

Дж.Эллиот, П.Добер
СИММЕТРИЯ В ФИЗИКЕ. Т.1

Двухтомная монография (английских физиков) о принципах симметрии в физике. В т. 1 кратко изложена теория групп и теория представлений групп, лежащая в основе теории симметрии, и рассмотрены приложения этой теории к анализу структуры атомов и кристаллических решеток, а также к описанию симметричных свойств ядер и элементарных частиц. В т. 2 рассматриваются электронная структура молекул, свойства симметрии пространства и времени, группы перестановок и унитарные группы, свойства частиц во внешних полях.

Для широкого круга физиков и математиков — научных работников, аспирантов и студентов.

Содержание

Предисловие редакторов перевода	5
Предисловие к первому толу	7
Глава 1. Введение	11
§ 1. Роль симметрии в физике	11
§ 2. Примеры проявления симметрии	13
§ 3. Заключение	20
Глава 2. Группы и их свойства	21
§ 1. Определение группы	21
§ 2. Примеры групп	23
§ 3. Изоморфизм	30
§ 4. Подгруппы	31
§ 5. Прямое произведение групп	32
§ 6. Сопряженные элементы и классы	33
§ 7. Примеры классов	34
§ 8. Классы произведения групп	37
§ 9. Теорема о перечислении групп	38
Литература	38
Задачи	39
Глава 3. Линейная алгебра и векторные пространства	40
§ 1. Линейные векторные пространства	40
§ 2. Примеры линейных векторных пространств	45
§ 3. Линейные операторы	48
§ 4. Умножение и преобразование операторов, обратный оператор	51
§ 5. Сопряженный оператор, унитарные и эрмитовы операторы	53
§ 6. Определение собственных значений	55
§ 7. Индуцированные преобразования функций	56
§ 8. Примеры линейных операторов	59
Литература	63
Задачи	64
Глава 4. Представления групп	65
§ 1. Определение представления группы	65
§ 2. Матричные представления	66

§ 3. Примеры представлений	67
§ 4. Построение инвариантных подпространств	71
§ 5. Неприводимость	74
§ 6. Эквивалентные представления	77
§ 7. Неэквивалентные неприводимые представления	80
§ 8. Свойства ортогональности неприводимых представлений	81
§ 9. Характеры представлений	88
§ 10. Соотношения ортогональности для характеров неприводимых представлений	89
§ 11. Приведение представления с использованием характеров групп	91
§ 12. Критерий неприводимости	92
§ 13. Число неэквивалентных неприводимых представлений, регулярное представление	93
§ 14. Второе соотношение ортогональности для характеров групп	96
§ 15. Построение таблицы характеров	97
§ 16. Ортогональность базисных функций неприводимых представлений	98
§ 17. Прямое произведение двух представлений	100-
§ 18. Разложение неприводимого представления при сведении к подгруппе	104
§ 19. Проекционные операторы	106
§ 20. Неприводимые наборы операторов и теорема Вигнера — Экарта	111
§ 21. Представления прямого произведения групп	116
Литература	118
Задачи	118
Глава 5. Симметрия в квантовой механике	120
§ 1. Краткий обзор основных понятий квантовой механики	120
§ 2. Симметрия в квантовой системе	125
§ 3. Вырождение и классификация по симметрии собственных значений и собственных функций	126
§ 4. Правила отбора и матричные элементы операторов	128
§ 5. Законы сохранения	130
§ 6. Примеры	131
§ 7. Теория групп и вариационный метод	136
§ 8. Нарушение симметрии при возмущении	139
§ 9. Неразличимость частиц	143
§ 10. Комплексное сопряжение и обращение времени	145
Литература	146
Задачи	146
Глава 6. Молекулярные колебания	148
§ 1. Гармоническое приближение	149
§ 2. Классическое решение	151
§ 3. Квантовомеханическое решение	152
§ 4. Роль симметрии в молекулярных колебаниях	153
§ 5. Классификация нормальных мод	156
§ 6. Колебательные энергетические уровни и волновые функции	161

§ 7. Инфракрасные спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния молекул	165
§ 8. Картина смещений и частоты нормальных колебаний	168
Литература	170
Задачи	171
Глава 7. Непрерывные группы и их представления, группы вращений $\mathcal{R}_2$ и $\mathcal{R}_3$	172
§ 1. Общие замечания	172
§ 2. Инфинитезимальные операторы	174
§ 3. Группа $\mathcal{R}_2$	179
§ 4. Группа $\mathcal{R}_3$	184
§ 5. Оператор Казимира	203
§ 6. Двухзначные представления	205
§ 7. Комплексно-сопряженное представление	208
Литература	209
Задачи	210
Глава 8. Угловой момент и группа $\mathcal{R}_3$, приложение к структуре атома	212
§ 1. Вращательная инвариантность и ее следствия	212
§ 2. Орбитальный угловой момент системы частиц	214
§ 3. Сложение угловых моментов	216
§ 4. Внутренний спин	218
§ 5. Атом водорода	226
§ 6. Строение многоэлектронных атомов	231
Литература	247
Задачи	248
Глава 9. Точечные группы и их применение в теории кристаллического поля	249
§ 1. Операции точечной группы и обозначения	250
§ 2. Стереопроекция	251
§ 3. Перечисление точечных групп	253
§ 4. Структура классов точечных групп	260
§ 5. Кристаллографические точечные группы	265
§ 6. Неприводимые представления точечных групп	267
§ 7. Двухзначные представления точечных групп	270
§ 8. Обращение времени и магнитные точечные группы	273
§ 9. Расщепление атомных уровней в кристаллическом поле	275
Литература	286
Задачи	287
Глава 10. Изоспин и группа SU_2	289
§ 1. Изоспин в ядрах	290
§ 2. Изоспин и элементарные частицы	302
§ 3. Изоспиновая симметрия и зарядовая независимость	304
Литература	305

Задачи	306
Глава 11. Группа SU_3 и приложения к элементарным частицам	307
§ 1. Некоторые сведения об элементарных частицах	308
§ 2. Гиперзаряд	313
§ 3. Барионный заряд	314
§ 4. Группа SU_3	315
§ 5. Подгруппы группы SU_3	316
§ 6. Неприводимые представления группы SU_3	311
§ 7. Классификация адронов по SU_3 -мультиплетам	330
§ 8. Формула расщепления масс	332
§ 9. Электромагнитные эффекты	336
§ 10. Операторы Казимира	338
Литература	340
Задачи	340
Глава 12. Супермультиплеты в ядрах и супермультиплеты элементарных частиц — группы SU_3 и SU_6. Кварковые модели	342
§ 1. Ядерные супермультиплеты	342
§ 2. Супермультиплеты элементарных частиц	348
§ 3. Трехкварковая модель	350
§ 4. Девятикварковая модель	356
§ 5. Очарование	358
Литература	359
Задачи	359

ПРЕДИСЛОВИЕ РЕДАКТОРОВ ПЕРЕВОДА

Книга Дж. Эллиота и П. Добера представляет собой результат многолетнего труда авторов по созданию самостоятельного курса, посвященного принципам симметрии в физике. Основным стимулом в этой их работе явилось, по-видимому, сознание того, что, хотя многие разделы физики (прежде всего физика атомов, молекул, кристаллов, а также атомных ядер и элементарных частиц) стали полем активного приложения абстрактных математических идей теории групп, лежащей в основе теории симметрии, еще с 20-х гг., знакомство широких кругов физиков с этим направлением и соответствующим математическим аппаратом все еще явно недостаточно. Дело в том, что математики излагают теорию групп для физиков слишком абстрактно, а в физике приложения теории групп оказываются расчлененными по разным разделам, из-за чего исчезает ощущение единства физической науки, общности идей и методов. Мы, приступая к работе над русским изданием, руководствовались еще и тем соображением, что со времени издания у нас в стране лучших книг на данную тему — классических трудов Вигнера и Вейля — прошло уже свыше десяти лет и в настоящее время ощущается некоторая нехватка учебной литературы комплексного характера по такого рода вопросам. Этот недостаток и призвана восполнить книга, предлагаемая вниманию читателей.

Книга Дж. Эллиота и П. Добера написана с большим методическим мастерством, и ее структура отвечает интересам широких кругов читателей. В русском издании она, как и в английском, делится на два тома. В первом томе излагаются основы теории групп и ее простейшие приложения. Второй том следует рассматривать как спецкурс, посвященный более сложным и разнообразным при-

ложениям этой теории в различных разделах физики. Математическое изложение теории групп в данном, первом томе, занимая не более одной пятой всего объема двухтомной книги, сочетает достаточную математическую строгость с исключительной физической ясностью. Те, кто знаком с теорией групп, найдут в первом томе физические приложения. «Новички» вообще могут ограничиться чтением первого тома. Специалисты по физике атомов и молекул, твердых тел, ядер и элементарных частиц могут при желании читать лишь те главы, которые их непосредственно интересуют, опуская без ущерба остальные. Читателями первого тома (как и второго) могут быть студенты, аспиранты, научные работники (физики и математики) самой различной специализации. Подробно о содержании книги говорится в предисловии самих авторов.

При переводе были исправлены немногочисленные опечатки английского издания, а обозначения несколько приближены к более принятым в отечественной литературе. Перевод выполнили канд. хим. наук М. Ю. Антипин (гл. 1—6, приложения 1, 2), канд. физ.-мат. наук Ю. М. Зиновьев (гл. 7, 16—18, приложения 3, 6), д-р физ.-мат. наук, профессор Ю. Г. Рудой (предисловия к обоим томам, гл. 8, 9, 13, 14, 20, приложение 5) и канд. физ.-мат. наук А. Ю. Таранов (гл. 10—12, 15, 19, приложение 4).

*И. С. Желудев
Д. А. Славнов*

ПРЕДИСЛОВИЕ К ПЕРВОМУ ТОМУ

При изучении любой физической системы мы довольно быстро обнаруживаем у нее те или иные проявления регулярности — так называемые симметрии, которые требуют своего объяснения, причем мы уверены, что, несмотря на сложность системы, объяснение должно быть простым. Столь оптимистическая точка зрения, пронизывающая не только физику, но и всю науку вообще, вполне оправдывается существованием общей теории симметрии, применяемой почти во всех областях физики и в особенности в квантовой физике. Цель нашей книги состоит в изложении теории симметрии и изучении ее приложений к широкому кругу физических систем.

Книга выросла из нескольких курсов лекций, читавшихся нами в Сассекском университете на протяжении последних десяти лет. Один из курсов был общим введением в теорию симметрии и предназначался для студентов третьего года обучения, второй был посвящен применению симметрии в физике твердого тела и читался аспирантам, а третий, тоже для аспирантов, посвящался применению симметрии в физике атомов, ядра и элементарных частиц. Поэтому данная книга может быть полезна изучающим любой из указанных разделов физики. Мы считаем, что гл. 1—5 содержат материал, минимально необходимый любому изучающему симметрию, причем студенты, прослушавшие курс линейной алгебры, обнаружат, что большая часть гл. 3 им хорошо знакома и может быть прочитана очень быстро. Остальные главы первого тома (гл. 6—12) содержат широкий круг приложений, вполне достаточный для студенческого курса. В пределах первого тома допустимо даже ограничиться чтением гл. 6—9, опустив гл. 10—12, где изложены вопросы физики ядра и элементарных частиц; можно также

опустить гл. 6 и 9, посвященные точечным группам. Второй том предназначается для более серьезного изучения на уровне аспирантов и может также служить дополнительным чтением для наиболее вдумчивых студентов.

В гл. 1 на очень простых примерах вводится понятие симметрии и отмечаются наиболее общие следствия, обязанные наличию симметрии. В следующих трех главах (гл. 2—4) мы оставляем физику в стороне и готовим в целях дальнейшего использования математический аппарат — прежде всего теорию групп (гл. 2) и линейную алгебру (гл. 3). В гл. 4 оба эти понятия объединяются на основе понятия представлений групп; именно этот аспект теории групп чаще всего используется в теории симметрии. К физике мы возвращаемся в гл. 5, где дается краткая сводка основных идей квантовой механики и общая характеристика влияния симметрии на квантовые системы. Остальная часть книги посвящена приложениям теории симметрии к различным физическим системам и более детальному изучению соответствующих групп. Мы рассматриваем широкий круг приложений — от молекулярных колебаний до элементарных частиц, причем во всех случаях ставим себе целью дать изложение основных положений, достаточное для того, чтобы читатель, не знакомый с данной физической системой, сумел оценить роль, которую играет для этой системы симметрия. Каждое из таких приложений в достаточной степени замкнуто, причем степень сложности описываемых систем нарастает к концу книги. Первое из физических явлений, подробно разобранных в книге (гл. 6), — молекулярные колебания. На этом примере удастся проиллюстрировать результаты применения симметрии еще в классической механике, до перехода к квантовой теории. В гл. 7 и 8 рассматривается симметрия по отношению к вращениям и указывается ее применение к строению атомов. Именно здесь мы впервые встречаем понятие непрерывной группы с бесконечным числом элементов (или операций симметрии), и здесь же излагаются основные свойства таких групп. В гл. 9 весьма подробно рассматриваются свойства так называемых «точечных групп», содержащих лишь конечное число вращений, и с их помощью исследуется влияние кристаллического поля на атомные состояния. В гл. 10—12 мы рассматриваем более абстрактные симметрии, встре-

чающиеся в физике ядер и элементарных частиц, но пользуемся той же общей теорией, что и развитая ранее для более конкретных приложений. В этих главах вводятся группы унитарных преобразований с размерностью два, три, четыре и шесть. Они используются затем для описания наблюдаемых симметрий между протонами и нейтронами, а также некоторых регулярных свойств недавно открытых короткоживущих элементарных частиц. В частности, раскрывается содержание понятий «странность» и «кварки».

Второй том начинается с дальнейших приложений точечных групп — на этот раз к движению электронов в молекуле (гл. 13), а затем (гл. 14) мы переходим от симметрии с неподвижной точкой к изучению дискретных трансляций (переносов) и их применению в теории кристаллической структуры. Как известно, специальная теория относительности имеет фундаментальное значение во всей физике и приобретает практическое значение, когда скорости движения становятся сравнимыми со скоростью света. Для всех систем, рассмотренных в первом томе, ввиду достаточной малости скоростей частиц было допустимо игнорировать выводы специальной теории относительности. В гл. 15 рассматривается симметрия в четырехмерном пространстве — времени, лежащая в основе специальной теории относительности. Анализируются также следствия этой симметрии, в особенности связанные с классификацией элементарных частиц. Понятия импульса, энергии, массы и спина интерпретируются с точки зрения теории симметрии на основе групп Лоренца и Пуанкаре, причем удается определить естественное место в теории частиц с нулевой массой покоя (таких, как фотон). Гл. 16 посвящена полям, в отличие от предшествующих глав, где речь шла только о частицах и системах частиц. Мы рассматриваем прежде всего классические поля (такие, как электромагнитное), используя четырехмерное пространство — время. Затем дается краткий очерк теории релятивистских квантовых полей, которая допускает возможность рождения и уничтожения частиц и существования античастиц.

В гл. 17 и 18 подробно рассматриваются две общие группы: «симметрическая» группа всех перестановок N объектов и «унитарная» группа в N измерениях и разби-

рается вопрос о связи между ними. Частные случаи этих двух групп уже встречались в предшествующих главах. В гл. 19 описаны некоторые неожиданные симметрии в двух знакомых потенциалах — кулоновском и параболическом (потенциале гармонического осциллятора). В последней главе (гл. 20) собраны небольшие и мало связанные друг с другом, но весьма интересные темы.

В текст включены проработанные примеры и подборы задачи с решениями. Для читателей, интересующихся более детальным анализом физических приложений или желающих глубже изучить математические вопросы, в конце каждой главы дается список дополнительной литературы.

Для удобства читателей мы пользовались общепринятыми обозначениями: курсивом для алгебраических символов (например, x, y, z) и прямым латинским шрифтом для операторов. Так, оператор и матрица обозначаются символом T , а матричные элементы (числа) — курсивными буквами T_{ij} . Кроме того, векторы обозначаются прямыми жирными буквами, а в гл. 15 и 16 (т. 2) встречаются четырехвекторы $\hat{e}$ с крышкой над буквой.

Дж. Э.
П. Д.

Брайтон, Сассекс, 1979

ВВЕДЕНИЕ

§ 1. РОЛЬ СИММЕТРИИ В ФИЗИКЕ

В «Кратком Оксфордском словаре» симметрия определяется как «Красота, обусловленная пропорциональностью частей тела или любого целого, равновесием, подобием, гармонией, согласованностью». Хотя в физике очень много сложного, в ней также много простоты и изящества, что в значительной мере обусловлено симметрией физических законов и физических систем. В соответствии с этим симметрия не только занимает важное место в физике, но и играет все возрастающую роль в современных физических исследованиях. Чтобы с общей точки зрения объяснить, почему наличие симметрии приводит к многочисленным упрощениям физической картины как в классической, так и в квантовой механике, мы и написали свою книгу. Общие положения в ней иллюстрируются конкретными простыми свойствами кристаллов, молекул, атомов, ядер и элементарных частиц. Хотя эти физические системы столь очевидно различаются между собой, все они тем не менее могут быть рассмотрены с позиций единой теории симметрии. Таким образом, изучение симметрии способствует установлению единства физики, выявляя сходство между ее различными областями.

Симметрия играет некую роль и в классической, не только в квантовой, физике, но именно в последней ее проявления наиболее интересны. Это объясняется рядом причин. С одной стороны, на микроскопическом уровне, где, например, один электрон неотличим от любого другого электрона и всякий атом, скажем атом углерода, идентичен любому атому того же типа, можно найти значительно больше симметричного в природе. С другой стороны, квантовая механика, которой приходится пользоваться на микроскопическом уровне, будучи значительно сложнее классической, в большей мере упрощается при

наличии симметрии. Примером может служить то, что частица описывается не заданием ее положения, а заданием волновой *функции*. Важно и то, что исследования строения атомных и субатомных систем представляют собой сейчас передний край науки, и здесь идеи симметрии помогают отыскивать порядок в кажущемся хаосе.

Как рабочим инструментом для изучения следствий принимаемых теорий или моделей в физике пользуются математикой. Например, при прямолинейном движении частицы с массой M в направлении оси x под действием силы $f(x)$, согласно закону физики (ньютоновской теории), мы имеем $f(x) = M(d^2x/dt^2)$. Чтобы выразить координату $x(t)$ через время t при заданной функции $f(x)$, нужно решить это дифференциальное уравнение с учетом начальных значений величин x и dx/dt . Для этого в ньютоновской механике соответствующим математическим аппаратом оказывается дифференциальное и интегральное исчисления. Изучая же симметрию физических систем, мы рассматриваем их поведение при различных преобразованиях. Например, если частица движется прямолинейно в поле с потенциалом $V(x)$, то этот потенциал может иметь зеркальную симметрию относительно начала координат, т. е. удовлетворять равенству $V(-x) = V(x)$. В таком случае говорят, что потенциал инвариантен относительно преобразования, заменяющего x на $-x$. В случае же частицы, движущейся в трех измерениях, потенциал может обладать сферической симметрией, т. е. в сферических полярных координатах иметь вид $V(r)$ и не зависеть от угла. Такой потенциал инвариантен относительно любого преобразования, состоящего в повороте на произвольный угол вокруг произвольной оси, проходящей через начало координат (число таких преобразований бесконечно!).

Чтобы исследовать физические следствия симметрии системы, мы, очевидно, должны узнать кое-что о преобразованиях и в особенности о множестве (совокупности) преобразований, оставляющих неизменными некоторые функции типа потенциала. Теория, рассматривающая такие совокупности преобразований, называемая математиками «теорией групп», и есть тот математический аппарат, которым пользуются физики при изучении симметрии.

Интересно проследить аналогию между применением дифференциального и интегрального исчислений в клас-

сической механике и теории групп — в квантовой. Исторически открытие законов Ньютона и изобретение дифференциального и интегрального исчисления, датированные семнадцатым веком, примерно совпадают во времени. Идеи теории групп возникли в математике еще в 1810 г., но наиболее важная для исследования симметрии теория представлений получила развитие лишь в 20-х годах нынешнего века. Именно в эти годы физики создавали квантовую теорию. И действительно, важное значение симметрии для квантовой механики было установлено очень скоро в классических работах Вигнера (1931), Вейля (1928) и Ван-дер-Вердена (1932).

Всегда были приверженцы того мнения, что использовать теорию групп в квантовой механике необязательно. В определенном смысле это верно, поскольку теория групп сама построена из простейших алгебраических действий. Тем не менее затраты сил на изучение столь тонкого и сложного аппарата, как теория групп, быстро окупаются, ибо она позволяет внести красивую простоту и общность в исследование сложных квантовомеханических систем. В конце концов дифференциальное и интегральное исчисления ведь тоже можно считать необязательными для классической механики. Например, движение по эллиптической орбите можно вывести из закона обратной пропорциональности сил гравитационного притяжения квадрату расстояния путем лишь геометрических рассуждений. И сам Ньютон первоначально пользовался именно таким методом, но в настоящее время мы обосновываем этот результат, решая дифференциальное уравнение. Заглядывая вперед, очень интересно задуматься над тем, какие новые блестящие достижения физики и математики возможны в результате их дальнейшего параллельного развития.

§ 2. ПРИМЕРЫ ПРОЯВЛЕНИЯ СИММЕТРИИ

Чтобы оживить интерес читателя, мы перечислим ниже ряд физических систем, обладающих симметрией, и отметим их некоторые свойства, являющиеся прямыми следствиями симметрии. Сначала приведем простейшие примеры. Хотя в некоторых случаях мы можем связать симметрию со свойствами, не прибегая к новым методам, это,

конечно, не всегда возможно. Целью данной книги является как раз общий анализ следствий существования симметрии, и, лишь преодолев значительную часть книги, читатель будет в состоянии понимать и предсказывать поведение систем со сложной симметрией.

А. Классическая частица в одном измерении

Движение частицы с массой M в одном измерении в поле с потенциалом $V(x)$ описывается уравнением

$$M\ddot{x} = -dV/dx. \quad (1.1)$$

Предположим теперь, что $V(x)$ — не зависящая от x константа, другими словами, что потенциал инвариантен относительно трансляций. Тогда ясно, что $M\ddot{x}=0$. Интегрируя, получаем $M\dot{x}=C$, т. е. закон сохранения (постоянства) импульса $M\dot{x}$.

Б. Классическая частица в двух измерениях

Движение частицы в двух измерениях определяется двумя уравнениями:

$$M\ddot{x} = -\partial V/\partial x, \quad M\ddot{y} = -\partial V/\partial y. \quad (1.2)$$

Пусть теперь потенциал $V(x, y)$ инвариантен относительно вращения вокруг начала координат, т. е. если перейти от декартовых координат x, y к полярным r и θ , то $V(x, y)$ не зависит от полярного угла θ . В этом случае $\partial V/\partial \theta = 0$. Однако

$$\frac{\partial V}{\partial \theta} = \frac{\partial x}{\partial \theta} \frac{\partial V}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \theta} \frac{\partial V}{\partial y} = -y \frac{\partial V}{\partial x} + x \frac{\partial V}{\partial y},$$

и, используя уравнения (1.2), получаем

$$\frac{\partial V}{\partial \theta} = M(y\ddot{x} - x\ddot{y}) = M \frac{d}{dt}(y\dot{x} - x\dot{y}),$$

т. е. инвариантность $\partial V/\partial \theta = 0$ означает постоянство выражения $M(y\dot{x} - x\dot{y})$ — момента количества движения (или углового момента) относительно оси, проходящей через начало координат перпендикулярно плоскости.

Если частица, движущаяся свободно в трех измерениях, находится в поле с потенциалом, инвариантным от-

носителю поворотов вокруг любой оси, то аналогичные рассуждения показывают, что постоянна *любая* компонента углового момента. Другими словами, в случае сферически-симметричного потенциала сохраняются как величина, так и направление углового момента.

В. Две классические частицы, соединенные пружинами

Две частицы одинаковой массы M связаны между собой, а также с неподвижными опорами одинаковыми параллельными пружинами с коэффициентом упругости λ . Пусть длина ненагруженной пружины равна a и опоры расположены на расстоянии $3a$ друг от друга. Обозначим смещения двух частиц из их положений равновесия через x_1 и x_2 . Хотя общее смещение (рис. 1.1) не обладает сим-

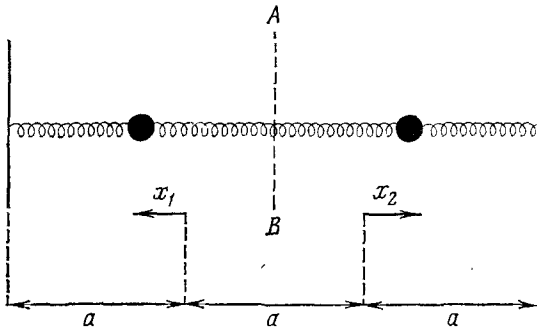


Рис. 1.1.

метрией, интуиция подсказывает, что система в некотором смысле симметрична относительно средней линии. Действительно, кинетическая T и потенциальная V энергии,

$$T = \frac{1}{2} M (\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2), \quad V = \frac{1}{2} \lambda \{x_1^2 + x_2^2 + (x_1 + x_2)^2\},$$

инвариантны относительно перестановки x_1 и x_2 — преобразования координат x_1 и x_2 при отражении относительно линии AB .

В данном случае следствия симметрии не столь существенны, однако приложение общих результатов к колебаниям атомов относительно их равновесных позиций в молекуле весьма важно. Поэтому мы решим полностью

эту простую задачу. Система дифференциальных уравнений движения имеет вид

$$\begin{aligned} M\ddot{x}_1 &= -\lambda x_1 - \lambda(x_1 + x_2), \\ M\ddot{x}_2 &= -\lambda x_2 - \lambda(x_1 + x_2), \end{aligned}$$

что позволяет ввести новые координаты $Q_1 = x_1 + x_2$ и $Q_2 = x_1 - x_2$. Тогда, складывая и вычитая два уравнения системы, найдем

$$M\ddot{Q}_1 = -3\lambda Q_1, \quad M\ddot{Q}_2 = -\lambda Q_2,$$

откуда видно, что в новых координатах Q_1 и Q_2 мы имеем простые гармонические колебания $Q_i \sim \cos \omega_i t$ с частотами $\omega_1 = (3\lambda/M)^{1/2}$ и $\omega_2 = (\lambda/M)^{1/2}$. В исходных координатах x_1 и x_2 у нас будут суперпозиции этих простых колебаний, поскольку $x_1 = 1/2(Q_1 + Q_2)$ и $x_2 = 1/2(Q_1 - Q_2)$. Новые координаты Q_1 , Q_2 и соответствующие частоты обычно называют нормальными координатами и нормальными частотами.

Заметим, что координата Q_1 оказывается четной, а Q_2 — нечетной относительно отражения. Если мы обозначим такое отражение буквой σ , то $\sigma Q_1 = Q_1$ и $\sigma Q_2 = -Q_2$. Другими словами, новые координаты при отражении преобразуются проще, чем исходные x_1 и x_2 , и, кроме того, уравнения движения, записанные в новых координатах, оказываются независимыми.

В более сложных задачах не всегда удастся так легко разделить все уравнения движения, но тем не менее, выбирая новые координаты, «проще» преобразующиеся при симметрических операциях, можно существенно уменьшить степень смешивания уравнений. Опять-таки, хотя из данного примера ясно, что Q_1 и Q_2 преобразуются простейшим возможным образом, для случаев более сложной симметрии придется определить и исследовать само понятие «простота». Это будет сделано в гл. 4. Например, для молекулы NH_3 , содержащей 4 атома и имеющей в общей сложности 12 степеней свободы, соображения симметрии позволяют в случае малых колебаний уменьшить число связанных между собой уравнений движения от двенадцати до двух. Общие принципы применения соображений симметрии в теории нормальных колебаний будут рассмотрены в гл. 6 на примере колебаний молекул.

Г. Частица в трех измерениях в квантовой механике, сферическая симметрия и вырождение

В квантовой механике энергетические уровни частицы, движущейся в поле со сферически-симметричным потенциалом, являются вырожденными: одной и той же энергии отвечают несколько независимых волновых функций. К таким системам относится атом водорода, единственный электрон которого движется в электростатическом поле протона. Попросту говоря, причина такого вырождения заключается в том, что в отсутствие какого-либо выделенного направления в пространстве энергия не может, очевидно, зависеть от направления вектора углового момента. В квантовой механике отсутствие такой зависимости выражается в вырождении. Если сферическая симметрия нарушается, например, вследствие включения магнитного поля, то вырождение «снимается» и возникает «мультиплет», состоящий из нескольких близко расположенных уровней энергии, как, например, при зеемановском расщеплении.

Сферическую симметрию можно также нарушить, поместив атом во внешнее поле, которое обладает симметрией относительно некоторых вращений, хотя не является сферически-симметричным. В таком случае вырождение снимается лишь частично. Подобные явления в атоме, находящемся в кристаллическом поле, будут подробно рассмотрены в гл. 9.

Вырождение вследствие сферической симметрии с физической точки зрения легко объяснить, рассматривая ориентацию вектора углового момента, но существование вырождения характерно вообще для всякой симметрии. Действительно, возьмем уравнение Шредингера $H\psi = E\psi$, где H — оператор Гамильтона, E — энергия и ψ — волновая функция. Выполним преобразование координат, переводящее ψ в ψ' и H в H' ; преобразовав обе части уравнения Шредингера, будем иметь $H'\psi' = E\psi'$. Энергия, будучи числовой величиной, не изменяется при преобразовании. Теперь предположим, что гамильтониан H' инвариантен относительно преобразования, т. е. $H = H'$. Тогда $H\psi' = E\psi'$, т. е. ψ' — собственная функция исходного гамильтониана, отвечающая той же энергии, что и ψ . Следовательно, если ψ' не является с точностью до

постоянного множителя той же самой функцией, что и ψ , мы имеем по меньшей мере двукратное вырождение уровней с энергией E . В гл. 5 мы увидим, как (вне зависимости от точного вида гамильтониана) структура вырожденных мультиплетов следует только из симметрии системы.

Д. Частица в одном измерении в квантовой механике, четность и правила отбора

Рассмотрим с точки зрения квантовой механики движение частицы в одном измерении под действием четного потенциала $V(x)=V(-x)$. Вследствие такой простейшей симметрии собственные функции гамильтониана оказываются либо четными, либо нечетными функциями переменной x . В самом деле, если $H\psi(x)=E\psi(x)$, то и $H\psi(-x)=E\psi(-x)$, как в п. «Г». Следовательно, $\psi(x)$ и $\psi(-x)$ отвечают одной и той же энергии, так что в предположении об отсутствии вырождения эти две функции физически идентичны. Следовательно, $\psi(-x)=c\psi(x)$, где c — константа. Но это означает, что $\psi(x)=c\psi(-x)$, а также что $\psi(x)=c^2\psi(x)$, откуда $c^2=1$, $c=\pm 1$. Таким образом, $\psi(x)$ является либо четной, либо нечетной функцией, но не может быть чем-либо другим. Характеристику c называют четностью функции $\psi(x)$. Если имеется вырождение, то мы не можем сказать, что $\psi(-x)=c\psi(x)$. Но в этом случае в качестве пары вырожденных собственных функций можно выбрать линейные комбинации $\{\psi(x)\pm\psi(-x)\}/\sqrt{2}$, одна из которых будет четной, а другая — нечетной. (Можно показать, что в одномерном случае вырождения не бывает, но в трехмерном случае, на который легко обобщить сказанное выше, вырождение возможно.)

