^{(\lambda)}(g)$ — матрицы неприводимых представлений. Если в правой части этого равенства не содержится тождественное представление, то

$$\sum_g \sum_\lambda \oplus D^{(\lambda)}(g) = 0, \quad (21.9)$$

а следовательно, и

$$\sum_g D(g) = V^{-1} \sum_g \sum_\lambda \oplus D^{(\lambda)}(g) V = 0. \quad (21.10)$$

Таким образом, в правой части равенства (21.7) мы получим нуль, если в представлении D не содержится тождественное представление.

Полученный критерий равенства нулю матричного элемента $O_{\alpha\gamma}$ (или *правила отбора*) можно сформулировать следующим образом: для того чтобы матричный элемент $O_{\alpha\gamma}$ был отличен от нуля, необходимо (но недостаточно), чтобы в прямом произведении $\bar{D}^{(1)} \times D' \times D^{(2)}$ содержалось тождественное представление.

Если, в частности, оператор \widehat{O} является единичным оператором и, следовательно, преобразуется по тождественному представлению, то сформулированные правила отбора будут выражать свойство ортогональности функций, преобразующихся по неэквивалентным неприводимым представлениям (см. главу V, с. 65).

2. Правила отбора для поглощения и излучения света

Для иллюстрации применения доказанной в предыдущем пункте теории установим правила отбора для излучения и поглощения света атомами. Мы ограничимся рассмотрением дипольного приближения, в котором вероятность перехода из состояния A в состояние B пропорциональна квадрату модуля матричного элемента:

$$r_{AB} = \int \bar{\Psi}_A(\mathbf{x}) \sum_j r_j \Psi_B(\mathbf{x}) d\tau, \quad (21.11)$$

где r_j — радиусы-векторы электронов атома, \mathbf{x} — совокупность пространственных и спиновых координат, интегрирование по $d\tau$ означает интегрирование по пространственным и суммирование по спиновым переменным.

Рассмотрим случай L – S -связи. При этом сначала будем считать, что волновые функции Ψ_A и Ψ_B начального и конечного состояний построены из одноэлектронных волновых функций, соответствующих заданным конфигурациям. Тогда матричный элемент (21.11) может быть выражен через одноэлектронные матричные элементы:

$$\int \bar{\psi}_l(\mathbf{r}) \mathbf{r} \psi_{l'}(\mathbf{r}) d\tau, \quad (21.12)$$

где ψ_l — одноэлектронная волновая функция с квантовым азимутальным числом l .

Установим правила отбора, обусловленные симметрией системы относительно инверсии. Радиус-вектор \mathbf{r} преобразуется по нечетному представлению группы инверсии; волновая функция ψ_l преобразуется по четному представлению, если l четно, и по нечетному представлению, если l нечетно. Для того чтобы интеграл (21.12) был отличен от нуля, необходимо, чтобы подинтегральное выражение преобразовывалось по четному (тождественному) представлению, т. е. l и l' должны иметь разную четность.

Теперь рассмотрим правила отбора для матричного элемента (21.12), обусловленные симметрией системы относительно вращений. Очевидно, подинтегральное выражение в (21.12) при вращениях преобразуется по представлению $D^{(l)} \times D^{(l')} \times D^{(l)}$. Применяя формулу Клебша—Гордана, мы приходим к заключению, что это представление содержит

тождественное представление только в том случае, если

$$l = l' \quad \text{или} \quad l = l' \pm 1.$$

Принимая во внимание полученные ранее правила отбора по четности, можем утверждать, что матричный элемент (21.12) может быть отличен от нуля только в том случае, если

$$\Delta l = l' - l = \pm 1. \quad (21.13)$$

Так как оператор дипольного момента в (21.11) представляет собой сумму одноэлектронных операторов, то при интегрировании мы получим отличный от нуля результат только в том случае, если конфигурации начального и конечного состояний отличаются только одним азимутальным квантовым числом.

Получим теперь правила отбора для матричного элемента (21.11), не связанные с одноэлектронным приближением.

Пусть состояния A и B характеризуются квантовыми числами L, S, J и L', S', J' соответственно. Рассматривая правила отбора для (21.11), обусловленные группой вращений, мы получим

$$\Delta L = L' - L = 0, \pm 1, \quad (21.14)$$

$$\Delta J = J' - J = 0, \pm 1. \quad (21.15)$$

Заметим, однако, что переходы $J = 0 \rightarrow J' = 0$ и $L = 0 \rightarrow L' = 0$ запрещены. Это станет очевидным, если представление $D^{(0)} \times D^{(1)} \times D^{(0)}$, по которому преобразуется в этом случае произведение трех сомножителей в (21.11), разложить по правилу Клебша—Гордана на неприводимые части. Далее, оператор дипольного момента $\sum \mathbf{r}_i$ симметричен относительно перестановок радиусов-векторов \mathbf{r}_i . Поэтому для того, чтобы представление, по которому преобразуется подынтегральное выражение в (21.12), содержало тождественное представление, необходимо, чтобы функции Ψ_A и Ψ_B преобразовывались по эквивалентным представлениям группы перестановок. Но так как представление группы перестановок пространственных переменных \mathbf{r}_i однозначно связано с собственным значением полного спина (см. главу XVII), то мы получим

$$\Delta S = S' - S = 0. \quad (21.16)$$

3. Правила отбора для комбинационного рассеяния света молекулами

В качестве еще одного примера рассмотрим правила отбора для комбинационного рассеяния света молекулами.

Для простоты ограничимся моделью молекулы с двумя невырожденными электронными термами. Каждый из этих термов имеет свою колебательную структуру.

На рис. 17 изображены колебательные подуровни для одного нормального колебания молекулы. Комбинационное рассеяние света является процессом второго порядка по отношению к взаимодействию с электромагнитным полем и связано с виртуальными переходами на колебательные подуровни возбужденного состояния.

Пусть молекула поглощает квант частоты ω_0 и поляризации α и испускает квант частоты ω_1 и поляризации β . При этом молекула изменяет только свое колебательное состояние, продолжая оставаться в основном электронном состоянии. Вероятность такого процесса пропорциональна квадрату модуля следующей величины:

$$K = \sum_m \frac{\langle 1n | M_\alpha | 2m \rangle \langle 2m | M_\beta | 1n' \rangle}{E_2 + \epsilon_m - E_1 - \epsilon_n - \hbar\omega_0} + \sum_m \frac{\langle 1n | M_\alpha | 2m \rangle \langle 2m | M_\beta | 1n' \rangle}{E_2 + \epsilon_m - E_1 - \epsilon_n + \hbar\omega_0}. \quad (21.17)$$

Здесь $\langle 1n | M_\alpha | 2m \rangle$ обозначает матричный элемент оператора электронного дипольного момента молекулы, вычисленный с волновыми функциями n -го колебательного подуровня основного электронного состояния и m -го колебательного подуровня возбужденного электронного состояния; через E_2 и E_1 обозначены минимумы возбужденного и основного электронных термов соответственно, а через ϵ_m и ϵ_n — энергии их колебательных подуровней. Частота ω_1 испущенного кванта определяется законом сохранения энергии:

$$E_1 + \epsilon_n + \hbar\omega_0 = E_2 + \epsilon_{n'} + \hbar\omega_1. \quad (21.18)$$

Мы рассмотрели случай нерезонансного комбинационного рассеяния, т. е. будем считать, что

$$E_2 - E_1 - \hbar\omega_0 \gg \epsilon_m - \epsilon_n. \quad (21.19)$$

Пренебрегая малой величиной $\epsilon_m - \epsilon_n$ в знаменателях формулы (21.17), мы получим

$$K = \left\{ \frac{1}{E_2 - E_1 - \hbar\omega_0} + \frac{1}{E_2 - E_1 + \hbar\omega_0} \right\} \times \sum_m \langle 1n | M_\alpha | 2m \rangle \langle 2m | M_\beta | 1n' \rangle. \quad (21.20)$$

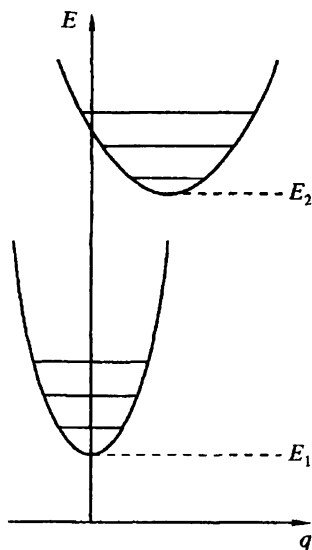


Рис. 17.

В адиабатическом приближении волновую функцию молекулы представляют в виде

$$\Psi_{im}(\mathbf{r}, \mathbf{q}) = \psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{q}) \Phi_m^{(i)}(\mathbf{q}), \quad (21.21)$$

где $\psi_i(\mathbf{r}, \mathbf{q})$ — электронная волновая функция, являющаяся решением уравнения Шрёдингера для некоторой фиксированной конфигурации ядер, которая определяется смещениями \mathbf{q} ; $\Phi_m^{(i)}(\mathbf{q})$ — колебательная волновая функция. Теперь мы можем представить величину K в виде

$$\begin{aligned} K &= \frac{2(E_2 - E_1)}{(E_2 - E_1)^2 - (\hbar\omega_0)^2} \sum_m \langle n | M_{\alpha 12}(\mathbf{q}) | m \rangle \langle m | M_{\beta 21}(\mathbf{q}) | n' \rangle = \\ &= \frac{2(E_2 - E_1)}{(E_2 - E_1)^2 - (\hbar\omega_0)^2} \sum \langle n | M_{\alpha 12}(\mathbf{q}) M_{\beta 21}(\mathbf{q}) | n' \rangle, \end{aligned} \quad (21.22)$$

где

$$M_{\alpha ij}(\mathbf{q}) = \int \bar{\psi}_i(\mathbf{r}, \mathbf{q}) \mathbf{r}_\alpha \psi_j(\mathbf{r}, \mathbf{q}) d\mathbf{r}. \quad (21.23)$$

Чтобы найти правила отбора для величины (21.22), определим сначала закон преобразования электронных матричных элементов $M_{\alpha ij}(\mathbf{q})$ при преобразованиях смещений \mathbf{q} , дающих представление D группы G симметрии молекулы в основном электронном состоянии. Если g — элемент группы G , то мы можем написать

$$\psi_j(g^{-1}\mathbf{r}, D(g^{-1})\mathbf{q}) = e^{i\delta_j(g)} \psi_j(\mathbf{r}, \mathbf{q}). \quad (21.24)$$

В частности, если $\mathbf{q} = \mathbf{0}$, то

$$\psi_j(g^{-1}\mathbf{r}, \mathbf{0}) = e^{i\delta_j(g)} \psi_j(\mathbf{r}, \mathbf{0}), \quad (21.25)$$

откуда следует, что множители $e^{i\delta_j(g)}$ образуют представление группы G , по которому преобразуются электронные волновые функции при равновесной конфигурации ядер. Нас интересует величина $M_{\alpha 12}(D(g^{-1})\mathbf{q})$, которая имеет следующий явный вид:

$$M_{\alpha 12}(D(g^{-1})\mathbf{q}) = \int \bar{\psi}_1(\mathbf{r}, D(g^{-1})\mathbf{q}) \mathbf{r}_\alpha \psi_2(\mathbf{r}, D(g^{-1})\mathbf{q}) d\mathbf{r}. \quad (21.26)$$

Делая замену переменной интегрирования

$$\mathbf{r} = g^{-1}\mathbf{r}', \quad (21.27)$$

мы получим

$$\begin{aligned} M_{\alpha 12}(D(g^{-1})\mathbf{q}) &= \\ &= \int \bar{\psi}_1(g^{-1}\mathbf{r}', D(g^{-1})\mathbf{q}) \sum_{\gamma} g_{\alpha\gamma}^{-1} \mathbf{r}'_{\gamma} \psi_2(g^{-1}\mathbf{r}', D(g^{-1})\mathbf{q}) d\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (21.28)$$

Используя (21.24) и свойство ортогональности матрицы $\|g_{\alpha\beta}\|$, мы найдем

$$\begin{aligned} M_{\alpha 12}(D(g^{-1})\mathbf{q}) &= e^{-i\delta_1(g)} e^{i\delta_2(g)} \sum_{\gamma} g_{\gamma\alpha} \int \bar{\psi}_1(\mathbf{r}', \mathbf{q}) \mathbf{r}'_{\gamma} \psi_2(\mathbf{r}', \mathbf{q}) d\mathbf{r}' = \\ &= e^{-i\delta_1(g)} e^{i\delta_2(g)} \sum_{\gamma} g_{\gamma\beta} M_{\gamma 12}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (21.29)$$

Теперь мы можем легко найти закон преобразования оператора $O_{\alpha\beta}(\mathbf{q}) = M_{\alpha 12} M_{\beta 21}$, стоящего в матричном элементе (21.22). Мы получаем

$$\begin{aligned} O_{\alpha\beta}(D(g^{-1})\mathbf{q}) &= M_{\alpha 12}(D(g^{-1})\mathbf{q}) M_{\beta 21}(D(g^{-1})\mathbf{q}) = \\ &= \sum_{\gamma, \gamma'} g_{\gamma\alpha} g_{\gamma'\beta} M_{\alpha 12}(\mathbf{q}) M_{\beta 21}(\mathbf{q}) = \sum_{\gamma, \gamma'} g_{\gamma\alpha} g_{\gamma'\beta} O_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (21.30)$$

Мы видим, что оператор $O_{\alpha\beta}(\mathbf{q})$ преобразуется по тензорному представлению группы G . Если матричные элементы $M_{\alpha 12}$ дипольного момента вещественны, то мы имеем дополнительное условие

$$O_{\alpha\beta} = O_{\beta\alpha}. \quad (21.31)$$

В этом случае шесть независимых величин будут преобразовываться по симметричному квадрату представления g , которое образуют сами матрицы вращения в трехмерном пространстве. Симметричный квадрат представления принято обозначать $[g^2]$. Используя этот результат, мы можем, наконец, сформулировать правила отбора для комбинационного рассеяния: *переход будет разрешен, если в прямом произведении представлений $D^{(n)} \times D^{(n')} \times [g^2]$, где $D^{(n)}$ и $D^{(n')}$ — представления, по которым преобразуются осцилляторные волновые функции, содержится тождественное представление¹⁾.*

4. Матричные элементы, построенные на функциях одного базиса

Если волновые функции, с которыми строится матричный элемент некоторого эрмитова оператора, принадлежат базису одного представления, то можно получить более жесткие правила отбора по сравнению с теми, которые были рассмотрены в предыдущих пунктах. Эти правила отбора существенны, например, в тех случаях, когда надо вычислять матричные элементы с волновыми функциями, принадлежащими одному уровню энергии.