На данном примере можно рассмотреть еще одно следствие симметрии, а именно понятие «правил отбора» в квантовой механике. Вероятность перехода системы из некоторого начального состояния ψ_i в конечное состояние ψ_f пропорциональна квадрату интеграла

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_f^*(x) g(x) \psi_i(x) dx,$$

где вид множителя $g(x)$ зависит от способа перехода. Если подынтегральное выражение нечетно, то интеграл,

очевидно, обращается в нуль. Следовательно, если $g(x)$ — четная функция аргумента x , то интеграл отличен от нуля только тогда, когда функции ψ_i и ψ_f либо обе четны, либо обе нечетны, т. е. «четность» исходного и конечного состояний одинакова. Если же $g(x)$ — нечетная функция, то начальное и конечное состояния должны иметь разную четность. Если интеграл $I = 0$, то и вероятность перехода равна нулю — отсюда и выражение «правило отбора».

Е. Поиски симметрии, физика элементарных частиц

При изложении теории симметрии в физике вполне естественно анализировать следствия существования той или иной симметрии, но при этом всегда следует помнить, что в эксперименте мы наблюдаем следствия и лишь затем выясняем, какая симметрия может их вызывать. Такой процесс поиска — двусторонний, как и бывает обычно при разработке физической теории. Экспериментальные данные указывают на возможные типы симметрии; анализируя следствия симметрии, делают предсказания, для проверки которых проводят новые эксперименты.

Прекрасный пример такого метода исследований дает нынешняя физика элементарных частиц. Массы нейтрона и протона почти одинаковы, то же наблюдается и для π^+ -, π^- - и π^0 -мезонов. Подобные мультиплеты характерны даже для всех наблюдаемых элементарных частиц. Поскольку масса релятивистски связана с энергией, существование массовых мультиплетов свидетельствует о симметрии фундаментального гамильтониана. Так как различные составляющие мультиплета заряжены по-разному, симметрические операторы должны, по-видимому, включать преобразования «зарядовых координат» частиц. Развитие этой идеи привело к концепции «изоспина», чрезвычайно важной для интерпретации как структуры ядра, так и свойств элементарных частиц (гл. 10).

С возрастанием энергий современных ускорителей в последние годы обнаруживается все больше элементарных частиц. Некоторые зарядовые мультиплеты, о которых говорилось выше, по-видимому, имеют одинаковую массу. Кроме того, было постулировано существование и больших мультиплетов. Это в свою очередь потребовало наличия симметрии более высокой, чем описываемой изоспином. Ее называли симметрией SU_3 — обозначение

будет объяснено в гл. 11. К сожалению, SU_3 -мультиплеты обнаруживают значительное расщепление, что свидетельствует о более низкой симметрии некоторых существенных членов гамильтониана (подобно тому как для атома зеемановское расщепление говорит о снятии сферической симметрии в магнитном поле).

§ 3. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Выше были приведены примеры самых разнообразных физических систем, и во всех случаях к ним применима одна и та же общая теория симметрии. Перечислим еще раз самые важные следствия существования симметрии в квантовомеханических системах: 1) законы сохранения; 2) энергетическое вырождение; 3) «простота» преобразования собственных функций при операциях симметрии и существование для них симметричного индекса, не зависящего от частного вида гамильтониана; 4) правила отбора; 5) соотношения между матричными элементами наблюдаемых величин. Конечно, не все эти следствия могут наблюдаться в случаях простой симметрии.

В предыдущих примерах мы так или иначе рассмотрели все эти проявления симметрии, кроме п. 5. Здесь мы не будем на этом останавливаться, но последнее следствие наблюдается при зеемановском расщеплении атомных уровней. Энергетический сдвиг разных состояний в любом данном мультиплете пропорционален их угловому моменту по отношению к направлению поля, и это не зависит от детальной структуры волновой функции. Таким образом, в данном примере матричные элементы достаточно просто связаны друг с другом, хотя их абсолютные значения вычислить, вообще говоря, трудно.

Другим примером следствия 5 могут служить формулы масс ядер и элементарных частиц. В этом случае малые различия в массе между компонентами изоспинового мультиплета очень просто связаны между собой. Вообще же говоря, различия масс частиц SU_3 -мультиплетов требуют более сложных формул, поскольку симметрия здесь сложнее. Однако везде действует тот же принцип, что и в случае зеемановского расщепления. Все упомянутые в этом введении примеры будут подробно рассмотрены далее. Но прежде всего нам следует овладеть соответствующим математическим аппаратом — этому посвящены гл. 2—4.

ГРУППЫ И ИХ СВОЙСТВА

В данной главе мы введем понятие группы, рассмотрим основные свойства ее элементов и приведем примеры нескольких простейших групп. Свойства специальных групп, важных в физических приложениях, будут подробно рассмотрены в следующих главах.

§ 1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ГРУППЫ

Хотя мы скоро перейдем к весьма конкретным примерам, начнем все же с абстрактного определения группы, при всей своей поразительной простоте влекущего за собой множество важных следствий.

Совокупность $\mathcal{G}$ элементов $G_1, G_2, G_3, \dots$ называется *группой*, если задан закон «умножения» элементов, удовлетворяющий определенным требованиям. Результат умножения двух элементов G_a и G_b называется, естественно, их произведением и обозначается через $G_a G_b$. Упомянутые требования таковы.

1. Произведение $G_a G_b$ любых двух элементов тоже должно быть элементом данной совокупности, т. е.

$$G_a G_b = G_d, \text{ где } G_d \text{ — элемент группы } \mathcal{G}, \quad (2.1)$$

2. При перемножении трех элементов G_a, G_b и G_c не должно иметь значения, какое произведение вычисляется первым, другими словами:

$$G_a (G_b G_c) = (G_a G_b) G_c, \quad (2.2)$$

где действие умножения внутри скобок выполняется в первую очередь. Это означает, что скобки не нужны и произведение трех элементов можно просто записать в виде $G_a G_b G_c$.

3. Один из элементов совокупности, который обычно обозначают через E и называют единичным элементом,

обязан иметь следующие свойства:

$$EG_a = G_a, \quad G_a E = G_a, \quad (2.3)$$

для любого G_a из набора $\mathcal{G}$.

4. Каждому элементу G_a из совокупности должен соответствовать другой элемент той же совокупности, обозначаемый через G_a^{-1} и называемый «обратным» элементу G_a . Этот элемент имеет следующие свойства:

$$G_a G_a^{-1} = E, \quad G_a^{-1} G_a = E. \quad (2.4)$$

Вообще говоря, изменять порядок умножения элементов группы *не разрешается*; другими словами, $G_a G_b$ — это, вообще говоря, не тот же самый элемент, что и $G_b G_a$. Группы, в которых $G_a G_b = G_b G_a$ для любых элементов G_a и G_b , называются «абелевыми»; они редко встречаются в физических задачах. Элементы абелевых групп называют «коммутирующими».

Заметим, что элемент, обратный произведению $G_a G_b$, равен

$$(G_a G_b)^{-1} = G_b^{-1} G_a^{-1}. \quad (2.5)$$

Это сразу же следует из определения

$$(G_a G_b)^{-1} G_a G_b = E,$$

если умножить справа обе части этого равенства вначале на G_b^{-1} , а потом на G_a^{-1} . Результаты умножения $G_a G_b = G_d$ элементов данной группы $\mathcal{G}$ удобно записывать в виде таблицы умножения, где строки и столбцы обозначены символами групповых элементов, а результат G_d умножения $G_a G_b$ находится на пересечении строки G_a со столбцом G_b . Из определения группы следует, что каждый элемент группы должен встретиться в каждой строке и каждом столбце один и только один раз.

Мы не ограничивали число элементов в группе. Оно может быть конечным (и тогда его обозначают буквой g и называют «порядком» группы), но может быть и бесконечным. В соответствии с этим и группа называется конечной или бесконечной. В данной книге мы будем рассматривать как конечные, так и бесконечные группы, поскольку и те и другие имеют большое значение для физики. Многие общие свойства групп, о которых пойдет речь здесь, а также в гл. 4, не зависят от того, является ли

группа конечной или бесконечной. Но в некоторых случаях приходится проводить отдельные доказательства. Конечные группы несколько проще; из бесконечных групп мы затронем лишь «непрерывные», которые весьма часто встречаются при анализе интересующих нас физических задач. Так называются группы, элементы которых обозначаются не дискретными символами a или b , а непрерывно меняющимися параметрами. В этом случае при малом изменении параметра можно непрерывно перейти от одного элемента группы к другому.

§ 2. ПРИМЕРЫ ГРУПП

Простейший пример элементов группы — обычные числа с обычным законом умножения; два наших первых примера именно таковы.

1. Два числа 1 и -1 образуют группу. Единичный элемент — это, естественно, 1. Элемент, обратный единичному, опять-таки единица, а элемент -1 обратен сам себе. Эти соотношения записаны в табл. 2.1 (таблице группового умножения).

Таблица 2.1

$\begin{array}{c} \searrow \\ \sigma_b \\ \swarrow \end{array}$			
		1	-1
$\begin{array}{c} \swarrow \\ \sigma_a \\ \searrow \end{array}$	1	1	-1
	-1	-1	1

2. Несколько более обширную таблицу того же рода образует набор чисел 1, -1 , i и $-i$; результаты их умножения представлены в табл. 2.2.

Обе эти группы «циклические», т. е. все их элементы могут быть получены как степени одного элемента. Во втором примере все 4 элемента даются выражением i^k , где $k=0, 1, 2, 3$. Увеличивая показатель степени k далее, мы, очевидно, получим повторение того же цикла. Обе рассмотренные группы абелевы, поскольку мы приняли обычный закон умножения. Нетрудно сообразить, что и всякая циклическая группа должна быть абелевой.

Таблица 2.2

$G_a \backslash G_b$				
	1	-1	i	$-i$
1	1	-1	i	$-i$
-1	-1	1	$-i$	i
i	i	$-i$	-1	1
$-i$	$-i$	i	1	-1

При изучении симметрии физических систем весьма важно знать их поведение при поворотах. Разнообразные наборы вращений образуют группы, и к некоторым примерам таких групп мы и переходим. Закон умножения здесь таков: если поворот R_1 переводит систему из положения A в положение B , а поворот R_2 — из положения B в положение C , то произведение $R_1 R_2$ переводит систему из A в C . Здесь мы впервые сталкиваемся с примером неабелевой группы: хотя при вращении вокруг одной и той же оси $R_2 R_1 = R_1 R_2$, в общем случае $R_2 R_1 \neq R_1 R_2$. Таким образом, вращения, вообще говоря, не коммутируют.

Чтобы убедиться в некоммутативности вращений, выберем в качестве операции R_1 поворот на угол $\pi/2$ вокруг оси z , а в качестве операции R_2 — поворот на π вокруг оси y . (Поворотом на положительный угол относительно направленной оси мы, как это общепринято, будем считать поворот, соответствующий вращению правого винта, т. е. вращению по часовой стрелке, если смотреть вдоль оси в ее положительном направлении.) Если внимательно проследить за перемещением каждой оси при последовательных поворотах, то мы увидим, что поворот $R_2 R_1$ аналогичен повороту на π вокруг оси $(1, 1, 0)$, тогда как $R_1 R_2$ — это поворот на π вокруг оси $(-1, 1, 0)$. Но начнем с более простых примеров.

3. Пусть E — тождественная операция (поворот на нулевой угол), а R — поворот на угол π вокруг оси z . Тогда набор из E и R образует группу с таблицей умно-

жения, указанной в табл. 2.3. (Такая группа обычно обозначается через C_2 .)

Таблица 2.3

$G_a \backslash G_b$	E	R
E	E	R
R	R	E

4. Пусть операция I — инверсия, т. е. операция, изменяющая направление всякого вектора на обратное. Очевидно, что $I^2 = E$ (тождественная операция), так что пара E, I образует группу; она называется группой S_2 .

5. Если R_1 и R_2 — повороты вокруг оси z на углы $2\pi/3$ и $4\pi/3$, то совокупность операций E, R_1 и R_2 есть группа, называемая группой C_3 . Ее таблицу умножения легко вывести (табл. 2.4).

Таблица 2.4

$G_a \backslash G_b$	E	R_1	R_2
E	E	R_1	R_2
R_1	R_1	R_2	E
R_2	R_2	E	R_1

6. Группу образует совокупность операций E, R_1, R_2, R_3, R_4 и R_5 , если R_1 и R_2 — повороты на углы $2\pi/3$ и $4\pi/3$ вокруг оси z , а остальные элементы R_3, R_4 и R_5 — повороты на угол π вокруг каждой из трех осей, лежащих в плоскости xy (рис. 2.1). Такая группа D_3 с геометрической точки зрения есть группа вращений равностороннего треугольника, приводящих его в положения, неотличимые от исходного. Говоря «неотличимые», мы предполагаем, что треугольник не имеет меток и вообще

ничего, что нарушало бы его идеальную симметрию. Такое преобразование геометрической фигуры называют операцией «собственного совмещения»; если разрешены отражения, то говорят о «несобственном совмещении».

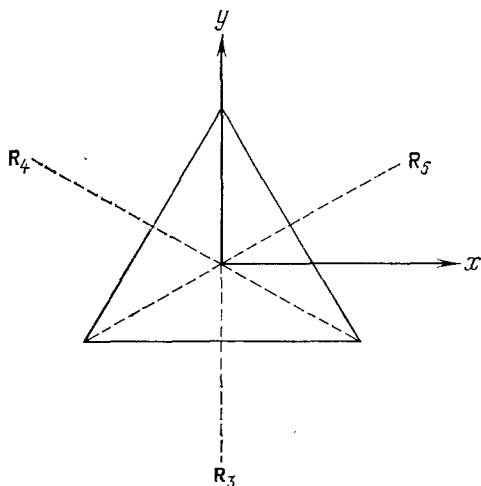


Рис. 2.1.

Для наглядности мы все же вообразим, что углы треугольника обозначены цифрами 1, 2 и 3, и посмотрим, как эти цифры перемещаются при поворотах. Таким путем можно построить таблицу умножения (табл. 2.5). Например,

$$R_1 \begin{array}{c} 1 \\ 2 \quad 3 \end{array} = \begin{array}{c} 3 \\ 1 \quad 2 \end{array}$$

$$R_4 R_1 \begin{array}{c} 1 \\ 2 \quad 3 \end{array} = R_4 \begin{array}{c} 3 \\ 1 \quad 2 \end{array} = \begin{array}{c} 1 \\ 3 \quad 2 \end{array} = R_3 \begin{array}{c} 1 \\ 2 \quad 3 \end{array}$$

так что $R_4 R_1 = R_3$.

Выяснить на этом и других аналогичных примерах, образует ли набор элементов группу, можно по таблице

Таблица 2.5

$G_b \backslash G_a$	E	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5
E	E	R_1	R_2	R_3	R_4	R_5
R_1	R_1	R_2	E	R_4	R_5	R_3
R_2	R_2	E	R_1	R_5	R_3	R_4
R_3	R_3	R_5	R_4	E	R_2	R_1
R_4	R_4	R_3	R_5	R_1	E	R_2
R_5	R_5	R_4	R_3	R_2	R_1	E

умножения. Поскольку любая строка и любой столбец таблицы обозначены одним из элементов набора, условие 1 образования группы выполняется. Единичный элемент появляется в каждой строке и в каждом столбце один и только один раз — этим подтверждается справедливость условия 4. Условие 3 выполняется очевидно, а условие 2 справедливо для любых вращений. Обратно, уже определение нашей совокупности как набора *всех* собственных операций совмещения равностороннего треугольника с собой гарантирует, что этот набор является группой. Как произведение двух операций совмещения, так и действие, обратное любой из них, естественно, являются операциями совмещения.

7. Треугольник из приведенного выше примера также не изменяется при отражении в его плоскости. Эту операцию обычно обозначают через σ_h , считая, что плоскость треугольника горизонтальна (horizontal). Введение нового элемента влечет за собой появление других новых элементов — произведений $R_1\sigma_h, R_2\sigma_h, \dots, R_5\sigma_h$. Геометрически ясно, что произведение $R_3\sigma_h$ — это просто отражение в вертикальной плоскости, в которой лежит ось R_3 ; то же самое верно для $R_4\sigma_h$ и $R_5\sigma_h$. Легко убедиться, что набор из 12 элементов

$$E, R_1, R_2, R_3, R_4, R_5, \sigma_h, R_1\sigma_h, R_2\sigma_h, R_3\sigma_h, R_4\sigma_h, R_5\sigma_h,$$

где $R_3\sigma_h$ и т. д., образует группу, в которой содержится группа D_3 ; эту новую группу обычно обозначают

символом D_{3h} . Ее таблицу умножения можно получить из табл. 2.5 и соотношения $\sigma^2 = E$ (двукратное отражение в плоскости эквивалентно операции идентичности). Заметим, что группа D_{3h} не содержит инверсии I , хотя несобственные элементы (не являющиеся поворотами) в ней содержатся. Очевидно, что инверсия треугольника не переводит его в себя. Элементы типа $R_1\sigma_h$, содержащие вращения в сочетании с отражением в плоскости, перпендикулярной оси вращения, называются зеркально-поворотными.

8. Совокупность всех вращений относительно заданной оси образует непрерывную группу, называемую группой $\mathcal{R}_2$. Ее элементы обозначаются символами $R(a)$, где a — угол поворота, $0 \leq a < 2\pi$. В этом случае таблица умножения должна быть бесконечной, но в действительности мы можем написать общую формулу для произведения двух любых элементов. Из геометрических соображений очевидно, что

$$R(a)R(b) = R(a+b), \quad (2.6)$$

причем

$$R(a+2\pi) = R(a).$$

Таким образом, элементы коммутируют и обратный элемент есть

$$R^{-1}(a) = R(2\pi - a). \quad (2.7)$$

9. Обобщив предыдущий пример на случай трех измерений, мы получим набор всевозможных вращений вокруг осей, проходящих через данную точку, который также будет группой. Здесь для описания вращений требуется три параметра. Обычный способ параметризации включает задание двух полярных углов, фиксирующих ось вращения, и угла поворота относительно этой оси. Операция вращения в этом случае обозначается через $R_k(a)$, где индекс k соответствует единичному вектору в направлении оси вращения. Вместо этого можно также ввести эйлеровы углы, описывающие положение тела по отношению к некоторой исходной позиции. Данная группа, обозначаемая символом $\mathcal{R}_3$, состоит из совокупности собственных операций совмещения сферы, и мы еще вернемся к ней в гл. 7.

10. Набор всех перестановок P из n объектов образует группу, называемую обычно «симметрической группой» и обозначаемую символом $\mathcal{S}_n$. Произведение двух перестановок по определению есть такая перестановка, которая прямо переводит исходное расположение в конечное. Перестановку удобно обозначать символом

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & p_3 & \dots & p_n \end{pmatrix}, \quad (2.8)$$

указывающим, что элемент i заменяется элементом p_i . Следовательно, числа $p_1 p_2 p_3 \dots p_n$ — это переставленные числа $1 2 3 \dots n$. Таким образом, существует $n!$ элементов, поскольку p_1 можно выбрать n способами, p_2 можно выбрать $(n-1)$ способами и т. д. Так обычно и делают, но записывать числа верхнего ряда P в порядке возрастания вовсе не обязательно. Так, например, два символа

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}$$

обозначают одну и ту же перестановку, так что сразу же можно записать выражение для элемента, обратного P :

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & p_3 & \dots & p_n \\ 1 & 2 & 3 & \dots & n \end{pmatrix}.$$

В качестве упражнения составим таблицу умножения для $n=3$. Для краткости введем обозначения

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad P_1 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix},$$

$$P_3 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_4 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad P_5 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Получим, например,

$$P_1 P_2 = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} =$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 3 & 2 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = P_4.$$

Здесь мы для доказательства переставили столбцы в P_1 так, чтобы верхняя строка матрицы P_1 совпала с нижней строкой матрицы P_2 . Поэтому можно написать общее соотношение

$$\begin{pmatrix} p_1 & p_2 & p_3 & \dots & p_n \\ q_1 & q_2 & q_3 & \dots & q_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & p_3 & \dots & p_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & \dots & n \\ q_1 & q_2 & q_3 & \dots & q_n \end{pmatrix}, \quad (2.9)$$

которое будет фактически определением произведения двух перестановок. Таким путем мы построим таблицу умножения (табл. 2.6).

Таблица 2.6

$G_a \backslash G_b$						
	E	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5
E	E	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5
P_1	P_1	E	P_4	P_5	P_2	P_3
P_2	P_2	P_5	E	P_4	P_3	P_1
P_3	P_3	P_4	P_5	E	P_1	P_2
P_4	P_4	P_3	P_1	P_2	P_5	E
P_5	P_5	P_2	P_3	P_1	E	P_4

§ 3. ИЗОМОРФИЗМ

Данное выше определение группы столь абстрактно, что возможны случаи, когда две группы, элементы которых определены совершенно по-разному, тем не менее очень сходны между собой и алгебраически могут рассматриваться как одна и та же группа. На языке математики это выражается так: мы называем две группы $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$ изоморфными, если между элементами G_a группы $\mathcal{G}$ и элементами H_a группы $\mathcal{H}$ можно установить взаимно однозначное соответствие $G_a \leftrightarrow H_a$, такое, что из равенства $G_a G_b = G_d$ следует равенство $H_a H_b = H_d$. Если соответствие такого типа существует, но не является

взаимно однозначным, то группы называются гомоморфными. Таким образом, две изоморфные группы должны иметь одну и ту же таблицу умножения; возможно лишь иное расположение групповых элементов. Поскольку при изучении симметрии для нас интересны в основном алгебраические свойства групп, определяемые их таблицами умножения, понятие изоморфизма позволяет экономить время и находить полезные аналогии, выявляя изоморфизм групп.

С некоторыми случаями изоморфизма мы уже сталкивались в примерах § 2. Так, взаимно однозначное соответствие $1 \leftrightarrow E$ и $-1 \leftrightarrow R$ указывает на изоморфизм групп, разобранных в примерах 1 и 3, а соответствие $R_1 \leftrightarrow P_5$, $R_2 \leftrightarrow P_4$, $R_3 \leftrightarrow P_1$, $R_4 \leftrightarrow P_2$ и $R_5 \leftrightarrow P_3$ — на изоморфизм в группах примеров 6 и 10.

§ 4. ПОДГРУППЫ

Часто оказывается возможным выделить внутри данного набора из g элементов, образующих группу $\mathcal{G}$, другой набор из меньшего числа этих элементов, который тоже удовлетворяет определению группы. Тогда говорят, что эти элементы образуют подгруппу группы $\mathcal{G}$. В отобранные элементы, безусловно, должен попасть единичный, но самое главное — произведение любых двух элементов из этой совокупности обязано также быть ее элементом. В § 2 можно найти ряд групп, содержащих подгруппы: в примере 2 элементы 1 и -1 , очевидно, составляют подгруппу; группа $\mathcal{R}_2$ является подгруппой группы $\mathcal{R}_3$ (на самом деле группа $\mathcal{R}_3$ содержит бесконечное множество подгрупп $\mathcal{R}_2$, определяемых выбором оси вращения); подгруппами группы $\mathcal{R}_3$ являются также все конечные группы вращения и в частности группа, рассмотренная в примере 6.

Группа D_3 в примере 6 в свою очередь содержит несколько подгрупп, как можно видеть из ее таблицы умножения. Это циклическая группа C_3 , образованная элементами E , R_1 и R_2 , а также три группы из двух элементов: E , R_3 ; E , R_4 и E , R_5 . Каждая из этих трех подгрупп изоморфна группе в примере 3. Рассмотренная в примере 10 группа перестановок имеет ту же структуру,

что и изоморфная ей группа D_3 , и, следовательно, содержит те же самые подгруппы.

Существует ряд изящных теорем, описывающих подгруппы, но мы здесь упомянем пока только одну, по которой порядок группы обязан быть кратным порядкам подгрупп. Эта теорема называется теоремой Лагранжа (задача 2.4).

С физической точки зрения подгруппы важны в теории возмущений. Часто бывает так, что на систему, симметрия которой соответствует группе $\mathcal{G}$, действует возмущение, которое не подчиняется всем симметрическим операциям группы, но сохраняет более низкую симметрию, соответствующую некой подгруппе группы $\mathcal{G}$.

§ 5. ПРЯМОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ ГРУПП

Пусть группа $\mathcal{K}$ содержит две подгруппы $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$, элементы которых коммутируют, так что $G_a H_b = H_b G_a$, где G_a — любой элемент подгруппы $\mathcal{G}$, а H_b — любой элемент подгруппы $\mathcal{H}$. Если, кроме того, любой элемент группы $\mathcal{K}$ может быть записан единственным образом в виде произведения $G_a H_b$, то группу $\mathcal{K}$ называют «прямым произведением» групп $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$, изображая это как $\mathcal{K} = \mathcal{G} \times \mathcal{H}$. Данное определение означает, что единственным общим элементом групп $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$ является единичный элемент.

Построим прямое произведение групп C_2 и S_2 , рассмотренных в примерах 3 и 4 (§ 2). Очевидно, что инверсия, означающая просто замену всякого вектора противоположным вектором, коммутирует с любыми вращениями, поскольку если $Rr = r'$, то $|Rr| = |r'| = -r'$ и $R|r| = -Rr = -r'$. Совокупность элементов E , R , I , RI образует группу, являющуюся прямым произведением $C_2 \times S_2$ и обычно обозначаемую через C_{2h} . Заметим, что элемент RI есть операция отражения в плоскости xu (обозначаемая через σ). Это становится понятным, если проследить преобразование осей координат x , y и z : инверсия I изменяет направление всех трех осей на противоположное, а при повороте R вновь меняют знак оси x и y . Таким образом, произведение RI обращает направление лишь оси z ; это и есть отражение в плоскости xu .

Группа D_{3h} , с которой мы познакомились в примере 7, также является прямым произведением группы D_3 и группы, состоящей из элементов E и σ_h . Последняя группа обычно обозначается через S_1 , так что имеем $D_{3h} = D_3 \times S_1$.

Забегая вперед, скажем, что к группе $\mathcal{R}_3$ всевозможных вращений в трех измерениях можно добавить операцию инверсии, в результате чего образуется так называемая «полная ортогональная» группа O_3 . Ее элементами являются операции $R_k(a)$ и $IR_k(a)$.

Представление группы в виде прямого произведения удобно тем, что при этом можно вывести ее свойства из свойств образующих групп. Полностью оценить значение данного обстоятельства мы сможем позднее, пока же заметим, что таблицу умножения прямого произведения групп можно прямо написать на основании таблиц компонент, поскольку

$$(G_a H_b) (G_c H_d) = (G_a G_c) (H_b H_d).$$

В случае группы C_{2h} мы получим табл. 2.7.

Таблица 2.7

$G_a \backslash G_b$		R	I	σ
E	E	R	I	σ
R	R	E	σ	I
I	I	σ	E	R
σ	σ	I	R	E

§ 6. СОПРЯЖЕННЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ И КЛАССЫ

Во всех группах, кроме самых простых, число элементов весьма велико. Уже в примерах 5 и 8 (§ 2) таблицы умножения становятся громоздкими. Но исследование строения групп можно упростить, выделив внутри группы «классы» элементов со сходными свойствами.

Элемент G_a некой группы называется «сопряженным» элементу G_b , если в группе найдется элемент G_n , такой, что

$$G_a = G_n G_b G_n^{-1}. \quad (2.10)$$

Если элементы G_b и G_c оба являются сопряженными элементу G_a , то отсюда сразу следует, что элементы G_b и G_c также являются сопряженными друг другу, поскольку если

$$G_a = G_n G_b G_n^{-1} \quad \text{и} \quad G_a = G_m G_c G_m^{-1},$$

то

$$G_b = G_n^{-1} G_a G_n = G_n^{-1} G_m G_c G_m^{-1} G_n = (G_n^{-1} G_m) G_c (G_n^{-1} G_m)^{-1}.$$

Это приводит к понятию «класса», в котором все элементы сопряжены друг другу. При этом ни один элемент не может принадлежать более чем к одному классу. В самом деле, если элемент G принадлежит двум классам, то он должен быть сопряжен со всеми элементами в обоих классах, и тогда элементы одного класса будут сопряжены элементам другого, т. е. эти два класса объединяются в один. Вследствие этого всякую группу можно разбить на непересекающиеся классы, которые мы будем обозначать символами $\mathcal{C}_p$.

В абелевых группах каждый элемент группы сам по себе образует класс, поскольку из соотношения (2.10) вследствие коммутации групповых элементов вытекает равенство $G_a = G_b$. По той же причине один единичный элемент всегда образует класс.

§ 7. ПРИМЕРЫ КЛАССОВ

А. Группа вращений $\mathcal{R}_3$

Чтобы найти элементы группы, принадлежащие к тому же классу, что и некоторый выбранный поворот $R_k(a)$, необходимо построить операцию вращения

$$R R_k(a) R^{-1}$$

для произвольного R . Такое тройное произведение можно очень просто интерпретировать. Покажем, что это есть поворот на тот же угол a вокруг оси $\mathbf{k}'$, связанной с ис-

ходной осью $\mathbf{k}$ соотношением

$$\mathbf{k}' = R\mathbf{k}; \quad (2.11)$$

другими словами,

$$RR_{\mathbf{k}}(a)R^{-1} = R_{\mathbf{k}'}(a). \quad (2.12)$$

Если представить себе, что операция R переводит все векторы из старых положений в новые (обозначенные штрихом), то результат почти очевиден. Правая часть равенства (2.12) — это поворот вокруг новой оси $\mathbf{k}$ на угол a . Операция в левой части равенства — это перевод вектора из нового положения в старое, поворот вокруг старой оси $\mathbf{k}$, а затем возвращение вектора из старого положения в новое. Для более строгого доказательства рассмотрим равенство

$$[RR_{\mathbf{k}}(a)R^{-1}]\mathbf{k}' = RR_{\mathbf{k}}(a)\mathbf{k} = R\mathbf{k} = \mathbf{k}' \quad (2.13)$$

с учетом равенства (2.11) и того обстоятельства, что поворот, ось которого совпадает с направлением вектора, оставляет этот вектор без изменения. Но, согласно формуле (2.13), левая часть равенства (2.12) оставляет на месте вектор $\mathbf{k}'$; следовательно, эта операция может быть только поворотом вокруг направления $\mathbf{k}'$. Наконец, чтобы показать, что угол поворота a не меняется, построим два единичных ортогональных вектора $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$ в плоскости, перпендикулярной $\mathbf{k}$. Из рис. 2.2 видно, что

$$R_{\mathbf{k}}(a)\mathbf{e}_1 = \cos a \mathbf{e}_1 + \sin a \mathbf{e}_2. \quad (2.14)$$

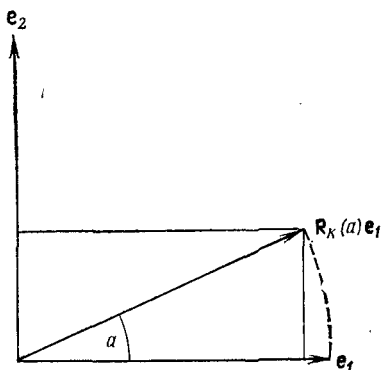


Рис. 2.2.

Поворот R в соответствии с равенством (2.11) переводит $\mathbf{k}$ в $\mathbf{k}'$, а $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$ преобразует в два новых единичных ортогональных вектора $\mathbf{e}'_1 = R\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}'_2 = R\mathbf{e}_2$, лежащих в плоскости, перпендикулярной вектору $\mathbf{k}'$. Теперь мы имеем аналогично (2.14)

$$R_{\mathbf{k}'}(a)\mathbf{e}'_1 = \cos a \mathbf{e}'_1 + \sin a \mathbf{e}'_2; \quad (2.15)$$

но, с другой стороны,

$$[RR_k(a)R^{-1}]e'_1 = RR_k(a)e_1 = R(\cos a e_1 + \sin a e_2) = \\ = \cos a e'_1 + \sin a e'_2;$$

сравнивая это выражение с (2.15), мы видим, что равенство (2.12) доказано.

Итак, классы группы $\mathcal{R}_3$ очень простые. Поскольку операция вращения R , переводящая направление вектора $\mathbf{k}$ в произвольно заданное направление $\mathbf{k}'$, существует всегда, любые два поворота на одинаковый угол вне зависимости от того, вокруг каких осей они осуществляются, будут относиться к одному и тому же классу. (Разумеется, мы рассматриваем только такие повороты, оси которых проходят через фиксированное начало координат.) В то же время равенство (2.12) показывает, что два поворота на разные углы не могут принадлежать одному и тому же классу, поскольку R — произвольная операция.

Б. Конечная группа вращений D_3 (§ 2, пример 6)

Выбрав эту подгруппу группы $\mathcal{R}_3$, мы можем искать классы сопряженных элементов на основе равенства (2.12). Из него следует, что для того, чтобы два элемента группы D_3 принадлежали одному классу, они должны отвечать поворотам на одинаковый угол. Но это условие не является достаточным. В дополнение к нему элементом группы D_3 обязан быть и поворот R , переводящий $\mathbf{k}$ в $\mathbf{k}'$. Таким путем можно установить, что в данном случае имеется три класса:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_1 &= E, \\ \mathcal{C}_2 &= \{R_1, R_2\}, \\ \mathcal{C}_3 &= \{R_3, R_4, R_5\}. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Как обычно, единичная операция сама по себе образует класс. Операции R_1 и R_2 соответствуют углу поворота $2\pi/3$, а R_3, R_4 и R_5 — повороту на π (R_2 можно рассматривать либо как поворот на $4\pi/3$ вокруг положительного направления оси z , либо как поворот на $2\pi/3$ вокруг противоположного направления). Таким образом, помимо $\mathcal{C}_1$ должны существовать еще по крайней мере два класса.

Чтобы показать, что элементы R_1 и R_2 попадают в один класс, следует найти операцию вращения, переводящую ось R_1 в ось R_2 . Но это просто инверсия оси z , достигаемая при операциях R_3 , R_4 и R_5 . Аналогично повороты R_1 и R_2 переводят друг в друга оси R_3 , R_4 и R_5 . Именно:

$$R_2 = R_3 R_1 R_3^{-1}, \quad R_3 = R_1 R_4 R_1^{-1} = R_2 R_5 R_2^{-1}.$$

В. Симметрическая группа $\mathcal{S}_3$ (§ 2, пример 10)

Группа $\mathcal{S}_3$ разбивается на классы аналогично группе D_3 , так как эти группы изоморфны. Имеем

$$\mathcal{C}_1 = E,$$

$$\mathcal{C}_2 = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \right\}, \quad (2.17)$$

$$\mathcal{C}_3 = \left\{ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \right\}.$$

Заметим одну общую особенность элементов группы $\mathcal{S}_3$: все они при перестановке оставляют на месте одно из чисел, тогда как два элемента группы $\mathcal{S}_2$ перемещают все три числа. Это характерно для структуры классов группы $\mathcal{S}_n$ при произвольном n , но более подробное исследование данного вопроса мы оставим до гл. 17 (т. 2).

§ 8. КЛАССЫ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ГРУПП

Классы группы прямого произведения $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$ легко установить, зная классы групп $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$, следующим образом. Предположим, что элементы $G_a H_b$ и $G_c H_d$ принадлежат одному и тому же классу. Тогда по определению должен существовать некоторый элемент $G_e H_f$, такой, что

$$G_e H_f G_a H_b (G_e H_f)^{-1} = G_c H_d,$$

т. е.

$$(G_e G_a G_e^{-1}) (H_f H_b H_f^{-1}) = G_c H_d,$$

откуда

$$G_e G_a G_e^{-1} = G_c, \quad H_f H_b H_f^{-1} = H_d.$$

Отсюда видно, что G_a и G_c принадлежат одному и тому же классу группы $\mathcal{G}$, а H_b и H_d — одному и тому же

классу группы $\mathcal{H}$. Таким образом, в классе группы $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$ будут содержаться все произведения элементов $G_a H_b$, где G_a пробегает целиком некоторый класс группы $\mathcal{G}$, а H_b пробегает класс группы $\mathcal{H}$. Каждой паре классов, одному из $\mathcal{G}$, а другому из $\mathcal{H}$, будут соответствовать один класс в группе $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$.

Рассматривая в качестве примера полную ортогональную группу O_3 , мы можем теперь видеть, что каждому углу поворота a соответствуют два класса сопряженных элементов. В один из них попадают все собственные вращения $R_k(a)$, а в другой — все несобственные вращения $IR_k(a)$. Каждая такая пара классов соответствует двум классам группы инверсии: E и I . Другой наш пример — группа D_{3h} — содержит шесть классов, соответствующих комбинациям трех классов группы D_3 и двух классов (E и σ_h) группы S_1 .

§ 9. ТЕОРЕМА О ПЕРЕЧИСЛЕНИИ ГРУПП

Докажем одно простое свойство групп, называемое теоремой о перечислении, которым мы будем часто пользоваться в дальнейшем. Теорема утверждает, что если G_a — некоторый фиксированный элемент группы $\mathcal{G}$, а элемент G_b пробегает всю группу, то произведение $G_c = G_b G_a$ также пробегает всю группу, причем каждый из элементов группы появляется один и только один раз. Для доказательства вначале заметим, что при любом заданном G_c из условия $G_b = G_c G_a^{-1}$ следует равенство $G_c = G_b G_a$ (элемент G_a^{-1} обязан существовать по определению группы). Далее можно утверждать, что два разных элемента G_b и G'_b не могут порождать один элемент G_c , ибо отсюда следовало бы равенство

$$G_c = G_b G_a = G'_b G_a,$$

так что, умножив на G_a^{-1} , мы получили бы $G_b = G'_b$. Тем самым теорема доказана.

ЛИТЕРАТУРА

Элементарное, хотя математически более строгое, рассмотрение групп и родственных им объектов можно найти в книге
Green J. A. Sets and Groups, Routledge and Kegan Paul, London, 1965.

Дополнительная литература ¹⁾

Головина Л. И. Линейная алгебра и некоторые ее приложения. — М.: Наука, 1975.

ЗАДАЧИ

- 2.1. Покажите, что в групповой таблице умножения каждый элемент появляется в каждой строке и каждом столбце один и только один раз.
- 2.2. Покажите, что элементы E , P_4 и P_5 группы $\mathcal{S}_3$ (обозначения — как в § 2, пример 10) образуют подгруппу, изоморфную группе C_3 .
- 2.3. Обобщением примера 6 (§ 2) является группа собственных совмещений (вращений) плоского квадрата — группа $*D_4$. Постройте таблицу умножения этой группы и разбейте ее элементы по классам.
- 2.4. Пусть $\mathcal{S} = \{S_1, S_2, \dots, S_n\}$ — подгруппа группы $\mathcal{G}$ порядка g . Правым смежным классом всякого элемента G_i группы $\mathcal{G}$ называется совокупность элементов $\mathcal{S}G_i = \{S_1G_i, S_2G_i, \dots, S_nG_i\}$. Аналогичным способом определяется левый смежный класс. Покажите, что если элемент G_i принадлежит группе $\mathcal{S}$, то смежный класс тождественно совпадает с группой $\mathcal{S}$. Покажите, что если G_i не входит в группу $\mathcal{S}$, то смежный класс не содержит элементов, общих с группой $\mathcal{S}$. Исходя из этого покажите, что всякие два правых смежных класса $\mathcal{S}$ либо совпадают, либо не имеют общих элементов. В заключение докажите, что порядок подгруппы n обязан быть целым делителем порядка g группы $\mathcal{G}$ и что для данной группы $\mathcal{G}$ всегда найдется такой набор из g/n элементов G_i группы $\mathcal{G}$, что всякий элемент группы $\mathcal{G}$ можно будет записать в виде $S_p G_i$ (так называемая теорема Лагранжа).
- 2.5. Найдите классы группы $\mathcal{S}_3$ всех перестановок трех элементов, не пользуясь при этом понятием изоморфизма (§ 7, п. «В»).
- 2.6. Постройте группу, перемножая следующие элементы: а) поворот R на угол π вокруг оси z ; б) отражение в плоскости xy . Покажите, что такая группа состоит из четырех элементов, найдите классы сопряженных элементов и запишите группу в виде прямого произведения.
- 2.7. Докажите, что группа D_6 , порождаемая вращениями $\pi/3$, $2\pi/3, \dots$ вокруг оси z и поворотом на 180° вокруг оси x , есть прямое произведение $D_3 \times C_2$, причем главной осью групп D_3 и C_2 является ось z . Разбейте элементы на классы сопряженных элементов.

¹⁾ Добавлено при переводе. — Прим. ред.

ЛИНЕЙНАЯ АЛГЕБРА И ВЕКТОРНЫЕ ПРОСТРАНСТВА

В приложениях теории групп к исследованию симметрии интерес представляет не структура самих по себе групп, а превращения и изменения, которые индуцируются в тех или иных «объектах» элементами групп. Объектами в общем случае будут либо координаты составных частей некоторой физической системы, либо, как в квантовой механике, некие функции этих координат. В том и другом случае наши объекты можно рассматривать как векторы в некотором пространстве. Задачей данной главы и является общее, а потому довольно абстрактное изложение свойств векторов и их преобразований. Со многими из разбираемых здесь положений читатель наверняка уже сталкивался, когда речь заходила о векторах в обычном трехмерном пространстве, и еще, быть может, в начальном курсе линейной алгебры и теории матриц. Поэтому для многих данная глава будет носить характер повторения, но не следует относиться к ней слишком беспечно, ибо на ее основе, идеях и терминологии целиком построена следующая глава, в которой мы рассмотрим все важнейшие моменты теории групп. В данной главе теория групп не используется. Изучение преобразований, индуцируемых в векторном пространстве элементами групп, — задача гл. 4.

§ 1. ЛИНЕЙНЫЕ ВЕКТОРНЫЕ ПРОСТРАНСТВА

Вектор — это весьма общее понятие. Мы можем представить себе просто вектор в трехмерном пространстве, задающий положение одной частицы относительно начала координат. Для N частиц потребуется $3N$ координат, и их можно рассматривать как координаты некоторого вектора в $3N$ -мерном пространстве. В этом $3N$ -

мерном векторном пространстве успешно решаются задачи классической механики. В квантовой же механике область наших интересов расширяется до некоторой совокупности функций координат (волновых функций). Но понятие векторного пространства можно распространить и на такую совокупность функций, хотя это означает, что размерность пространства становится равной бесконечности (на практике часто рассматривают лишь подпространства такого бесконечномерного пространства функций, обладающие конечным числом измерений).

Простой пример пространства функций дает нам ряд Фурье. Разложение произвольной функции в ряд Фурье

$$f(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \sin nx$$

можно рассматривать как разложение «вектора» $f(x)$ по бесконечному набору «ортогональных» базисных векторов $\sin nx$. Коэффициенты c_n можно считать компонентами вектора $f(x)$, а при подходящем выборе скалярного произведения термину «ортогональность» удастся придать математическую строгость. Такое распространение простого понятия вектора вначале на конечное число измерений, большее трех, а затем на бесконечное число измерений — классический пример абстракции в математике. Оказывается, можно говорить о свойствах некоего абстрактного векторного пространства, отвлекаясь от его размерности — будь то 3, $3N$ или бесконечность. Дадим же после этих вводных замечаний формальное определение линейного векторного пространства.

Набор $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots$ образует «линейное векторное пространство L », если сумма любых двух его элементов тоже является элементом набора и если результат умножения элемента на комплексное число c также входит в данный набор. Если ограничиваются действительными c , то и пространство называют действительным. Понятно, что любое такое пространство содержит бесконечное множество элементов; эти элементы и называются векторами.

Набор векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_p$ называют линейно независимым, если эти векторы не связаны между собой со-

отношением

$$\sum_{k=1}^p c_k \mathbf{r}_k = 0 \quad (3.1)$$

с отличными от нуля коэффициентами c_k .

Размерность пространства L определяется как наибольшее число векторов в пространстве L , образующих линейно независимый набор. Мы будем обозначать размерность символом s (подчеркнем, что размерность — это не число векторов в пространстве L). Если дано некоторое s -мерное векторное пространство L , то любой набор из s линейно независимых векторов образует его базис. Обозначим один из таких наборов символом $\mathbf{e}_i$, где $i = 1, 2, \dots, s$. Базис хорош тем, что для любого вектора $\mathbf{r}$ можно написать

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^s r_i \mathbf{e}_i. \quad (3.2)$$

В самом деле, если существует вектор $\mathbf{r}$, для которого равенство (3.2) не выполняется, то набор из $(s+1)$ векторов $\mathbf{r}, \mathbf{e}_i$ будет линейно независимым. Но это невозможно, ибо тогда размерность пространства L должна быть равна $s+1$, что противоречит определению, по которому L имеет размерность s (вот пример доказательства «от противного» — таким способом доказательства мы будем пользоваться часто).

В физическом пространстве трех измерений в качестве базиса обычно выбирают три взаимно перпендикулярных вектора. Такой выбор взаимно перпендикулярных (или ортогональных) векторов, естественно, многое упрощает в трех измерениях, а потому следует попытаться распространить понятие ортогональности на абстрактное векторное пространство. И это легко сделать, используя общее понятие «скалярного произведения» (называемого иногда «внутренним произведением»). Определить скалярное произведение можно по-разному, но оно обязательно должно обладать следующими свойствами:

1. Скалярное произведение есть комплексное число, поставленное в соответствие каждой упорядоченной паре векторов $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ [оно обозначается через $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$];

$$2. (\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1) = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)^*, \quad (3.3a)$$

где знак * соответствует комплексному сопряжению;

$$3. (\mathbf{r}_1, \mathbf{c}\mathbf{r}_2) = c (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2); \quad (3.36)$$

$$4. (\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3) = (\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_3) + (\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_3); \quad (3.3в)$$

5. $(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \geq 0$ и равенство выполняется только для нулевого вектора $\mathbf{r} = 0$.

Положительное значение квадратного корня $(\mathbf{r}, \mathbf{r})^{1/2}$ называют нормой (или длиной, модулем) вектора $\mathbf{r}$. Если для вектора $\mathbf{r}$ выполняется равенство $(\mathbf{r}, \mathbf{r})^{1/2} = 1$, то вектор называют «нормированным». Два вектора $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$ взаимно ортогональны, если их скалярное произведение равно нулю, т. е. $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = 0$. Набор нормированных и взаимно ортогональных векторов называют ортонормированным. В векторном пространстве всегда можно выбрать ортонормированный набор в качестве базиса; поэтому далее мы всегда будем считать, что базис $\mathbf{e}_i$ выбран именно таким образом, т. е.

$$(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}, \quad (3.4)$$

где δ_{ij} — так называемый символ Кронекера; по определению.

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{при } i \neq j, \\ 1 & \text{при } i = j. \end{cases}$$

Может показаться неочевидным, что мы всегда вольны выбрать ортонормированный базис, но это легко доказать. Пусть мы имеем базис $\tilde{\mathbf{e}}_i$, который не является ортонормированным. Тогда, исходя из $\tilde{\mathbf{e}}_1$, мы можем построить базис $\mathbf{e}_i$ взаимно ортогональных векторов по следующему алгоритму.

1. Разделив вектор $\tilde{\mathbf{e}}_1$ на его норму, получим нормированный вектор $\mathbf{e}_1 = \tilde{\mathbf{e}}_1 / (\tilde{\mathbf{e}}_1, \tilde{\mathbf{e}}_1)^{1/2}$.

2. Построив $\tilde{\mathbf{e}}_2 - (\mathbf{e}_1, \tilde{\mathbf{e}}_2)\mathbf{e}_1$ и нормировав его, получим $\mathbf{e}_2$. Ясно, что тогда $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2) \sim (\mathbf{e}_1, \tilde{\mathbf{e}}_2) - (\mathbf{e}_1, \tilde{\mathbf{e}}_2)(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_1) = 0$.

3. Построив $\tilde{\mathbf{e}}_3 - (\mathbf{e}_1, \tilde{\mathbf{e}}_3)\mathbf{e}_1 - (\mathbf{e}_2, \tilde{\mathbf{e}}_3)\mathbf{e}_2$ и нормировав, получим $\mathbf{e}_3$. Сразу же имеем $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3) = (\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) = 0$.

Продолжая такой процесс, получим ортонормированный набор $\mathbf{e}_i$, где $i = 1, 2, \dots, s$. Новый набор $\mathbf{e}_i$ — линейно независимый, поскольку его составляющие взаимно

ортогональны. Так, предположим, что выполняется соотношение

$$\sum_{i=1}^s c_i \mathbf{e}_i = 0. \quad (3.5)$$

Тогда, вычислив скалярное произведение некоторого вектора $\mathbf{e}_j$ с левой и правой частями равенства (3.5), получим $c_j = 0$. Таким образом, нетривиальные связи типа (3.5) не существуют и набор является линейно независимым. Для завершения доказательства заметим, что ни один из векторов $\mathbf{e}_i$ не может тождественно равняться нулю, ибо это означало бы линейную зависимость исходного набора векторов $\tilde{\mathbf{e}}_i$, а по нашему предположению они образуют базис и, следовательно, линейно независимы. Рассмотренный метод построения ортонормированного набора векторов называется ортогонализацией по Шмидту.

Коэффициенты r_i в формуле (3.2) для ортонормированного базиса иногда называют i -ми «компонентами» или координатами вектора $\mathbf{r}$. Они просто связаны со скалярным произведением, а именно

$$r_i = (\mathbf{e}_i, \mathbf{r}). \quad (3.6)$$

Это следует из равенства (3.2), если вычислить скалярное произведение левой и правой частей с некоторым фиксированным вектором $\mathbf{e}_j$ и учесть соотношение (3.4). Скалярное произведение двух произвольных векторов, выраженное в их компонентах, равно

$$(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{i=1}^s \sum_{j=1}^s r_{1i}^* r_{2j} (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \sum_{i=1}^s r_{1i}^* r_{2i}. \quad (3.7)$$

Для заданного векторного пространства L с некоторым ортонормированным базисом $\mathbf{e}_i$, где $i=1, 2, \dots, s$, можно построить «подпространство» L_1 , выбрав в качестве нового базиса меньший набор $\mathbf{e}_i$, где, скажем, $i=1, 2, \dots, s_1 < s$. Оставшиеся базисные векторы порождают другое подпространство L_2 , называемое «ортогональным дополнением» подпространства L_1 . Мы часто будем пользоваться записью $L = L_1 + L_2$. Это означает не то, что все векторы пространства L принадлежат либо L_1 , либо L_2 , а то, что любой вектор из L можно представить в виде суммы вектора из L_1 и ортогонального ему вектора из L_2 .

§ 2. ПРИМЕРЫ ЛИНЕЙНЫХ ВЕКТОРНЫХ ПРОСТРАНСТВ

А. Смещения в трех измерениях

Всевозможные смещения частицы в трехмерном пространстве относительно начала координат — самый естественный пример действительного линейного векторного пространства. Сумма любых двух смещений, очевидно, тоже есть смещение. В качестве базиса обычно выбирают три единичных вектора $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$, направленных вдоль осей x , y и z , а скалярное произведение определяется как произведение длин двух векторов на косинус угла между ними. Такое определение не зависит от выбора базиса; читатель может проверить геометрически, что оно обладает необходимыми свойствами (3.3).

Б. Смещения совокупности из N частиц в трех измерениях

В этом примере, являющемся обобщением предыдущего, естественнее всего выбрать базис из $3N$ единичных векторов $\mathbf{e}_{tx}$, $\mathbf{e}_{ty}$, $\mathbf{e}_{tz}$, где $t=1, 2, \dots, N$ и $\mathbf{e}_{tx}$ представляет собой смещение частицы t на единичный отрезок в направлении x , при котором все остальные частицы неподвижны. Можно определить скалярное произведение как сумму по всем частицам обычных скалярных произведений, определенных ранее в п. «А». Тогда произвольный вектор

$$\mathbf{r} = \sum_{t=1}^N \sum_{i=x, y, z} r_{ti} \mathbf{e}_{ti} \quad (3.8)$$

будет соответствовать смещению всех частиц, при котором частица t перемещается в направлении x на расстояние r_{tx} и т. д.

В. Пространство функций

Далее мы рассмотрим совокупность всех непрерывных функций $\psi(x)$, где x находится в интервале $a \leq x \leq b$, с граничными условиями $\psi(a) = \psi(b) = 0$. Легко показать, что эта совокупность образует векторное пространство в соответствии с определением, данным в § 1, но не совсем ясно, как нам определить здесь скалярное произведение. В действительности можно показать, что определе-

ние

$$(\psi', \psi) = \int_a^b \psi'^*(x) \psi(x) dx \quad (3.9)$$

удовлетворяет формальным требованиям (3.3). В этом случае две функции ψ' и ψ ортогональны, если интеграл (3.9) обращается в нуль, и функция ψ нормирована, если

$\int_a^b |\psi(x)|^2 dx = 1$. Если положить для простоты $a=0$, $b=\pi$, то набор

$$\psi_n(x) = (2/\pi)^{1/2} \sin nx,$$

где n — целое число, образует ортонормированный базис бесконечной размерности. Соотношение

$$(\psi_m, \psi_n) = \frac{2}{\pi} \int_0^\pi \sin mx \sin nx dx = \delta_{n,m} \quad (3.10)$$

доказывается легко, но требуется тщательно исследовать условие полноты, чтобы доказать справедливость разложения

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x) \quad (3.11)$$

для любой функции из нашей совокупности и тем самым показать, что функции $\psi_n(x)$ действительно образуют базис.

Коэффициенты c_n в разложении (3.11) совершенно аналогичны коэффициентам r_i в формуле (3.2), и в соответствии с (3.6) имеем

$$c_n = (\psi_n, \psi) = (2/\pi)^{1/2} \int_0^\pi \sin nx \psi(x) dx. \quad (3.12)$$

В формулах (3.11) и (3.12) мы узнаем разложение в синусоидальный ряд Фурье и формулу для его коэффициентов.

Г. Пространство функций с конечным числом измерений

В качестве примера рассмотрим шестимерное пространство L функций вида $\psi(\mathbf{r}) = c_1 x^2 + c_2 y^2 + c_3 z^2 + c_4 yz + c_5 zx + c_6 xy$, зависящих от координат x, y, z частицы, где

функция $\psi(\mathbf{r})$ задается набором шести комплексных параметров c_i . Определим скалярное произведение двух функций $\psi(\mathbf{r})$ и $\psi'(\mathbf{r})$ как интеграл

$$(\psi', \psi) = \iiint_V \psi'^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV \quad (3.13)$$

по единичной сфере V . Следует не упускать из виду отличие таких скалярных произведений от скалярного произведения векторов в обычном трехмерном пространстве. Чтобы избежать путаницы, мы будем обозначать скалярное произведение в обычном трехмерном пространстве символом $\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}$, а для функций оставим обозначение (ψ', ψ) . В качестве базиса L мы можем выбрать шесть функций $\psi_1 = x^2$, $\psi_2 = y^2$, $\psi_3 = z^2$, $\psi_4 = yz$, $\psi_5 = zx$, $\psi_6 = xy$, обозначив их через радиус-вектор $\mathbf{r}$:

$$\psi_1 = (\mathbf{e}_x \cdot \mathbf{r})^2, \quad \psi_4 = (\mathbf{e}_y \cdot \mathbf{r})(\mathbf{e}_z \cdot \mathbf{r}) \text{ и т. д.} \quad (3.14)$$

Этот простой базис не является ортонормированным, но линейная независимость составляющих его векторов очевидна.

Д. Волновые функции

В квантовой механике свойства системы из N частиц в некотором определенном состоянии описывает волновая функция $\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N)$, являющаяся функцией координат частиц $\mathbf{r}_i$. Волновые функции удовлетворяют определенным граничным условиям (зависящим от вида системы); совокупность волновых функций, описывающих все возможные состояния системы, образует векторное пространство. Скалярное произведение определяется как

$$(\psi', \psi) = \int \psi'^* \psi dV,$$

где интеграл берется по всем координатам, а элемент объема $dV = d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N$ есть произведение элементов объема, соответствующих каждой частице в отдельности. Предполагается, что функция ψ обладает конечной нормой (ψ, ψ) . Если гамильтониан системы H , определяющий ее свойства, эрмитов, то можно показать, что собственные функции ψ'_i , удовлетворяющие уравнению Шредингера

$H\psi_i = E_i\psi_i$ и описывающие стационарные состояния системы ψ_i , будут взаимно ортогональны в смысле соотношения $(\psi_i, \psi_j) = \int \psi_i^* \psi_j dV = \delta_{ij}$. Следовательно, они образуют базис в векторном пространстве. Если же при некоторой энергии E система становится вырожденной, т. е. имеется набор s линейно независимых ортонормированных собственных функций ψ_i , соответствующих этой энергии, то набор этих функций ψ_i ($i=1, 2, \dots, s$) образует базис s -мерного подпространства, каждый вектор в котором есть собственная функция гамильтониана H с энергией E .

§ 3. ЛИНЕЙНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Изложив основные сведения о векторном пространстве L , перейдем теперь к самому важному понятию всей книги — понятию преобразования (отображения), переводящего каждый вектор пространства L в другой вектор того же пространства. Пусть некоторый произвольный вектор $\mathbf{r}$ переводится в вектор $\mathbf{r}'$; определим оператор T равенством

$$T\mathbf{r} = \mathbf{r}'. \quad (3.15)$$

Оператор T называется линейным оператором, если для любых векторов $\mathbf{r}_1$, $\mathbf{r}_2$ и $\mathbf{r}$ выполняются соотношения

$$T(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = T\mathbf{r}_1 + T\mathbf{r}_2, \quad (3.16a)$$

$$Tc\mathbf{r} = cT\mathbf{r}, \quad (3.16b)$$

где c — любое комплексное число.

Поскольку даже конечномерное векторное пространство содержит бесконечное множество векторов, на первый взгляд может показаться, что определить T равенством (3.15) можно лишь с использованием бесконечного набора параметров. Но ограничившись лишь линейными операторами [формулы (3.16)], мы чрезвычайно упрощаем задачу: задавая преобразование базисных векторов, мы тем самым задаем преобразование произвольного вектора. На практике все операторы в этой книге, представляющие интерес с точки зрения изучения симметрии, являются линейными — за одним небольшим исключением (т. 2, гл. 15, § 7, п. Г).

Рассмотрим теперь преобразование некоторого базисного вектора e_i в векторном пространстве конечной размерности s . Обозначим преобразованный вектор через e'_i :

$$Te_i = e'_i. \quad (3.17)$$

Но поскольку векторы $e_1, e_2, \dots, e_s$ образуют базис, вектор e'_i можно разложить по этому базису:

$$e'_i = \sum_{j=1}^s T_{ji} e_j.$$

Таким образом, в силу (3.17) имеем

$$Te_i = \sum_{j=1}^s T_{ji} e_j,$$

но коэффициенты T_j , очевидно, зависят также от индекса i исходного вектора, а потому было бы желательно ввести этот индекс в коэффициент T_j , записав его как T_{ji} , и тогда

$$e'_i = Te_i = \sum_{j=1}^s T_{ji} e_j. \quad (3.18)$$

Таким образом, преобразование всего базиса полностью задается набором s^2 коэффициентов T_{ji} . Зная эти коэффициенты, можно найти преобразование $Tr = r'$ для

произвольного вектора $r = \sum_{i=1}^s r_i e_i$:

$$r' = Tr = \sum_{i=1}^s r_i Te_i = \sum_{i=1}^s r_i \sum_{j=1}^s T_{ji} e_j = \sum_{j=1}^s \left\{ \sum_{i=1}^s T_{ji} r_i \right\} e_j. \quad (3.19)$$

Вводя компоненты r'_j вектора r' ,

$$r' = \sum_{j=1}^s r'_j e_j,$$

и сравнивая с равенством (3.19), мы видим, что они связаны с компонентами r_i вектора r соотношением

$$r'_j = \sum_{i=1}^s T_{ji} r_i. \quad (3.20)$$

Коэффициенты преобразования T_{ji} входят как в формулу (3.18), так и в формулу (3.20), но эти две формулы не

одно и то же. Первая из них связывает преобразованные базисные векторы с исходным базисом, а вторая — компоненты любого преобразованного вектора с его первоначальными компонентами, причем те и другие компоненты относятся к исходному базису. Отметим, однако, что в формуле (3.18) суммирование проводится по первому индексу j компонент T_{ji} , а в формуле (3.20) — по второму индексу i .

§ Коэффициенты T_{ji} на самом деле образуют некую матрицу T , так что T_{ji} — матричный элемент, стоящий на пересечении j -й строки с i -м столбцом. Если представить базисный вектор e_i в виде матрицы-столбца, элементы всех строк которой, кроме i -й, равны 0, а элемент i -й строки равен 1, то мы получим

$$\begin{aligned} T e_i &= \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1s} \\ T_{21} & & & \\ \vdots & & & \\ T_{s1} & \dots & T_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} T_{1i} \\ T_{2i} \\ \vdots \\ T_{si} \end{pmatrix} = T_{1i} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \\ &+ T_{2i} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} + \dots + T_{si} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix} = \sum_{j=1}^s T_{ji} e_j, \end{aligned}$$

т. е. просто формулу (3.18), записанную в другой форме.

Произвольный вектор r можно представить аналогичным образом в виде

$$\begin{aligned} r &= \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_s \end{pmatrix}, \text{ причем } T r = \begin{pmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1s} \\ T_{21} & & & \\ \vdots & & & \\ T_{s1} & \dots & T_{ss} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \vdots \\ r_s \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^s T_{1i} r_i \\ \vdots \\ \sum_{i=1}^s T_{si} r_i \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Если базис $\mathbf{e}_i$ ортонормированный, то возможна еще одна интерпретация матричных элементов T_{ji} . Вычисляя скалярное произведение $\mathbf{e}_j$ на $\mathbf{e}'_i$, получаем

$$(\mathbf{e}_j, \mathbf{e}'_i) = (\mathbf{e}_j, T\mathbf{e}_i) = \sum_k T_{ki} (\mathbf{e}_j, \mathbf{e}_k) = \sum_k T_{ki} \delta_{jk} = T_{ji}. \quad (3.21)$$

Таким образом, матричный элемент T_{ji} — это просто скалярное произведение $(\mathbf{e}_j, T\mathbf{e}_i)$, в котором оператор T «вложен» между двумя базисными векторами $\mathbf{e}_j$ и $\mathbf{e}_i$. В квантовой механике часто встречается выражение «матричный элемент оператора», понимаемый именно как такое скалярное произведение.

§ 4. УМНОЖЕНИЕ И ПРЕОБРАЗОВАНИЕ ОПЕРАТОРОВ, ОБРАТНЫЙ ОПЕРАТОР

Произведением TS двух операторов T и S в векторном пространстве L называется результат действия сначала оператора S , а затем оператора T .

Если

$$S\mathbf{e}_i = \sum_j S_{ji} \mathbf{e}_j, \quad T\mathbf{e}_j = \sum_k T_{kj} \mathbf{e}_k,$$

то

$$TSe_i = \sum_j S_{ji} T\mathbf{e}_j = \sum_j \sum_k S_{ji} T_{kj} \mathbf{e}_k = \sum_k \left\{ \sum_j T_{kj} S_{ji} \right\} \mathbf{e}_k,$$

так что матричные элементы произведения TS имеют вид

$$(TS)_{ki} = \sum_j T_{kj} S_{ji}. \quad (3.22)$$

Отсюда понятно, что матрица произведения операторов TS есть обычное произведение матриц T и S в указанном порядке. Заметим, что операторы, как и матрицы, в общем случае не «коммутируют», т. е. порядок умножения влияет на результат. Разность $TS - ST$ двух разных произведений операторов T и S называется их коммутатором. Коммутатор, обозначаемый символом $[T, S]$, сам является оператором. Отметим также, что, по принятому соглашению, оператор действует на вектор, находящийся справа от него. Следовательно, можно считать, что в произведении TS сначала действует оператор S , а затем оператор T .