¹⁾ О преобразовании осцилляторных волновых функций см. в главе XIV, с. 172, а также упр. 16.3.

Рассмотрим сначала случай, когда волновые функции вещественны и не зависят от спина. Интересующий нас матричный элемент эрмитова оператора \widehat{O}_α может быть представлен в виде

$$\langle i|\widehat{O}_\alpha|j\rangle = \int \psi_i \widehat{O}_\alpha \psi_j d\tau. \quad (21.32)$$

Пусть функции ψ_k преобразуются по представлению D , а оператор \widehat{O}_α — по представлению D' некоторой группы G . Тогда, для того чтобы матричный элемент (21.32) был отличен от нуля, необходимо, чтобы в прямом произведении $D \times D \times D'$ содержалось тождественное представление. Однако можно получить некоторые дополнительные ограничения, если учесть симметрию матричного элемента относительно перестановки значков i, j . Подчеркнем, что в этом случае, когда функции, стоящие слева и справа от оператора, принадлежат одному и тому же базису некоторого представления, перестановка значков матричных элементов дает снова ту же совокупность матричных элементов, что не имеет места, если упомянутые функции принадлежат разным базисам. Мы можем написать

$$\begin{aligned} \langle i|\widehat{O}_\alpha|j\rangle &= \int \psi_i \widehat{O}_\alpha \psi_j d\tau = \int (\overline{\widehat{O}_\alpha} \psi_i) \psi_j d\tau = \\ &= \pm \int \psi_j \widehat{O}_\alpha \psi_i d\tau = \pm \langle j|\widehat{O}_\alpha|i\rangle. \end{aligned} \quad (21.33)$$

Знаки плюс и минус в этой формуле относятся соответственно к тем случаям, когда оператор \widehat{O}_α вещественный или чисто мнимый. (Например, оператор взаимодействия электрона с электрическим полем вещественный, а оператор взаимодействия с магнитным полем чисто мнимый). На основании полученного свойства симметрии (или антисимметрии) матричных элементов мы можем утверждать, что представление, по которому они преобразуются, должно в качестве множителя содержать симметричный (или антисимметричный) квадрат представления D . Используя обозначения, принятые в главе XVI, мы запишем представление, по которому преобразуются матричные элементы, в виде

$$\left. \begin{array}{l} [D^2] \times D' \text{ для вещественного оператора,} \\ \{D^2\} \times D' \text{ для чисто мнимого оператора.} \end{array} \right\} \quad (21.34)$$

Теперь правила отбора могут быть сформулированы следующим образом: для того, чтобы матричный элемент (21.32) был отличен от нуля, необходимо, чтобы в представлении (21.34) содержалось тождественное представление.

Модифицируем эти правила отбора, учтя спиновые состояния многоэлектронной системы¹⁾. Мы ограничимся тем случаем, когда оператор энергии рассматриваемой системы инвариантен относительно операции обращения времени, т. е. не содержит взаимодействия с магнитным полем (см. главу XIII). Если ψ — собственная функция такого гамильтониана, то $\hat{\Theta}\psi$, где $\hat{\Theta}$ — оператор обращения времени, — также собственная функция этого гамильтониана с тем же собственным значением. Напомним, что оператор $\hat{\Theta}$ для n -электронной системы имеет вид

$$\hat{\Theta} = \hat{S}_{1y}\hat{S}_{2y}\dots\hat{S}_{ny}K, \quad (21.35)$$

где \hat{S}_{iy} — оператор проекции спина i -го электрона на ось Oy , K — операция комплексного сопряжения.

Оператор $\hat{\Theta}$, как легко проверить, коммутирует с инфинитезимальными операторами вращений и, следовательно, с любым вращением. Но отсюда следует, что если функция ψ преобразуется по представлению D группы вращений (или какой-нибудь ее подгруппы), то функция $\hat{\Theta}\psi$ будет преобразовываться по комплексно сопряженному представлению \bar{D} . Действительно,

$$\hat{T}_g\hat{\Theta}\psi_i = \hat{\Theta}\hat{T}_g\psi_i = \hat{\Theta} \sum_j D_{ji}(g)\psi_j = \sum_j \bar{D}_{ji}(g)\hat{\Theta}\psi_j. \quad (21.36)$$

Отсюда следует, что собственные функции рассматриваемого гамильтониана, соответствующие одному собственному значению, преобразуются либо по вещественному представлению, либо по представлению, которое эквивалентно своему комплексно сопряженному. В последнем случае оно может быть представлено в виде $D^{(s)} \oplus \bar{D}^{(s)}$, где $D^{(s)}$ — некоторое представление рассматриваемой группы. Нетрудно найти преобразование подобия, которое делает представление $D^{(s)} \oplus \bar{D}^{(s)}$ вещественным.

Рассмотрим закон преобразования волновых функций при действии на них оператора $\hat{\Theta}$. Мы можем написать

$$\hat{\Theta}\psi_i = \sum_j \theta_{ji}\psi_j, \quad (21.37)$$

где $||\theta_{ji}||$ — некоторая унитарная матрица: $\Theta^- = \Theta^{-1}$. Известно (см. главу XIII), что

$$\hat{\Theta}^2 = \kappa, \quad (21.38)$$

¹⁾ Левинсон И. Б. Труды АН Литовской ССР, серия Б, 2 (1961), 67.

где $\kappa = 1$ для четного числа электронов и $\kappa = -1$ для нечетного числа электронов. Соответствующее матричное равенство будет иметь вид

$$\Theta \bar{\Theta} = \kappa E, \quad (21.39)$$

откуда

$$\Theta^{-1} = \kappa \bar{\Theta}. \quad (21.40)$$

В силу унитарности матрицы Θ мы получаем

$$\Theta^{-1} = \Theta^+ = \kappa \bar{\Theta} \quad (21.41)$$

или

$$\Theta^* = \kappa \Theta, \quad (21.42)$$

где Θ^* обозначает транспонированную матрицу. Это свойство матрицы Θ мы используем для определения симметрии матричного элемента $O_{\alpha ij} = (\psi_i, \hat{O}_\alpha \psi_j)$ относительно перестановки значков i и j .

Мы можем написать следующее равенство

$$O_{\alpha ij} = (\hat{\Theta} \psi_i, \hat{\Theta} \hat{O}_\alpha \psi_j) = (\hat{\Theta} \psi_i, \hat{\Theta} \hat{O}_\alpha \hat{\Theta}^{-1} \hat{\Theta} \psi_j) = \pm \sum_{m,n} \bar{O}_{\alpha mn} \theta_{mi} \bar{\theta}_{nj}. \quad (21.43)$$

Здесь верхний знак соответствует случаю, когда $\hat{\Theta} \hat{O}_\alpha \hat{\Theta}^{-1} = \hat{O}_\alpha$, нижний — случаю, когда $\hat{\Theta} \hat{O}_\alpha \hat{\Theta}^{-1} = -\hat{O}_\alpha$. Используя эрмитовость оператора \hat{O}_α : $\bar{O}_{\alpha mn} = O_{\alpha nm}$ и унитарность матрицы Θ : $\Theta^{-1} = \Theta^+$, мы можем переписать равенство (21.43) в виде

$$\sum_i \bar{\theta}_{mi} O_{\alpha ij} = \pm \sum_n \bar{\theta}_{nj} O_{\alpha nm} \quad (21.44)$$

или, в силу (21.42),

$$\sum_i \bar{\theta}_{mi} O_{\alpha ij} = \pm \kappa \sum_n \bar{\theta}_{jn} O_{\alpha nm}. \quad (21.45)$$

Если вместо матричных элементов $O_{\alpha ij}$ мы введем величины

$$\bar{O}_{\alpha mj} = \sum_i \bar{\theta}_{mi} O_{\alpha ij}, \quad (21.46)$$

то из (21.45) получим

$$\bar{O}_{\alpha mj} = \pm \kappa \bar{O}_{\alpha jm}. \quad (21.47)$$

Найдем правила отбора для величин $\bar{O}_{\alpha mj}$. Мы показали, что представление, по которому преобразуются волновые функции ψ_i , можно считать вещественным. Поэтому по значкам m, j величины $\bar{O}_{\alpha mj}$

преобразуются, как компоненты тензора. В силу (21.47) мы получаем, что для четного числа электронов ($\kappa = 1$) и для оператора \bar{O}_α , коммутирующего с оператором $\hat{\Theta}$, или для нечетного числа электронов ($\kappa = -1$) и для оператора \bar{O}_α , антикоммутирующего с оператором $\hat{\Theta}$, величины $\bar{O}_{\alpha m j}$ являются компонентами симметричного тензора; для нечетного числа электронов и для оператора \bar{O}_α , коммутирующего с оператором $\hat{\Theta}$, или для четного числа электронов и для оператора \bar{O}_α , антикоммутирующего с оператором $\hat{\Theta}$, — компонентами антисимметричного тензора. Следовательно, представление, по которому преобразуются величины $\bar{O}_{\alpha m j}$, в первом случае имеет вид

$$[D^2] \times D', \quad (21.48)$$

во втором случае — вид

$$\{D^2\} \times D'. \quad (21.49)$$

Теперь мы можем сделать следующее заключение. Для того чтобы величины $\bar{O}_{\alpha i j}$ были отличны от нуля, необходимо, чтобы в представлениях (21.48), (21.49) содержалось тождественное представление. Эти же правила отбора остаются в силе и для матричных элементов $O_{\alpha i j}$, которые связаны с величинами $\bar{O}_{\alpha m j}$ унитарным преобразованием.

В качестве примера использования правил отбора, установленных в этом пункте, мы рассмотрим вопрос об устойчивости симметричных конфигураций молекул.

5. Теорема Яна—Теллера

Рассмотрим уравнение Шрёдингера для волновой функции электронного состояния молекулы:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \right] \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E(\mathbf{R}) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}). \quad (21.50)$$

В этом уравнении \mathbf{R} обозначает координаты ядер, а \mathbf{r} — координаты электронов. Собственное значение электронной энергии $E(\mathbf{R})$ является функцией координат ядер. Минимум этого собственного значения соответствует равновесной конфигурации ядер для рассматриваемого электронного состояния. Предположим, что нам неизвестно пока точное положение равновесия ядер. Выберем в качестве нулевого приближения некоторую симметричную конфигурацию $\mathbf{R}^{(1)}$ и будем предполагать, что эта конфигурация близка к равновесной конфигурации $\mathbf{R}^{(0)}$, т. е. $\mathbf{R}_i^{(0)} = \mathbf{R}_i^{(1)} + \Delta \mathbf{R}_i$, где $\Delta \mathbf{R}_i$ — малое смещение i -го ядра. Равновесную конфигурацию $\mathbf{R}^{(0)}$ будем искать с помощью

теории возмущений. Уравнение Шрёдингера (21.50) для конфигурации $\mathbf{R}^{(0)}$ можно записать в виде

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r + V(\mathbf{r}, \mathbf{R}^{(1)}) + W(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (21.51)$$

где

$$W(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}, \mathbf{R}^{(0)}) - V(\mathbf{r}, \mathbf{R}^{(1)}) \cong \sum_i \left(\frac{\partial V(\mathbf{r}, \mathbf{R})}{\partial \mathbf{R}_i} \right)_{\mathbf{R}^{(1)}} \Delta \mathbf{R}_i \quad (21.52)$$

можно рассматривать как возмущение.

Будем обозначать декартовы составляющие смещений ядер относительно конфигурации $\mathbf{R}^{(1)}$ через x_β , где значок β нумерует как декартовы оси, так и ядра. Мы знаем (см. главу V), что смещения x_β преобразуются по представлению группы симметрии G конфигурации $\mathbf{R}^{(1)}$:

$$x'_\alpha = \sum_\beta D_{\alpha\beta}(g) x_\beta. \quad (21.53)$$

Перейдем теперь от смещений x_β к симметризованным смещениям q_β , которые преобразуются по неприводимым представлениям группы G :

$$q_\beta = \sum_\alpha b_{\alpha\beta} x_\alpha. \quad (21.54)$$

Возмущение W теперь можно записать через координаты q_α :

$$W = \sum_\alpha \left(\frac{\partial V}{\partial q_\alpha} \right)_{q=0} q_\alpha. \quad (21.55)$$

Мы можем теперь найти поправку к собственному значению энергии $E(\mathbf{R}^{(1)})$, обусловленную возмущением W . Пусть собственное значение $E(\mathbf{R}^{(1)})$ s -кратно вырождено и соответствующие ему собственные функции преобразуются по некоторому неприводимому представлению D группы симметрии G конфигурации $\mathbf{R}^{(1)}$. Обозначим эти функции через $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_s$ и будем считать их ортонормированными. Мы знаем, что поправки к энергии в первом порядке теории возмущений определяются корнями векового уравнения

$$|w_{ik} - \lambda \delta_{ik}| = 0. \quad (21.56)$$

В нашем случае

$$w_{ik} = \int \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \sum_\alpha \left(\frac{\partial V}{\partial q_\alpha} \right)_0 q_\alpha \psi_k(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (21.57)$$

Мы видим, что корни уравнения (21.56) будут функциями величин q_α , значения которых для равновесной конфигурации выбираются из условия минимума энергии $E(q)$. Обращая равенства (21.54) с найденными значениями q_α , мы определим смещения ядер и, следовательно, возможные равновесные конфигурации.