Пусть имеется оператор T в векторном пространстве L ; мы записываем, как обычно, $Tr = r'$ и называем r' преобразованным вектором. Тогда, вообще говоря, можно определить «обратный» оператор T^{-1} соотношением

$$r = T^{-1}r'. \quad (3.23)$$

Обратный оператор T^{-1} имеет очевидные свойства $T^{-1}T = TT^{-1} = E$, где E — тождественный оператор, оставляющий все векторы неизменными; в любом произвольном базисе он дается единичной диагональной матрицей. Матрица T^{-1} — это просто матрица, обратная матрице T . Предполагается, конечно, что обратная операция существует, а это, в свою очередь, накладывает на T ограничения, а именно преобразование должно быть взаимно-однозначным или, если говорить о матрице T , ее детерминант должен быть отличным от нуля. Во всех представляющих интерес задачах этой книги фигурируют взаимно-однозначные преобразования. Заметим, что оператор, обратный произведению TS , дается выражением $(TS)^{-1} = S^{-1}T^{-1}$, в котором первоначальный порядок умножения изменяется на противоположный. Это утверждение, хорошо известное из теории матриц, легко проверить: обратный оператор по определению удовлетворяет тождеству $T(S)^{-1}TS = E$, и, умножив правую и левую части справа на S^{-1} , получим $(TS)^{-1}T = S^{-1}$, а умножив еще раз справа на T^{-1} , получим требуемый результат $(TS)^{-1} = S^{-1}T^{-1}$. Этот результат очевиден, если рассматривать операции надевания носков и ботинок. При операции обувания мы сначала надеваем носки, а затем ботинки, а при операции разувания ботинки снимают вначале, а носки потом.

Пусть оператор T переводит r в r' , а $\tilde{r}$ — в $\tilde{r}'$, т. е. $Tr = r'$ и $T\tilde{r} = \tilde{r}'$. Если при этом имеется другой оператор S , переводящий r в $\tilde{r}$, т. е. $Sr = \tilde{r}$, мы вправе заинтересоваться: а какой вид имеет оператор S' , переводящий r' в $\tilde{r}'$, т. е. $S'r' = \tilde{r}'$. Если векторы r' и $\tilde{r}'$ мы называли преобразованными (т. е. трансформированными оператором T), то оператор S' можно назвать трансформированным оператором. Чтобы выразить S' через исходные операторы, заметим, что $\tilde{r}' = T\tilde{r} = TSr = TST^{-1}r'$; таким

образом,

$$S' = TST^{-1}. \quad (3.24)$$

Понятие трансформированного оператора становится более ясным на примерах § 8, а наглядно оно поясняется на рис. 3.1. Здесь точками представлены векторы, а прямыми со стрелкой — операторы. Расстояния и углы не несут здесь никакой информации. Таким образом, уравнение $Sr = \tilde{r}$ представлено прямой, обозначенной буквой S и направленной от r к $\tilde{r}$. Искомый трансформированный оператор, переводящий r' в $\tilde{r}'$, изображен пунктиром; но такое же перемещение можно совершить и по другому пути, пройдя три остальные стороны четырехугольника. Это будет движение сначала против направления T , соответствующее обратному оператору T^{-1} , затем движению по S и, наконец, по T . В результате мы вновь получаем $S' = TST^{-1}$.

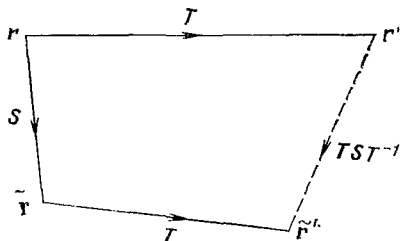


Рис. 3.1.

В более общем случае оператор T может переводить вектор из пространства L в другое пространство L' , так что векторы r' , $\tilde{r}'$ и оператор S' принадлежат пространству L' .

В примере с обуванием и разуванием мы можем рассматривать T как операцию надевания носка, а S — как операцию его заштопывания. Если носок уже на ноге, то штопка становится более сложной процедурой TST^{-1} , т. е. прежде всего требуется снять носок (T^{-1}), затем его заштопать (S) и наконец надеть снова (T).

§ 5. СОПРЯЖЕННЫЙ ОПЕРАТОР, УНИТАРНЫЕ И ЭРМИТОВЫ ОПЕРАТОРЫ

Оператор, сопряженный оператору T и обозначаемый через $T^\dagger$, по определению удовлетворяет уравнению

$$(r, T^\dagger s) = (Tr, s) \quad (3.25)$$

для любых векторов $\mathbf{r}$ и $\mathbf{s}$ в пространстве L . В частности, выбирая $\mathbf{r} = \mathbf{e}_i$, $\mathbf{s} = \mathbf{e}_j$ и используя уравнение (3.20), получим, что в ортонормированном базисе матрицы $\mathbf{T}^\dagger$ и $\mathbf{T}$ связаны соотношением

$$(\mathbf{T}^\dagger)_{ij} = (\mathbf{T}_{ji})^*. \quad (3.26)$$

Унитарный оператор проще всего определить так: оператор $\mathbf{T}$ является унитарным, если удовлетворяет условию

$$\mathbf{T}^\dagger \mathbf{T} = \mathbf{E} \quad (3.27)$$

или, другими словами, если

$$\mathbf{T}^\dagger = \mathbf{T}^{-1}. \quad (3.28)$$

Такое условие важно тем, что при этом скалярное произведение сохраняется, т. е. если мы возьмем $\mathbf{r}' = \mathbf{T}\mathbf{r}$ и $\mathbf{s}' = \mathbf{T}\mathbf{s}$, то

$$(\mathbf{r}', \mathbf{s}') = (\mathbf{T}\mathbf{r}, \mathbf{T}\mathbf{s}) = (\mathbf{r}, \mathbf{T}^\dagger \mathbf{T}\mathbf{s}) = (\mathbf{r}, \mathbf{s}). \quad (3.29)$$

Это означает, что если векторы $\mathbf{e}_i$ образуют ортонормированный базис, а $\mathbf{e}'_i = \mathbf{T}\mathbf{e}_i$, то векторы $\mathbf{e}'_i$ образуют новый ортонормированный базис. Таким образом, унитарный оператор есть оператор перехода от одного ортонормированного базиса к другому.

Элементы унитарной матрицы, очевидно, связаны между собой соотношением (3.28). Подробнее это записывается так:

$$\sum_{j=1}^s T_{ji}^* T_{jk} = \delta_{ik}, \quad (3.30a)$$

$$\sum_{j=1}^s T_{ij} T_{kj}^* = \delta_{ik}, \quad (3.30b)$$

хотя (3.30b) есть следствие равенства (3.30a). Если матрица $\mathbf{T}$ действительная, то $\mathbf{T}^\dagger$ будет транспонированной матрицей и звездочки в этих двух формулах не нужны. Унитарная действительная матрица называется «ортogonalной».

Эрмитовым или самосопряженным называют оператор, равный своему сопряженному. Таким образом, оператор $\mathbf{H}$ эрмитов, если

$$\mathbf{H}^\dagger = \mathbf{H}, \quad (3.31)$$

откуда следует равенство

$$(Hr, s) = (r, Hs) \quad (3.32)$$

при любых r и s .

В заключение подчеркнем, что понятия унитарных и эрмитовых операторов имеют смысл только тогда, когда полностью определены векторное пространство и скалярное произведение.

§ 6. ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ

Если в векторном пространстве L задан оператор T , то можно поставить вопрос: существуют ли в пространстве L векторы r , обладающие весьма специальными свойствами, а именно такие, что трансформированный вектор Tr будет равен просто вектору r , умноженному на константу? Другими словами, можем ли мы по заданному оператору T найти векторы r , удовлетворяющие соотношению

$$Tr = \lambda r \quad (3.33)$$

при некоторых λ ? Для решения этой задачи лучше всего написать выражение для вектора r в некотором базисе e_i ; тогда с учетом формулы (3.19) получим

$$\sum_{j=1}^s T_{ij} r_j = \lambda r_i,$$

т. е.

$$\sum_{j=1}^s (T_{ij} - \lambda \delta_{ij}) r_j = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, s), \quad (3.34)$$

где r_j — компоненты вектора r . Система s линейных однородных уравнений с s неизвестными [формула (3.34)] совместна, если детерминант ее коэффициентов равен нулю. Это дает нам полиномиальное уравнение s -й степени по λ , s корней которого λ называют собственными значениями оператора T . Каждому корню λ_i соответствует решение $r = \xi^i$, называемое собственным вектором оператора T . Система (3.33) однородна, а потому мы вправе еще и нормировать ξ^i произвольным образом. Далее, если оператор T эрмитов, то его собственные векторы взаимно ортогональны или могут быть ортогонализованы. Таким образом, из собственных векторов эрмитова

оператора можно составить ортонормированный базис в пространстве L . Ортогональность доказывается просто: из равенств

$$\begin{aligned} T\xi^i &= \lambda_i \xi^i, \\ T\xi^j &= \lambda_j \xi^j \end{aligned}$$

вытекает равенство $(\xi^j, T\xi^i) - (\xi^i, T\xi^j)^* = \lambda_i(\xi^j, \xi^i) - \lambda_j^*(\xi^i, \xi^j)^*$, а потому $(\xi^j, T\xi^i) - (T\xi^j, \xi^i) = (\lambda_i - \lambda_j^*)(\xi^j, \xi^i)$ и, следовательно,

$$(\lambda_i - \lambda_j^*)(\xi^j, \xi^i) = (\xi^j, T\xi^i) - (T\xi^j, \xi^i) = 0 \quad (3.35)$$

с учетом свойства (3.32) эрмитова оператора T . Положив в этой формуле $i=j$, мы получим $\lambda_i - \lambda_i^* = 0$. Итак, все собственные значения оператора T действительны. Далее, при $i \neq j$, полагая $\lambda_i \neq \lambda_j$, получаем соотношение ортогональности

$$(\xi^j, \xi^i) = 0,$$

а после нормировки ξ^i для собственных векторов эрмитова оператора имеем

$$(\xi^i, \xi^j) = \delta_{ij}. \quad (3.36)$$

Эту формулу можно вывести даже при $\lambda_i = \lambda_j$. Действительно, хотя приведенное выше доказательство ортогональности в этом случае не верно, рассмотренная в § 1 ортогонализация по Шмидту позволяет построить ортонормированный базис внутри совокупности вырожденных собственных векторов (т. е. собственных векторов, соответствующих одному и тому же собственному значению). Здесь существенным оказывается то обстоятельство, что всякая линейная комбинация вырожденных собственных векторов сама есть собственный вектор.]

§ 7. ИНДУЦИРОВАННЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ФУНКЦИЙ

В § 2, п. В и Г было показано, как из некой совокупности функций при подходящем выборе скалярного произведения образуется векторное пространство. Один из важных способов построения оператора в пространстве функций — задание преобразования функций, «индуцированного» преобразованием аргументов этих функций. Обозначим координаты некой системы s -мерным вектором

$\mathbf{r} = (r_1, r_2, \dots, r_s)$ и рассмотрим некоторую группу преобразований $\mathbf{G}$ системы и, стало быть, также вектора $\mathbf{r}$. Итак, мы рассматриваем преобразования, индуцированные в векторном пространстве функций $\psi(\mathbf{r})$ этими преобразованиями $\mathbf{G}$, примененными к вектору $\mathbf{r}$. Такое индуцированное преобразование мы будем обозначать символом $\mathbf{T}(\mathbf{G})$ и определять из уравнения

$$\mathbf{T}(\mathbf{G})\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{r}). \quad (3.37)$$

Для трансформированных функций $\mathbf{T}(\mathbf{G})\psi(\mathbf{r})$ будем использовать обозначение $\psi'(\mathbf{r})$. Важно четко понимать, что мы имеем дело с двумя векторными пространствами: пространством координат вектора $\mathbf{r}$, в котором определено преобразование $\mathbf{G}$, и пространством функций $\psi(\mathbf{r})$, в котором определено индуцированное преобразование $\mathbf{T}(\mathbf{G})$. Через компоненты вектора $\mathbf{r}$ в некотором базисе $\mathbf{e}_i$ преобразование (3.37) можно выразить таким образом:

$$\mathbf{T}(\mathbf{G})\psi(r_1, r_2, \dots, r_s) = \psi(\bar{r}_1, \bar{r}_2, \dots, \bar{r}_s), \quad (3.38)$$

где $\bar{r}_i$ — i -я компонента вектора $\bar{\mathbf{r}} = \mathbf{G}^{-1}\mathbf{r}$. Если известна матрица преобразования $\mathbf{G}$ в базисе $\mathbf{e}_i$, то для унитарного оператора $\mathbf{G}$ по формуле (3.20)

$$\bar{r}_j = \sum_i (\mathbf{G}^{-1})_{ji} r_i = \sum_i \mathbf{G}_{ij}^* r_i. \quad (3.39)$$

Числа $\bar{r}_j$ можно рассматривать как компоненты вектора $\mathbf{r}$ в трансформированном базисе $\mathbf{e}'_i = \mathbf{G}\mathbf{e}_i$, поскольку

$$(\mathbf{e}'_i, \mathbf{r}) = (\mathbf{G}\mathbf{e}_i, \mathbf{r}) = (\mathbf{e}_i, \mathbf{G}^{-1}\mathbf{r}) = \bar{r}_i. \quad (3.40)$$

Чтобы, зная функцию $\psi(\mathbf{r})$ и матрицу преобразования $\mathbf{G}$, найти $\psi'(\mathbf{r})$, нужно просто подставить (3.39) в (3.38).

Может показаться непонятным, зачем нужен в определении (3.37) обратный оператор $\mathbf{G}^{-1}$, раз мы с тем же успехом можем использовать и $\mathbf{G}$. Тем не менее, согласившись применять $\mathbf{G}^{-1}$, мы в дальнейшем получим важные упрощения; такое условие имеет и некоторый физический смысл. Предположим, например, что $\psi(\mathbf{r})$ описывает температуру тела в точке $\mathbf{r}$ трехмерного пространства, а $\mathbf{G}$ есть поворот тела относительно начала координат. Тогда по определению (3.37) новая функция $\psi'(\mathbf{r})$ будет описывать температуру в точке $\mathbf{r}$ после поворота. Это

можно видеть на рис. 3.2, где буквой Q обозначена точка $G^{-1}r$. Таким образом, в результате поворота G точка Q переносится в точку P , ибо $G(G^{-1}r)=r$. Значит, температура в P после поворота, задаваемая функцией $\psi'(r)$, — это та температура, которая была до поворота в точке Q , т. е. $\psi(G^{-1}r)$. Следовательно, мы получили $\psi'(r)=\psi(G^{-1}r)$,

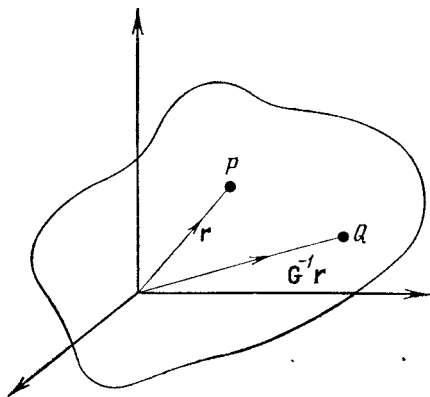


Рис. 3.2.

так что преобразование $\psi(r)$ в $\psi'(r)$ задает оператор $T(G)$ в пространстве функций. В этой книге мы значительно чаще будем иметь дело не с температурами, а с волновыми функциями, но рассуждения от этого не изменятся; кроме того, температуру тела проще себе представить, чем значение волновой функции в точке.

Математически необходимость использования в равенстве (3.37) именно обратной операции G^{-1} становится понятной при рассмотрении последовательности двух операций. Пусть функция ψ' определяется преобразованием $T(G_2)$, заданным, как в (3.37), соотношением $T(G_2)\psi(r)=\psi(G_2^{-1}r)=\psi'(r)$. Тогда получим

$$T(G_1)T(G_2)\psi(r)=T(G_1)\psi(G_2^{-1}r)=T(G_1)\psi'(r)=\psi'(G_1^{-1}r)=\psi(G_2^{-1}G_1^{-1}r)=\psi((G_1G_2)^{-1}r), \quad (3.41)$$

а это означает, что произведение G_1G_2 преобразований векторов r индуцирует в пространстве функций произведение операторов $T(G_1)T(G_2)$, взятых в той же последовательности. Если использовать в определении (3.37)

не G^{-1} , а G , то мы получили бы, что оператору $G_1 G_2$ соответствует оператор $T(G_2)T(G_1)$ с запутывающей перестановкой операций.

Важный частный случай преобразования функций (3.37) мы получим, если сами компоненты рассматривать как функции вектора $\mathbf{r}$, записывая $r_i = (\mathbf{e}_i, \mathbf{r})$. По (3.37) компонента r_i преобразуется в

$$T(G)r_i = (\mathbf{e}_i, G^{-1}\mathbf{r}) = \bar{r}_i, \quad (3.42)$$

т. е. в i -ю компоненту вектора $G^{-1}\mathbf{r}$.

Во всех предыдущих рассуждениях мы рассматривали только скалярные функции положения, которые ставят каждому вектору $\mathbf{r}$ в соответствие число $\psi(\mathbf{r})$. Обобщение на функции с несколькими компонентами, ставящие в соответствие каждому $\mathbf{r}$ несколько чисел, будет проведено в гл. 8.

§ 8. ПРИМЕРЫ ЛИНЕЙНЫХ ОПЕРАТОРОВ

А. Вращение векторов в плоскости xu

Рассмотрим поворот всевозможных векторов в плоскости xu относительно оси z на угол a . Соответствующий оператор, обозначаемый через $R(a)$, есть линейный оператор в двумерном пространстве плоскости xu . Он, очевидно, соответствует определениям (3.16). Матрицу легко найти из уравнений (3.21) и (3.14):

$$R_{ji}(a) = \mathbf{e}_j \cdot R(a) \mathbf{e}_i = \mathbf{e}_j \cdot \mathbf{e}_i^*,$$

откуда $R_{11} = \cos a$, $R_{12} = -\sin a$, $R_{21} = \sin a$, $R_{22} = \cos a$, так что

$$R = \begin{pmatrix} \cos a & -\sin a \\ \sin a & \cos a \end{pmatrix}.$$

При повороте расстояния и углы сохраняются, а потому скалярное произведение, очевидно, остается неизменным. Поэтому матрица R является ортогональной и удовлетворяет условию (3.30).

Б. Перестановки

Перестановку часто можно рассматривать как линейный оператор. Пусть перестановка P_{12} меняет местами векторы $\mathbf{e}_1$ и $\mathbf{e}_2$ в двумерном пространстве. Тогда матрица

P_{12} равна

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

и удовлетворяет условию (3.16). Примером перемножения операторов может служить произведение $(P_{12})^2 = E$; это равенство можно получить, перемножив матрицы:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = E.$$

На этом примере можно пояснить и задачу на собственные значения. Из вида матрицы следует, что собственные значения λ оператора P_{12} должны удовлетворять соотношению

$$\begin{vmatrix} -\lambda & 1 \\ 1 & -\lambda \end{vmatrix} = 0,$$

откуда $\lambda = \pm 1$ и собственные векторы равны $(1/2)^{1/2}(\mathbf{e}_1 \pm \mathbf{e}_2)$. Геометрически оператор P_{12} эквивалентен отражению относительно биссектрисы прямого угла. Очевидно, что оператор P_{12} оставляет на месте вектор $(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2)$, а направление вектора $(\mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2)$ изменяет на противоположное в соответствии с собственным значением -1 .

В. Умножение на функцию в функциональном пространстве

В примере § 2, п. Д векторное пространство состояло из всех функций, удовлетворяющих определенным граничным условиям и обладающим конечной нормой. Результатом умножения некоторой такой функции $\psi(\mathbf{r})$ на непрерывную функцию $S(\mathbf{r})$ является другая функция $\varphi(\mathbf{r})$ в том же пространстве, равная

$$\varphi(\mathbf{r}) = S(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}). \quad (3.43)$$

В этом смысле множитель $S(\mathbf{r})$ можно рассматривать как линейный оператор в пространстве. Но здесь нужна осторожность — так, например, в конечномерном пространстве квадратичных функций (§ 2, п. Г) результат умножения на любую функцию $S(\mathbf{r})$, кроме константы, не будет квадратичной функцией, и, следовательно, в данном пространстве такой множитель не является оператором.

Как и в преобразовании функционального пространства (3.37), трансформированный оператор (3.24) в обозначениях (3.38) имеет вид $S'(\mathbf{r}) = S(\mathbf{G}^{-1}\mathbf{r}) = S(\bar{\mathbf{r}})$.

Г. Дифференцирование в пространстве функций

Если задана функция $\psi(\mathbf{r}) \equiv \psi(x, y, z)$, то путем ее дифференцирования можно получить новую функцию $\varphi(x, y, z) = (\partial/\partial x)\psi(x, y, z)$. В этом смысле $\partial/\partial x$ есть линейный оператор в пространстве функций; конечно, предполагается, что функция $\varphi(x, y, z)$ принадлежит данному пространству. В примере 2, п. В множитель $\partial/\partial x$ не является оператором в пространстве квадратичных функций, но $y(\partial/\partial x)$ в этом пространстве, очевидно, является оператором. Заметим, что операторы умножения на функцию (§ 8, п. В) должны коммутировать друг с другом, ибо очевидно, что $S_1(\mathbf{r})S_2(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = S_2(\mathbf{r})S_1(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})$. Но при введении дифференцирования это, вообще говоря, становится неверным; например, взяв $\psi(\mathbf{r}) = xy$, $S(\mathbf{r}) = x$, получим

$$\begin{aligned} S(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) &= x^2y, & \frac{\partial}{\partial x} S(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) &= 2xy, \\ \frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) &= y, & S(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) &= xy. \end{aligned} \quad (3.44)$$

В общем случае (§ 4) коммутатор двух операторов отличен от нуля. В данном примере коммутатор вычисляется непосредственно, поскольку для любой функции $\psi(\mathbf{r})$

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, S(\mathbf{r}) \right] \psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial x} S(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) - S(\mathbf{r})\frac{\partial}{\partial x} \psi(\mathbf{r}) = \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial x} \psi(\mathbf{r}),$$

и поэтому можно написать

$$\left[\frac{\partial}{\partial x}, S(\mathbf{r}) \right] = \frac{\partial S(\mathbf{r})}{\partial x}, \quad (3.45)$$

где производная $\partial S/\partial x$ сама является оператором в смысле примера § 8, п. В, т. е. функцией, на которую следует умножить. Это справедливо при любой функции $S(\mathbf{r})$; в разобранным выше частном случае $\partial S/\partial x = 1$, что согласуется с формулой (3.44).

Д. Индуцированное преобразование функций

В качестве иллюстрации к общим рассуждениям, изложенным в § 7, рассмотрим функцию $\psi(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r}$ — вектор в двух измерениях. Тогда, вводя полярные координаты r, φ , получим $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \varphi)$. По определению (3.37) преобразование функции ψ , индуцированное поворотом $R(a)$, имеет вид

$$T(R(a))\psi(\mathbf{r}) = \psi(R^{-1}(a)\mathbf{r}) = \psi(r, \varphi - a),$$

т. е.

$$T(R(a))\psi(r, \varphi) = \psi(r, \varphi - a).$$

Для примера рассмотрим две функции:

$$\psi_1(r, \varphi) = \cos \varphi, \quad \psi_2(r, \varphi) = \sin \varphi,$$

которые дадут

$$T(R(a))\psi_1(r, \varphi) = \cos(\varphi - a) = \cos \varphi \cos a + \sin \varphi \sin a,$$

$$T(R(a))\psi_2(r, \varphi) = \sin(\varphi - a) = \sin \varphi \cos a - \cos \varphi \sin a.$$

Итак,

$$T\psi_1 = \cos a \psi_1 + \sin a \psi_2,$$

$$T\psi_2 = -\sin a \psi_1 + \cos a \psi_2,$$

т. е. мы получили преобразование функций ψ_1 и ψ_2 , индуцированное преобразованием $R(a)$. Понятно, что можно построить и более сложные функции. Снова, если мы возьмем

$$\psi(r, \varphi) = \exp(im\varphi),$$

то

$$T\psi = \exp[im(\varphi - a)] = \exp(-ima)\psi,$$

т. е. данная функция есть на самом деле собственная функция оператора T с собственным значением $\exp(-ima)$. Заметим, что интересующие нас в этом случае функции будут периодическими функциями угла φ с периодом 2π , поскольку при прибавлении к φ величины 2π получаем тот же самый вектор $\mathbf{r}$. Функции типа $\exp(im\varphi)$ будут иметь это свойство, если только m — целое число (положительное или отрицательное). Даже при данном ограничении оператор T все еще имеет бесконечное множество собственных значений, в чем отражается бесконечная размерность функционального пространства. $\blacksquare$

Е. Еще один пример индуцированного преобразования функций

В качестве еще одной иллюстрации преобразования, индуцированного в функциональном пространстве, рассмотрим квадратичные функции из § 2, п. Г с операцией поворота R на угол $2\pi/3$ вокруг оси z . В случае функции $\psi_1 = x^2$ из формулы (3.38) получим

$$T(R_1)\psi_1 = \bar{x}^2,$$

где в силу формулы (3.39) и сказанного в § 8, п. А имеем $\bar{x} = x \cos 2\pi/3 + y \sin 2\pi/3 = (-1/2)x + (3/4)^{1/2}y$. В результате получаем $T(R_1)\psi_1 = (1/4)x^2 - (3/4)^{1/2}xy + (3/4)y^2 = (1/4)\psi_1 - (3/4)^{1/2}\psi_6 + (3/4)\psi_2$, и, таким образом, ψ_1 преобразуется в линейную комбинацию шести функций ψ_i .

Ж. Трансформированный оператор

В § 4 мы определили трансформированный оператор $S' = TST^{-1}$, представляемый той же матрицей в трансформированном базисе $e'_i = Te_i$, что и оператор S в первоначальном базисе e_i . Выберем в качестве примера оператор S типа обсуждавшихся в § 8, п. В, а также функциональное пространство и преобразование T , разобранные в том же пункте. В частности, пусть оператор S есть оператор умножения на функцию $\sin 3\varphi$, вектор ψ равен $\cos \varphi$ и преобразование $T = T(R(a))$, так что $T\psi = \cos(\varphi - a)$. Таким образом, напомним

$$\psi' = T\psi = \cos(\varphi - a),$$

$$\bar{\psi} = S\psi = \sin 3\varphi \cos \varphi,$$

$$\bar{\psi}' = T\bar{\psi} = \sin 3(\varphi - a) \cos(\varphi - a),$$

так что трансформированный оператор S' , определяемый соотношением $S'\psi' = \bar{\psi}'$, в данном случае есть просто оператор умножения на функцию $\sin 3(\varphi - a)$.

ЛИТЕРАТУРА

Подробнее относительно линейной алгебры см.
Birkhoff G., MacLane S., A Survey of Modern Algebra, Macmillan, London, 1965.

ЗАДАЧИ

- 3.1. Покажите, что в трехмерном физическом пространстве скалярное произведение векторов вида $(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = |\mathbf{r}_1||\mathbf{r}_2|\cos\theta$, где θ — угол между векторами $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$, удовлетворяет требованиям, предъявляемым к скалярному произведению (§ 1).
- 3.2. Покажите, что если L_1 — одномерное подпространство, заданное векторами $(a, a, 0)$, то его ортогональное дополнение L_2 определяется векторами $(b, -b, c)$, и представьте вектор $(1, 2, 3)$ в виде суммы двух векторов, один из которых принадлежит подпространству L_1 , а второй — подпространству L_2 .
- 3.3. Пусть скалярное произведение двух функций есть $(f, g) = \int_{-1}^1 f(x) * g(x) dx$. Покажите, что функции $f_0(x) = (1/2)^{1/2}$ и $f_1(x) = (3/4)^{1/2}x$ ортонормальны. Воспользуйтесь методом ортогонализации по Шмидту для построения квадратичной функции $f_2(x)$, ортонормальной функциям f_0 и f_1 . Аналогичным способом постройте кубическую функцию $f_3(x)$.
- 3.4. Взяв функции $f_n(x)$ из предыдущей задачи в качестве базисных векторов и $T = x^2$ в качестве оператора, по формуле (3.21) вычислите матричные элементы T_{01} , T_{11} и T_{02} .
- 3.5. Покажите, что оператор T из предыдущей задачи эрмитов, и рассмотрите граничные условия, которые следует наложить на функции $f(x)$ на отрезке $[-1, 1]$, чтобы оператор id/dx был эрмитовым, если скалярное произведение имеет тот же вид, что и в задаче 3.3.
- 3.6. Пусть преобразование R есть поворот вокруг оси z на 90° . Для трех единичных векторов e_i , направленных вдоль осей x , y и z , найдите $Re_i = e_i'$. По формулам (3.38) и (3.39) или (3.40) вычислите индуцированное преобразование $T(R)\psi(r)$, где $\psi(r)$ есть: а) x , б) y , в) x^2 и г) xy . Выполните то же самое, если R — поворот вокруг оси z на 45° .
- 3.7. Исходя из функции $f(x, y) = x^2$, методом ортогонализации по Шмидту постройте ортонормированный базис в пространстве функций x^2 , y^2 и xy предыдущей задачи, если скалярное произведение имеет вид $(f(x, y), g(x, y)) = \int_{-1}^1 dx \int_{-1}^1 dy f(x, y) g(x, y)$.
Найдите матрицу $T(R)$, где R — поворот на 90° относительно оси z . Приведите матрицу к диагональному виду, определите собственные значения и собственные векторы.
- 3.8. Пусть R — оператор поворота вокруг оси z на 45° , а T — оператор поворота вокруг оси x на 90° . Покажите геометрически, что TRT^{-1} есть оператор поворота вокруг оси y против часовой стрелки на 45° (поворота вокруг оси — y). Подтвердите этот результат, перемножая матрицы соответствующих операторов в базисе e_x, e_y, e_z . [Это частный случай общего соотношения (2.12).]
- 3.9. Покажите, что если оператор S есть $\partial/\partial r_i$, то трансформированный оператор TST^{-1} в обозначениях формулы (3.38) есть $\partial/\partial \bar{r}_i$.

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП

В двух предыдущих главах были введены два математических понятия: группы (гл. 2) и векторного пространства (гл. 3). Теперь мы объединим эти два понятия и рассмотрим взаимосвязь между элементами группы и преобразованиями векторного пространства. В этой главе, начиная с § 6 и далее, нам в ряде случаев понадобится вычислять сумму по всем групповым элементам. Для конечных групп это не составляет труда, но в бесконечных группах (гл. 2, § 2) суммирование заменяется интегрированием и возникает проблема сходимости интегралов. Исследование данного вопроса мы оставим до гл. 7, а пока скажем лишь, что в большинстве интересных с физической точки зрения непрерывных групп сумму можно заменить интегралом, если его определить соответствующим образом.

§ 1. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ

Если в векторном пространстве L можно найти набор T линейных операторов $T(G_a)$ (гл. 3, § 3), которые соответствуют элементам G_a группы $\mathcal{G}$ в том смысле, что

$$T(G_a)T(G_b) = T(G_a G_b), \quad T(E) = 1, \quad (4.1)$$

то такой набор T называется «представлением» группы $\mathcal{G}$ в пространстве L . Таким образом, представление группы $\mathcal{G}$ есть «отображение» элементов G_a на операторы $T(G_a)$ в векторном пространстве L . Если размерность пространства L равна s , то представление называют s -мерным. Пространство L называют пространством представлений T . Представление $T(G_a)$ называется точным, если существует взаимно-однозначное соответствие (изоморфизм) между операциями $T(G_a)$ и групповыми элементами G_a .

Вообще говоря, можно рассматривать и отображение многих математических объектов в один, т. е. представление нескольких групповых элементов одним и тем же оператором. Примером может служить крайний случай «тождественного представления», когда все элементы представлены оператором идентичности 1.

§2. МАТРИЧНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

На практике оператор обычно задают его матрицей в некотором выбранном базисе. Выбрав базис $e_1, e_2, e_3, \dots, e_s$ в пространстве L , мы можем для каждого оператора $T(G_a)$ построить матрицу (гл. 3, §3) по формуле

$$T(G_a)e_i = \sum_j T_{ji}(G_a)e_j. \quad (4.2)$$

Набор матриц $T(G_a)$ с матричными элементами $T_{ji}(G_a)$ образует матричное представление группы. Как и должно быть, матрицы $T(G_a)$ удовлетворяют уравнению (4.1) обычного матричного умножения

$$T(G_a)T(G_b) = T(G_a G_b). \quad (4.3)$$

Это прямо следует из (4.1) и (4.2), поскольку

$$\begin{aligned} T(G_a)T(G_b)e_i &= \sum_j T(G_a)T_{ji}(G_b)e_j = \\ &= \sum_j \sum_k T_{ji}(G_b)T_{kj}(G_a)e_k \end{aligned}$$

и

$$\overline{T(G_a)}T(G_b)e_i = T(G_a G_b)e_i = \sum_k T_{ki}(G_a G_b)e_k,$$

так что

$$T_{ki}(G_a G_b) = \sum_j T_{kj}(G_a)T_{ji}(G_b).$$

На практике для вычисления матричных элементов с использованием ортонормированного базиса, как правило, удобнее пользоваться соотношением

$$T_{ji}(G_a) = (e_j, T(G_a)e_i), \quad (4.4)$$

которое прямо следует из равенства (4.2).

§ 3. ПРИМЕРЫ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

А. Группа D_3

Чтобы установить, каков физический смысл представления, мы рассмотрим здесь группу D_3 , введенную ранее (гл. 2, § 2, п. Е), и построим для нее матричное представление. Точное представление этой группы получается сразу же, если записать соответствующие каждой операции преобразования в обычном трехмерном декартовом пространстве. Выберем базисные векторы e_x и e_y так, как показано на рис. 4.1, а вектор e_z направим перпендику-

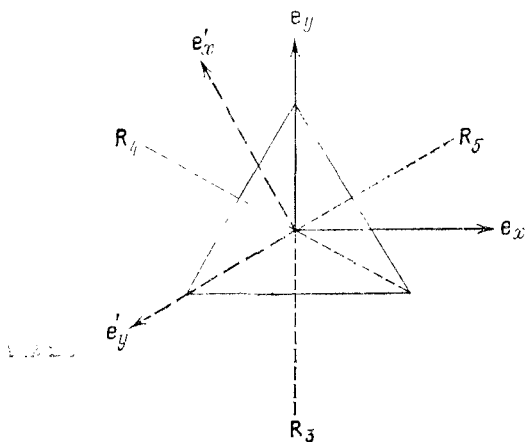


Рис. 4.1.

лярно плоскости рисунка. Тогда отображение элемента группы, например R_1 (оператора поворота на 120° вокруг оси z), примет вид

$$\begin{aligned} T(R_1)e_x &= e'_x = -\frac{1}{2}e_x + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}e_y, \\ T(R_1)e_y &= e'_y = -\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}e_x - \frac{1}{2}e_y, \\ T(R_1)e_z &= e'_z = e_z \end{aligned} \quad (4.5)$$

и, следовательно, согласно формуле (4.4), его матрица будет равна

$$T_1(R_1) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Для других элементов группы аналогичным образом получим

$$T(R_2) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T(R_3) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$T(R_4) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$T(R_5) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Как нетрудно убедиться, эти матрицы имеют ту же таблицу умножения, что и групповые элементы. Имеем, например, $T(R_1)T(R_4) = T(R_5)$, что согласуется с равенством $R_1R_4 = R_5$ (табл. 2.5).

Рассматривая только одномерное пространство вектора e_2 , мы можем построить очень простое одномерное представление, которое обозначим через $T^{(2)}$:

$$\begin{aligned} T^{(2)}(R_1) &= 1, & T^{(2)}(R_2) &= 1, & T^{(2)}(R_3) &= -1, \\ T^{(2)}(R_4) &= -1, & T^{(2)}(R_5) &= -1, & T^{(2)}(E) &= 1. \end{aligned}$$

Отметим, что $T^{(2)}$ не есть тождественное представление [которое мы будем обозначать через $T^{(1)}(R)_i=1$], ставящее в соответствие каждому элементу группы $+1$. Заметим также, что числа -1 соответствуют трем элементам, относящимся к одному и тому же классу $\mathcal{C}_3$ группы D_3 (гл. 2, § 7). Это отнюдь не случайность — в § 9 мы увидим, что представления элементов, принадлежащих одному классу, имеют ряд общих свойств.

Поскольку в третьей строке и третьем столбце матриц $T(R_i)$ стоят нули, понятно, что матрицы 2×2 , построенные из двух первых строк и столбцов, тоже образуют представление группы D_3 , которое мы обозначим через $T^{(3)}$.

Б. Группа $\mathcal{R}_3$

Используя то же пространство, что и в предыдущем примере, можно построить представление непрерывной группы вращений $\mathcal{R}_3$ вокруг оси z . В этом случае индекс a групповых элементов $R(a)$ является непрерывным параметром в интервале $0 \leq a \leq 2\pi$, а матрица, уже полученная нами ранее (гл. 3, § 8), имеет вид

$$T(a) = \begin{pmatrix} \cos a & -\sin a & 0 \\ \sin a & \cos a & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (4.6)$$

Отсюда сразу следует, что

$$T(a) T(b) = T(a+b) \quad (4.7)$$

для любых a и b в согласии с правилом умножения групповых элементов $R(a)R(b)=R(a+b)$.

В. Функциональные пространства

Два первых примера представлений построены в обычном физическом трехмерном пространстве, и поэтому на данной стадии нелегко понять, каким образом для

групп типа D_3 и $\mathcal{R}_2$ могут быть построены представления размерности, большей 3. Чтобы показать, как это может быть достигнуто, мы построим представления в функциональном пространстве, рассмотрев преобразования функций при повороте системы координат согласно формуле (3.37). Это будет иметь очень важное значение для приложений теории групп в квантовой механике.

Пусть мы имеем пространство L функций $\psi(\mathbf{r})$, где $\mathbf{r}$ — некоторые координаты, инвариантных относительно группы преобразований координат G_a в том смысле, что если $\psi(\mathbf{r})$ принадлежит пространству L , то ему принадлежит и $\psi(G_a^{-1}\mathbf{r})$ для всех элементов G_a этой группы. Тогда мы можем определить представление Γ в функциональном пространстве L как преобразования

$$\Gamma(G_a)\psi(\mathbf{r}) = \psi(G_a^{-1}\mathbf{r}) \quad (4.8)$$

типа преобразования, рассмотренного в гл. 3, § 7. Снова нетрудно убедиться, что это представление удовлетворяет условию (4.1), ибо, определив $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(G_b^{-1}\mathbf{r})$, имеем

$$\begin{aligned} \Gamma(G_a)\Gamma(G_b)\psi(\mathbf{r}) &= \Gamma(G_a)\psi(G_b^{-1}\mathbf{r}) = \Gamma(G_a)\psi'(\mathbf{r}) = \\ &= \psi'(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi(G_b^{-1}G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi((G_aG_b)^{-1}\mathbf{r}) = \Gamma(G_aG_b)\psi(\mathbf{r}). \end{aligned}$$

В данном доказательстве очень важно введение новой функции $\psi'(\mathbf{r}) = \psi(G_b^{-1}\mathbf{r})$, поскольку в общем случае $\Gamma(G_a)\psi(G_b^{-1}\mathbf{r}) \neq \psi(G_a^{-1}G_b^{-1}\mathbf{r})$.

Матричное представление в функциональном пространстве может быть получено, если распространить общее выражение (4.2) на пространство функций, выбрав базис $\psi_i(\mathbf{r})$:

$$\Gamma(G_a)\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(G_a^{-1}\mathbf{r}) = \psi'_i(\mathbf{r}) = \sum_j T_{ji}(G_a)\psi_j(\mathbf{r}). \quad (4.9)$$

Здесь функции $\psi_i(\mathbf{r})$ служат примером абстрактных базисных векторов $\mathbf{e}_i$.

В качестве иллюстрации рассмотрим шестимерное пространство L квадратичных функций, введенных в гл. 3, § 2, п. Г. Оно, очевидно, инвариантно относительно любого вращения и, в частности, относительно операций группы D_3 . Например, $\Gamma(R_1)\psi_1 = \frac{1}{4}\psi_1 - (\frac{3}{4})^{1/2}\psi_6 + \frac{3}{4}\psi_2$.

Продолжая выкладки, мы получим матрицу

$$T(R_1) = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & 0 & 0 & 0 & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} & 0 \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & \sqrt{\frac{3}{4}} & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

Тем же путем могут быть получены остальные пять матриц, и они будут иметь ту же таблицу умножения, что и элементы группы.

Отметим, что при умножении функций $\psi(\mathbf{r})$ на любую скалярную функцию $f(r)$, где $r=|\mathbf{r}|$, представление остается неизменным и, если функция $f(r)$ достаточно быстро уменьшается при больших r , объем V , в котором определено скалярное произведение, можно расширить до бесконечности. В этом случае функция $\psi(\mathbf{r})$ может представлять собой волновую функцию частицы, движущейся в сферически-симметричном потенциале вокруг начала координат, как электрон в атоме водорода.

§ 4. ПОСТРОЕНИЕ ИНВАРИАНТНЫХ ПОДПРОСТРАНСТВ

Если в пространстве L определен некий оператор T то может случиться так, что существует подпространство: L_1 пространства L , обладающее следующим свойством: если $\mathbf{r}_1$ — произвольный вектор подпространства L_1 , то преобразованный вектор $\mathbf{r}'_1 = T\mathbf{r}_1$ тоже принадлежит подпространству L_1 . Такое подпространство называется «инвариантным» по отношению к оператору T . В общем случае, если в пространстве L задан набор операторов $T(G_a)$, образующих представление группы $\mathcal{G}$, то может существовать подпространство L_1 , инвариантное отно-

сительно всех преобразований $T(G_a)$, когда G_a пробегает группу $\mathcal{G}$. В этом случае подпространство L_1 называется инвариантным по отношению к преобразованиям, индуцированным группой $\mathcal{G}$; в таком смысле обычно и понимается термин «инвариантное подпространство».

В примере, рассмотренном в § 3, п. А, из вида матриц понятно, что инвариантными являются как подпространство векторов e_x и e_y , так и его ортогональное дополнение (гл. 3, § 1) — одномерное пространство, задаваемое вектором e_z . Шестимерное функциональное пространство в примере § 3, п. В само по себе является подпространством пространства всех непрерывных функций, имеющего бесконечное число измерений.

В данном параграфе мы хотим показать, что можно построить инвариантное подпространство, исходя из единственного вектора в исходном пространстве. Пусть $\mathbf{r}$ — произвольный вектор в L . Определим набор из g векторов $\mathbf{r}_a$ соотношением

$$\mathbf{r}_a = T(G_a) \mathbf{r}, \quad (4.10)$$

где G_a пробегает g элементов группы $\mathcal{G}$. Отсюда сразу следует, что набор векторов $\mathbf{r}_a$ заключен в инвариантном подпространстве пространства L , поскольку для любого b

$$T(G_b) \mathbf{r}_a = T(G_b) T(G_a) \mathbf{r} = T(G_b G_a) \mathbf{r} = T(G_c) \mathbf{r} = \mathbf{r}_c, \quad (4.11)$$

где групповой элемент G_c задается соотношением $G_c = G_b G_a$.

Если все векторы $\mathbf{r}_a$ линейно-независимы, то они образуют базис g -мерного представления группы, поскольку формула (4.11) есть частный случай общей формулы (4.2) для представлений. В таком случае матрица $T(G_b)$ будет задаваться равенством $T_{ji}(G_b) = 1$, если групповые элементы, обозначенные индексами b, i и j , удовлетворяют соотношению $G_b G_i = G_j$. Все прочие матричные элементы должны равняться нулю.

В общем случае векторы $\mathbf{r}_a$ не являются линейно-независимыми, но всегда можно выбрать $s \leq g$ линейно-независимых базисных векторов в виде линейных комбинаций векторов $\mathbf{r}_a$. В большинстве случаев независимые базисные векторы удобно ортонормировать по Шмидту. Чтобы проиллюстрировать процедуру такого построения, вернемся к примеру § 3, п. В. Мы будем строить неза-

висимое пространство, исходя из единственной функции $\psi_1(\mathbf{r})=x^2$ в группе D_2 :

$$T(E)\psi_1=\psi_1,$$

$$T(R_1)\psi_1=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2-\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy,$$

$$T(R_2)\psi_1=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2+\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy,$$

$$T(R_3)\psi_1=\psi_1,$$

$$T(R_4)\psi_1=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2-\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy,$$

$$T(R_5)\psi_1=\frac{1}{4}x^2+\frac{3}{4}y^2+\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}xy.$$

Из вида полученных функций явствует, что они не являются линейно-независимыми, что построенное пространство трехмерно и что три функции x^2 , y^2 и xy образуют его базис, хотя и не ортонормированный. Матричное представление в этом базисе можно найти, пользуясь формулой (4.2); имеем

$$T(R_1)=\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$T(R_2)=\begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{3}{4} & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ \frac{3}{4} & \frac{1}{4} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \text{ и т. д.}$$

Процедура ортонормирования базиса по Шмидту (гл. 3, § 1) требует гораздо больше вычислений. Прежде всего напишем $\varphi_1=Ax^2$, где A находим из условия нормировки φ_1 с использованием скалярного произведения (3.13):

$$\iiint_V \varphi_1^* \varphi_1 dV = 1,$$

откуда

$$\varphi_1 = \left(\frac{21}{4\pi}\right)^{1/2} x^2.$$

Затем положим $\varphi_2 = B(y^2 - C\varphi_1)$ и найдем C и B из условий ортогональности $(\varphi_1, \varphi_2) = 0$ и нормировки $(\varphi_2, \varphi_2) = 1$. Получаем

$$\varphi_2 = \left(\frac{21}{220\pi}\right)^{1/2} (8y^2 - 3x^2).$$

Нетрудно убедиться, что произведение xy , будучи нечетной функцией как переменной x , так и переменной y , ортогонально и функции φ_1 , и функции φ_2 . Из условия нормировки находим

$$\varphi_3 = \left(\frac{14}{\pi}\right)^{1/2} xy.$$

§ 5. НЕПРИВОДИМОСТЬ

Как видно из примеров § 4, исходя из все более сложного функционального пространства, можно получать матричные представления все возрастающего размера. Казалось бы, изучение возможных представлений даже в простейших группах типа D_3 является делом устрашающей сложности. Однако нас спасает следующее замечательное свойство групповых представлений: все представления конечной группы можно «построить» из конечного числа некоторых определенных неприводимых представлений. Группа D_3 , например, имеет только три определенных неприводимых представления: два одномерных и одно двумерное. Здесь нам приходится вводить некоторые новые понятия; мы строго определим их чуть позже, а пока для иллюстрации обратимся к примеру, рассмотренному в § 3, п. А. Размерность представления в этом примере равна трем. Из вида матриц вытекает, однако, что построенные из первых двух строк и столбцов матрицы 2×2 образуют двумерное представление, тогда как диагональные матричные элементы, расположенные на пересечении третьей строки с третьим столбцом, образуют представление размерности единица. Это становится возможным, поскольку равны нулю элементы, расположенные на пересечении первых двух строк с третьим столбцом и первых двух столбцов с третьей строкой. Если говорить о векторном пространстве, то это озна-

чает, что два вектора e_x и e_y порождают инвариантное векторное пространство, а один вектор e_z порождает второе инвариантное векторное пространство, ортогональное первому. Мы скажем в этой ситуации, что трехмерное представление приводится к «сумме» двумерного и одномерного представлений. Одномерное представление, очевидно, не может быть приведено дальше, а попытавшись привести двумерное представление, можно убедиться в том, что и оно также неприводимо. Мы вкладываем в эти слова такой смысл: невозможно выбрать новые базисные векторы $e_1 = \alpha e_x + \beta e_y$ и $e_2 = \beta e_x - \alpha e_y$, такие, чтобы матричные элементы

$$T_{12}(R_a) = (e_1, T(R_a) e_2) \quad \text{и} \quad T_{21}(R_a) = (e_2, T(R_a) e_1)$$

обращались в этом базисе в нуль для всех элементов R_a из группы D_3 . Представления, которые нельзя привести, называют неприводимыми.

Понятие приводимости играет чрезвычайно важную роль в физике, поскольку, как мы увидим в следующей главе, из волновых функций, описывающих стационарные состояния симметрической системы с одной и той же энергией, можно построить базисные функции неприводимого представления группы операций симметрии.

Дадим теперь более строгое определение понятия приводимости. Пусть L — пространство, инвариантное относительно преобразований $T(G_a)$, индуцированных некоторой группой $\mathcal{G}$ из элементов G_a . Тогда, если L_1 — инвариантное подпространство пространства L и его ортогональное дополнение L_2 (гл. 3, § 1) тоже инвариантно, то представление T называют приводимым. Если же такое подпространство найти невозможно, то представление T называется неприводимым. В этом определении приводимости существенно, что инвариантны как подпространство L_1 , так и его ортогональное дополнение L_2 . Здесь опять возможно упрощение, поскольку, если операторы $T(G_a)$ унитарны, из инвариантности пространства L_1 вытекает инвариантность пространства L_2 . Доказательство очевидно: если базисные векторы пространства L_1 обозначить через e_i , а базисные векторы пространства L_2 — через $\tilde{e}_j$, то по определению L_2 мы имеем $(e_i, \tilde{e}_j) = 0$.

В силу инвариантности L_i произведение $(T(G_a)e_i, \tilde{e}_j) = 0$, а вследствие унитарности оператора T последнее равенство эквивалентно равенству $(e_i, T(G_a)\tilde{e}_j) = 0$. Из этого равенства вытекает, что векторы $T(G_a)\tilde{e}_j$ ортогональны векторам e_i , т. е. обязаны принадлежать пространству L_2 . Таким образом, пространство L_2 инвариантно, что и требовалось доказать. Условие унитарности преобразований почти не ограничивает общности, поскольку, как мы увидим в § 6, почти все интересные с точки зрения физики преобразования унитарны. Таким образом, оказывается возможным разбить любое пространство L на сумму подпространств L_q (их может быть больше двух), каждое из которых является инвариантным и неприводимым, хотя такое разбиение не обязательно должно осуществляться единственным образом. Можно написать $L = L_1 + L_2 + L_3 + \dots$, где каждое подпространство L_q неприводимо и инвариантно по отношению к преобразованиям $T(G_a)$. Соответственно этому представление предствления можно записать в виде

$$T(G_a) = T^{(1)}(G_a) \oplus T^{(2)}(G_a) \oplus T^{(3)}(G_a) \oplus \dots, \quad (4.12)$$

где $T^{(q)}(G_a)$ — неприводимое представление, индуцированное в пространстве L_q . Данное выражение следует понимать как сумму операторов $T^{(q)}(G_a)$, действующих в разных пространствах L_q , — на это указывает особая форма знака сложения.

На языке матриц это означает следующее: если выбрать базисные векторы таким образом, что вначале идут векторы пространства L_1 , затем векторы L_2 и т. д., то матрица примет «блок-диагональную» форму с нулями всюду, кроме диагонали, как показано ниже. Здесь символом $T^{(q)}(G_a)$ обозначена квадратная матрица, размерность которой совпадает с размерностью подпространства L_q , а нулями обозначены прямоугольные матрицы из одних нулевых элементов:

$$\begin{pmatrix} T^{(1)} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & T^{(2)} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & T^{(3)} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}.$$

Каждое $\Gamma^{(q)}(G_a)$ есть неприводимое матричное представление группы $\mathcal{G}$. Если задано произвольное матричное представление Γ , то, чтобы перейти к простой блочно-диагональной форме матрицы, очевидно, необходимо аккуратно осуществить переход к новому базису, отвечающему подпространствам L_q . Приведение матриц может быть записано в виде

$$\Gamma(G_a) = \Gamma^{(1)}(G_a) \oplus \Gamma^{(2)}(G_a) \oplus \Gamma^{(3)}(G_a) \oplus \dots, \quad (4.13)$$

аналогичном операторному равенству (4.12). Особая форма знака сложения вновь напоминает нам, что мы имеем дело не с обычным сложением матриц, а со «сборкой» матрицы Γ из квадратных матриц $\Gamma^{(q)}(G_a)$, размещенных вдоль диагонали.

Если задан произвольный вектор $\mathbf{r}$, то мы можем построить инвариантное пространство L , используя операции $\Gamma(G_a)\mathbf{r}$, как показано в § 4. Если теперь привести это пространство к сумме неприводимых подпространств L_q , то вектор $\mathbf{r}$ можно записать в виде $\mathbf{r} = \sum_q \mathbf{r}_q$, где $\mathbf{r}_q$ принадлежит пространству L_q . В этом случае говорят, что вектор $\mathbf{r}$ разложен на неприводимые компоненты $\mathbf{r}_q$.

§ 6. ЭКВИВАЛЕНТНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Описанное в § 5 приведение позволяет в принципе свести любое представление к составляющим его неприводимым представлениям. Поэтому в дальнейшем мы в основном ограничимся исследованием свойств неприводимых представлений, зная, что из них можно вывести свойства любого приводимого представления. Даже в этом случае число возможных неприводимых представлений остается бесконечным, как можно видеть из примера, рассмотренного в § 3, п. А. Пространство, определенное двумя векторами $\mathbf{e}_x$ и $\mathbf{e}_y$, было неприводимым и порождало двумерное неприводимое представление группы D_3 . Однако, по-другому выбрав в том же пространстве базисные векторы, мы получим иной набор матриц $\Gamma(G_a)$. Можно надеяться, что подобное тривиальное преобразование базиса не будет изменять некие существенные свойства представления — и это действительно так. Мы

введем понятие эквивалентности представлений, которое придаст строгую форму нашему утверждению.

Обозначим через $\Gamma(G_a)$ представление группы $\mathcal{G}$ в пространстве L . Тогда, если A есть отображение пространства L на пространство L' той же размерности, то набор операторов

$$\Gamma'(G_a) = A\Gamma(G_a)A^{-1}, \quad (4.14)$$

действующих в пространстве L' , также образует представление группы $\mathcal{G}$. Это легко показать; действительно, имеем

$$\begin{aligned} \Gamma'(G_a)\Gamma'(G_b) &= A\Gamma(G_a)A^{-1}A\Gamma(G_b)A^{-1} = \\ &= A\Gamma(G_a)\Gamma(G_b)A^{-1} = \\ &= A\Gamma(G_aG_b)A^{-1} = \\ &= \Gamma'(G_aG_b), \end{aligned}$$

что является определением понятия представления [формула (4.10)]. Такие два представления Γ' и Γ называют эквивалентными. Совершенно необходимо, чтобы для всех групповых элементов G_a применялась одна и та же операция отображения A . В частном случае пространства L и L' могут оказаться совпадающими.

Если представление Γ' эквивалентно представлению Γ , а Γ'' эквивалентно Γ' , то Γ'' эквивалентно Γ , откуда вытекает понятие класса взаимно эквивалентных представлений.

Преобразование базиса матричного представления дает эквивалентное матричное представление. В частности, пусть задан набор операторов $\Gamma(G_a)$, матрицы которых в базисе e_i имеют вид $T_{ji}(G_a)$. Тогда, если взять новый базис $e'_i = Ae_i$, то матрицы операторов $\Gamma(G_a)$ в новом базисе будут определяться матричным произведением $A^{-1}\Gamma(G_a)A$, поскольку

$$\begin{aligned} Te'_i &= T Ae_i = \sum_j (TA)_{ji} e_j = \sum_{jk} (TA)_{ji} (A^{-1})_k e'_k = \\ &= \sum_k (A^{-1}TA)_{ki} e'_k. \end{aligned}$$

Здесь порядок следования операторов A и A^{-1} обратен порядку в формуле (4.14). Это объясняется тем, что формулой (4.14) определяется новый оператор, а в данном

случае тот же самый оператор $\Gamma(G_a)$ записан в новом базисе.

Можно ожидать, что важнейшие свойства любых двух эквивалентных представлений одинаковы, и мы увидим далее, что это действительно так. Поэтому мы можем ограничиться рассмотрением из каждого класса эквивалентных представлений лишь по одному представлению. В частности, можно рассматривать только унитарные представления, поскольку утверждение, известное под названием теоремы Машке, гласит, что для конечных групп в любом классе эквивалентных представлений содержатся унитарные представления. Эта теорема справедлива и для большинства непрерывных групп, рассматриваемых в физике.

А. Доказательство теоремы Машке

Требуется доказать, что любое представление эквивалентно некоторому унитарному представлению. Для данного представления $\Gamma(G_a)$ мы обязаны найти оператор S , такой, чтобы эквивалентное представление $\Gamma'(G_a) = S\Gamma(G_a)S^{-1}$ было унитарным. Мы покажем, что этому условию удовлетворяет оператор $S = \{\sum_b \Gamma^\dagger(G_b) \times \Gamma(G_b)\}^{1/2}$, не пытаясь объяснить, что нас побудило сделать такой выбор. Для проверки унитарности мы должны показать, что

$$\Gamma'(G_a)^\dagger = \Gamma'(G_a)^{-1}. \quad (4.15)$$

Прежде всего заметим, что

$$\begin{aligned} \Gamma^\dagger(G_a) S^2 \Gamma(G_a) &= \sum_b \Gamma^\dagger(G_a) \Gamma^\dagger(G_b) \Gamma(G_b) \Gamma(G_a) = \\ &= \sum_b \Gamma^\dagger(G_b G_a) \Gamma(G_b G_a) = \\ &= \sum_c \Gamma^\dagger(G_c) \Gamma(G_c) = S^2, \end{aligned} \quad (4.16)$$

где $G_c = G_b G_a$. Мы использовали то свойство группы, что если элемент G_a фиксирован, а G_b пробегает всю группу, причем каждый ее элемент встречается один и только один раз, то и G_c пробегает все групповые элементы, причем каждый элемент также появляется один и только один

раз (гл. 2, § 9). Теперь, умножив обе части равенства (4.16) справа на $T^{-1}(G_a)S^{-1}$ и слева на S^{-1} , получим

$$S^{-1}T^{\dagger}(G_a)S = ST^{-1}(G_a)S^{-1},$$

т. е.

$$(ST(G_a)S^{-1})^{\dagger} = (ST(G_a)S^{-1})^{-1},$$

а это и есть требуемое условие унитарности (4.15). Мы воспользовались тем обстоятельством, что оператор S эрмитов.

§ 7. НЕЭКВИВАЛЕНТНЫЕ НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

Два представления T и T' называются «неэквивалентными», если не существует такого оператора A , который удовлетворял бы соотношению (4.14) для всех элементов G_a группы. Эквивалентные неприводимые представления удобно рассматривать как одно представление. (Для матриц это означает, что всегда можно выбрать такой базис, в котором соответствующие матрицы идентичны.) С точки зрения разложения (4.12) приводимого представления на его неприводимые компоненты это означает, что в таком разложении некоторое неприводимое представление может появляться несколько раз. Поэтому разложение на неприводимые представления можно записать в виде

$$T = \sum_{\alpha} m_{\alpha} T^{(\alpha)}, \quad (4.17)$$

где α пробегает неэквивалентные неприводимые представления, а целое число m_{α} показывает, сколько раз данное неприводимое представление $T^{(\alpha)}$ появляется в разложении. [Точка над знаком суммирования означает то же самое, что и знаки сложения в формуле (4.13).]

Например, в разложение шестимерного представления рассмотренного в § 3, п. В, дважды входит тождественное представление. Две независимые функции $(x^2 + y^2)$ и z^2 , инвариантные в группе D_3 , являются по этой причине базисными функциями одномерного тождественного представления $T^{(1)}$, ставящего в соответствие каждому групповому элементу единицу. Можно также показать (задача 4.9), что и двумерное представление $T^{(3)}$ входит в разложение дважды, а поэтому формула приведения представления будет записываться в виде $T = 2T^{(1)} \oplus 2T^{(3)}$.

§ 8. СВОЙСТВА ОРТОГОНАЛЬНОСТИ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Из сказанного в § 5—7 можно сделать вывод, что задача исследования представлений группы сводится к изучению неэквивалентных неприводимых представлений, обладающих, как мы сейчас установим, важными свойствами ортогональности. Эти свойства составляют ядро математической теории представлений, позволяют нам легко оперировать с ними и лежат в основе большинства физических проявлений симметрии. Свойства ортогональности следуют из двух положений, носящих название лемм Шура. Они были выведены Шуром в 1905 г. «Леммой» математики называют промежуточное заключение, которое необходимо сделать при выводе теоремы или какого-либо положения. Вначале мы сформулируем эти две леммы, затем рассмотрим их следствия, а в конце параграфа докажем их.

Первая лемма Шура. Пусть $\Gamma(G_a)$ — неприводимое представление группы $\mathcal{G}$ в пространстве L , и пусть A — фиксированный оператор в L . Тогда, если для всех элементов G_a группы $\mathcal{G}$ выполняется равенство $\Gamma(G_a)A = A\Gamma(G_a)$, то $A = \lambda I$, где I есть тождественный (или единичный) оператор. Другими словами, всякий фиксированный оператор, коммутирующий с операторами $\Gamma(G_a)$ неприводимого представления для любых G_a из группы $\mathcal{G}$, является единичным оператором с точностью до постоянного множителя.

Вторая лемма Шура. Пусть $\Gamma^{(1)}(G_a)$ и $\Gamma^{(2)}(G_a)$ — два неприводимых представления группы $\mathcal{G}$ в пространствах L_1 и L_2 размерностей s_1 и s_2 , и пусть A — оператор, переводящий векторы из L_2 в L_1 . Тогда, если представления $\Gamma^{(1)}$ и $\Gamma^{(2)}$ неэквивалентны и для всех элементов G_a группы $\mathcal{G}$ выполняется равенство $\Gamma^{(1)}(G_a)A = A\Gamma^{(2)}(G_a)$, то $A = 0$, т. е. A — нулевой оператор.

Воспользуемся теперь леммами Шура для вывода соотношений ортогональности матричных представлений. Рассмотрим два неприводимых представления $\Gamma^{(\alpha)}(G_a)$ и $\Gamma^{(\beta)}(G_a)$ группы $\mathcal{G}$, причем $\Gamma^{(\alpha)}(G_a)$ определено в пространстве L_α , а $\Gamma^{(\beta)}(G_a)$ — в L_β . Пусть X — некоторый оператор, преобразующий векторы пространства L_β в векторы пространства L_α . Мы можем теперь показать,

что оператор A вида

$$A = \sum_b T^{(\alpha)}(G_b) X T^{(\beta)}(G_b^{-1}) \quad (4.18)$$

как раз обладает свойствами оператора A в леммах Шура, ибо

$$\begin{aligned} T^{(\alpha)}(G_a) A &= \sum_b T^{(\alpha)}(G_a) T^{(\alpha)}(G_b) X T^{(\beta)}(G_b^{-1}) = \\ &= \sum_b T^{(\alpha)}(G_a G_b) X T^{(\beta)}(G_b^{-1}) T^{(\beta)}(G_a^{-1}) T^{(\beta)}(G_a) = \\ &= \sum_b T^{(\alpha)}(G_a G_b) X T^{(\beta)}((G_a G_b)^{-1}) T^{(\beta)}(G_a) = \\ &= \sum_c T^{(\alpha)}(G_c) X T^{(\beta)}(G_c^{-1}) T^{(\beta)}(G_a) = \\ &= A T^{(\beta)}(G_a). \end{aligned}$$

Мы здесь использовали то свойство группы, что произведение $G_a G_b = G_c$ двух элементов, в котором элемент a фиксирован, а b пробегает всю группу, также пробегает все групповые элементы (гл. 2, § 9). Рассмотрим два случая:

1) $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$ — одно и то же представление, откуда по лемме Шура $A = \lambda 1$;

2) $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$ неэквивалентны, и по лемме Шура $A = 0$. Эти два случая можно объединить в одно равенство

$$A = \lambda \delta_{\alpha\beta} 1, \quad (4.19)$$

считая, что в нем $\delta_{\alpha\beta} = 0$, когда неприводимые представления $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$ неэквивалентны, и $\delta_{\alpha\beta} = 1$, когда $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$ — одно и то же представление. Случай, когда $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$ эквивалентны, но не совпадают, не охватывается данным равенством, но он не представляет для нас интереса.