В главе VI мы построили координаты q_α для молекулы, обладающей кубической симметрией, и выяснили их геометрический смысл. В частности, мы видели, что только координата q_1 , преобразующаяся по тождественному представлению точечной группы, соответствует такому изменению положений ядер, которое не изменяет симметрии молекулы.

Теперь найдем на основании теоретико-групповых соображений критерий равенства нулю матричных элементов

$$\int \bar{\psi}_i(\mathbf{r}) \left(\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial q_\alpha} \right)_0 \psi_k(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \quad (21.58)$$

Для этого сначала выясним закон преобразования функций $\left(\frac{\partial V(\mathbf{r})}{\partial q_\alpha} \right)_0 \equiv W_\alpha(\mathbf{r})$, когда к электронным координатам применяется преобразование из точечной группы G . Рассмотрим совокупность производных $\left(\frac{\partial V}{\partial q_\alpha} \right)_0$ по тем координатам q_α , которые преобразуются по некоторому неприводимому представлению Γ группы G . Покажем, что эти производные преобразуются по тому же представлению Γ . С этой целью заметим, что возмущение W инвариантно относительно любого одновременного ортогонального преобразования радиусов-векторов ядер и электронов. Поэтому мы имеем

$$W = \sum_\alpha W_\alpha(\mathbf{r}) q_\alpha = \sum_\beta W_\beta(\mathbf{r}') q'_\beta, \quad (21.59)$$

где

$$\mathbf{r}' = g\mathbf{r}, \quad q'_\beta = \sum_\alpha \Gamma_{\beta\alpha}(g) q_\alpha. \quad (21.60)$$

Таким образом, мы получаем

$$\sum_\beta W_\beta(\mathbf{r}') q'_\beta = \sum_{\beta,\alpha} W_\beta(\mathbf{r}') \Gamma_{\beta\alpha} q_\alpha = \sum_\alpha W_\alpha(\mathbf{r}) q_\alpha, \quad (21.61)$$

откуда

$$W_\alpha(\mathbf{r}) = \sum_\beta \Gamma_{\beta\alpha} W_\beta(g\mathbf{r}). \quad (21.62)$$

Делая подстановку $\mathbf{r} \rightarrow q^{-1}\mathbf{r}$, мы окончательно получаем

$$W_{\alpha}(g^{-1}\mathbf{r}) = \sum_{\beta} \Gamma_{\beta\alpha}(g) W_{\beta}(\mathbf{r}), \quad (21.63)$$

что и требовалось доказать.

Так как гамильтониан нашей задачи не содержит спиновых операторов, то мы можем воспользоваться правилами отбора, сформулированными на с. 234. Оператор возмущения W_{α} вещественный. Поэтому можно ожидать, что матричный элемент (21.58) будет отличен от нуля, если в представлении $[D^2]$ содержится представление Γ . Если электронное состояние не вырождено, т. е. представление D одномерно, то представление $[D^2]$ является тождественным и возможны только полносимметричные смещения, которые не изменяют симметрии молекулы. Если же электронное состояние вырождено, то, как показало детальное исследование всех возможных типов симметричных молекул, всегда можно найти неполносимметричное смещение, которое преобразуется по представлению, содержащемуся в $[D^2]$ ¹⁾. Ясно, что всегда можно так выбрать значение этого смещения, чтобы соответствующая поправка к энергии была отрицательной. Действительно, если для некоторого значения $q = \Delta$ она положительна, то для $q = -\Delta$ она должна быть отрицательной. Отсюда следует, что если для некоторой симметричной конфигурации ядер электронное состояние вырождено, то молекула «стремится понизить свою симметрию так, чтобы это вырождение снималось» (*теорема Яна—Теллера*).

Упражнения

21.1. Найти правила отбора для поглощения и излучения света атомами в приближении $j-j$ -связи.

21.2. Доказать, что тетраэдрическая конфигурация молекулы CH_4 для вырожденных электронных состояний является неустойчивой.

¹⁾ Iahn H. A., Teller E. Proc. Roy. Soc. A, 161 (1937), 220. Исключение составляют лишь линейные молекулы.

Глава XXII

Группа Лоренца и ее неприводимые представления

Инвариантность уравнений движения относительно преобразований Лоренца является основным требованием специальной теории относительности. Совокупность преобразований Лоренца образует группу. Данная глава посвящена изучению структуры группы Лоренца и классификации ее неприводимых представлений.

1. Общая группа Лоренца

Согласно теории относительности пространственные координаты и время в двух равномерно движущихся друг относительно друга системах отсчета связаны линейным преобразованием, которое мы будем называть собственным преобразованием Лоренца. Если время и пространственные координаты в одной системе отсчета обозначить соответственно через x_0, x_1, x_2, x_3 , а в другой через y_0, y_1, y_2, y_3 , то мы можем написать

$$y_\alpha = \sum_{\beta=0}^3 \Lambda_{\alpha\beta} x_\beta, \quad (22.1)$$

где $||\Lambda_{\alpha\beta}||$ — матрица преобразования Лоренца. Для установления некоторых свойств этой матрицы используем тот факт, что преобразование Лоренца оставляет инвариантной квадратичную форму

$$\varphi = -x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \quad (22.2)$$

Если четырехмерный вектор с составляющими x_0, x_1, x_2, x_3 представить в виде матрицы, состоящей из одного столбца:

$$X = \begin{pmatrix} x_0 \\ x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix},$$

то квадратичную форму (22.2) можно записать в виде

$$\varphi = X^* F X, \quad (22.3)$$

¹⁾ Скорость света принята равной единице.

где звездочка обозначает транспонированную матрицу, а

$$F = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (22.4)$$

Инвариантность квадратичной формы (22.2) относительно преобразования Лоренца Λ можно теперь записать следующим образом:

$$X^* F X = Y^* F Y, \quad (22.5)$$

где

$$Y = \Lambda X. \quad (22.6)$$

Подставив (22.6) в (22.5), получим

$$(\Lambda X)^* F \Lambda X = X^* \Lambda^* F \Lambda X = X^* F X. \quad (22.7)$$

Следовательно,

$$\Lambda^* F \Lambda = F. \quad (22.8)$$

Мы увидим сейчас, что условию (22.8) удовлетворяет более широкий класс линейных вещественных преобразований, чем собственные преобразования Лоренца. Все такие преобразования мы будем называть *общими* преобразованиями Лоренца. Легко проверить, что общие преобразования Лоренца образуют группу — общую группу Лоренца L .

Вычислим определитель правой и левой частей равенства (22.8). Тогда получим

$$(\det \Lambda)^2 = 1, \quad (22.9)$$

откуда

$$\det \Lambda = \pm 1. \quad (22.10)$$

Таким образом, общую группу Лоренца можно разбить на две части: L_+ — совокупность матриц с определителем 1, и L_- — совокупность матриц с определителем, равным -1 .

Ясно, что совокупность L_+ сама образует группу, а совокупность L_- группы не образует.

Равенство элементов, стоящих на пересечении первой строки и первого столбца матрицы в формуле (22.8), дает

$$\Lambda_{00}^2 - \Lambda_{10}^2 - \Lambda_{20}^2 - \Lambda_{30}^2 = 1. \quad (22.11)$$

Аналогично из равенства

$$\Lambda F \Lambda^* = F, \quad (22.12)$$

которое можно получить из (22.8) с помощью транспонирования матриц, найдем

Из (22.11) (или из (22.13)) следует, что

$$\Lambda_{00}^2 \geq 1, \quad (22.14)$$

и, значит, или $\Lambda_{00} \geq 1$ или $\Lambda_{00} \leq -1$. По этому признаку каждую из совокупностей L_+ и L_- можно в свою очередь разбить на две совокупности. Таким образом, общая группа Лоренца разбивается на четыре совокупности:

L_+^+	L_+^-	L_-^+	L_-^-
$\Lambda_{00} \geq 1$	$\Lambda_{00} \leq -1$	$\Lambda_{00} \geq 1$	$\Lambda_{00} \leq -1$
$\det \Lambda = 1$	$\det \Lambda = 1$	$\det \Lambda = -1$	$\det \Lambda = -1$

Ясно, что эти совокупности нельзя связать друг с другом путем непрерывного изменения элементов матрицы Лоренца. Совокупность L_+^+ сама по себе образует группу. Доказательство основано на следующем свойстве: матрицы, для которых $\Lambda_{00} \geq 1$, образуют группу. Действительно, пусть Λ и $\tilde{\Lambda}$ — две такие матрицы. Интересующий нас элемент матрицы $\Lambda\tilde{\Lambda}$ равен

$$\{\Lambda\tilde{\Lambda}\}_{00} = \Lambda_{00}\tilde{\Lambda}_{00} + \Lambda_{01}\tilde{\Lambda}_{10} + \Lambda_{02}\tilde{\Lambda}_{20} + \Lambda_{03}\tilde{\Lambda}_{30}. \quad (22.15)$$

Применяя неравенство Шварца и используя формулы (22.11) и (22.13), мы можем написать

$$\begin{aligned} (\Lambda_{01}\tilde{\Lambda}_{10} + \Lambda_{02}\tilde{\Lambda}_{20} + \Lambda_{03}\tilde{\Lambda}_{30}) &\leq \\ &\leq (\Lambda_{01}^2 + \Lambda_{02}^2 + \Lambda_{03}^2)(\tilde{\Lambda}_{10}^2 + \tilde{\Lambda}_{20}^2 + \tilde{\Lambda}_{30}^2) < \Lambda_{00}^2\tilde{\Lambda}_{00}^2. \end{aligned} \quad (22.16)$$

Отсюда следует, что $\{\Lambda\tilde{\Lambda}\}_{00} > 0$. Так как матрица $\Lambda\tilde{\Lambda}$ принадлежит общей группе Лоренца, то окончательно мы получаем

$$\{\Lambda\tilde{\Lambda}\}_{00} \geq 1, \quad (22.17)$$

что и требовалось доказать.

Можно показать, что любые две матрицы, принадлежащие одной совокупности, могут быть переведены непрерывным образом друг в друга. Отсюда следует, в частности, что группа L_+^+ , содержащая единичную матрицу, содержит также все собственные преобразования Лоренца. Группу L_+^+ называют собственной группой Лоренца. Если ввести в рассмотрение следующие три матрицы, принадлежащие общей группе Лоренца,

$$F = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

то общую группу Лоренца можно будет разложить на следующие сопряженные совокупности:

$$L_+^+, FL_+^+, SL_+^+, IL_+^+.$$

Очевидно, что последние три совокупности совпадают с введенными нами ранее совокупностями L_-^-, L_+^-, L_+^- .

2. Связь группы Лоренца с группой четырехмерных вращений

Покажем теперь, что группа Лоренца в окрестности единичного элемента однозначно связана с группой четырехмерных вращений $O^+(4)$. В дальнейшем это поможет нам получить все конечномерные неприводимые представления собственной группы Лоренца.

Найдем сначала число параметров или число независимых элементов матрицы преобразования Лоренца. Мы видели, что матрицы Лоренца должны удовлетворять равенству (22.8). Так как матрица $\Lambda^*F\Lambda$ симметрична: $(\Lambda^*F\Lambda)^* = \Lambda^*F\Lambda$, то условие (22.8) эквивалентно 10 условиям, наложенным на матричные элементы. Отсюда следует, что из 16 элементов матрицы Лоренца независимых только 6. Поэтому преобразование Лоренца является шестипараметрическим. Этими параметрами могут быть три составляющих скорости относительного движения и три эйлеровых угла поворота, определяющих взаимную ориентацию систем координат. Однако в дальнейшем в качестве независимых параметров нам будет удобнее выбрать углы поворотов в двумерных плоскостях (x_0x_1) , (x_0x_2) , (x_0x_3) , (x_1x_2) , (x_1x_3) , (x_2x_3) . Эти параметры мы обозначим через $\varphi_{01}, \varphi_{02}, \varphi_{03}; \psi_{12}, \psi_{13}, \psi_{23}$, а соответствующие им инфинитезимальные матрицы — через $B_{01}, B_{02}, B_{03}; B_{12}, B_{13}, B_{23}$.