Содержание обеих лемм Шура при выборе оператора A в форме (4.18) можно свести к одному равенству

$$\sum_{a=1}^g \sum_{m=1}^{s_\beta} \sum_{k=1}^{s_\alpha} T_{ik}^{(\alpha)}(G_a) X_{km} T_{mj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = A_{ij} = \lambda \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}, \quad (4.20)$$

где X — совершенно произвольная прямоугольная матрица, но множитель λ зависит от выбора X . Мы восполь-

зуемся свободой выбора матрицы X и положим ее элементы равными $X_{km} = \delta_{kp} \delta_{mq}$; другими словами, мы выбираем матрицу X , все элементы которой — нули, кроме одного элемента, расположенного на пересечении p -й строки с q -м столбцом, который принимается равным единице. При таком выборе в формуле (4.20) исчезнут два знака суммирования и останется выражение

$$\sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = \lambda \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij}. \quad (4.21)$$

Величина λ имеет смысл, только если $\alpha = \beta$ и $i = j$; в этом случае, просуммировав по i обе части равенства (4.21), получим

$$\sum_{i=1}^{s_\alpha} \sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qi}^{(\alpha)}(G_a^{-1}) = \lambda \sum_{i=1}^{s_\alpha} 1 = \lambda s_\alpha,$$

т. е.

$$\sum_{a=1}^g T_{qp}^{(\alpha)}(E) = \lambda s_\alpha$$

и, следовательно,

$$\lambda = g \delta_{pq} / s_\alpha,$$

ибо образом тождественной операции E является единичная матрица. Подставляя в формулу (4.21) это выражение для λ , получаем

$$\sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{qj}^{(\beta)}(G_a^{-1}) = g \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{pq} / s_\alpha. \quad (4.22)$$

Если матричное представление $\Gamma^{(\beta)}$ унитарно, то возможно дальнейшее упрощение. Так как

$$\Gamma^{(\beta)}(G_a^{-1}) \Gamma^{(\beta)}(G_a) = \Gamma^{(\beta)}(E) = 1,$$

мы имеем

$$\Gamma^{(\beta)}(G_a^{-1}) = (\Gamma^{(\beta)}(G_a))^{-1},$$

а поэтому если матрица Γ унитарна, то

$$T_{qi}^{(\beta)*}(G_a^{-1}) = T_{iq}^{(\beta)}(G_a)^*,$$

и при подстановке в равенство (4.22) в итоге получим

$$\sum_{a=1}^g T_{ip}^{(\alpha)}(G_a) T_{iq}^{(\beta)}(G_a)^* = g \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \delta_{pq} / s_\alpha. \quad (4.23)$$

Данное соотношение ортогональности является чрезвычайно мощным. Заметим, что индексы матричных элементов, стоящих в левой части, выбраны совершенно произвольно, а суммирование производится только по элементам группы. Соотношение (4.23) показывает, что получаемая сумма обращается в нуль, если α и β — неэквивалентные неприводимые представления. Даже если представления α и β совпадают, сумма остается нулевой, пока в левую часть входят различные матричные элементы, т. е. если $i \neq j$ или $p \neq q$. Единственную ситуацию, в которой сумма отлична от нуля при произвольных i и p , можно изобразить так:

$$\sum_{a=1}^g |T_{ip}^{(\alpha)}(G_a)|^2 = g/s_\alpha.$$

Содержащуюся в соотношении ортогональности операцию суммирования по всем групповым элементам часто называют «усреднением по группе». В более строгом смысле для усреднения по группе требуется разделить получаемую сумму на общее число g элементов группы. Термин «соотношение ортогональности» для формулы (4.23) означает, что в некотором векторном пространстве некое скалярное произведение обращается в нуль. Использование этого термина в данном случае оправдывается, если рассматривать набор матричных элементов $T_{ip}^{(\alpha)}(G_a)$ для фиксированных α , i и p как обозначенные индексом a компоненты вектора в g -мерном пространстве. Скалярное произведение двух векторов определяется в этом пространстве обычным образом [формула (3.7)] как сумма по компонентам. Тогда формула (4.23) констатирует ортогональность таких векторов с разными наборами индексов α , i и p .

Важно понять, что соотношение ортогональности выполняется только для неприводимых представлений. Из этого, как мы вскоре увидим, вытекает простой алгебраический критерий приводимости представления.

Прежде чем продолжить наши рассуждения, отметим два момента, вытекающие из полученных результатов. Во-первых, покажем, что неприводимые представления абелевых групп одномерны. Пусть $\Gamma^{(\alpha)}(G_a)$ — неприводимое представление абелевой группы $\mathcal{G}$. Так как по

определению элементы абелевой группы коммутируют, для любых G_a и G_b из $\mathcal{G}$ имеем

$$T^{(\alpha)}(G_a) T^{(\alpha)}(G_b) = T^{(\alpha)}(G_b) T^{(\alpha)}(G_a).$$

Отсюда по первой лемме Шура следует, что $T^{(\alpha)}(G_a)$ отличается от единичного оператора постоянным множителем, т. е. $T^{(\alpha)}(G_a) = \lambda_a^{(\alpha)} 1$. Таким образом, представление $T^{(\alpha)}(G_a)$ для всех G_a является диагональным и поэтому должно быть либо приводимым, либо одномерным. Первое предположение противоречит исходным посылкам; следовательно, неприводимые представления абелевых групп одномерны.

В качестве второго примера докажем ортогональность неприводимых представлений группы D_3 . В § 3, п. А мы уже определили два из них: одномерное представление $T^{(2)}$ и двумерное $T^{(3)}$. Кроме того, в любой группе существует тождественное представление $T^{(1)}$. Эти три представления даны в табл. 4.1. Все они являются неприводимыми (задача 4.7) и могут использоваться для иллюстрации ортогональности. Размерности представлений, очевидно, равны $s_1=1$, $s_2=1$ и $s_3=2$, а размерность группы $g=6$. Применяя формулу (4.23) к данному случаю, получаем

$$\sum_{a=1}^{6^1} [T_{ip}^{(3)}(G_a)]^2 = 6/2 = 3 \text{ при любых } i \text{ и } p,$$

$$\sum_{a=1}^{6^2} T_{ip}^{(3)}(G_a) T^{(2)}(G_a) = 0 \text{ при любых } i \text{ и } p,$$

$$\sum_{a=1}^6 T^{(1)}(G_a) T^{(2)}(G_a) = 0,$$

$$\sum_{a=1}^{6^2} [T^{(2)}(G_a)]^2 = 6/1 = 6 \text{ и т. д.}$$

А. Доказательство первой леммы Шура

Пусть $\mathbf{r}$ — собственный вектор оператора $\mathbf{A}$ в пространстве L с собственным значением λ , так что $\mathbf{A}\mathbf{r} = \lambda\mathbf{r}$. Если теперь $\mathbf{r}$ преобразованием $T(G_a)$ переводится в новый вектор $\mathbf{r}_a = T(G_a)\mathbf{r}$, то $\mathbf{r}_a$ также будет собственным вектором оператора $\mathbf{A}$ с тем же собственным значением

Таблица 4.1

Преобразование	Элементы группы G'_d				
	E	R_1	R_2	R_3	R_5
$T(1)$	1	1	1	1	1
$T(2)$	1	1	1	-1	-1
$T(3)$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

λ , поскольку

$$A\mathbf{r}_a = A\mathbf{T}(G_a)\mathbf{r} = \mathbf{T}(G_a)A\mathbf{r} = \mathbf{T}(G_a)\lambda\mathbf{r} = \lambda\mathbf{T}(G_a)\mathbf{r} = \lambda\mathbf{r}_a.$$

Если G_a пробегает всю группу $\mathcal{G}$, то набор векторов $\mathbf{r}_a$ должен порождать инвариантное подпространство, так как

$$\mathbf{T}(G_b)\mathbf{r}_a = \mathbf{T}(G_b)\mathbf{T}(G_a)\mathbf{r} = \mathbf{T}(G_bG_a)\mathbf{r} = \mathbf{r}_c,$$

где c определяется из соотношения $G_bG_a = G_c$ групповой таблицы умножения. Но так как пространство L по определению неприводимо, оно не может содержать инвариантного подпространства. Таким образом, пространство векторов $\mathbf{r}_a$ обязано совпадать со всем пространством L . Следовательно, для любого вектора $\mathbf{R} = \sum_a c_a \mathbf{r}_a$ в L имеем

$$A\mathbf{R} = A \sum_a c_a \mathbf{r}_a = \sum_a c_a A\mathbf{r}_a = \sum_a c_a \lambda \mathbf{r}_a = \lambda \mathbf{R},$$

но так как $\mathbf{R}$ — произвольный вектор пространства L , то $A = \lambda I$. В матричной форме оператор A просто будет равняться величине λ , умноженной на единичную матрицу.

Б. Доказательство второй леммы Шура

Рассмотрим вначале случай $s_2 \leq s_1$. Тогда A переводит L_1 в подпространство L_A некоторой размерности $s_A \leq s_2 \leq s_1$ в пространстве L_1 . Подпространство L_A состоит из векторов $A\mathbf{r}$, где $\mathbf{r}$ — произвольный вектор в L_2 . Отсюда тотчас же следует, что пространство L_A инвариантно относительно преобразований группы $\mathcal{G}$, поскольку

$$\mathbf{T}^{(1)}(G_a)A\mathbf{r} = A\mathbf{T}^{(2)}(G_a)\mathbf{r} = A\mathbf{r}_a,$$

и этот вектор принадлежит пространству L_A , так как вектор $\mathbf{r}_a = [\mathbf{T}^{(2)}(G_a)\mathbf{r}]$ принадлежит L_2 . Однако представление $\mathbf{T}^{(1)}$ по определению неприводимо, а поэтому L_1 не может иметь инвариантного подпространства. Таким образом, мы приходим к противоречию, если только L_A не является ни нульмерным пространством ($s_A = 0$), ни полным пространством L_1 ($s_A = s_1$). Иными словами, мы доказали, что либо 1) $A\mathbf{r} = 0$ для любых $\mathbf{r}$ в L_2 , т. е. $A = 0$,

либо 2) $s_A = s_1 = s_2$. Последнее равенство вытекает из неравенства $s_A \leq s_2$ и условия $s_2 \leq s_1$.

Вторая из этих альтернатив исключается в силу условия, что $\Gamma^{(1)}$ и $\Gamma^{(2)}$ — неэквивалентные представления. Она означала бы, что L_1 и L_2 имеют одинаковую размерность; отсюда следовало бы существование оператора A^{-1} , обратного оператору A , и поэтому из допущения $\Gamma^{(1)}(G_a)A = A\Gamma^{(2)}(G_a)$ следовало бы, что $\Gamma^{(1)}(G_a) = A\Gamma^{(2)}(G_a)A^{-1}$, т. е. что представления $\Gamma^{(1)}$ и $\Gamma^{(2)}$ эквивалентны. Остается заключить, что $A = 0$.

В случае $s_2 > s_1$ доказательство аналогично. В этом случае с необходимостью $s_A < s_2$, а поэтому должны существовать векторы g в L_2 , которые переводятся преобразованием A в нуль, т. е. для которых $Ag = 0$. Подпространство этих векторов в L_2 обозначим через L_B ; его размерность будет равна $s_2 - s_A$. Тогда пространство L_B обязано быть инвариантным, так как если $g_a = \Gamma^{(2)}(G_a)g$, то $Ag_a = A\Gamma^{(2)}(G_a)g = \Gamma^{(1)}(G_a)Ag = 0$, из чего видно, что g_a тоже принадлежит пространству L_B . Это противоречит условию неприводимости представления $\Gamma^{(2)}$, если только не выполняется равенство $L_B = L_2$, другими словами, $Ag = 0$ для *всех* векторов g в L_2 . Таким образом, мы снова приходим к выводу, что $A = 0$.

§ 9. ХАРАКТЕРЫ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Как говорилось в § 6, для всякого данного представления можно построить бесконечное число эквивалентных матричных представлений путем изменения базиса (т. е. преобразования подобия). Мы хотим найти некоторые вполне определенные свойства представлений, которые не зависят от таких преобразований. В принципе можно построить много инвариантов, поскольку преобразование подобия не изменяет собственных значений матрицы. Но в большинстве случаев достаточно одной-единственной характеристики, и наиболее подходящей для этой цели оказывается сумма всех собственных значений, называемая «следом» матрицы и равная сумме ее диагональных элементов в любом базисе. Такой след матричного представления $\Gamma(G_a)$ обозначается через $\chi(G_a)$. Набор чисел $\chi(G_a)$, где G_a пробегает все элементы группы, называется «характером» представления Γ и обозна-

чается через χ . Имеем

$$\chi(G_a) = \sum_{i=1}^s T_{ii}(G_a). \quad (4.24)$$

Мы сразу же видим, что характер представления инвариантен по отношению к преобразованию подобия, поскольку из равенства $T'(G_a) = AT(G_a)A^{-1}$ следует равенство

$$\begin{aligned} \chi'(G_a) &= \sum_i T'_{ii}(G_a) = \sum_{ijk} A_{ij} T_{jk}(G_a) (A^{-1})_{ki} = \\ &= \sum_{jk} T_{jk}(G_a) (A^{-1}A)_{kj} = \\ &= \sum_j T_{jj}(G_a) = \chi(G_a). \end{aligned}$$

Путем аналогичных рассуждений можно показать, что все элементы одного и того же класса $\mathcal{C}_p$ (гл. 2, § 6) должны иметь одинаковый характер, который мы обозначим через χ_p . Действительно, предположим, что элементы G_a и G_b принадлежат одному и тому же классу, т. е. связаны соотношением $G_a = G_m G_b G_m^{-1}$. Тогда для любого представления T

$$\begin{aligned} \chi(G_a) &= \sum_i T_{ii}(G_a) = \sum_i T_{ii}(G_m G_b G_m^{-1}) = \\ &= \sum_{ijk} T_{ii}(G_a) T_{jk}(G_b) T_{ki}(G_m^{-1}) = \\ &= \sum_{jk} T_{jk}(G_b) T_{kj}(G_m^{-1} G_m) = \\ &= \sum_j T_{jj}(G_b) = \chi(G_b). \end{aligned}$$

§ 10. СООТНОШЕНИЕ ОРТОГОНАЛЬНОСТИ ДЛЯ ХАРАКТЕРОВ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В случае неприводимых представлений для вывода соотношений между характерами мы можем воспользоваться соотношением ортогональности (4.23). Положив в формуле (4.23) $p=i$ и $q=j$ и просуммировав левую и правую части по i и j , получим

$$\sum_{\alpha=1}^g \sum T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) \sum_j T_{jj}^{(\beta)}(G_a)^* = g \delta_{\alpha\beta},$$

так что

$$\sum_{a=1}^g \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)}(G_a)^* = g \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.25a)$$

Если объединить сопряженные элементы в классы $\mathcal{C}_p$, содержащие по c_p элементов, то данное соотношение можно записать в виде

$$\sum_{p=1}^n c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g \delta_{\alpha\beta}, \quad (4.25b)$$

где суммирование проводится по n классам $\mathcal{C}_p$ группы $\mathcal{G}$.

В частном случае $\alpha = \beta$ имеем соотношение

$$\sum_{a=1}^g |\chi^{(\alpha)}(G_a)|^2 = \sum_{p=1}^n c_p |\chi_p^{(\alpha)}|^2 = g. \quad (4.26)$$

Равенство (4.25) мы будем называть «соотношением ортогональности» для характеров. Характеры χ в формуле (4.25b) можно рассматривать как векторы с компонентами $(c_p)^{1/2} \chi_p$ в векторном пространстве размерности n , где n — число классов в группе $\mathcal{G}$. В этом пространстве характеры неприводимых представлений образуют набор ортогональных векторов. Отсюда ясно, что число неэквивалентных неприводимых представлений не может превышать числа классов группы. В § 13 мы увидим, что эти два числа в действительности равны.

Для иллюстрации ортогональности характеров неприводимых представлений можно воспользоваться примером из § 3, п. А. Характеры $\chi_p^{(\alpha)}$ для каждого класса p и каждого неприводимого представления α удобно свести в таблицу (табл. 4.2), которая теперь будет содержать

Таблица 4.2

Представление \ Класс			
	$\mathcal{C}_1 (E)$	$\mathcal{C}_2 (R_1, R_2)$	$\mathcal{C}_3 (R_3, R_4, R_5)$
$\Gamma (1)$	1	1	1
$\Gamma (2)$	1	1	-1
$\Gamma (3)$	2	-1	0

меньше столбцов (по одному на каждый класс, а не на каждый элемент группы). При использовании соотношения ортогональности для характеров следует не забывать включать число c_p групповых элементов в каждом классе.

§ 11. ПРИВЕДЕНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ХАРАКТЕРОВ ГРУППЫ

В § 5 и 7 мы показали, как в принципе можно привести произвольное представление Γ к его неприводимым составляющим. Просуммировав диагональные элементы матрицы Γ [формула (4.17)], мы сразу увидим, что характер χ представления связан с характерами неприводимых представлений таким же соотношением. Если характер представления Γ для элементов класса $\mathcal{C}_p$ обозначить через χ_p , то получим

$$\chi_p = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)}, \quad (4.27)$$

где числа m_{α} показывают, сколько раз в разложении представления Γ встречается каждое неэквивалентное неприводимое представление $\Gamma^{(\alpha)}$. Понятно, что возможность определить эти m_{α} для данного Γ весьма заманчива, и это действительно делается очень просто, если только известны характеры неприводимых представлений $\chi_p^{(\alpha)}$. Используя соотношение ортогональности (4.256) и формулу (4.27), получаем

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(\beta)*} \chi_p &= \frac{1}{g} \sum_{\alpha} m_{\alpha} \sum_p c_p \chi_p^{(\beta)*} \chi_p^{(\alpha)} = \\ &= \frac{1}{g} \sum_{\alpha} m_{\alpha} g \delta_{\alpha\beta} = m_{\beta}. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Это выражение для скалярного произведения характера χ на характер неприводимого представления $\chi^{(\beta)}$ аналогично формуле (3.6) для «компоненты» m_{β} характера χ в направлении «вектора» $\chi^{(\beta)}$. В качестве иллюстрации рассмотрим трехмерное представление Γ из § 3, п. А. Его характер равен (3, 0, -1), где числа соответствуют χ_p для трех классов группы D_3 и взяты в том же порядке, в котором эти классы расположены в табл. 4.2. Записав

в обозначениях таблицы

$$\Gamma = m_1 \Gamma^{(1)} \oplus m_2 \Gamma^{(2)} \oplus m_3 \Gamma^{(3)},$$

с учетом формулы (4.28) получим

$$m_1 = \frac{1}{6} (3 + 0 - 3) = 0,$$

$$m_2 = \frac{1}{6} (3 + 0 + 3) = 1,$$

$$m_3 = \frac{1}{6} (6 + 0 + 0) = 1.$$

Отсюда следует, что представление Γ приводится к сумме представлений $\Gamma^{(2)}$ и $\Gamma^{(3)}$. Это почти тривиальный пример, поскольку такое разложение явствует из самого вида матриц. Тем не менее он показывает, что наш метод неплохо застрахован от ошибок: величины m_α должны быть целыми положительными числами или нулями.

Более содержательный пример дает шестимерное представление, рассмотренное в примере § 3, п. В (задача 4.9).

§ 12. КРИТЕРИЙ НЕПРИВОДИМОСТИ

По характеру представления сразу можно судить, неприводимое оно или нет. В § 10 было показано, что если представление χ неприводимо, то

$$\sum_p c_p |\chi_p|^2 = g. \quad (4.29)$$

Можно также доказать, что если выполняется условие (4.29), то представление χ неприводимо; таким образом, (4.29) — необходимое и достаточное условие. Для доказательства обратимся к равенствам (4.25) и (4.27), которые можно объединить в соотношение

$$\sum_p c_p |\chi_p|^2 = \sum_{\alpha\beta p} c_p m_\alpha m_\beta \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g \sum_\alpha m_\alpha^2.$$

Поэтому, если справедливо равенство (4.29), то $\sum_\alpha m_\alpha^2 = 1$, а так как все m_α целые, отсюда следует, что все числа m_α равны нулю, кроме одного из них, которое мы обозначим через m_γ , — оно равно единице: $m_\gamma = 1$. Мы видим, что $\Gamma = \Gamma^{(\gamma)}$, а последнее есть неприводимое представление.

В качестве примера можно показать, что двумерное представление $\Gamma^{(3)}$ группы D_3 неприводимо, поскольку из табл. 4.2 следует

$$\sum_p \sigma_p |\chi_p|^2 = (4 + 2 + 0) = 6 = g.$$

§ 13. ЧИСЛО НЕЭКВИВАЛЕНТНЫХ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ, РЕГУЛЯРНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

В § 10 было показано, что число неэквивалентных неприводимых представлений конечной группы $\mathcal{G}$ не может превышать числа классов в этой группе. В примере группы D_3 из табл. 4.2 видно, что имеется три неэквивалентных неприводимых представления. Но в группе D_3 имеется только три класса; это дает нам основание заключить, что $\Gamma^{(1)}$, $\Gamma^{(2)}$ и $\Gamma^{(3)}$ — все возможные для группы D_3 неэквивалентные неприводимые представления. Вообще говоря, точное число неэквивалентных неприводимых представлений группы хотелось бы определять заранее, и сейчас, пользуясь довольно искусственным приемом, мы покажем, что оно всегда равно числу классов в группе. Прием заключается в том, что мы строим представление весьма специального вида, размерность которого равна числу элементов группы g . Такое представление называется «регулярным» и обозначается через $\Gamma^{(R)}$.

Матрицы $\Gamma^{(R)}(G_a)$ данного регулярного представления определяются соотношением

$$G_a G_b = \sum_c T_{cb}^{(R)}(G_a) G_c. \quad (4.30)$$

Нетрудно показать, что матрицы $\Gamma^{(R)}(G_a)$ в самом деле образуют представление. Умножив обе части равенства (4.30) на некоторый групповой элемент G_d , получим

$$\begin{aligned} G_d G_a G_b &= \sum_c T_{cb}^{(R)}(G_a) G_d G_c = \\ &= \sum_c \sum_e T_{cb}^{(R)}(G_a) T_{ec}^{(R)}(G_d) G_e = \\ &= \sum_e \left[\sum_c T_{ec}^{(R)}(G_d) T_{cb}^{(R)}(G_a) \right] G_e. \end{aligned}$$

Но в то же время $G_a G_a G_b = (G_a G_a) G_b = \sum T_{cb}^{(k)} (G_a G_a) G_c$; сравнивая это равенство с предыдущим, получаем

$$\Gamma^{(R)}(G_a G_a) = \Gamma^{(R)}(G_a) \Gamma^{(k)}(G_a),$$

т. е. условие (4.1), которым определяется представление. Отметим, что, поскольку произведение $G_a G_b$ тоже является элементом группы, сумма в правой части равенства (4.30) содержит только один член. Следовательно, при данных a и b все матричные элементы $T_{cb}^{(R)}(G_a)$ обращаются в нуль, кроме соответствующего одному значению c , который равен 1. Таким образом, все столбцы матрицы $\Gamma^{(k)}(G_a)$ будут состоять из нулей и одной единицы и эта единица будет располагаться на диагонали только тогда, когда G_a есть единичный элемент E . Следовательно, характеры регулярного представления будут равны нулю для всех элементов, кроме единичного, для которого характер равен размерности представления g , т. е.

$$\chi^{(R)}(G_a) = 0, \quad G_a \neq E, \quad \chi^{(k)}(E) = g. \quad (4.31)$$

Посмотрим теперь, как приводится регулярное представление

$$\Gamma^{(R)}(G_a) = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \Gamma^{(\alpha)}(G_a).$$

С учетом формул (4.28) и (4.31) получаем

$$m_{\alpha} = \frac{1}{g} \sum_a \chi^{(\alpha)}(G_a)^* \chi^{(R)}(G_a) = \frac{1}{g} g \chi^{(\alpha)}(E) = s_{\alpha}, \quad (4.32)$$

где s_{α} — размерность неприводимого представления $\Gamma^{(\alpha)}$. Таким образом, неприводимое представление $\Gamma^{(\alpha)}$ встречается в разложении регулярного представления столько раз, какова его размерность s_{α} . Это означает, что регулярное представление должно содержать все неприводимые представления.

Приравняв размерность g представления Γ^R суммарной размерности его составляющих, получим важный результат

$$g = \sum_{\alpha} m_{\alpha} s_{\alpha} = \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2. \quad (4.33)$$

Отметим, что соотношение (4.32) относится к регулярному представлению, а формула (4.33) выражает общее свой-

ство группы, а именно то, что сумма квадратов размерностей всех возможных неэквивалентных неприводимых представлений группы равна числу ее элементов. Теперь на основании равенства (4.33) докажем, что число неэквивалентных неприводимых представлений группы равно числу классов этой группы.

Доказательство. В § 8 было показано, что матричные элементы $T_{ij}^{(\alpha)}(G_a)$ можно рассматривать как компоненты некоего набора взаимно ортогональных векторов $T_{ij}^{(\alpha)}$ в g -мерном пространстве с базисом e_a , где $a=1, 2, \dots, g$. Общее число таких векторов определяется всеми возможными значениями индексов i, j и α и равно сумме $\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2$

по всем неэквивалентным неприводимым представлениям. Но как только что было показано, эта сумма равняется g . Следовательно, число ортогональных векторов $T_{ij}^{(\alpha)}$ равно размерности пространства и, стало быть, векторы $T_{ij}^{(\alpha)}$ должны образовывать пространство. Поэтому любой вектор v в этом пространстве можно представить в виде линейной комбинации векторов $T_{ij}^{(\alpha)}$:

$$v = \sum_{\alpha, ij} c(\alpha_{ij}) T_{ij}^{(\alpha)},$$

а его компоненты v_a в базисе e_a — в виде

$$v_a = \sum_{\alpha, ij} c(\alpha_{ij}) T_{ij}^{(\alpha)}(G_a). \quad (4.34)$$

Выделим только те векторы v , которые имеют одинаковые «проекции» на все «направления» e_a ; они соответствуют элементам одного и того же класса группы G , т. е. $v_c = v_a$, если $G_c = G_b^{-1} G_a G_b$ для любого G_b из $\mathcal{G}$. Поэтому можно записать

$$\begin{aligned} v_a &= \frac{1}{g} \sum_{b=1}^g v_c = \quad (\text{где } G_c = G_b^{-1} G_a G_b) \\ &= \frac{1}{g} \sum_b \sum_{\alpha, ij} c(\alpha_{ij}) T_{ij}^{(\alpha)}(G_b^{-1} G_a G_b) = [\text{формула (4.34)}] \\ &= \frac{1}{g} \sum_b \sum_{\alpha, ij} \sum_{kl} c(\alpha_{ij}) T_{ik}^{(\alpha)}(G_b^{-1}) T_{kl}^{(\alpha)}(G_a) T_{lj}^{(\alpha)}(G_b) = \quad (4.35) \\ &= \frac{1}{g} \sum_{\alpha, ij} \sum_{kl} c(\alpha_{ij}) T_{kl}^{(\alpha)}(G_a) \delta_{ij} \delta_{kl} g / s_{\alpha} = [\text{с учетом (4.22)}] \\ &= \sum_{\alpha} \frac{1}{s_{\alpha}} \sum_{ij} c(\alpha_{ij}) \chi^{(\alpha)}(G_a). \end{aligned}$$

Эти векторы $\mathbf{v}$ образуют подпространство размерности n , где n — число классов, и формула (4.35) показывает, что характеры, являющиеся набором ортонормированных векторов в этом подпространстве (§ 10), также образуют его базис. Отсюда вытекает, что должно быть ровно n таких характеров $\chi^{(\alpha)}$, т. е. число неэквивалентных неприводимых представлений равно n — числу классов группы $\mathcal{G}$, что и требовалось доказать.

§ 14. ВТОРОЕ СООТНОШЕНИЕ ОРТОГОНАЛЬНОСТИ ДЛЯ ХАРАКТЕРОВ ГРУПП

Равенство числа классов числу неэквивалентных неприводимых представлений означает, что таблица характеров, в которой столбцы соответствуют классам, а строки — неприводимым представлениям, должна быть квадратной. В силу соотношения ортогональности (4.25) любые две строки в такой таблице ортогональны, и отсюда мы можем заключить, что и для двух произвольных столбцов таблицы также существует соотношение ортогональности.

Чтобы вывести это соотношение, построим матрицу B размерности $n \times n$, элементы которой таковы:

$$B_{\alpha p} = \left(\frac{c_p}{g} \right)^{1/2} \chi_p^{(\alpha)},$$

где n — число классов, а также число неэквивалентных неприводимых представлений. Из соотношения ортогональности (4.25) следует, что при любых α и β

$$\sum_p B_{\beta p} B_{\alpha p}^* = 1$$

или, в матричной форме, $BB^+ = 1$. Поскольку матрица B квадратная, отсюда следует, что модуль ее детерминанта равен 1, что существует обратная матрица B^{-1} и $B^{-1} = B^+$. Поэтому также и $B^+B = 1$, что для матричных элементов означает

$$\sum_{\alpha} B_{\alpha p}^* B_{\alpha q} = \delta_{pq}.$$

Вернувшись к характеристам группы, получим

$$\sum_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)*} \chi_q^{(\alpha)} = \frac{g}{c_p} \delta_{pq}, \quad (4.36)$$

т. е. соотношение ортогональности для столбцов таблицы характеров.

§ 15. ПОСТРОЕНИЕ ТАБЛИЦЫ ХАРАКТЕРОВ

Мы находили элементы таблицы характеров группы D_3 (табл. 4.2), суммируя диагональные элементы построенных ранее матриц представления. Это не самый простой способ построения таблицы характеров. Но таблицы характеров для всех групп, которые могут понадобиться, уже давно вычислены (они приведены в приложении 1). Тем не менее было бы интересно увидеть, как из априорных соображений можно построить таблицу характеров для большинства обычных конечных групп. Это выполняется удивительно просто. Уже найденных нами свойств характеров неприводимых представлений во многих случаях достаточно, чтобы однозначно определить характеры. Выпишем эти свойства.

1. Число неприводимых представлений = числу классов.

2. Размерность s_{α} неприводимых представлений должна удовлетворять равенству $\sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 = g$, которое во многих случаях дает для s_{α} единственное решение. Далее, поскольку характер для единичного элемента E равен размерности представления, числа в первом столбце таблицы характеров — это просто целые числа s_{α} .

3. Для каждой группы существует одномерное тождественное представление, для которого $\Gamma(G_a) = 1$ и, следовательно, $\chi(G_a) = 1$. Этим определяется одна из строк таблицы; обычно это первая строка.

4. Строки взаимно ортогональны с весами c_p и нормированы к g , т. е.

$$\sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)*} = g \delta_{\alpha\beta} \text{ — это формула (4.25).}$$

В частности, если β — тождественное представление, то для всех представлений α , не совпадающих с тождест-

венным,

$$\sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} = 0.$$

5. Столбцы таблицы взаимно ортогональны и нормированы к g/c_p :

$$\sum_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)} \chi_q^{(\alpha)*} = \frac{g}{c_p} \delta_{pq} \text{— это формула (4.36).}$$

В частности, если в качестве класса $\mathcal{C}_g$ выбран единичный элемент E , для всех остальных столбцов имеем

$$\sum_{\alpha} s_{\alpha} \chi_p^{(\alpha)} = 0.$$

Таким путем можно построить таблицу характеров для некоторых простейших групп. Все, что при этом следует знать о группе, — это ее порядок g , число классов и число элементов в каждом классе. Для более сложных групп такой информации оказывается уже недостаточно. В этом случае для вывода дополнительных соотношений между характерами требуется обратиться к групповой таблице умножения (т. 2, приложение 3.3) или же, если группа содержит нормальную подгруппу, ее представления могут быть выведены из представлений нормальной подгруппы (т. 2, гл. 20, § 3). Подчеркнем, однако, что в большинстве физических приложений теории группы необходимо лишь просто взглянуть на таблицу характеров группы.