Введем в рассмотрение группу четырехмерных вращений $O^+(4)$. Координаты пространства, в котором действуют преобразования группы $O^+(4)$, также будем обозначать через x_0, x_1, x_2, x_3 . В отличие от (22.1) для этой группы инвариантом будет положительно определенная квадратичная форма

$$x_0^2 + x_1^2 + x_2^2 + x_3^2. \quad (22.18)$$

Рассмотрим произвольное преобразование из группы четырехмерных вращений, оставляющее неизменными координаты x_2 и x_3 . Очевидно, что это обычное вращение в плоскости $(x_0 x_1)$, которое может

быть представлено в виде

$$x'_0 = x_0 \cos \varphi - x_1 \sin \varphi, \quad x'_1 = x_0 \sin \varphi + x_1 \cos \varphi. \quad (22.19)$$

Рассмотрим равенства (22.19) при мнимых значениях переменных x_0 и φ , заменив φ на $i\varphi$, x_0 на ix_0 , x'_0 на ix'_0 . Тогда вместо (22.19) мы получим

$$ix'_0 = ix_0 \cos i\varphi - x_1 \sin i\varphi, \quad x'_1 = ix_0 \sin i\varphi + x_1 \cos i\varphi \quad (22.20)$$

или

$$x'_0 = x_0 \operatorname{ch} \varphi + x_1 \operatorname{sh} \varphi, \quad x'_1 = x_0 \operatorname{sh} \varphi + x_1 \operatorname{ch} \varphi. \quad (22.21)$$

Если преобразование (22.19) имеет инвариант

$$x_0^2 + x_1^2 = \operatorname{inv}, \quad (22.22)$$

то инвариант преобразования (22.21) получается из (22.22) заменой x_0 на ix_0 :

$$-x_0^2 + x_1^2 = \operatorname{inv}. \quad (22.23)$$

Но эта квадратичная форма совпадает с инвариантом преобразования Лоренца в плоскости $(x_0 x_1)$. Поэтому мы можем утверждать, что преобразование (22.21) является двумерным преобразованием Лоренца. Аналогичным образом можно получить связь между преобразованиями Лоренца и преобразованиями группы $O^+(4)$ в плоскостях $(x_0 x_2)$ и $(x_0 x_3)$. Что же касается преобразований в плоскостях $(x_1 x_2)$, $(x_2 x_3)$, $(x_1 x_3)$, то они для обеих групп совпадают, образуя группу $O^+(3)$.

Таким образом, мы видим, что преобразования группы Лоренца получаются из четырехмерных вращений заменой вещественных параметров поворотов в двумерных плоскостях $(x_0 x_i)$ ($i = 1, 2, 3$) на чисто мнимые величины и одновременно заменой координат x_0 на ix_0 . Поскольку матричные элементы матриц четырехмерных вращений являются периодическими функциями, то взаимно однозначное соответствие между преобразованиями из группы Лоренца и группы $O^+(4)$ имеет место только в определенной окрестности единичного элемента. Если матрицу четырехмерного вращения обозначить через $O(\varphi_{01}, \varphi_{02}, \varphi_{03}; \psi_{12}, \psi_{13}, \psi_{23})$, то соответствующая матрица группы Лоренца может быть представлена в виде

$$\Lambda(\varphi_{01}, \varphi_{02}, \varphi_{03}; \psi_{12}, \psi_{13}, \psi_{23}) = V^{-1} O(i\varphi_{01}, i\varphi_{02}, i\varphi_{03}; \psi_{12}, \psi_{13}, \psi_{23}) V, \quad (22.24)$$

где

$$V = \begin{pmatrix} i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

3. Перестановочные соотношения для инфинитезимальных матриц

Получим перестановочные соотношения для инфинитезимальных матриц группы Лоренца, соответствующих поворотам в двумерных плоскостях. Для этого мы сначала напишем перестановочные соотношения для инфинитезимальных матриц группы $O^+(4)$, а затем, используя установленную нами связь (22.24), найдем перестановочные соотношения для группы Лоренца.

В группе четырехмерных вращений можно выделить четыре подгруппы трехмерных вращений, которые действуют в пространствах R_{ikj} с координатами x_i, x_k, x_j :

$$\begin{aligned} R_{012} &: x_0, x_1, x_2; \\ R_{123} &: x_1, x_2, x_3; \\ R_{230} &: x_2, x_3, x_0; \\ R_{301} &: x_3, x_0, x_1. \end{aligned}$$

Поэтому инфинитезимальные матрицы группы $O^+(4)$, которые мы обозначим через $A_{01}, A_{02}, A_{03}, A_{12}, A_{13}, A_{23}$ ($A_{ik} = -A_{ki}$), можно одновременно рассматривать как инфинитезимальные матрицы четырех групп трехмерных вращений:

$$\begin{aligned} R_{012} &: A_{12}, A_{20}, A_{01}; \\ R_{123} &: A_{23}, A_{31}, A_{12}; \\ R_{230} &: A_{30}, A_{02}, A_{23}; \\ R_{301} &: A_{01}, A_{13}, A_{30}. \end{aligned}$$

Для каждой из выписанных здесь троек инфинитезимальных матриц мы имеем перестановочные соотношения типа (см. главу XI)

$$A_i A_k - A_k A_i \equiv [A_i, A_k] = A_j. \quad (22.25)$$

Таким образом, мы получаем 12 перестановочных соотношений. Остальные три перестановочных соотношения имеют вид

$$[A_{01}, A_{23}] = 0, \quad [A_{12}, A_{30}] = 0, \quad [A_{02}, A_{13}] = 0, \quad (22.26)$$

так как матрицы, действующие на разные пары координат, должны коммутировать.

Теперь легко найти перестановочные соотношения для инфинитезимальных матриц группы Лоренца. Согласно (22.24) мы получаем следующую связь между инфинитезимальными матрицами обеих групп:

$$\left. \begin{aligned} \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \varphi} \right)_0 &= iV^{-1} \left(\frac{\partial O}{\partial \varphi} \right)_0 V, & \varphi &= \varphi_{01}, \varphi_{02}, \varphi_{03}; \\ \left(\frac{\partial \Lambda}{\partial \psi} \right)_0 &= V^{-1} \left(\frac{\partial O}{\partial \psi} \right)_0 V, & \psi &= \psi_{12}, \psi_{13}, \psi_{23}. \end{aligned} \right\} \quad (22.27)$$

Преобразование подобия не изменяет перестановочных соотношений. Поэтому перестановочные соотношения для инфинитезимальных матриц группы Лоренца $B_{01}, B_{02}, B_{03}, B_{12}, B_{13}, B_{23}$ будут такими же, как для матриц $iA_{01}, iA_{02}, iA_{03}, A_{12}, A_{13}, A_{23}$. Это свойство будет, конечно, выполняться и для инфинитезимальных матриц представлений этих групп, для которых мы сохраним обозначения B_{ik} и A_{ik} .

4. Неприводимые представления

Мы уже знаем, что нахождение неприводимых представлений непрерывной группы сводится к определению инфинитезимальных матриц этих представлений.

Покажем, что задачу о нахождении конечномерных неприводимых представлений группы Лоренца можно привести к аналогичной задаче для группы $O^+(4)$. Действительно, если нам будут известны инфинитезимальные матрицы неприводимых представлений группы $O^+(4)$, то соответствующие инфинитезимальные матрицы для группы Лоренца либо будут совпадать с ними (для пространственных вращений), либо будут отличаться множителем i (для преобразований, связывающих временную и пространственные координаты).

Для определения инфинитезимальных матриц неприводимых представлений группы $O^+(4)$ поступим следующим образом. Составим матрицы

$$\left. \begin{aligned} \mu_1 &= \frac{1}{2}(A_{23} + A_{01}), & \tau_1 &= \frac{1}{2}(A_{23} - A_{01}), \\ \mu_2 &= \frac{1}{2}(A_{31} + A_{02}), & \tau_2 &= \frac{1}{2}(A_{31} - A_{02}), \\ \mu_3 &= \frac{1}{2}(A_{12} + A_{03}), & \tau_3 &= \frac{1}{2}(A_{12} - A_{03}). \end{aligned} \right\} \quad (22.28)$$

Легко проверить, используя перестановочные соотношения для матриц A_{ik} , что матрицы μ и τ удовлетворяют таким же перестановочным соотношениям, что и инфинитезимальные матрицы группы трехмерных вращений, т. е.

$$[\mu, \mu] = \mu, \quad [\tau, \tau] = \tau. \quad (22.29)$$

Кроме того, матрицы μ_k и τ_i коммутируют друг с другом. Мы удовлетворим этим требованиям, если в качестве матриц μ_k и τ_i возьмем

$$\left. \begin{aligned} \mu_i &= M_i \times E_T, \\ \tau_i &= E_M \times T_i, \end{aligned} \right\} \quad (22.30)$$

где M_i и T_i — инфинитезимальные матрицы двух представлений группы трехмерных вращений, а E_T и E_M — единичные матрицы этих представлений. На основании формулы (22.30) мы можем заключить,

что группа четырехмерных вращений изоморфна прямому произведению двух групп трехмерных вращений. Так как все неприводимые представления прямого произведения двух групп могут быть образованы композицией неприводимых представлений групп-сомножителей (см. главу IV), то неприводимые представления группы $O^+(4)$ являются композицией неприводимых представлений двух групп трехмерных вращений.

Мы знаем, что каждое неприводимое представление группы вращений однозначно определяется своим весом j , который может быть равен неотрицательному целому или полуцелому числу. Поэтому неприводимые представления группы $O^+(4)$ будут задаваться двумя числами j и j' , каждое из которых может быть целым или полуцелым. Порядок такого представления равен произведению порядков неприводимых представлений групп трехмерных вращений, т. е. равен

$$(2j + 1)(2j' + 1).$$

Инфинитезимальные матрицы *неприводимого* представления группы $O^+(4)$ будут определяться формулами (22.30), где вместо M_i и T_i надо подставить инфинитезимальные матрицы *неприводимых* представлений группы $O^+(3)$.

Если мы введем для инфинитезимальных матриц группы $O^+(4)$ новые обозначения:

$$\left. \begin{aligned} A_1^{(+)} &= A_{23}, & A_1^{(-)} &= A_{01}, \\ A_2^{(+)} &= A_{31}, & A_2^{(-)} &= A_{02}, \\ A_3^{(+)} &= A_{12}, & A_3^{(-)} &= A_{03}, \end{aligned} \right\} \quad (22.31)$$

то сможем написать

$$A_i^{(\pm)} = (M_i \times E_T \pm E_M \times T_i). \quad (22.32)$$

Для инфинитезимальных матриц неприводимых представлений группы Лоренца введем обозначения, аналогичные (22.31). Тогда мы получаем окончательно следующие выражения:

$$\left. \begin{aligned} B_i^{(+)} &= (M_i \times E_T + E_M \times T_i), \\ B_i^{(-)} &= i(M_i \times E_T - E_M \times T_i). \end{aligned} \right\} \quad (22.33)$$

Таким образом, найденные нами неприводимые представления собственной группы Лоренца определяются парой чисел j, j' , каждое из которых может быть целым или полуцелым. Мы будем обозначать эти представления через $D^{(jj')}$. Порядок представления $D^{(jj')}$ равен $(2j + 1)(2j' + 1)$. Инфинитезимальные матрицы этого представления определяются формулами (22.33), в которых M_i и T_i —

инфинитезимальные матрицы неприводимых представлений группы вращений с весами j и j' соответственно.

Обратим внимание на то, что из-за наличия множителя i во второй формуле (22.33) инфинитезимальные матрицы $B_i^{(-)}$ не являются антиэрмитовыми и, следовательно, представления $D^{(jj')}$ не унитарны. Неунитарность конечномерных представлений группы Лоренца связана с тем, что группа Лоренца не является компактной. Кроме конечномерных неприводимых представлений группа Лоренца имеет также бесконечномерные унитарные неприводимые представления. В квантовой механике эти представления имеют ограниченную область применения (см. главу XIV), и мы их рассматривать не будем.

5. Прямое произведение неприводимых представлений группы Лоренца

Для рассмотрения этого вопроса мы опять воспользуемся установленным соответствием представлений группы Лоренца с представлениями группы $O^+(4)$. Условимся неприводимые представления группы $O^+(4)$, соответствующие неприводимым представлениям $D^{(jj')}$ группы Лоренца, обозначать через $\bar{D}^{(jj')}$.

Мы видели, что неприводимые представления группы $O^+(4)$ можно выразить как прямое произведение неприводимых представлений двух групп трехмерных вращений:

$$\bar{D}^{(jj')} = D^{(j)}(g) \times D^{(j')}(g'), \quad (22.34)$$

где g и g' — элементы, принадлежащие двум независимым группам трехмерных вращений. Найдем разложение прямого произведения $\bar{D}^{(j_1 j'_1)} \times \bar{D}^{(j_2 j'_2)}$ на неприводимые части. Согласно (22.34) мы можем написать

$$\bar{D}^{(j_1 j'_1)} \times \bar{D}^{(j_2 j'_2)} = D^{(j_1)}(g) \times D^{(j'_1)}(g') \times D^{(j_2)}(g) \times D^{(j'_2)}(g'). \quad (22.35)$$

Если мы будем рассматривать равенство матриц представления с точностью до преобразования подобия, то в правой части (22.35) мы можем переставить порядок множителей. Используя правило Клебша—Гордана для групп $O^+(3)$ (см. главу XII), мы получим

$$\begin{aligned} \bar{D}^{(j_1 j'_1)} \times \bar{D}^{(j_2 j'_2)} &= (D^{(j_1)}(g) \times D^{(j_2)}(g)) \times (D^{(j'_1)}(g') \times D^{(j'_2)}(g')) = \\ &= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} D^{(j)}(g) \times \sum_{j'=|j'_1-j'_2|}^{j'_1+j'_2} D^{(j')}(g'). \end{aligned} \quad (22.36)$$

Но согласно (22.34) полученный результат можно привести следующему виду:

$$\bar{D}^{(j_1 j'_1)} \times \bar{D}^{(j_2 j'_2)} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{j'=|j'_1-j'_2|}^{j'_1+j'_2} \bar{D}^{(j j')}. \quad (22.37)$$

Ясно, что в силу установленного соответствия между неприводимыми представлениями группы Лоренца и группы $O^+(4)$ мы получим аналогичное разложение для прямого произведения двух неприводимых конечномерных представлений группы Лоренца.

Упражнения

22.1. Доказать, что произвольное собственное преобразование Лоренца может быть представлено в виде произведения шести однопараметрических преобразований в двумерных плоскостях.

22.2. Написать явное выражение для инфинитезимальных матриц неприводимых представлений:

$$D^{(0 \frac{1}{2})}, \quad D^{(\frac{1}{2} 0)}, \quad D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})}, \quad D^{(\frac{1}{2} \frac{3}{2})}.$$

22.3. На какие неприводимые представления группы трехмерных вращений может быть разложено представление $D^{(j j')}$?

22.4. Найти разложение на неприводимые представления

$$D^{(\frac{1}{2} 0)} \times D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})}, \quad D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})} \times D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})}.$$

22.5. Доказать, что четырехмерный вектор (x_0, x_1, x_2, x_3) преобразуется по неприводимому представлению $D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})}$.

Глава XXIII

Уравнение Дирака

В качестве приложения теории представлений группы Лоренца мы рассмотрим релятивистски инвариантное волновое уравнение для свободной частицы со спином $\frac{1}{2}$ — уравнение Дирака. Так как волновая функция в этом случае является многокомпонентной величиной, которая при преобразовании Лоренца должна преобразовываться по некоторому представлению группы Лоренца, то это уравнение фактически представляет собой систему линейных дифференциальных уравнений. Мы предполагаем, что читатель знаком с теорией уравнения Дирака, обычно излагаемой в курсах квантовой механики. Поэтому в этой главе мы ограничимся исследованием лишь трансформационных свойств его решений. Рассмотрим сначала общие свойства релятивистски инвариантных уравнений.

1. Релятивистски инвариантные уравнения

Систему линейных дифференциальных уравнений первого порядка, описывающих состояние свободной частицы, можно записать в виде

$$L_0 \frac{\partial \psi}{\partial x_0} + L_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + L_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + L_3 \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + i\kappa \psi = 0, \quad (23.1)$$

где $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \dots \end{pmatrix}$ — многокомпонентная волновая функция переменных x_0, x_1, x_2, x_3 , а L_0, \dots, L_3 и κ — некоторые матрицы, элементы которых не зависят от координат и времени.

Рассмотрим условие инвариантности системы (23.1) относительно преобразований Лоренца. Для этого запишем ее в новой (штрихованной) системе координат. Пусть X и $X' = \Lambda X$ — одна и та же пространственно-временная точка в двух рассматриваемых системах. Закон преобразования волновой функции при переходе к штрихованной системе координат имеет вид

$$\psi'(x') = D(\Lambda)\psi(x) \quad (23.2)$$

или

$$\psi'_\alpha(x') = \sum_\beta D_{\alpha\beta}(\Lambda)\psi_\beta(x).$$

Покажем, что матрицы $D(\Lambda)$ образуют представление группы Лоренца. Действительно, при последовательном применении двух преобразований Лоренца мы получим

$$\begin{aligned}\psi''_7(x'') &= \sum_{\delta} D_{\gamma\delta}(\Lambda') \psi'_\delta(x') = \\ &= \sum_{\beta, \delta} D_{\gamma\delta}(\Lambda') D_{\delta\beta}(\Lambda) \psi_\beta(x) = \sum_{\beta} D_{\gamma\beta}(\Lambda'') \psi_\beta(x).\end{aligned}\quad (23.3)$$

Запишем уравнение (23.1) в штрихованной системе координат. Для этого, применяя обратное преобразование, найдем

$$\psi(x) = D^{-1}(\Lambda) \psi'(x').\quad (23.4)$$

Далее, мы имеем

$$x'_i = \sum_{k=0}^3 \Lambda_{ik} x_k\quad (23.5)$$

и, следовательно,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} = \sum_{k=0}^3 \Lambda_{ki} \frac{\partial}{\partial x'_k}.\quad (23.6)$$

Подставляя (23.4) и (23.6) в (23.1), получим

$$\sum_{i, k=0}^3 L_i D^{-1} \frac{\partial \psi'}{\partial x'_k} \Lambda_{ki} + i\kappa D^{-1} \psi' = 0.\quad (23.7)$$

Матрицу κ мы будем считать неособой. Поэтому, не нарушая общности, можно положить ее равной матрице, кратной единичной. Действительно, мы всегда можем умножить обе части уравнения (23.1) на κ^{-1} . Тогда, умножая (23.7) слева на матрицу D , получим

$$\sum_{k, i=0}^3 \Lambda_{ki} D L_i D^{-1} \frac{\partial \psi'}{\partial x'_k} + i\kappa \psi' = 0.\quad (23.8)$$

Из требования инвариантности уравнения (23.1) относительно преобразования Лоренца следует, что

$$L_k = \sum_{i=0}^3 \Lambda_{ki} D L_i D^{-1}\quad (23.9)$$

или

$$D^{-1} L_k D = \sum_{i=0}^3 \Lambda_{ki} L_i.\quad (23.10)$$

Имея в виду это равенство, говорят, что матрицы L_k преобразуются, как четырехмерный вектор. Формулы (23.9) дают нам условие инвариантности рассматриваемой системы дифференциальных уравнений.

Выясним, какой вид имеют простейшие релятивистски инвариантные системы (23.1), состоящие из минимального числа уравнений. Так как число уравнений равно числу компонент волновой функции, а последняя преобразуется по некоторому представлению группы Лоренца, то естественно начать исследование с уравнения, которое соответствует неприводимому представлению группы Лоренца минимальной размерности. Мы можем начать с тождественного одномерного представления $D^{(00)}$. Однако можно убедиться в том, что для этого представления невозможно написать релятивистски инвариантное уравнение типа (23.1). В самом деле, переноса член $i\kappa\psi$ в (23.1) в правую часть равенства, мы получим, что слева стоит величина, преобразующаяся по представлению $D^{(00)} \times D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})}$, в то время как правая часть преобразуется по представлению $D^{(00)1}$. Ясно, что равенство двух величин, преобразующихся по разным представлениям, невозможно. Для того чтобы можно было написать релятивистски инвариантную систему, решение которой преобразовывалось бы по представлению, содержащему тождественное, это представление должно было бы по крайней мере содержать еще неприводимое представление $D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})}$. В этом случае мы получили бы систему, состоящую из пяти уравнений. Исследуем теперь уравнение для волновой функции, преобразующейся по представлению $D^{(\frac{1}{2} 0)}$ второго порядка. Применяя то же рассуждение, что и выше, мы увидим, что слева в уравнении стоит величина, преобразующаяся по представлению

$$D^{(\frac{1}{2} 0)} \times D^{(\frac{1}{2} \frac{1}{2})} = D^{(1 \frac{1}{2})} \oplus D^{(0 \frac{1}{2})},$$

а справа — по представлению

$$D^{(\frac{1}{2} 0)},$$

т. е. в этом случае написать релятивистски инвариантную систему также невозможно. Однако мы не придем к противоречию, если будем считать, что волновая функция преобразуется по приводимому представлению $D^{(\frac{1}{2} 0)} \oplus D^{(0 \frac{1}{2})}$ четвертого порядка. Полагая в (23.10) $D = D^{(\frac{1}{2} 0)} \oplus D^{(0 \frac{1}{2})}$, можно однозначно определить матрицы L_i . Полученная система будет состоять из четырех уравнений для четырех компонент волновой функции. Эта система, записанная в виде уравнения (23.1), называется *уравнением Дирака*.

¹⁾ См. упр. 22.5.

2. Уравнение Дирака

Матрицы L_i могут быть найдены из условий (23.10) (см. [6], ч. 2, гл. 2). Мы сразу приведем явный вид уравнения Дирака:

$$L_0 \frac{\partial \psi}{\partial x_0} + L_1 \frac{\partial \psi}{\partial x_1} + L_2 \frac{\partial \psi}{\partial x_2} + L_3 \frac{\partial \psi}{\partial x_3} + i\kappa \psi = 0, \quad (23.11)$$

где

$$\left. \begin{aligned} L_0 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & L_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ L_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & L_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (23.12)$$

Четырехкомпонентная волновая функция (биспинор Дирака) $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$

преобразуется по представлению

$$D = D^{(\frac{1}{2} \ 0)} \oplus D^{(0 \ \frac{1}{2})},$$

т. е. две ее первые компоненты ψ_1, ψ_2 преобразуются по представлению $D^{(\frac{1}{2} \ 0)}$, а две последние ψ_3, ψ_4 — по представлению $D^{(0 \ \frac{1}{2})}$. Используя результат, полученный в предыдущей главе, можно написать явный вид инфинитезимальных операторов этих неприводимых представлений. Для инфинитезимальных операторов представления $D^{(\frac{1}{2} \ 0)}$ мы получим следующие выражения:

$$\left. \begin{aligned} B_1^{(+)} &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & B_1^{(-)} &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ B_2^{(+)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & B_2^{(-)} &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ B_3^{(+)} &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & B_3^{(-)} &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \right\} \quad (23.13)$$

а для инфинитезимальных операторов представления $D^{(0\frac{1}{2})}$ найдем:

$$\left. \begin{aligned} B_1^{(+)} &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & B_1^{(-)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ B_2^{(+)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, & B_2^{(-)} &= -\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ B_3^{(+)} &= \frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & B_3^{(-)} &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (23.14)$$

Если вместо «канонических» компонент волновой функции мы возьмем их линейные комбинации $\varphi_\alpha = \sum C_{\alpha\beta} \psi_\beta$, то уравнение для функции φ будет иметь вид (23.11) с матрицами $L'_i = CL_i C^{-1}$. Если, например, мы положим

$$\left. \begin{aligned} \varphi_1 &= \psi_2 + \psi_4, & \varphi_3 &= -\psi_2 + \psi_4, \\ \varphi_2 &= -(\psi_1 + \psi_3), & \varphi_4 &= \psi_1 - \psi_3, \end{aligned} \right\} \quad (23.15)$$

то получим уравнение с матрицами $L'_i = \gamma_i$, имеющими следующий явный вид:

$$\left. \begin{aligned} \gamma_0 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & \gamma_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \gamma_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \gamma_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \right\} \quad (23.16)$$

Запись уравнения Дирака с матрицами γ_i является более распространенной.

3. Комплексно сопряженный биспинор Дирака

Найдем закон преобразования комплексно сопряженной волновой функции $\bar{\psi}$. Ясно, что комплексно сопряженные функции преобразуются по представлению с комплексно сопряженными матрицами.

Несколько расширяя наше рассмотрение, мы можем сформулировать задачу следующим образом. Пусть задано некоторое неприводимое представление группы Лоренца $D^{(j_1 j_2)}$. Если вместо каждой матрицы этого представления мы возьмем комплексно сопряженную, то снова получим представление группы, которое будем называть комплексно сопряженным представлением $\bar{D}^{(j_1 j_2)}$. Очевидно, это представление

также будет неприводимым, т. е.

$$\bar{D}^{(j_1 j_2)} = D^{(j_1 j_2)}.$$

Требуется найти j_1' , j_2' . Для этого применим операцию комплексно-сопряжения к инфинитезимальным матрицам неприводимого представления $D^{(j_1 j_2)}$. Напомним, что инфинитезимальные матрицы группы Лоренца представимы в виде

$$\left. \begin{aligned} B_i^{(+)} &= \frac{1}{2} (M_i \times E_T + E_M \times T_i), \\ B_i^{(-)} &= \frac{i}{2} (M_i \times E_T - E_M \times T_i), \end{aligned} \right\} \quad (23.17)$$

где T_i и M_i — инфинитезимальные матрицы неприводимых представлений группы $O^+(3)$ соответственно с весами j_1 и j_2 , а E_M и E_T — единичные матрицы этих представлений. Применяя комплексное сопряжение, мы получим

$$\bar{B}_i^{(+)} = \frac{1}{2} (\bar{M}_i \times E_T + E_M \times \bar{T}_i), \quad (23.18)$$

$$\bar{B}_i^{(-)} = \frac{i}{2} (E_M \times \bar{T}_i - \bar{M}_i \times E_T). \quad (23.19)$$

Мы знаем, что перестановка множителей в прямом произведении матриц эквивалентна некоторому преобразованию подобия. Поэтому мы можем написать

$$\bar{B}_i^{(+)} = \frac{1}{2} U [E_T \times \bar{M}_i + \bar{T}_i \times E_M] U^{-1}, \quad (23.20)$$

$$\bar{B}_i^{(-)} = \frac{i}{2} U [\bar{T}_i \times E_M - E_T \times \bar{M}_i] U^{-1}. \quad (23.21)$$

Далее, мы знаем (см. главу XII, п. 4), что матрицы \bar{M}_i и \bar{T}_i с помощью преобразования подобия могут быть выражены через канонические матрицы M_i и T_i :

$$V_T T_i V_T^{-1} = \bar{T}_i, \quad V_M M_i V_M^{-1} = \bar{M}_i, \quad (23.22)$$

где матрицы V_T и V_M являются матрицами соответствующих представлений для поворота на 180° вокруг оси Oy . Подставляя (23.22) в (23.20) и (23.21), мы получим:

$$\left. \begin{aligned} \bar{B}_i^{(+)} &= \frac{1}{2} W [E_T \times M_i + T_i \times E_M] W^{-1}, \\ \bar{B}_i^{(-)} &= \frac{i}{2} W [T_i \times E_M - E_T \times M_i] W^{-1}, \end{aligned} \right\} \quad (23.23)$$