§ 16. ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ БАЗИСНЫХ ФУНКЦИЙ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В этом и последующих параграфах мы будем в основном рассматривать свойства базисных векторов пространства, в котором задано неприводимое представление. Эти базисные векторы можно рассматривать абстрактно (как, например, в § 2), обозначая их через $e_i^{(\alpha)}$, где $i=1, 2, \dots, s_{\alpha}$, или, в более конкретном случае, они могут быть функциями $\psi_i^{(\alpha)}(\mathbf{r})$ в некотором векторном пространстве функций (§ 3, п. В). Поскольку в квантовохимических приложениях мы в основном будем иметь дело с функциями, для обозначения базисных векторов представления $\Gamma^{(\alpha)}$ в этом и последующих параграфах преимущественно

используется обозначение $\psi_i^{(\alpha)}$, а не $e_i^{(\alpha)}$. Аргумент g функций мы опускаем для краткости.

В § 4 было показано, как можно построить инвариантное функциональное пространство. В качестве базиса такого пространства удобно выбрать набор ортонормированных функций. Предположим теперь, что мы имеем инвариантное функциональное пространство, которое является еще и неприводимым, так что представление, индуцированное в нем некоторыми групповыми операциями, является неприводимым представлением. В этом случае мы вправе воспользоваться свойствами ортогональности неприводимых представлений (4.23), чтобы установить ортогональность базисных функций, принадлежащих двум неэквивалентным неприводимым представлениям.

Пусть функция $\varphi_i^{(\alpha)}$ преобразуется по i -й строке неприводимого представления $\Gamma^{(\alpha)}$, другими словами,

$$\Gamma(G_a) \varphi_i^{(\alpha)} = \sum_l T_{li}^{(\alpha)}(G_a) \varphi_l^{(\alpha)}, \quad (4.37)$$

и пусть функция $\psi_j^{(\beta)}$ преобразуется по j -й строке неприводимого представления $\Gamma^{(\beta)}$. Далее предположим, что при некотором определении скалярного произведения, применимом ко всем рассматриваемым функциям, операторы $\Gamma(G_a)$ унитарны, т. е. для всякого элемента G_a группы

$$\begin{aligned} (\varphi_i^{(\alpha)}, \psi_j^{(\beta)}) &= (\Gamma(G_a) \varphi_i^{(\alpha)}, \Gamma(G_a) \psi_j^{(\beta)}) = \\ &= \sum_l \sum_m T_{li}^{(\alpha)*}(G_a) T_{mj}^{(\beta)}(G_a) (\varphi_l^{(\alpha)}, \psi_m^{(\beta)}). \end{aligned}$$

Если еще предположить, что базисные векторы каждого представления выбраны ортонормированными, то мы можем воспользоваться соотношением ортогональности (4.23). Так, усредняя по всем групповым элементам, имеем

$$\begin{aligned} (\varphi_i^{(\alpha)}, \psi_j^{(\beta)}) &= \frac{1}{g} \sum_{\alpha} \sum_l \sum_m T_{li}^{(\alpha)*}(G_a) T_{mj}^{(\beta)}(G_a) (\varphi_l^{(\alpha)}, \psi_m^{(\beta)}) = \\ &= \frac{1}{s_{\alpha}} \delta_{\alpha}^{\beta} \delta_{ij} \sum_l (\varphi_l^{(\alpha)}, \psi_l^{(\alpha)}). \end{aligned} \quad (4.38)$$

Это значит, что две любые функции, преобразующиеся по унитарным неприводимым представлениям, взаимно ортогональны, если только они не принадлежат одной

и той же строке (т. е. они не преобразуются в соответствии с одной и той же строкой) одного и того же (или эквивалентного) неприводимого представления. Значение этого важного результата заключается не столько во взаимной ортогональности базисных функций одного и того же неприводимого представления (множитель δ_{ij} при $\varphi \equiv \psi$), так как это в принципе вопрос выбора функций, сколько в ортогональности базисных функций, относящихся к разным строкам эквивалентных представлений или к неэквивалентным представлениям (множитель $\delta_{\alpha\beta}$). Последний результат совершенно не зависит от выбора базиса в каждом из представлений. Кроме того, из равенства (4.38) следует, что скалярное произведение $(\varphi_i^{(\alpha)}, \psi_i^{(\alpha)})$ не зависит от i — в частности, функции $\varphi_i^{(\alpha)}$ для данного α , удовлетворяющие условию (4.37), имеют одинаковую норму.

Одним из особых следствий из соотношения (4.38) является то обстоятельство, что если $\Gamma^{(\alpha)}$ — тождественное представление, то данное скалярное произведение обращается в нуль для всех представлений $\Gamma^{(\beta)}$, кроме тождественного. Так, если под скалярным произведением, как обычно, понимать интегрирование по координатам и положить $\varphi_i^{(\alpha)} = 1$ (постоянная функция), мы получим

$$\int \varphi_i^{(\beta)} dV = 0, \quad (4.39)$$

если только $\Gamma^{(\beta)}$ не является тождественным представлением. Это означает, что интегральная инвариантная характеристика функции, преобразующаяся по неприводимому представлению, обращается в нуль, если только сама функция не инвариантна. Поскольку любую функцию можно разложить на неприводимые компоненты, это означает, что после интегрирования из всех компонент останутся только инвариантные.

§ 17. ПРЯМОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ ДВУХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Прямым произведением матрицы A размерности $n \times n$ на матрицу B размерности $m \times m$ называется матрица размерности $mn \times mn$, обозначаемая через $A \otimes B$, с матричными элементами

$$(A \otimes B)_{ij, kl} = A_{ik} B_{jl}. \quad (4.40)$$

Каждая строка (и каждый столбец) матрицы прямого произведения обозначается двойным индексом ij , причем первый индекс i относится к строке матрицы A , а второй индекс j — к строке матрицы B . Подчеркнем, что $A \otimes B$ — это не то же самое, что обычное произведение матриц.

Таким способом мы можем построить из двух представлений $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$ их прямое произведение $T^{(\alpha)} \otimes T^{(\beta)}$, обозначаемое через $T^{(\alpha \times \beta)}$ 1):

$$T_{ij, kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) = T_{ik}^{(\alpha)}(G_a) T_{jl}^{(\beta)}(G_a). \quad (4.41)$$

Легко показать, что прямое произведение действительно является представлением, ибо

$$\begin{aligned} T^{(\alpha \times \beta)}(G_a) T^{(\alpha \times \beta)}(G_b) &= \sum_{mn} T_{ij, mn}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) T_{mn, kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_b) = \\ &= \sum_{mn} T_{im}^{(\alpha)}(G_a) T_{jn}^{(\beta)}(G_a) T_{mk}^{(\alpha)}(G_b) T_{nl}^{(\beta)}(G_b) = \\ &= T_{ik}^{(\alpha)}(G_a G_b) T_{jl}^{(\beta)}(G_a G_b) = T_{ij, kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_a G_b). \end{aligned} \quad (4.42)$$

Характер прямого произведения представлений равен

$$\begin{aligned} \chi^{(\alpha \times \beta)}(G_a) &= \sum_{ij} T_{ij, ij}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) = \sum_{ij} T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) T_{jj}^{(\beta)}(G_a) = \\ &= \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)}(G_a). \end{aligned} \quad (4.43)$$

Другими словами, для данного группового элемента характер прямого произведения представлений $T^{(\alpha \times \beta)}$ равен просто произведению характеров составляющих его представлений $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$. Если представления $T^{(\alpha)}$ и $T^{(\beta)}$ неприводимы, то представление $T^{(\alpha \times \beta)}$, размерность которого равна $s_\alpha s_\beta$, вообще говоря, не является неприводимым. Но, зная характер $\chi^{(\alpha \times \beta)}$, мы можем разложить его на неприводимые представления (§ 11). Так, если

$$T^{(\alpha \times \beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} T^{(\gamma)}, \quad (4.44)$$

то по формулам (4.43) и (4.28)

$$m_{\gamma} = \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(\gamma)*} \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)}. \quad (4.45)$$

1) Его называют также тензорным произведением представлений. — Прим. перев.

В качестве упражнения рассмотрим произведение $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)}$ представлений группы D_3 , характеры которых выписаны в табл. 4.2. По формуле (4.43) характер четырехмерного представления прямого произведения $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)}$ равен

$$\chi^{(3 \times 3)} = (4, 1, 0),$$

а три его компоненты соответствуют трем классам в табл. 4.2. Записывая теперь

$$\chi^{(3 \times 3)} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \chi^{(\alpha)}$$

и используя формулу (4.28), получаем

$$m_1 = \frac{1}{6} (4 + 2 + 0) = 1,$$

$$m_2 = \frac{1}{6} (4 + 2 + 0) = 1,$$

$$m_3 = \frac{1}{6} (8 - 2 + 0) = 1,$$

так что

$$\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)} = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)} \oplus \Gamma^{(3)}.$$

На практике прямое произведение представлений органически связано с рассмотрением произведения функций. Если набор из s_{α} функций $\varphi_k^{(\alpha)}$ преобразуется по представлению $\Gamma^{(\alpha)}$, а набор функций $\psi_l^{(\beta)}$ — по представлению $\Gamma^{(\beta)}$, то набор из $s_{\alpha}s_{\beta}$ произведений функций $\{\varphi_k^{(\alpha)}\psi_l^{(\beta)}\}$ будет преобразовываться по прямому произведению представлений $\Gamma^{(\alpha \times \beta)}$. Чтобы показать это, рассмотрим

$$\begin{aligned} \Gamma(G_a) \{\varphi_k^{(\alpha)}\psi_l^{(\beta)}\} &= \sum_i \sum_j T_{ik}^{(\alpha)}(G_a) T_{jl}^{(\beta)}(G_a) \{\varphi_i^{(\alpha)}, \psi_j^{(\beta)}\} = \\ &= \sum_{ij} T_{ij, kl}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) \{\varphi_i^{(\alpha)}\psi_j^{(\beta)}\} \end{aligned}$$

с учетом формулы (4.41).

Предположим, что прямое произведение представлений приводимо:

$$\Gamma^{(\alpha \times \beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} \Gamma^{(\gamma)}.$$

Тогда можно, изменив базис, выбрать линейные комбинации

$$\Psi_k^{(\gamma)t} = \sum_{ij} C(\alpha\beta\gamma t, ijk) \{\varphi_i^{(\alpha)}\psi_j^{(\beta)}\}, \quad (4.46)$$

которые преобразуются по неприводимому представлению $\Gamma^{(\gamma)}$. Индекс k относится здесь к строкам представлений, а индекс t нужен, чтобы различать функции с одинаковыми γ и k . Такие функции будут появляться, если целое число m_γ больше 1, т. е. если неприводимое представление $\Gamma^{(\gamma)}$ появляется в разложении (4.44) несколько раз. Коэффициенты $C(\alpha\beta\gamma t, ijk)$ обычно называются коэффициентами Клебша — Гордана для данной группы. Группы, для которых при любых α и β коэффициенты m_γ равны 0 или 1, называются «легко приводимыми». Для таких групп (например, $\mathcal{R}_3$) употребление индекса t необязательно.

Ранее мы предполагали, что функции φ и ψ не идентичны; другими словами, мы полагали, что либо $\alpha \neq \beta$, либо если $\alpha = \beta$, то $\varphi_i^{(\alpha)} \neq \psi_i^{(\alpha)}$. Случай совпадения функций φ и ψ требуется рассмотреть отдельно, поскольку набор s_α^2 произведений $\varphi_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)}$ не является линейно-независимым. Действительно, например, $\varphi_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)} - \varphi_j^{(\alpha)} \varphi_i^{(\alpha)} = 0$. Отсюда следует, что и функции $\Psi_k^{(\gamma)t}$ нового базиса не будут линейно-независимыми: при некоторых значениях $(\gamma)t$ все s_γ^t соответствующих базисных функций одновременно обратятся в нуль. Другими словами, в нуль обратятся одновременно все базисные функции некоторых представлений в сумме (4.44). При этом исчезнут представления, антисимметричные относительно обеих функций; они должны исчезнуть, раз эти функции одинаковы. (Вопрос о симметризации прямого произведения представлений в общем виде рассматривается в т. 2, приложение 3.) В приведенном выше примере произведения $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)}$ выбор двух одинаковых базисных наборов приведет к тому, что базисные функции представления $\Gamma^{(2)}$ обратятся в нуль.

Коэффициенты Клебша — Гордана обычно нормируют так, чтобы выполнялось соотношение

$$\sum_{ij} |C(\alpha\beta\gamma t, ijk)|^2 = 1.$$

Этим обеспечивается нормировка функций $\Psi_k^{(\gamma)t}$ при условии, что функции-произведения сами образуют ортонормированный набор. Последнее условие соблюдается всегда, если компоненты произведения φ и ψ зависят от разных координат, например относятся к частице 1 и части-

це 2, поскольку тогда исходное скалярное произведение дается выражением

$$(\varphi_i^{(\alpha')} (1) \psi_j^{(\beta')} (2), \varphi_i^{(\alpha)} (1), \psi_j^{(\beta)} (2)) = (\varphi_i^{(\alpha')} (1), \varphi_i^{(\alpha)} (1)) \times \\ \times (\psi_j^{(\beta')} (2), \psi_j^{(\beta)} (2)) = \delta_{\alpha', \alpha} \delta_{\beta', \beta} \delta_{i, i} \delta_{j, j} \quad (4.47)$$

как результат перемножения двух обычных скалярных произведений, вычисляемых отдельно для каждой частицы. В этом случае линейной зависимости быть не может. В силу общих свойств ортогональности неприводимых представлений функции $\Psi_k^{(\gamma)t}$ ортогональны в отношении γ и k (§ 16), а для общей ортогональности вводится дополнительный индекс t . Поэтому набор $\Psi_k^{(\gamma)t}$ является ортонормированным, преобразование (4.46) — унитарным, а обратное преобразование может быть записано в виде

$$\{\varphi_i^{(\alpha)} \psi_j^{(\beta)}\} = \sum_{rth} C^* (\alpha \beta \gamma t, ijk) \Psi_k^{(\gamma)t}, \quad (4.48)$$

где коэффициенты удовлетворяют соотношениям ортогональности (унитарности)

$$\sum_{ij} C^* (\alpha \beta \gamma t, ijk) C (\alpha \beta \gamma' t', ijk') = \delta_{\gamma \gamma'} \delta_{tt'} \delta_{kk'}, \\ \sum_{\gamma th} C^* (\alpha \beta \gamma t, ijk) C (\alpha \beta \gamma t, i' j' k) = \delta_{ii'} \delta_{jj'}.$$

Если входящие в произведение функции не обеспечивают ортонормированности (4.47), те же самые коэффициенты Клебша — Гордана могут использоваться в формуле (4.46). Но хотя при этом функции $\Psi_k^{(\gamma)t}$ останутся ортогональными по отношению к γ и k , они не будут больше нормированными и в общем случае не будут ортогональны по отношению к прежним образом определенному t . Модуль некоторых функций $\Psi_k^{(\gamma)t}$ обратиться в нуль, если, как было сказано выше, функции произведения не являются линейно-независимыми. Но даже в этом случае справедливо обратное соотношение (4.48).

§ 18. РАЗЛОЖЕНИЕ НЕПРИВОДИМОГО ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРИ СВЕДЕНИИ К ПОДГРУППЕ

Пусть $\mathcal{H}$ — подгруппа группы $\mathcal{G}$, и пусть $\Gamma^{(\alpha)}(\mathcal{G}_a)$ — неприводимое представление группы $\mathcal{G}$. Отсюда непосредственно вытекает, что набор операторов $\Gamma^{(\alpha)}(\mathcal{G}_a)$

для элементов G_a подгруппы $\mathcal{H}$ образует представление подгруппы $\mathcal{H}$. Но хотя $\Gamma^{(\alpha)}$ по предположению есть неприводимое представление группы $\mathcal{G}$, в качестве представления подгруппы $\mathcal{H}$ оно не обязательно останется неприводимым. Поэтому в общем случае оно будет приводимым, и мы можем написать

$$\Gamma^{(\alpha)} = \sum_{\tilde{\alpha}} n_{\alpha\tilde{\alpha}} \Gamma^{(\tilde{\alpha})}, \quad (4.49)$$

где суммирование выполняется по всем неприводимым представлениям $\Gamma^{(\tilde{\alpha})}$ подгруппы $\mathcal{H}$. Зная из таблиц характеры представлений $\Gamma^{(\alpha)}$ и $\Gamma^{(\tilde{\alpha})}$, для нахождения коэффициентов разложения снова воспользуемся формулой (4.28). Заметим, что равенство (4.49) относится исключительно к представлениям подгруппы $\mathcal{H}$, и $\chi^{(\alpha)}$ можно определить, рассматривая в таблице характеров неприводимых представлений группы $\mathcal{G}$ только те элементы, которые относятся к подгруппе $\mathcal{H}$.

В качестве примера рассмотрим сведение группы D_3 к подгруппе C_3 (мы встречались с этими группами в гл. 2, § 2, п. Д и Е). Построим вначале таблицу характеров группы C_3 . Все неприводимые представления, обозначенные через $\tau^{(\tilde{\alpha})}$, одномерны, так как группа C_3 абелева. Далее, поскольку для всех элементов $R^3 = E$, характеры должны быть равны кубическим корням из единицы, т. е. $\exp(2k\pi i/3)$, где $k=0, 1$ и 2 ; в результате имеем табл. 4.3. Характеры неприводимых представлений $\Gamma^{(\alpha)}$ группы D_3 можно перенести из табл. 4.2, используя только те элементы E, R_1 и R_2 группы D_3 , которые принадлежат подгруппе C_3 (табл. 4.4). Сразу же получим,

Таблица 4.3

C_3	E	R_1	R_2
$\tau^{(1)}$	1	1	1
$\tau^{(2)}$	1	$\exp(2\pi i/3)$	$\exp(4\pi i/3)$
$\tau^{(3)}$	1	$\exp(4\pi i/3)$	$\exp(2\pi i/3)$

Таблица 4.4

D_s	E	R_1	R_2
$T^{(1)}$	1	1	1
$T^{(2)}$	1	1	1
$T^{(3)}$	2	-1	-1

что для C_3 представление

$$T^{(1)} \equiv T^{(2)} \equiv \tau^{(1)},$$

тогда как двумерное представление сводится к

$$T^{(3)} = \tau^{(2)} \oplus \tau^{(3)}.$$

§ 19. ПРОЕКЦИОННЫЕ ОПЕРАТОРЫ

В обычном трехмерном пространстве мы хорошо знакомы с геометрическим понятием проекции вектора на плоскость xu : проекция трехмерного вектора $r(x, y, z)$ есть просто вектор $(x, y, 0)$, лежащий в плоскости xu . Это понятие проекции на некоторое подпространство можно распространить и на случай пространств более высокой размерности, а также на функциональные пространства.

Рассмотрим векторное пространство L , инвариантное по отношению к преобразованиям $T(G_a)$, индуцированным элементами G_a группы $\mathcal{G}$. В общем случае пространство L не является неприводимым, и, следовательно, его можно разложить на неприводимые подпространства по методу, изложенному в § 5 и 11. Пусть $e_i^{(\alpha)t}$ — набор базисных векторов в L , причем при фиксированных α и t индекс i пробегает s_α строк неприводимого представления $T^{(\alpha)}$, а индекс t служит для случая, когда в L имеется более одного подпространства, преобразующихся по одному и тому же представлению $T^{(\alpha)}$ (или по эквивалентным представлениям). Тогда по определению

$$T(G_a) e_i^{(\alpha)t} = \sum_j T_{ji}(G_a) e_j^{(\alpha)t}.$$

Зададим подпространство $L_{\alpha i}$ в L набором базисных векторов $e_i^{(\alpha)t}$ с фиксированными α и i . Определим также $L_\alpha = \sum_{i=1}^{s_\alpha} L_{\alpha i}$.

В принятых обозначениях мы можем теперь показать, что оператор

$$P_i^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a T_{ii}^{(\alpha)*}(G_a) T(G_a) \quad (4.50)$$

есть оператор, проектирующий из L в $L_{\alpha i}$. Для этого напомним

$$P_i^{(\alpha)} e_j^{(\beta)t} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_{a, h} T_{ii}^{(\alpha)*}(G_a) T_{hj}^{(\beta)}(G_a) e_k^{(\beta)t} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} e_j^{(\beta)t}$$

с учетом формулы (4.23). Следовательно, $P_i^{(\alpha)}$ есть иско-
мый проекционный оператор, поскольку в результате
его действия на произвольный вектор $r = \sum_{\beta, t, i} c(\beta, t, i) e_j^{(\beta)t}$

в пространстве L получим

$$P_i^{(\alpha)} r = \sum_i c(\alpha, t, i) e_i^{(\alpha)t}.$$

Это означает, что оператор $P_j^{(\beta)}$ обращает в нуль все
компоненты вектора, лежащие вне пространства $L_{\alpha i}$,
и оставляет неизменными компоненты, принадлежащие
пространству $L_{\alpha i}$.

На практике могут возникать трудности при постро-
ении оператора $P_i^{(\alpha)}$, задаваемого формулой (4.50),
поскольку в нее входят диагональные матричные элементы
оператора $T^{(\alpha)}$ для всех групповых элементов G_a . Го-
раздо проще построить оператор, проектирующий из L
в большее подпространство L_α , ибо вследствие равенства
 $L_\alpha = \sum_i L_{\alpha i}$ этот оператор имеет вид

$$\begin{aligned} P^{(\alpha)} &= \sum_i P_i^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{g} \sum_a \sum_i T_{ii}^{(\alpha)*}(G_a) T(G_a) = \\ &= \frac{s_\alpha}{g} \sum_a \chi^{(\alpha)*}(G_a) T(G_a) \quad (4.51) \end{aligned}$$

и, следовательно, требуется лишь знание характеров
группы $\chi^{(\alpha)}$. (Пользуясь формулой (4.36), легко показать,

что $\sum_{\alpha} P^{(\alpha)} = 1$, как и должно быть вследствие равенства $\sum_{\alpha} L_{\alpha} = L$.)

Иногда применяется обобщенный проекционный оператор (или оператор переноса)

$$P_{ij}^{(\alpha)} = \frac{s_{\alpha}}{g} \sum_a T_{ij}^{(\alpha)*}(G_a) T(G_a). \quad (4.52)$$

Строго говоря, он не является проекционным оператором, но тем не менее обладает свойством

$$P_{ij}^{(\alpha)} e_k^{(\beta)t} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jk} e_i^{(\beta)t}, \quad (4.53)$$

т. е. вначале проектирует в подпространство $L_{\alpha j}$, а затем преобразует в $L_{\alpha i}$. На этом основании можно показать, что для всякого $\mathbf{r}$ при фиксированных α и j набор векторов $\mathbf{r}^{(\alpha)j} \equiv P_{ij}^{(\alpha)} \mathbf{r}$, где $i=1, 2, \dots, s_{\alpha}$, является базисом неприводимого представления T_{α} :

$$\begin{aligned} T(G_b) \mathbf{r}_i^{(\alpha)j} &= \frac{s_{\alpha}}{g} \sum_a T_{ij}^{(\alpha)*}(G_a) T(G_b) T(G_a) \mathbf{r} = \\ &= \frac{s_{\alpha}}{g} \sum_c T_{ij}^{(\alpha)*}(G_b^{-1} G_c) T(G_c) \mathbf{r} = \\ &\quad \text{(здесь } G_c = G_b G_a) \\ &= \frac{s_{\alpha}}{g} \sum_h T_{ik}^{(\alpha)*}(G_b^{-1}) \sum_c T_{kj}^{(\alpha)*}(G_c) T(G_c) \mathbf{r} = \\ &= \sum_h T_{ki}^{(\alpha)}(G_b) \mathbf{r}_k^{(\alpha)j}. \end{aligned}$$

Нетрудно убедиться, что построенные нами операторы подчиняются обычному правилу умножения проекционных операторов:

$$P_j^{(\alpha)} P_k^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jk} P_j^{(\alpha)}, \quad (4.54)$$

тогда как для обобщенных операторов выполняется соотношение

$$P_{ij}^{(\alpha)} P_{kl}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{jk} P_{il}^{(\alpha)}. \quad (4.55)$$

Рассмотрение общих свойств проекционных операторов мы завершаем двумя предостережениями. Во-первых, неверно, что набор векторов $P_i^{(\alpha)} g$ для данного g и фиксированного α образует базис представления $T^{(\alpha)}$, — для этого требуется обобщенный оператор $P_{ij}^{(\alpha)}$. Во-вторых, из того, что вектор g нормирован, не следует, что нормирована и проекция $P_i^{(\alpha)} g$; назначение численного множителя s_α/g в формуле (4.50) другое — он обеспечивает неизменность тех составляющих вектора g , которые не уничтожаются при проектировании.

В качестве конкретного примера проектирования рассмотрим функцию $\psi_1(g) = x^2$, использованную в § 4, и разложим ее на компоненты, преобразующиеся по неприводимым представлениям группы D_3 . Пользуясь таблицей характеров для трех неприводимых представлений $T^{(1)}$, $T^{(2)}$ и $T^{(3)}$ (табл. 4.2) вместе с формулой (4.51) и имеющимися в § 4 выражениями для $T(R_\alpha)\psi_1$, получаем

$$\begin{aligned} P^{(1)}x^2 &= \frac{1}{6} [1 + T(R_1) + T(R_2) + T(R_3) + T(R_4) + T(R_5)] x^2 = \\ &= \frac{1}{6} \left(x^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{2}y^2 + x^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{2}y^2 \right) = \frac{1}{2} (x^2 + y^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P^{(2)}x^2 &= \frac{1}{6} [1 + T(R_1) + T(R_2) - T(R_3) - T(R_4) - T(R_5)] x^2 = \\ &= \frac{1}{6} \left(x^2 + \frac{1}{2}x^2 + \frac{3}{2}y^2 - x^2 - \frac{1}{2}x^2 - \frac{3}{2}y^2 \right) = 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P^{(3)}x^2 &= \frac{2}{6} [2x^2 - T(R_1)x^2 - T(R_2)x^2] = \\ &= \frac{1}{3} \left(2x^2 - \frac{1}{2}x^2 - \frac{3}{2}y^2 \right) = \frac{1}{2} (x^2 - y^2). \end{aligned}$$

Таким образом, мы можем написать $x^2 = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + \frac{1}{2}(x^2 - y^2)$, где первое слагаемое преобразуется по тождественному представлению $T^{(1)}$, а второе — по представлению $T^{(3)}$.

Далее мы можем использовать проекционный оператор (4.50), чтобы проектировать не просто на какую-то строку двумерного представления $T^{(3)}$, а на нужную нам строку. Для этого потребуются уже не характеры, а матричные

элементы представления (табл. 4.1). Получаем

$$\begin{aligned} P_1^{(3)} x^2 &= \frac{2}{6} \left[x^2 - \frac{1}{2} T(R_1) x^2 - \frac{1}{2} T(R_2) x^2 - T(R_3) x^2 + \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} T(R_4) x^2 + \frac{1}{2} T(R_5) x^2 \right] = \\ &= \frac{1}{3} \left(x^2 - \frac{1}{4} x^2 - \frac{3}{4} y^2 - x^2 + \frac{1}{4} x^2 + \frac{3}{4} y^2 \right) = 0, \\ P_2^{(3)} x^2 &= \frac{2}{6} \left[x^2 - \frac{1}{2} T(R_1) x^2 - \frac{1}{2} T(R_2) x^2 + T(R_3) x^2 - \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} T(R_4) x^2 - \frac{1}{2} T(R_5) x^2 \right] = \\ &= \frac{1}{3} \left(x^2 - \frac{1}{4} x^2 - \frac{3}{4} y^2 + x^2 - \frac{1}{4} x^2 - \frac{3}{4} y^2 \right) = \\ &= \frac{1}{2} (x^2 - y^2). \end{aligned}$$

Таким образом, функция x^2 не содержит составляющих, преобразующихся аналогично первой строке представления $T^{(3)}$.

И наконец, в этом примере мы можем построить пару функций, преобразующихся по представлению $T^{(3)}$. Для этого следует использовать оператор (4.52). Мы уже нашли, что

$$P_{22}^{(3)} x^2 \equiv P_2^{(3)} x^2 = \frac{1}{2} (x^2 - y^2),$$

и теперь вычислим

$$\begin{aligned} P_{12}^{(3)} x^2 &= \frac{2}{6} \sum_a T_{12}^{(3)}(R_a) T(R_a) x^2 = \\ &= \frac{1}{3} \left[- \left(\frac{3}{4} \right)^{1/2} T(R_1) x^2 + \left(\frac{3}{4} \right)^{1/2} T(R_2) x^2 - \left(\frac{3}{4} \right)^{1/2} T(R_4) x^2 + \right. \\ &\quad \left. + \left(\frac{3}{4} \right)^{1/2} T(R_5) x^2 \right] = \frac{1}{3} \left(\frac{3}{2} xy + \frac{3}{2} xy \right) = xy. \end{aligned}$$

Итак, две функции $f_1 = xy$ и $f_2 = \frac{1}{2}(x^2 - y^2)$ преобразуются по матричному представлению $T^{(3)}$, полученному в § 8. Чтобы убедиться в этом, вычислим $T(R_1)f_1$. В соответствии с табл. 4.1 результат должен быть равен $T(R_1)f_1 = -\frac{1}{2}f_1 + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}f_2$. На основании изложенного в гл. 3,

§ 8, п. Е. получаем

$$\begin{aligned} T(R_1) f_1 = & \left[-\frac{1}{2}x + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}y \right] \left[-\left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}x - \frac{1}{2}y \right] = -\frac{1}{2}xy + \\ & + \frac{1}{2} \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2} (x^2 - y^2) = -\frac{1}{2}f_1 + \left(\frac{3}{4}\right)^{1/2}f_2, \end{aligned}$$

чем и доказывается сказанное выше.

С физической точки зрения одной из важных областей применения проекционных операторов является нахождение так называемых симметрических координат системы. Так, пример из гл. 1, § 2, п. В значительно упрощается после введения симметризованных координат $Q_1 = x_1 + x_2$ и $Q_2 = x_1 - x_2$. Соответствующей группой является группа $\mathcal{S}_2$ (гл. 2, § 2, пример 10) с элементами Е и P_{12} (перестановка). Ее характеры приведены в табл. 4.5. Ясно, что Q_1

Таблица 4.5

	Е	P_{12}
$T^{(1)}$	1	1
$T^{(2)}$	1	-1

преобразуется по $T^{(1)}$, а Q_2 — по $T^{(2)}$. Конечно, в такой простой задаче применять теорию групп необязательно, но в более близком к реальности примере колебаний молекулы аммиака NH_3 (гл. 6, § 5), где имеется двенадцать координат, учет симметрии ведет к весьма желательному упрощению.