где

$$W = (E_T \times V_M) (V_T \times E_M) U. \quad (23.24)$$

Сравнивая (23.23) с (23.17), мы видим, что комплексно сопряженные инфинитезимальные матрицы $\bar{B}_i^{(+)}$ и $\bar{B}_i^{(-)}$ с точностью до преобразования подобия совпадают с каноническими инфинитезимальными операторами неприводимого представления $D^{(j_2 j_1)}$. Таким образом, мы получаем

$$j'_1 = j_2, \quad j'_2 = j_1. \quad (23.25)$$

Но кроме этого результата мы получили также явный вид преобразования, которое приводит комплексно сопряженные инфинитезимальные операторы к каноническому виду. Это преобразование определяется формулой (23.24). Таким образом, если $\{q_\alpha\}$ есть базис представления $D^{(j_1 j_2)}$, то $\{\bar{q}_\alpha\}$ есть базис представления $D^{(j_2 j_1)}$. Базис $\{\bar{q}_\alpha\}$ не является каноническим. Переход к каноническому базису $\{\bar{q}_\alpha\}$ осуществляется с помощью преобразования

$$\bar{q}_\alpha = \sum_{\beta} W_{\beta\alpha} \bar{q}_\beta. \quad (23.26)$$

Напишем преобразование (23.26) для представления $D^{(0 \frac{1}{2})}$. Так как базис этого представления одновременно является базисом неприводимого представления группы вращений, то согласно (12.52) мы имеем

$$\bar{q} = (2A_2)^{-1} \bar{q} \quad (23.27)$$

или

$$\bar{q}_{\frac{1}{2}} = \bar{q}_{-\frac{1}{2}}, \quad \bar{q}_{-\frac{1}{2}} = -\bar{q}_{\frac{1}{2}}.$$

Как мы показали, величины $\bar{q}_{\frac{1}{2}}$, $\bar{q}_{-\frac{1}{2}}$ образуют базис представления $D^{(\frac{1}{2} 0)}$. Наоборот, если $p_{\frac{1}{2}}$, $p_{-\frac{1}{2}}$ — базис представления $D^{(\frac{1}{2} 0)}$, то из (23.27) следует, что величины

$$\bar{p}_{\frac{1}{2}} = -\bar{p}_{-\frac{1}{2}}, \quad \bar{p}_{-\frac{1}{2}} = \bar{p}_{\frac{1}{2}} \quad (23.28)$$

образуют базис неприводимого представления $D^{(0 \frac{1}{2})}$. Эти результаты мы можем непосредственно применить для выяснения закона преобразования комплексно сопряженного биспинора Дирака. Мы получим

$$\bar{\psi}_1 = \psi'_4, \quad \bar{\psi}_2 = -\psi'_3, \quad \bar{\psi}_3 = \psi'_2, \quad \bar{\psi}_4 = -\psi'_1, \quad (23.29)$$

где ψ'_1 , ψ'_2 , ψ'_3 , ψ'_4 — четыре компоненты некоторого нового биспинора.

4. Инвариантная квадратичная форма

Составим теперь из компонент биспинора эрмитову квадратичную форму, инвариантную относительно собственных преобразований Лоренца:

$$\text{inv} = \sum_{i, k} \bar{\psi}_i \psi_k a_{ik} = \sum_{i, k} \psi'_i \psi_k b_{ik}. \quad (23.30)$$

Для того чтобы определить коэффициенты a_{ik} , заметим, что 1) тождественное представление группы Лоренца содержится только в прямом произведении одинаковых представлений, 2) квадратичная форма должна быть также инвариантной относительно группы вращений, 3) $a_{ik} = \bar{a}_{ki}$ (условие эрмитовости). Учитывая первые два условия, мы можем написать

$$\begin{aligned} \text{inv} &= a(\psi_1 \psi'_1 - \psi_2 \psi'_2) + b(\psi_3 \psi'_3 - \psi_4 \psi'_4) = \\ &= -a(\psi_1 \bar{\psi}_4 + \psi_2 \bar{\psi}_3) + b(-\psi_3 \bar{\psi}_2 - \psi_4 \bar{\psi}_1), \end{aligned} \quad (23.31)$$

где a и b — произвольные комплексные числа. Используя требование $a_{ik} = \bar{a}_{ki}$, получаем $a = \bar{b}$,

$$\text{inv} = a(\psi_1 \bar{\psi}_4 + \psi_2 \bar{\psi}_3) + \bar{a}(\psi_3 \bar{\psi}_2 + \psi_4 \bar{\psi}_1). \quad (23.32)$$

Как легко убедиться, эта форма не является положительно определенной, что находится в согласии с тем, что рассматриваемые представления группы Лоренца неунитарны. В частности, если положить $a = 1$, то мы получим инвариант

$$\text{inv} = \tilde{\psi} \psi, \quad (23.33)$$

где $\tilde{\psi} = (\bar{\psi}_4, \bar{\psi}_3, \bar{\psi}_2, \bar{\psi}_1)$ — матрица-строка, $\psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$ — матрица-

столбец. Законы преобразования величин ψ , $\tilde{\psi}$ при преобразовании Лоренца представимы в виде

$$\psi' = D\psi, \quad \tilde{\psi}' = \tilde{\psi} \bar{D}. \quad (23.34)$$

Так как $\tilde{\psi} \psi$ — инвариант, то

$$\tilde{\psi}' \psi' = \tilde{\psi} \bar{D} D \psi = \tilde{\psi} \psi, \quad (23.35)$$

откуда

$$\bar{D} = D^{-1}.$$

Используя этот результат и формулу (23.10), легко, например, доказать, что величины $\tilde{\psi} \bar{L}_i \psi$ преобразуются, как четырехмерный вектор.

Приложение

Указания к решению задач

1.1. Рассмотрим шар с центром в некоторой точке O . Зададим на поверхности шара две произвольные точки A и B . Рассмотрим теперь такое движение шара, при котором точки A и B переходят в A' и B' (рис. 18). Ясно, что дуга большого круга AB равна дуге $A'B'$. Соединим точки A с A' и B с B' окружностями больших кругов и проведем симметралы (окружности больших кругов, нормальных к дугам AA' и BB' и делящих их пополам) для этих пар точек. На рис. 18, симметралы изображены пунктирными линиями, пересекающимися в точке M . Сферические треугольники $MA B$ и $MA' B'$ равны друг другу и могут быть совмещены в результате поворота на угол φ вокруг оси, проходящей через точку M и центр шара. В том случае, когда симметралы совпадают, ось вращения определяется пересечением дуг AB и $A'B'$.

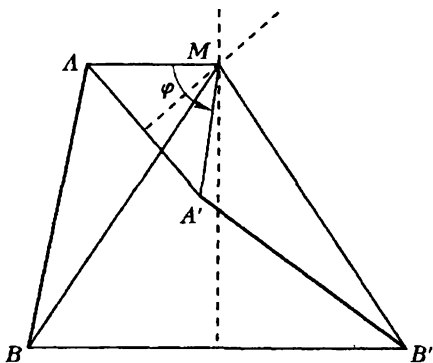


Рис. 18.

Задача может быть решена также следующим образом. Рассмотрим ортогональную матрицу U ($\text{Det } U = +1$), соответствующую рассматриваемому вращению. Ее собственными значениями будут $e^{i\varphi}$, $e^{-i\varphi}$ и 1. Перейдем от системы координат, в которой задана матрица U , к новой системе, причем одну из осей (например, Ox'_3) направим по собственному вектору u_3 , соответствующему собственному значению $\lambda = 1$. В новой системе осей матрица U примет вид

$$V^{-1}UV = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

и будет, следовательно, соответствовать вращению на угол $\varphi = \arccos \frac{1}{2}(\text{Sp } U - 1)$ относительно вектора u_3 .

2.6. Пусть k — число элементов в классе K , которому принадлежит элемент A . Возьмем вместо элемента A какой-нибудь другой элемент A' , также принадлежащий классу K . Тогда при B , пробегающем всю группу, совокупность BAB^{-1} будет совпадать с совокупностью $BA'B^{-1}$; обозначим эту совокупность через ω . Если элемент A пробегает весь класс K , а B пробегает всю группу, то получим k раз повторенную совокупность ω . Обозначим эту новую совокупность через Ω . Фиксируем теперь элемент B , а элемент A пусть пробегает весь класс K . Тогда элементы BAB^{-1} будут все различными и составят снова класс K . Следовательно, мы можем утверждать, что в совокупность Ω каждый элемент класса K входит n раз, где n — порядок рассматриваемой группы. Но так как совокупность Ω представляет собой k раз повторенную совокупность ω , то, следовательно, в совокупности ω каждый элемент класса содержится $\frac{n}{k}$ раз, что и требовалось доказать. Отсюда мы получаем, что порядок группы должен быть всегда целым кратным порядка любого класса.

3.1. Если группа имеет гомоморфное представление, то те элементы группы, которым соответствует единичная матрица представления, образуют инвариантную подгруппу (нормальный делитель).

3.3. Пусть B — любой фиксированный элемент группы, а элемент A пробегает некоторый класс K . Тогда совокупность BAB^{-1} снова дает нам весь класс. Переходя к неприводимому представлению группы матрицами D , мы можем написать

$$D(B) \left[\sum_{A \in K} D(A) \right] D^{-1}(B) = \sum_{A \in K} D(A)$$

или

$$D(B) \sum_{A \in K} D(A) = \left[\sum_{A \in K} D(A) \right] D(B).$$

Так как элемент B произволен, то согласно первой лемме Шура мы можем утверждать, что матрица $\sum_{A \in K} D(A)$ кратна единичной.

3.4. Элементы матриц регулярного представления определяются следующим образом. Если $g_s g_i = g_j$, то

$$R_{ji}(g_s) = 1, \quad R_{ti}(g_s) = 0, \quad t \neq j.$$

Иначе можно сказать, что $R_{mn}(g_s) = 1$, если $g_m g_n^{-1} = g_s$, и $R_{mn}(g_s) = 0$, если $g_m g_n^{-1} = g_t$, $t \neq s$. С помощью таблицы умножения рассматриваемой группы составим новую таблицу умножения, в которой первым множителем, стоящим в столбце, будет g_m , $m = 1, 2, \dots, 6$, а вторым множителем, расположенным в строке, будет g_n^{-1} , $n = 1, 2, \dots, 6$.

$g_m \backslash g_n^{-1}$	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>F</i>	<i>D</i>
<i>E</i>	<i>E</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>F</i>	<i>D</i>
<i>A</i>	<i>A</i>	<i>E</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	<i>C</i>	<i>B</i>
<i>B</i>	<i>B</i>	<i>F</i>	<i>E</i>	<i>D</i>	<i>A</i>	<i>C</i>
<i>C</i>	<i>C</i>	<i>D</i>	<i>F</i>	<i>E</i>	<i>B</i>	<i>A</i>
<i>D</i>	<i>D</i>	<i>C</i>	<i>A</i>	<i>B</i>	<i>E</i>	<i>F</i>
<i>F</i>	<i>F</i>	<i>B</i>	<i>C</i>	<i>A</i>	<i>D</i>	<i>E</i>

Согласно сказанному выше мы можем утверждать, что мы получим матрицу регулярного представления, соответствующую некоторому элементу g , если в построенной таблице вместо элемента g , мы поставим 1, а вместо других элементов 0.

3.6. Характеры приводимого представления могут быть записаны в виде

$$\chi(g) = \sum_j k_j \chi^{(j)}(g),$$

где $\chi^{(j)}(g)$ — характеры неприводимых представлений, а k_j — кратности этих представлений. Используя свойство ортогональности характеров неприводимых представлений, мы получим

$$\frac{1}{n} \sum_g \overline{\chi(g)} \chi(g) = \sum_j k_j^2.$$

Правая часть этого равенства может равняться единице лишь в том случае, когда только одно из чисел k_j отлично от нуля и равно единице.

3.7. Использовать свойство ортогональности матричных элементов для двух неэквивалентных неприводимых представлений, одно из которых является тождественным (формула (3.66)).

4.1. Использовать формулу (4.20) и свойство ортогональности характеров неприводимых представлений.

4.3. Использовать свойство ортогональности характеров неприводимых представлений перемножаемых групп.

4.5. Перестановка множителей в прямом произведении равносильна определенной перестановке строк и такой же перестановке столбцов в матрице прямого произведения. Поэтому можно написать

$$A \times B = V(B \times A)V^{-1},$$

где V — ортогональная матрица, состоящая из нулей и единиц, — осуществляет указанную перестановку строк, а матрица $V^{-1} = V^*$ — такую же перестановку столбцов.

6.1. Используя формулы (6.25), (6.29) и таблицу характеров неприводимых представлений группы C_{3v} , мы найдем, что молекула NH_3 имеет два невырожденных нормальных колебания типа A_1 и два двукратно вырожденных колебания типа E .

7.1. Применим к функции $\varphi_k(\mathbf{r})$ оператор T_g . Мы получим

$$T_g \varphi_k(\mathbf{r}) = T_g \psi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|) = \psi(|g^{-1}\mathbf{r} - \mathbf{R}_k|) = \psi(|g^{-1}(\mathbf{r} - g\mathbf{R}_k)|) = \psi(|\mathbf{r} - \mathbf{R}_i|),$$

где $\mathbf{R}_i = g\mathbf{R}_k$. Следовательно, мы имеем

$$T_g \varphi_k(\mathbf{r}) = \varphi_i(\mathbf{r}).$$

Найдем характеры представления D , по которому преобразуются функции $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_6$. Очевидно, что для данного преобразования g отличный от нуля вклад в характер дадут лишь те функции, которые не изменяются при действии оператора T_g : $T_g \varphi_k(\mathbf{r}) = \varphi_k(\mathbf{r})$.

Мы получим

E	$3C_2'$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	i	$3iC_2'$	$6iC_4$	$6iC_2$	$8iC_3$
6	2	2	0	0	0	4	0	2	0

Используя формулу (6.25) и таблицу характеров группы O_h , находим

$$D = \Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_4'$$

Так как в это разложение неприводимые неэквивалентные представления входят не более одного раза, то матрица гамильтониана, записанная на функциях, преобразующихся по неприводимым представлениям, будет диагональной. Следовательно, построенные функции будут приближенными собственными функциями рассматриваемой задачи. Построим эти функции. Введем вместо функций $\varphi_k(\mathbf{r})$ их комбинации, симметричные и антисимметричные относительно инверсии:

$$\varphi_1 + \varphi_3, \quad \varphi_2 + \varphi_4, \quad \varphi_5 + \varphi_6, \quad \varphi_1 - \varphi_3, \quad \varphi_2 - \varphi_4, \quad \varphi_5 - \varphi_6.$$

Ясно, что функции $\varphi_1 - \varphi_3, \varphi_2 - \varphi_4, \varphi_5 - \varphi_6$ должны преобразовываться по представлению Γ_4 . Если пренебречь перекрытием функций φ_k и считать их нормированными, то соответствующие приближенные собственные функции нашей задачи можно записать в виде

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_1 - \varphi_3), \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_2 - \varphi_4), \quad \frac{1}{\sqrt{2}}(\varphi_5 - \varphi_6).$$

Приближенная собственная функция, преобразующаяся по тождественному представлению Γ_1 , имеет вид

$$\frac{1}{\sqrt{6}}(\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + \varphi_4 + \varphi_5 + \varphi_6).$$

Оставшиеся две независимые функции симметричной цепочки, преобразующиеся по неприводимому представлению Γ_3 , можно выбрать в виде

$$\frac{1}{\sqrt{4}} [(\varphi_2 + \varphi_4) - (\varphi_1 + \varphi_3)],$$

$$\frac{1}{\sqrt{12}} [(\varphi_2 + \varphi_4) + (\varphi_1 + \varphi_3) - (\varphi_5 + \varphi_6)].$$

8.3. Для простой кубической решетки обратная решетка также является простой кубической. Для гранецентрированной решетки обратной

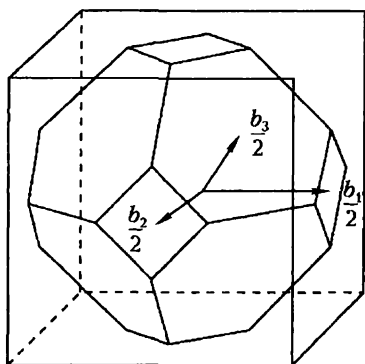


Рис. 19.

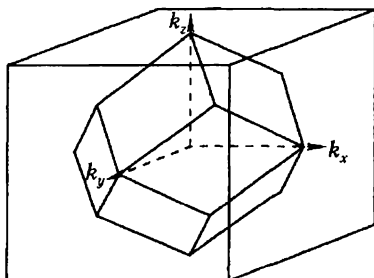


Рис. 20.

является объемноцентрированная кубическая решетка. Зоны Бриллюэна для этих решеток изображены на рис. 19 и рис. 20. Зона Бриллюэна для гранецентрированной решетки ограничена плоскостями, перпендикулярными к осям четвертого и третьего порядков. Зона Бриллюэна для объемноцентрированной решетки ограничена плоскостями, перпендикулярными к осям второго порядка.

9.1. Буквами Γ , R , M , X , Λ , Δ , Σ , T , S , Z отмечены некоторые типичные симметричные точки зоны Бриллюэна простой кубической решетки (рис. 21). Характеристики неприводимых представлений групп волновых векторов, соответствующих этим точкам, приведены в таблицах:

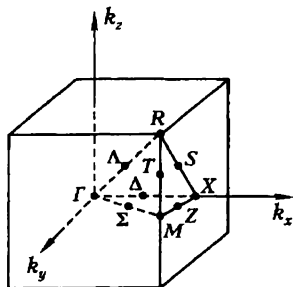


Рис. 21.

Λ	E	$2C_3$	$3iC_2$
Λ_1	1	1	1
Λ_2	1	1	-1
Λ_3	2	-1	0

Z	E	C_4^2	iC_4^2	$iC_4^2 \perp$
Z_1	1	1	1	1
Z_2	1	1	-1	-1
Z_3	1	-1	-1	1
Z_4	1	-1	1	-1

Γ, R	E	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	i	$3iC_4^2$	$6iC_4$	$6iC_2$	$8iC_3$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1	1
Γ_3	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1
Γ_4	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
Γ_5	3	-1	1	-1	0	3	-1	1	-1	0
Γ'_1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ'_2	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1	1	-1
Γ'_3	2	2	0	0	-1	-2	-2	0	0	1
Γ'_4	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0
Γ'_5	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0

Δ, T	E	C_4^2	$2C_4$	$2iC_4$	$2iC_2$
Δ_1	1	1	1	1	1
Δ'_1	1	1	1	-1	-1
Δ_2	1	1	-1	1	-1
Δ'_2	1	1	-1	-1	1
Δ_5	2	-2	0	0	0

Σ, S	E	C_2	iC_4^2	iC_2
Σ_1	1	1	1	1
Σ_2	1	1	-1	-1
Σ_3	1	-1	-1	1
Σ_4	1	-1	1	-1

M	E	$2C_4^2$	$C_4^2 \perp$	$2C_4 \perp$	$2C_2$	i	$2iC_4^2$	$iC_4^2 \perp$	$2iC_4 \perp$	$2iC_2$
X	E	$2C_4^2 \perp$	$C_4^2 \parallel$	$2C_4 \parallel$	$2C_2$	i	$2iC_4^2 \perp$	$iC_4^2 \parallel$	$2iC_4 \parallel$	$2iC_2$
M_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
M_2	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
M_3	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
M_4	1	-1	1	1	-1	1	-1	1	1	-1
M_5	2	0	-2	0	0	2	0	-2	0	0
M'_1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
M'_2	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
M'_3	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
M'_4	1	-1	1	1	-1	-1	1	-1	-1	1
M'_5	2	0	-2	0	0	-2	0	2	0	0

Примечание. Вращение вокруг оси, перпендикулярной к вектору \mathbf{k} , обозначено через C_{\perp} , вращение вокруг оси, проходящей через вектор \mathbf{k} , — через C_{\parallel} .

Найти классификацию нормальных колебаний — это значит определить неприводимые представления групп волновых векторов, по которым преобразуются нормальные координаты. Для определения характеров приводимого представления, по которому преобразуются нормальные координаты с данным значением волнового вектора, воспользуемся формулами (9.8) и (9.9). Нам удобно представить их в следующем виде:

$$\chi(g) = \begin{cases} (1 + 2 \cos \varphi) \sum_a e^{i(ka)} n_a & \text{для поворота,} \\ -(1 + 2 \cos \varphi) \sum_a e^{i(ka)} n_a & \text{для поворота с инверсией.} \end{cases} \quad (*)$$

Заметим, что если вектор \mathbf{k} лежит внутри зоны Бриллюэна, то множители $e^{i(\mathbf{k}\mathbf{a})}$ можно опустить, так как в этом случае $(\mathbf{k}\mathbf{a}) = 0$.

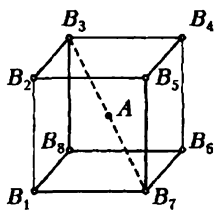
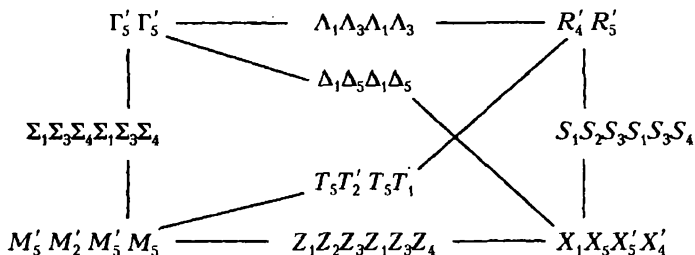


Рис. 22.

Выберем центр симметрии в узле A (рис. 22). Рассмотрим элементарную ячейку, в которую входят атомы A и B_1 . При преобразованиях симметрии атом A будет всегда оставаться на своем месте, а атом B_1 будет совмещаться с атомами B_2, B_3, \dots, B_8 . Векторы \mathbf{a} , входящие в формулу (*), соединяют узел B_1 с эквивалентными узлами B_2, B_3, \dots, B_8 . Вычислив характеры представления по формуле (*) и применяя обычную процедуру разложения этого представления

на неприводимые, мы получим следующую схему классификации нормальных колебаний рассматриваемого кристалла:



Обратим внимание на то, что при переходе от более симметричной точки зоны Бриллюэна к менее симметричной (например, от точки Γ к точке Λ) неприводимые представления для последней могут быть получены с помощью разложения представлений, соответствующих первой.

Например, $\Gamma'_5 = \Lambda_1 + \Lambda_3$, $\Gamma'_5 = \Sigma_1 + \Sigma_3 + \Sigma_4$ и т. д. Заметим, что полученная здесь классификация нормальных колебаний, основанная на чисто механическом рассмотрении, справедлива лишь для неполярных кристаллов.

Матрицы неприводимых представлений группы $C_{\infty v}$

	A_1	A_2	E_m
Вращение на угол φ	1	1	$\begin{pmatrix} e^{-im\varphi} & 0 \\ 0 & e^{im\varphi} \end{pmatrix}$
Отражение в плоскости, проходящей через ось	1	-1	$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

10.1. Используя метод, аналогичный тому, который был применен в главе VI для нахождения матриц неприводимых представлений группы S_n , мы получим результат, приведенный в таблице на с. 266.

18.1. Использовать метод, изложенный на с. 204, и классификацию нормальных координат такой молекулы, полученную в главе VII. Закон преобразования осцилляторных волновых функций см. на с. 172. Промежуточные и окончательные результаты для случая а) приведены в таблице на с. 268.

18.2. Рассмотрим тензор n -го ранга в каноническом базисе, т. е. как 1-тензор. Каждый из n значков 1-тензора принимает три значения: 1, 0, -1. Найдем сначала число δ_m компонент симметричного тензора n -го ранга, сумма значков которых равна m . Тогда кратность r_L неприводимого представления $D^{(L)}$ в рассматриваемом тензорном представлении может быть определена по формуле

$$r_L = \delta_L - \delta_{L+1}.$$

Обозначим через $\alpha_1, \alpha_0, \alpha_{-1}$ числа тензорных значков данной компоненты, равных соответственно 1, 0, -1 ($\alpha_1 + \alpha_0 + \alpha_{-1} = n$). Очевидно, что $m = \alpha_1 - \alpha_{-1}$. Поэтому мы можем написать неравенство

$$m \leq \alpha_1 + \alpha_{-1} \leq n.$$

Знак равенства справа имеет место только в том случае, если числа m и n одинаковой четности. Отсюда следует, что $\delta_m = n - m + 1$, если m и n одинаковой четности, и $\delta_m = n - m$, если m и n имеют противоположную четность. В результате мы получим $r_L = (n - L + 1) - (n - L) = 1$, если L и n одинаковой четности; $r_L = (n - L) - (n - L) = 0$, если L и n противоположной четности. В обоих случаях, конечно, $L \leq n$.

18.3. Воспользоваться методом, изложенным на с. 205, и результатом упражнения 18.2.

22.1. Рассмотрим две системы отсчета, движущиеся друг относительно друга с постоянной скоростью v . Найдем преобразование Лоренца, связывающее пространственные координаты и время в этих системах. Рассмотрим преобразование Лоренца g_{03} , соответствующее движению вдоль оси Ox . Очевидно, что преобразование Лоренца, соответствующее движению со скоростью v , может быть представлено в виде $u g_{03}(\psi) u^{-1}$, где преобразование u совмещает ось Ox с направлением скорости v . Преобразование u^{-1} можно записать в виде $g_{12}(\varphi) g_{23}(\theta)$, где θ — угол между осью Ox и скоростью v . Так как пространственные оси двух систем могут быть ориентированы произвольно, то окончательно связь между рассматриваемыми системами отсчета получается с помощью преобразования

$$\Lambda = u' u g_{03}(\psi) u^{-1} = u'' g_{03}(\psi) u^{-1}.$$

	E	$3C_2$	$6C_4$	$6C_2$	$8C_3$	i	$3iC_2$	$6iC_4$	$6iC_2$	$8iC_3$	стат. веса
α_i	$\alpha_1 = 7$	$\alpha_1 = 3$ $\alpha_2 = 2$	$\alpha_1 = 3$ $\alpha_4 = 1$	$\alpha_1 = 1$ $\alpha_2 = 3$	$\alpha_1 = 1$ $\alpha_3 = 2$	$\alpha_1 = 1$ $\alpha_2 = 3$	$\alpha_1 = 5$ $\alpha_2 = 1$	$\alpha_1 = 1$ $\alpha_2 = 1$ $\alpha_4 = 1$	$\alpha_1 = 3$ $\alpha_2 = 2$	$\alpha_1 = 1$ $\alpha_6 = 1$	
$\sum_i \alpha_i$	7	5	4	4	3	4	6	3	5	2	
Четность $\Gamma^{(2)'} = \gamma_A$	ч 1	ч 1	н -1	н -1	ч 1	н -1	н -1	ч 1	ч 1	н -1	
$\chi = 2^i \sum \alpha_i$	128	32	16	16	8	16	64	8	32	4	
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	2
$\Gamma^{(3)}$	2	2	0	0	-1	2	2	0	0	-1	0
$\Gamma^{(4)}$	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0	12
$\Gamma^{(4)'}$	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0	0
$\Gamma^{(5)'}$	3	-1	1	-1	0	-3	1	-1	1	0	6

Поскольку произвольное вращение u'' можно представить в виде

$$u'' = g_{12}(\varphi_2'')g_{23}(\theta'')g_{12}(\varphi''),$$

то окончательно мы получаем

$$\Lambda = g_{12}(\varphi_2'')g_{23}(\theta'')g_{12}(\varphi_1'')g_{03}(\psi)g_{12}(\varphi)g_{23}(\theta).$$

22.3. Рассмотрим инфинитезимальные матрицы неприводимого представления $D^{(l_1, l_2)}$ группы Лоренца, соответствующие группе трехмерных вращений. Согласно формуле (22.33) они имеют вид

$$B_i^+ = (M_i \times E_T + E_M \times T_i),$$

т. е. совпадают с инфинитезимальными матрицами прямого произведения $D^{(l_1)} \times D^{(l_2)}$ двух неприводимых представлений группы вращений. Применяя правило Клебша—Горлана, мы получим, таким образом, что неприводимое представление $D^{(l_1, l_2)}$ имеет следующее разложение:

$$D^{(l_1, l_2)} = D^{(l_1 + l_2)} \oplus D^{(l_1 + l_2 - 1)} \oplus \dots \oplus D^{(|l_1 - l_2|)}.$$

Приложение к главе VII

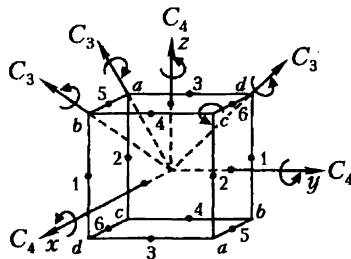


Рис. 23. Оси k -го порядка неприводимых представлений группы O (к таблице на с. 270—272)

Матрицы неприводимых представлений группы O

	E	$C_2^{(x)}$	$C_2^{(y)}$	$C_2^{(z)}$	$C_4^{(x)}$	$C_4^{(y)}$	$C_4^{(z)}$	$(C_4^{(x)})^3$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$ xyz	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma^{(3)}$ $\sqrt{3}(y^2 - z^2)$ $r^2 - 3z^2$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
$\Gamma^{(4)}$ yz, zx, xy	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\Gamma^{(5)}$ x, y, z	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$

Обозначение: $C_k^{(a)}$ — ось k -го порядка, проходящая через точки a (рис. 23 на с. 269). Рядом с символами неприводимых представлений приведены примеры ненормированных базисов.

	$(C_4^{(y)})^3$	$(C_4^{(z)})^3$	$C_2^{(1)}$	$C_2^{(2)}$	$C_2^{(3)}$	$C_2^{(4)}$	$C_2^{(5)}$	$C_2^{(6)}$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$ xyz	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma^{(3)}$ $\sqrt{3}(y^2 - z^2)$ $r^2 - 3z^2$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$
$\Gamma^{(4)}$ yz, xz, xy	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$
$\Gamma^{(5)}$ x, y, z	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

	$C_3^{(a)}$	$C_3^{(b)}$	$C_3^{(c)}$	$C_3^{(d)}$	$(C_3^{(a)})^2$	$(C_3^{(b)})^2$	$(C_3^{(c)})^2$	$(C_3^{(d)})^2$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$ xyz	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(3)}$ $\sqrt{3}(y^2 - z^2)$ $r^2 - 3z^2$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$
$\Gamma^{(4)}$ yz, zx, xy	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$
$\Gamma^{(5)}$ x, y, z	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

Библиография

- [1] *Вигнер Е.* Теория групп и ее приложения к квантовомеханической теории атомных спектров. М.: ИЛ, 1961.
- [2] *Ван дер Варден Б. Л.* Метод теории групп в квантовой механике. Харьков, 1938.
- [3] *Weyl H.* The Theory of Groups and Quantum Mechanics. Dover Publications, Inc., 1931.
- [4] *Любарский Г. Я.* Теория групп и ее применение в физике. М.: Гостехиздат, 1957.
- [5] *Хейне В.* Теория групп в квантовой механике. М.: ИЛ, 1963.
- [6] *Гельфанд И. М., Минлос Р. А., Шапиро З. Я.* Представления группы вращений и группы Лоренца. М.: Физматгиз, 1958.
- [7] *Мурнаган Ф.* Теория представлений групп. М.: ИЛ, 1950.
- [8] *Voertner H.* Darstellungen von Gruppen. Berlin, 1955.
- [9] *Lotmot J. S.* Applications of Finite Groups. New York, 1959.
- [10] *Хамермеш М.* Теория групп и ее применение к физическим проблемам. Едиториал УРСС, 2002.
- [11] *Mc Weeny R.* Symmetry. An Introduction to Group Theory and Its Applications. Oxford: Pergamon Press, 1963.
- [12] *Смирнов В. И.* Курс высшей математики. Т. III. Ч. 1. М.: Наука, 1957.
- [13] *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Курс терстической физики. Т. 3. Квантовая механика. М.: Наука, 1974.
- [14] *Elliot J. P. and Dawber P. J.* Symmetry in Physics: in 2 vol. London: The Macmillan Press, 1979.
- [15] *Kaplan I. G.* Symmetry of Many-Electron System. New York: Academic Press, 1975.
- [16] *Bradley C. J. and Cracknell A. P.* The Mathematical Theory of Simmetry in Solids. Oxford: Clarendon Press, 1972.
- [17] *Cracknell A. P.* Group Theory in Solid State Physics. New York: Academic Press, 1975.
- [18] *Burns G. and Glazer A. M.* Space Group for Solid Statc Scientiests. 2nd ed. New York: Academic Press, 1975.
- [19] *Evarestov R. A. and Smirnov V. P.* Site Symmetry in Crystals: Theory and Application // Springer Ser. Sol. Scie. Vol. 108. Berlin—Heidelberg: Springer, 1995.
- [20] *Ludwig W. and Falter C.* Symmetry in Physics: Group Theory Applied to Physical Problems // Springer Ser. Sol. Scie. Vol. 64. Berlin—Heidelberg: Springer, 1995.

- [21] Барут А., Рончка Р. Теория представлений групп и ее приложения. Т. 1, 2., М.: Мир, 1980.
- [22] Ляховский В. Д., Болохов А. А. Группы симметрии и элементарные частицы. Едиториал УРСС, 2002.
- [23] Cornwell J. F. Group Theory in Physics. Lie Groups and Their Applications. Vol. I, II. Academic Press, 1984; Supersymmetries and Infinite-Dimensional Algebras. Vol. III. Academic Press, 1989.
- [24] Gilmore R. Lie Groups, Lie Algebras and Some of Their Applications. New York: John Wiley & Sons, 1974.
- [25] Inui T., Tanabe Y., Onodera Y. Group Theory and Its Applications in Physics. 2nd ed. // Springer Ser. Sol. Scie. Vol.78 Berlin—Heidelberg: Springer, 1995.
- [26] Burns G., Glaser A. M. Space Groups for Solid State Scientists. 2nd ed. New York: Academic Press, 1990.
- [27] Kettle F. A. Symmetry and Structure: Readable Group Theory for Chemists. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1995.
- [28] Cotton F. A. Chemical Application of Group Theory. 2nd ed. New York: John Wiley & Sons, 1990.

Оглавление

Предисловие ко второму изданию (как была написана эта книга)	3
Предисловие к первому изданию	6
Глава I	
Введение	8
1. Свойства симметрии физических систем	8
2. Определение группы	9
3. Примеры групп, имеющих приложение в физике	11
4. Условия инвариантности уравнений движения	12
Упражнения	14
Глава II	
Абстрактные группы	15
1. Сдвиг по группе	15
2. Подгруппа	15
3. Порядок элемента	15
4. Сопряженные совокупности	16
5. Сопряженные элементы и класс	17
6. Инвариантная подгруппа (нормальный делитель)	18
7. Фактор-группа	19
8. Изоморфизм и гомоморфизм групп	20
Упражнения	21
Глава III	
Представления конечных групп	23
1. Определение представления группы	23
2. Примеры представлений	25
3. Представление группы симметрии уравнения Шрёдингера, реализующееся на его собственных функциях	26
4. Существование эквивалентного унитарного представления	28
5. Приводимые и неприводимые представления группы	30
6. Первая лемма Шура	32
7. Вторая лемма Шура	33
8. Соотношение ортогональности для матричных элементов неприводимых представлений	35
9. Характеры представлений	38
10. Регулярное представление	40
11. Число неприводимых представлений	41
12. Вычисление характеров неприводимых представлений	42
Упражнения	44

Глава IV	
Композиция представлений и прямое произведение групп	45
1. Прямое произведение матриц	45
2. Композиция представлений группы	47
3. Прямое произведение групп	49
4. Неприводимые представления прямого произведения групп	50
Упражнения	53
Глава V	
Теорема Вигнера	54
1. Симметрия квантовомеханической системы относительно группы преобразований	54
2. Симметрия системы частиц, совершающих малые колебания	57
3. Теорема Вигнера	61
Глава VI	
Точечные группы	67
1. Элементы точечных групп	67
2. Классификация точечных групп	69
3. Неприводимые представления точечных групп	72
4. Классификация нормальных колебаний и электронных состояний молекулы	78
Упражнения	81
Глава VII	
Разложение приводимого представления на неприводимые	82
1. Построение базисов неприводимых представлений	82
2. Определение симметризованных смещений ядер молекулы	85
3. Метод линейной комбинации атомных орбит	90
Упражнение	91
Глава VIII	
Пространственные группы и их неприводимые представления	93
1. Подгруппа трансляций	93
2. Сингонии	94
3. Общий элемент пространственной группы	96
4. Неприводимые представления группы трансляций	98
5. Звезда вектора \mathbf{k}	100
6. Группа вектора \mathbf{k}	101
7. Неприводимые представления пространственной группы	102
8. Неприводимые представления группы вектора \mathbf{k}	103
9. Пример	103
10. Неприводимые представления пространственной группы, содержащей несобственные трансляции	105
Упражнения	107

Глава IX	
Классификация колебательных и электронных состояний кристалла	108
1. Классификация нормальных колебаний	108
2. Классификация электронных состояний кристалла	113
3. Одноэлектронное приближение	114
Упражнение	117
Глава X	
Непрерывные группы	118
1. Непрерывные группы линейных преобразований	118
2. Общие свойства групп Ли	119
3. Инфинитезимальные преобразования и законы сохранения	122
4. Группа двумерных вращений $O^-(2)$	124
5. Группа трехмерных вращений $O^+(3)$	124
Упражнения	126
Глава XI	
Неприводимые представления группы трехмерных вращений	127
1. Инфинитезимальные матрицы представлений группы $O^+(3)$	127
2. Неприводимые представления группы $O^+(3)$	130
3. Двухзначные представления	133
4. Разложение любого представления группы $O^+(3)$ на неприводимые	135
5. Неприводимые представления ортогональной группы $O(3)$	136
Глава XII	
Свойства неприводимых представлений группы вращений	137
1. Сферические функции как базисы неприводимых представлений группы $O^+(3)$	137
2. Композиция неприводимых представлений группы $O^+(3)$	140
3. Тензорные и спинорные представления группы вращений	144
4. Комплексно сопряженные представления	146
Упражнения	148
Глава XIII	
Некоторые приложения теории представлений группы вращений к квантовомеханическим задачам	149
1. Частица в центральном поле. Орбитальный момент количества движения	149
2. Правило сложения моментов количества движения	152
3. Спин	153
4. Теорема Крамерса	157
5. Теорема Вигнера—Эккарта	160
Глава XIV	
Дополнительное вырождение в сферически симметричном поле	163
1. Дополнительное вырождение	163

2. Связь с классической механикой	164
3. Группа симметрии атома водорода	165
4. Группа симметрии изотропного осциллятора	169
Глава XV	
Группа перестановок	173
1. Квантовомеханическое описание системы тождественных частиц	173
2. Группа перестановок n символов	174
3. Неприводимые представления группы S_n	176
Упражнения	182
Глава XVI	
Симметризованные степени представлений	183
1. Векторы и тензоры в n -мерном пространстве	183
2. Матрицы перестановок тензорных значков	184
3. Связь между представлениями группы S_n и группы G в тензорном пространстве	185
4. Характеры симметризованной степени представления	186
Упражнения	188
Глава XVII	
Свойства симметрии многоэлектронных волновых функций	189
1. Постановка задачи	189
2. Свойства симметрии спиновой волновой функции	190
3. Связь между симметрией спиновой и координатной волновых функций	193
4. Свойства симметрии координатной волновой функции	196
Упражнения	197
Глава XVIII	
Свойства симметрии волновых функций системы тождественных частиц с произвольными спинами	198
1. Постановка задачи	198
2. Теорема Фробениуса	200
3. λ -тензоры	202
4. Статистический вес энергетического уровня	203
5. Собственные значения оператора полного спина	204
Упражнения	205
Глава XIX	
Классификация состояний многоэлектронного атома	206
1. Конфигурация	206
2. Термы	208
3. Соответствие между конфигурацией и термами	209
4. Спин-орбитальное взаимодействие	211

Глава XX	
Применение теории групп в задачах, связанных с теорией возмущений . . .	214
1. Расщепление уровней энергии под влиянием возмущения	214
2. Правильные функции нулевого приближения	217
3. Атом в однородном магнитном поле	218
4. Атом в кристаллическом поле	223
Глава XXI	
Правила отбора	227
1. Общая формулировка правил отбора	227
2. Правила отбора для поглощения и излучения света	229
3. Правила отбора для комбинационного рассеяния света молекулами	230
4. Матричные элементы, построенные на функциях одного базиса . . .	233
5. Теорема Яна—Теллера	237
Упражнения	240
Глава XXII	
Группа Лоренца и ее неприводимые представления	241
1. Общая группа Лоренца	241
2. Связь группы Лоренца с группой четырехмерных вращений	244
3. Перестановочные соотношения для инфинитезимальных матриц . .	246
4. Неприводимые представления	247
5. Прямое произведение неприводимых представлений группы Лоренца	249
Упражнения	250
Глава XXIII	
Уравнение Дирака	251
1. Релятивистски инвариантные уравнения	251
2. Уравнение Дирака	254
3. Комплексно сопряженный спинор Дирака	255
4. Инвариантная квадратичная форма	258
Приложение	259
Указания к решению задач	259
Приложение к главе VII	269
Библиография	273