§ 20. НЕПРИВОДИМЫЕ НАБОРЫ ОПЕРАТОРОВ И ТЕОРЕМА ВИГНЕРА — ЭККАРТА

Важнейшее значение в данной главе имело понятие векторного пространства, одновременно инвариантного и неприводимого по отношению к преобразованиям, индуцированным группой $\mathcal{G}$. В частности, мы увидели, что такие пространства имеют строго определенные трансформационные свойства и размерности и что они должны соответствовать какому-либо из неприводимых представ-

лений группы $\mathcal{G}$. Отсюда мы логически пришли к мысли о классификации функций по их трансформационным свойствам и о разложении произвольной функции на составляющие, каждая из которых преобразуется по определенной строке i определенного неприводимого представления $\Gamma^{(\alpha)}$. Теперь мы перенесем такой подход и на классификацию операторов. Такая классификация, совершенно аналогичная классификации функций, имеет прямой физический смысл в квантовой механике, где операторы используются для описания физических наблюдаемых величин. Изучение их трансформационных свойств непосредственно приводит к пониманию правил отбора в процессах перехода (гл. 5, § 4; гл. 1, § 2, п. Д).

Рассмотрим преобразование $\Gamma(G_a)$ в некотором пространстве L , где G_a — элемент группы $\mathcal{G}$. Пусть S — произвольный оператор в пространстве L ; тогда трансформированный оператор S' по определению равен $S' = \Gamma(G_a)S\Gamma(G_a)^{-1}$ (гл. 3, § 4). Точно так же, как преобразованная функция $\varphi' = \Gamma(G_a)\varphi$ в общем случае не совпадает с функцией φ , трансформированный оператор S' , вообще говоря, весьма сильно отличается от S . Мы видели, однако, что функции неприводимого инвариантного пространства преобразуются, не выходя за его рамки [«друг в друга» в смысле формулы (4.37)]. Теперь мы определим аналогичным образом «неприводимый набор операторов» $S_i^{(\alpha)}$ с помощью соотношения

$$S_i^{(\alpha)'} \equiv \Gamma(G_a) S_i^{(\alpha)} \Gamma(G_a)^{-1} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(G_a) S_j^{(\alpha)}. \quad (4.56)$$

Набор операторов $S_i^{(\alpha)}$, которые удовлетворяют соотношению (4.56), называют преобразующимся по неприводимому представлению $\Gamma^{(\alpha)}$. Ясно, что число операторов в таком наборе равно размерности s_α представления $\Gamma^{(\alpha)}$. В частности, скалярный оператор, для которого $S' = S$, будет преобразовываться по тождественному представлению. По причинам, совершенно аналогичным рассмотренным в § 17, произведение двух операторов $S_i^{(\alpha)} S_j^{(\beta)}$ преобразуется по ij -й строке прямого произведения представлений $\Gamma^{(\alpha \times \beta)}$.

Чтобы подойти к изучению матричных элементов операторов, рассмотрим результат действия оператора $S_i^{(\alpha)}$ на функцию $\varphi_j^{(\beta)}$, где, как явствует из обозначений, и опе-

ратор, и функция преобразуются по неприводимым представлениям одной и той же группы. Снова по аналогии с § 17 набор $s_\alpha s_\beta$ функций ψ_{ij} , определяемых как

$$\psi_{ij} = S_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\beta)}, \quad (4.57)$$

преобразуется по прямому произведению представлений $T^{(\alpha \times \beta)}$, так как

$$\begin{aligned} T(G_a) \psi_{ij} &= T(G_a) S_i^{(\alpha)} T(G_a)^{-1} T(G_a) \varphi_j^{(\beta)} = \\ &= \sum_{k, m} T_{ki}^{(\alpha)}(G_a) T_{mj}^{(\beta)}(G_a) S_k^{(\alpha)} \varphi_m^{(\beta)} = \\ &= \sum_{k, m} T_{km, ij}^{(\alpha \times \beta)}(G_a) \psi_{km}. \end{aligned} \quad (4.58)$$

По этой причине мы можем с учетом формулы (4.48) разложить каждую функцию ψ_{ij} на неприводимые компоненты:

$$\psi_{ij} = \sum_{\gamma', t, k'} C^*(\alpha \beta \gamma' t, ijk') \Psi_k^{(\gamma')t}. \quad (4.59)$$

Рассмотрим теперь матричные элементы (гл. 3, § 3) неприводимого оператора $S_i^{(\alpha)}$ между базисными функциями $\varphi_j^{(\beta)}$ и $\varphi_k^{(\gamma)}$. Используя формулу (4.38), имеем

$$\begin{aligned} (\varphi_k^{(\gamma)}, S_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\beta)}) &= (\varphi_k^{(\gamma)}, \psi_{ij}) = \\ &= \sum_{\gamma', t, k'} C^*(\alpha \beta \gamma' t, ijk') (\varphi_k^{(\gamma)}, \Psi_k^{(\gamma')t}) = \\ &= \sum_t C^*(\alpha \beta \gamma t, ijk) (\varphi_k^{(\gamma)}, \Psi_k^{(\gamma)t}). \end{aligned} \quad (4.60)$$

Во-первых, это означает, что если неприводимое представление $T^{(\gamma)}$ не содержится в разложении произведения $T^{(\alpha)} \otimes T^{(\beta)}$, то матричный элемент оператора $S_i^{(\alpha)}$ равен нулю. Комбинации α, β и γ , при которых матричные элементы равны нулю, находят по формуле (4.45) с использованием известных таблиц характеров. Во-вторых, отсюда следует, что все матричные элементы с фиксированными α, β, λ и варьируемыми i, j, k на деле определяются значительно меньшим числом констант. Заметим, например, что, согласно формуле (4.38), скалярное произведение $(\varphi_k^{(\gamma)}, \Psi_k^{(\gamma)t})$ не зависит от k ; кроме того, оно не зависит от i и j .

Поскольку коэффициенты Клебша — Гордана известны из теории групп, выражение (4.60) содержит для каж-

дого члена в сумме по индексу t только одну константу. В частности, для «легко приводимых» групп имеется лишь одна константа. Такие константы называют «приведенными матричными элементами» и обозначают символом

$$\langle \varphi^{(\gamma)} \| S^{(\alpha)} \| \varphi^{(\beta)} \rangle_t = (\varphi_k^{(\gamma)}, \Psi_k^{(\gamma)t}), \quad (4.61)$$

где индексы i, j, k в обозначении оператора и функций опущены, поскольку константа от них не зависит. В этих обозначениях равенство (4.60) превращается в соотношение

$$(\varphi_k^{(\gamma)}, S_i^{(\alpha)} \varphi_j^{(\beta)}) = \sum_t C^*(\alpha\beta\gamma t, ijk) \langle \varphi^{(\gamma)} \| S^{(\alpha)} \| \varphi^{(\beta)} \rangle_t, \quad (4.62)$$

называемое теоремой Вигнера — Эккарта и показывающее, что i, j и k полностью определяются коэффициентами Клебша — Гордана.

С физической точки зрения диагональные матричные элементы некоего оператора — это средние значения соответствующих наблюдаемых величин, а недиагональные матричные элементы равны вероятностям перехода из одного состояния в другое (гл. 5, § 1). Поэтому значение полученных в данном параграфе результатов чрезвычайно велико, ибо в сложных физических системах оператор S и функции φ могут сами по себе быть весьма громоздкими, но уже на основании одной только симметрии из соотношения (4.62) мы можем заключить, какие именно матричные элементы обратятся в нуль, и предсказать, как соотносятся между собой другие матричные элементы.

Если S — инвариантный оператор, то представление α является тождественным и коэффициенты C в формуле (4.46) тривиальны, а именно $\lambda = \beta, j = k$, индекс t не нужен и $C(\alpha\beta\gamma, ijk) = \delta_{\beta\gamma} \delta_{jk}$. При этом равенство (4.62) переходит в соотношение

$$(\varphi_k^{(\gamma)}, S \varphi_j^{(\beta)}) = \langle \varphi^{(\beta)} \| S \| \varphi^{(\beta)} \rangle \delta_{\beta\gamma} \delta_{jk}, \quad (4.63)$$

что означает просто такой вид инвариантного оператора, когда все матричные элементы, соответствующие переходу от одного неприводимого представления к другому, равны нулю, а блоки, соответствующие одному представлению, диагональны, причем диагональные матричные элементы равны между собой. Другими словами, внутри одного представления оператор с точностью до постоянного мно-

жителя равен единичному, а между двумя представлениями обращается в нуль. Фактически это утверждение есть просто лемма Шура, сформулированная для данного специального случая.

Для иллюстрации понятия неприводимого набора операторов рассмотрим операторы $\partial/\partial x$, $\partial/\partial y$ и $\partial/\partial z$ в векторном пространстве непрерывных функций $\varphi(\mathbf{r})$ (гл. 3, § 8, п. Г). В данном случае функцию $\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(x, y, z)$ проще рассматривать как функцию координат вектора $\mathbf{r}$. По формуле (3.38) вращения $\mathbf{R}$ преобразуют функцию φ в

$$\varphi'(x, y, z) = \mathbf{T}(\mathbf{R})\varphi(x, y, z) = \varphi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}), \quad (4.64)$$

где $\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}$ — координаты вектора $\mathbf{r} = \mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}$. Соответствующие трансформированные операторы, очевидно, равны $\partial/\partial \bar{x}$, $\partial/\partial \bar{y}$, $\partial/\partial \bar{z}$, ибо

$$\frac{\partial}{\partial \bar{x}} \mathbf{T}(\mathbf{R})\varphi(x, y, z) = \frac{\partial}{\partial \bar{x}} \varphi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}),$$

тогда как, определив $\tilde{\varphi}(x, y, z) = (\partial/\partial x)\varphi(x, y, z)$, получим

$$\mathbf{T}(\mathbf{R})\frac{\partial}{\partial x}\varphi(x, y, z) = \mathbf{T}(\mathbf{R})\tilde{\varphi}(x, y, z) = \tilde{\varphi}(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}) = \frac{\partial}{\partial \bar{x}}\varphi(\bar{x}, \bar{y}, \bar{z}),$$

так что $(\partial/\partial \bar{x})\mathbf{T}(\mathbf{R}) = \mathbf{T}(\mathbf{R})(\partial/\partial x)$ и, следовательно, $\partial/\partial \bar{x} = \mathbf{T}(\mathbf{R})(\partial/\partial x)\mathbf{T}^{-1}(\mathbf{R})$. Оператор $\partial/\partial \bar{x}$ можно выразить через исходные операторы по обычному цепному правилу для частных производных

$$\frac{\partial}{\partial \bar{q}} = \sum_{q'=x, y, z} \frac{\partial q'}{\partial \bar{q}} \frac{\partial}{\partial q'},$$

откуда следует, что три оператора образуют набор, инвариантный относительно вращений. Коэффициенты этого преобразования просто связаны с матрицей преобразования базисных векторов $\mathbf{e}_q$, поскольку из выражения

$$\mathbf{R}\mathbf{e}_q = \sum_{q'} R_{q'q} \mathbf{e}_{q'}$$

следует равенство

$$q' = \mathbf{e}_{q'} \cdot \mathbf{r} = \mathbf{e}_{q'} \cdot \mathbf{R}\bar{\mathbf{r}} = \sum_q \bar{q} \mathbf{e}_{q'} \cdot \mathbf{R}\mathbf{e}_q = \sum_q \bar{q} R_{q'q},$$

так что $\partial q'/\partial \bar{q} = R_{q'q}$ и, следовательно,

$$\mathbf{T}(\mathbf{R})\frac{\partial}{\partial \bar{q}}\mathbf{T}^{-1}(\mathbf{R}) = \sum_{q'} R_{q'q} \frac{\partial}{\partial q'},$$

откуда видно, что три данных оператора преобразуются совершенно аналогично базисным векторам e_x , e_y и e_z .

В группе всевозможных вращений $\mathcal{R}$, данный набор операторов, естественно, неприводим, но если мы будем рассматривать только группу D_3 , то, как было показано в § 11, для набора векторов e_q набор операторов уже не является неприводимым и разобьется на оператор $\partial/\partial z$, преобразующийся по $\Gamma^{(2)}$, и неприводимый набор из двух операторов $\partial/\partial x$ и $\partial/\partial y$, преобразующихся по $\Gamma^{(3)}$ (в обозначениях табл. 4.2).

В качестве еще одного примера неприводимого набора операторов рассмотрим умножение на функцию (гл. 3, § 8, п. В). В частности, функции x и y образуют неприводимый набор, преобразующийся по представлению $\Gamma^{(3)}$ группы D_3 , поскольку трансформированные операторы — это просто координаты x и y , даваемые формулой (3.39). То обстоятельство, что в эту формулу входят комплексно-сопряженные величины, в данном случае несущественно, поскольку матрица действительная.

§ 21. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРЯМОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ ГРУПП

Понятие прямого произведения групп $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$ было введено в гл. 2, § 5, а в § 8 той же главы было показано, что классы в такой группе нумеруются парой классов — одним из $\mathcal{G}$, другим из $\mathcal{H}$. Теперь, если заданы два неприводимых матричных представления $\Gamma^{(\alpha)}(G_a)$ группы $\mathcal{G}$ и $\Gamma^{(\beta)}(H_b)$ группы $\mathcal{H}$, легко показать, что матрицы прямого произведения, определяемые как

$$\Gamma^{(\alpha \times \beta)}(G_a H_b) = \Gamma^{(\alpha)}(G_a) \otimes \Gamma^{(\beta)}(H_b), \quad (4.65)$$

образуют неприводимое представление группы $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$.

Доказательство того, что $\Gamma^{(\alpha \times \beta)}$ является представлением, почти идентично выводу формулы (4.42). Неприводимость представления $\Gamma^{(\alpha \times \beta)}$ следует из его характера, который, как и в формуле (4.43), оказывается равным произведению характеров представлений $\Gamma^{(\alpha)}$ и $\Gamma^{(\beta)}$:

$$\chi^{(\alpha \times \beta)}(G_a H_b) = \chi^{(\alpha)}(G_a) \chi^{(\beta)}(H_b). \quad (4.66)$$

Отсюда, суммируя по групповым элементам и используя для $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$ формулу (4.29), получаем

$$\sum_{ab} |\chi^{(\alpha \times \beta)}(G_a H_b)|^2 = \sum_a |\chi^{(\alpha)}(G_a)|^2 \sum_b |\chi^{(\beta)}(H_b)|^2 = gh.$$

Но поскольку gh есть порядок произведения группы $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$, из этого равенства следует, что представление $\Gamma^{(\alpha \times \beta)}$ неприводимо.

Далее можно показать, что представлениями прямых произведений $\Gamma^{(\alpha \times \beta)}$ исчерпываются все неприводимые представления группы $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$, если α и β пробегает все неприводимые представления $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$. Это проще всего сделать, суммируя квадраты размерностей и пользуясь формулой (4.33):

$$\sum_{\alpha, \beta} (s_{\alpha} s_{\beta})^2 = \sum_{\alpha} s_{\alpha}^2 \sum_{\beta} s_{\beta}^2 = gh.$$

Таким образом, снова применяя к произведению групп $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$ формулу (4.33), мы убеждаемся, что $\Gamma^{(\alpha \times \beta)}$ исчерпывает все неэквивалентные неприводимые представления группы $\mathcal{G} \times \mathcal{H}$. Таблицу характеров групп прямого произведения получим, просто нумеруя строки и столбцы парами индексов, относящихся к отдельным группам $\mathcal{G}$ и $\mathcal{H}$ и перемножая соответствующие числа в таблицах характеров каждой отдельной группы.

Таблица 4.6

C_2	E	R	S_2	E	I
$\Gamma^{(1)}$	1	1	$\Gamma^{(1)}$	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	-1	$\Gamma^{(2)}$	1	-1

$C_2h = C_2 \times S_2$	E	R	I	$RI = \sigma$
$\Gamma^{(1 \times 1)}$	1	1	1	1
$\Gamma^{(1 \times 2)}$	1	-1	1	-1
$\Gamma^{(2 \times 1)}$	1	1	-1	-1
$\Gamma^{(2 \times 2)}$	1	-1	-1	1

В качестве примера возьмем группу $C_2 \times S_2$, уже рассматривавшуюся в гл. 2, § 5 и обычно обозначаемую символом C_{2h} . Эта группа является абелевой, так что каждый

элемент сам по себе образует класс. Характеры групп C_2 и S_2 приведены в табл. 4.6, а из них непосредственно выводится таблица характеров группы C_{2h} , где, например, $\Gamma^{(1 \times 2)}$ есть представление, построенное из представления $\Gamma^{(1)}$ группы C_2 и представления $\Gamma^{(2)}$ группы S_2 .

В качестве другого примера рассмотрим группу $D_{3h} = D_3 \times S_2$, с которой мы познакомились в гл. 2, § 2, пример 7. Исходя из характеров группы D_3 , которые были приведены в табл. 4.2, и таблицы характеров группы S_2 , изоморфной S_2 , вычисляются характеры группы D_{3h} ; они сведены в табл. 4.7.

Таблица 4.7

D_{3h}	$\mathcal{C}_1(E)$	$\mathcal{C}_2(R_1, R_2)$	$\mathcal{C}_3(R_3, R_4, R_5)$	$\mathcal{C}'_1(\sigma_h)$	$\mathcal{C}'_2(R_1\sigma_h, R_2\sigma_h)$	$\mathcal{C}'_3(\sigma_2, \sigma_4, \sigma_5)$
$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma^{(2)}$	1	1	-1	1	1	-1
$\Gamma^{(3)}$	2	-1	0	2	-1	0
$\Gamma^{(1)'} $	1	1	1	-1	-1	-1
$\Gamma^{(2)'} $	1	1	-1	-1	-1	1
$\Gamma^{(3)'} $	2	-1	0	-2	1	0

ЛИТЕРАТУРА

Более строгое математическое изложение теории представлений групп можно найти в книге

Boerner H., Representations of Groups, North-Holland, Amsterdam, 1963.

ЗАДАЧИ

- 4.1. Покажите, что матрицы $\Gamma(R_i)$ размерности 3×3 из § 3, п. А имеют ту же таблицу умножения, что и групповые элементы R_i (гл. 2, § 2, табл. 2.5.).
- 4.2. Постройте представление группы D_4 (см. задачу 2.3) при помощи матриц 3×3 с базисными векторами e_x , e_y и e_z ; ось симметрии четвертого порядка совпадает с осью z .
- 4.3. Продолжая рассуждения § 3, п. В, постройте матрицы 6×6 для представлений $\Gamma(R_4)$ и $\Gamma(R_5)$ и покажите, что произведение $\Gamma(R_1)\Gamma(R_4) = \Gamma(R_5)$.
- 4.4. Исходя из функции $\psi_4 = yz$ и группы D_3 , постройте инвариантное подпространство, базисом которого служат шесть квадратичных функций, рассмотренных в § 4. Покажите, что представ-

ление D_3 , порождаемое этим подпространством, эквивалентно рассмотренному в § 3, п. А представлению $\Gamma^{(3)}$.

- 4.5. Найдите характер трехмерного представления группы D_4 , полученного в задаче 4.2, и, используя таблицы характеров (приложение 1), покажите, что оно сводится к двумерному и одномерному представлениям. Проверьте этот результат, пользуясь непосредственно матрицами, найденными в задаче 4.2.
- 4.6. Покажите, что характеры неприводимых представлений циклической группы порядка n равны $\chi^{(m)}(C_n^p) = \exp(2\pi i mp/n)$, где $m=0, 1, 2, \dots, (n-1)$. Исходя из этого, постройте таблицу характеров группы вращений C_4 относительно оси четвертого порядка, совпадающей с осью z .
- 4.7. Покажите, что любое изменение базиса делает матрицу $\Gamma(R_3)$ представления $\Gamma^{(3)}$ в табл. 4.1 (§ 8) недиагональной и поэтому представление $\Gamma^{(3)}$ неприводимо (§ 12).
- 4.8. Проверьте, удовлетворяют ли приведенные представления задачи 4.5 соотношениям ортогональности (4.23) и критерию неприводимости (4.29).
- 4.9. Исходя из матриц, найденных в задаче 4.3, вычислите характер представления группы D_3 в шестимерном пространстве, рассмотренном в § 3, п. В, и докажете правильность разложения этого представления на $2\Gamma^{(1)} \oplus 2\Gamma^{(3)}$ (конец § 7).
- 4.10. Постройте таблицу характеров группы D_4 , используя методы § 15. Покажите, что неприводимое представление, найденное в задаче 4.5, содержится в этой таблице.
- 4.11. Покажите, что функция $f(x, y) = x^2 + y^2$ преобразуется по тождественному представлению группы D_4 , рассмотренной в задаче 2.3 (ось четвертого порядка — в направлении z). Найдите для каждого представления линейную или квадратичную функцию переменных x, y и z , преобразующуюся по нему.
- 4.12. Зная ответ задачи 4.10, определите характер прямого произведения двумерного представления группы D_4 на самого себя и разложите его на неприводимые представления.
- 4.13. Координаты x, y некой частицы преобразуются по двумерному неприводимому представлению Γ группы D_4 , так что 4 произведения $x_1x_2, x_1y_2, y_1x_2, y_1y_2$ для двух частиц преобразуются по прямому произведению представлений $\Gamma \otimes \Gamma$. Действием проекционного оператора найдите 4 комбинации этих произведений, которые преобразуются по неприводимым представлениям группы D_4 . Выпишите коэффициенты Клебша — Гордана.
- 4.14. Найдите представления группы C_4 , на которые будут разлагаться неприводимые представления группы D_4 при сведении последней к подгруппе C_4 . (Воспользуйтесь результатами задач 4.6 и 4.10.)
- 4.15. Взяв проекционный оператор (4.51), покажите, что функция x^3 преобразуется по представлению Γ группы D_4 . Характеры возьмите из приложения 1. Далее покажите, что она преобразуется по первой строке представления Γ в базисе задачи 4.5. [Для этого используйте проекционный оператор (4.50).] Наконец, с использованием проекционного оператора (4.52) и матриц, полученных в задаче 4.5, постройте функцию, преобразующуюся по второй строке.

СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Данную главу мы начнем с обзора основных понятий квантовой механики (§ 1). Мы исходим из того, что читатель уже знаком с основами квантовой механики (см. литературу), и главная цель нашего обзора — напомнить те ее моменты, которые в дальнейшем будут необходимы для иллюстрации проявлений симметрии. К изложению последних мы перейдем после того, как в § 2 дадим строгое определение симметрии. В качестве иллюстрации в § 6 будет рассмотрено движение частицы в постоянном поле, обладающем различной простой симметрией: C_3 , D_3 , S_2 и $\mathcal{R}_2$. В конце главы дается представление о применении симметрии в приближенных методах. Более сложные группы и более близкие к действительности физические системы будут рассмотрены в дальнейших главах книги, но все важнейшие следствия симметрии квантовомеханических систем рассматриваются в данной главе.

§ 1. КРАТКИЙ ОБЗОР ОСНОВНЫХ ПОНЯТИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

В квантовой механике поведение системы с n степенями свободы, описываемой некоторым набором координат $(r_1, r_2, \dots, r_n) = \mathbf{r}$, полностью определяется ее волновой функцией, или вектором состояния, $\psi(\mathbf{r}, t)$. Для всякой пары $\mathbf{r}$ и t эта волновая функция принимает некоторые, вообще говоря, комплексные значения. Действительная величина $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV$ интерпретируется как вероятность того, что в момент времени t координаты системы имеют значения, лежащие внутри элемента объема dV возле точки $\mathbf{r}$. Поэтому волновая функция должна быть нормирована так, чтобы полная вероятность нахождения системы в каком-либо положении равнялась единице, т. е.

выполнялось равенство

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 dV = 1, \quad (5.1)$$

в котором интеграл берется по всем значениям координат.

Волновые функции находят, решая уравнение Шредингера

$$\hat{H}(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.2)$$

в котором $\hat{H}(\mathbf{r}, t)$ — оператор Гамильтона, или гамильтониан, соответствующий классической функции Гамильтона $H = T + V$, где T — кинетическая и V — потенциальная энергии. Для получения квантовомеханического оператора из соответствующего классического аналога существуют определенные правила, например декартова координата x частицы заменяется оператором x , а сопряженный момент p_x заменяется оператором $-i\hbar (\partial/\partial x)$. Граничные условия, налагаемые на дифференциальное уравнение (5.2) (например, обращение в нуль функции ψ на границах системы), являются достаточными для того, чтобы в любой момент времени t функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ была однозначно определена уравнением (5.2), если в момент времени t_0 известна функция $\psi(\mathbf{r}, t_0)$.

Во многих важных задачах квантовой механики используется не зависящий от времени гамильтониан. В таких случаях из самого уравнения (5.2) явствует, что существуют решения, для которых зависимость от времени определяется множителем

$$\psi_E(\mathbf{r}, t) = \psi_E(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar), \quad (5.3)$$

где $\psi_E(\mathbf{r})$ — решение (собственная функция) не зависящего от времени уравнения на собственные значения

$$\hat{H}\psi_E(\mathbf{r}) = E\psi_E(\mathbf{r}), \quad (5.4)$$

а E — соответствующее собственное значение. Бесконечный набор собственных функций $\psi_E(\mathbf{r})$ есть полный набор в том смысле, что любую непрерывную функцию с теми же граничными условиями можно разложить в бесконечный ряд по функциям $\psi_E(\mathbf{r})$. Следовательно, любое решение уравнения Шредингера может быть представлено в виде

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_E a_E \psi_E(\mathbf{r}) \exp(-iEt/\hbar). \quad (5.5)$$

Решения простого вида (5.3) называют «стационарными состояниями», так как плотность вероятности $|\Psi_E(\mathbf{r}, t)|^2$ не зависит от времени. Собственные значения E физически интерпретируются как энергия системы.

Совокупность всех непрерывных функций, удовлетворяющих налагаемым на уравнение (5.2) граничным условиям, образует функциональное пространство, называемое пространством Гильберта. Скалярное произведение двух функций ψ и φ удобно определить как интеграл

$$(\varphi, \psi) = \int \varphi^*(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) dV \quad (5.6)$$

по всем возможным значениям координат $\mathbf{r}$. Чтобы энергия E при данном определении скалярного произведения была действительной величиной, гамильтониан должен быть эрмитовым оператором. Как следствие этого, набор собственных функций $\psi_E(\mathbf{r})$ при данном определении скалярного произведения оказывается ортогональным; таким образом, он может служить удобным базисом. В соответствии с формулой (5.1) функции $\psi_E(\mathbf{r})$ обычно нормированы на единицу. Отметим, что для стационарного состояния условие (5.1) переходит в равенство $(\psi_E, \psi_E) = 1$.

Всякой классической наблюдаемой величине O — энергии, импульсу, угловому моменту и т. д. — соответствует некоторый эрмитов оператор O (обычно не зависящий от времени), определенный в гильбертовом пространстве волновых функций. Каждый такой оператор имеет свой набор собственных функций и собственных значений $O\psi_\lambda^O(\mathbf{r}) = \lambda\psi_\lambda^O(\mathbf{r})$, причем всякий набор собственных функций $\psi_\lambda(\mathbf{r})$ образует ортонормированный базис. Собственные значения λ — единственные определенные величины, которые дает измерение наблюдаемой O ; данное значение λ будет получено лишь в том случае, если волновая функция системы в данный момент времени точно соответствует собственной функции $\psi_\lambda^O(\mathbf{r})$ оператора O . В общем случае волновая функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ не будет совпадать с какой-либо отдельной собственной функцией оператора O , но вследствие полноты системы функций $\psi_\lambda^O(\mathbf{r})$ всегда возможно разложение

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_{\lambda} c_{\lambda}(t) \psi_{\lambda}^O(\mathbf{r}). \quad (5.7)$$

Результат измерения наблюдаемой O в таком состоянии однозначно не определен, но $|c_\lambda(t)|^2$ есть вероятность того, что эта наблюдаемая имеет значение λ . Среднее значение оператора O в состоянии ψ равно сумме $\sum_\lambda |c_\lambda(t)|^2 \lambda$. Это среднее значение очень удобно представить в виде скалярного произведения, поскольку

$$(\psi, O\psi) = \sum_{\lambda'} \sum_{\lambda} c_{\lambda'}^*(t) c_{\lambda}(t) \lambda (\psi_{\lambda'}, \psi_{\lambda}) = \sum_{\lambda} |c_{\lambda}(t)|^2 \lambda \quad (5.8)$$

вследствие ортонормированности собственных функций $\psi_{\lambda}^0(\mathbf{r})$. В квантовой механике скалярное произведение $(\psi, O\psi)$ обычно обозначают символом $\langle \psi | O | \psi \rangle$. Отметим, что в стационарном состоянии энергия E может быть измерена точно; в роли оператора здесь выступает гамильтониан. В соответствии с нашими обозначениями волновую функцию стационарного состояния следовало бы записать как ψ_E^H , но для краткости мы записываем ее как ψ_E , учитывая особый смысл оператора энергии H .

Если спектр оператора (набор собственных значений) является дискретным, мы сталкиваемся с явлением квантования — случаем, когда измеряемые значения оператора дискретны. Спектр некоторых операторов может быть и непрерывным; в этом случае выражение (5.7) принимает вид

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int c(\lambda, t) \psi_{\lambda}^0(\mathbf{r}) d\lambda,$$

где интеграл берется по всей области возможных собственных значений λ .

Квантовую систему можно исследовать экспериментально, измеряя ее энергию и средние значения различных операторов. Измеренные значения можно затем сравнивать со значениями, рассчитанными на основе некоторого модельного гамильтониана. Другой очень важный вид эксперимента — измерение скорости перехода, или его вероятности, для процесса, в котором система изменяется от начального состояния ψ_i до конечного ψ_f . Можно доказать, что вероятность перехода W_{if} пропорциональна квадрату недиагонального матричного элемента:

$$W_{if} \sim |(\psi_f, O\psi_i)|^2, \quad (5.9)$$

где O — оператор, характеризующий данный процесс. Понятно, что именно из измеренных средних значений и

вероятностей перехода можно извлечь информацию о симметрии квантовых систем, и в следующих параграфах данной главы мы покажем, как симметрия влияет на указанные величины. Исследование взаимодействия системы, например атома или атомного ядра, с электромагнитным полем является особенно удобным и ценным методом получения такой информации. Он позволяет определять как средние значения (путем исследования энергетических возмущений), так и вероятности переходов (путем измерения поглощения и испускания излучения). Не вдаваясь детально в теорию, укажем основные характеристики электромагнитного взаимодействия и соответствующие операторы.

Как и в классической физике, взаимодействие системы с электромагнитным полем зависит от положений и моментов заряженных частиц, составляющих систему. Помимо общего заряда системы наиболее важными величинами являются электрический и магнитный дипольные моменты, которые для системы частиц i с зарядами e_i даются выражениями $\sum_i e_i \mathbf{r}_i$ и $\sum_i (e_i/2Mc) \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$. (Для частиц со спином существует дополнительный вклад в магнитный момент, см. гл. 8, § 4.) В атоме, где все Z электронов имеют одинаковый заряд, эти выражения упрощаются до $-Ze\mathbf{R}$ и $-(e/2Mc)\mathbf{L}$, где $\mathbf{R}$ — радиус-вектор центра масс, а $\mathbf{L}$ — полный угловой момент. Оба этих оператора входят в выражение для энергетических возмущений и вероятностей перехода в квантовой системе. В частности, энергетический сдвиг, обусловленный однородным магнитным полем $\mathbf{B}$, равен $e\mathbf{L} \cdot \mathbf{B}/2Mc$. При переходах в атомах существен в основном электрический дипольный момент, и в случае неполяризованного излучения вклад будут вносить все три компоненты вектора $\mathbf{R}$. При поглощении же поляризованного света существенными оказываются лишь некоторые компоненты вектора $\mathbf{R}$. Например, в случае так называемого плоскополяризованного света направление электрического поля задается вектором $\mathbf{p}$, перпендикулярным направлению пучка света. Соответствующим оператором в этом случае является компонента вектора $\mathbf{R}$ в направлении $\mathbf{p}$, и свет называют поляризованным в направлении $\mathbf{p}$.

§ 2. СИММЕТРИЯ В КВАНТОВОЙ СИСТЕМЕ

Рассмотрим систему, характеризуемую не зависящим от времени гамильтонианом $H(\mathbf{r})$ с произвольной волновой функцией $\psi(\mathbf{r})$, не обязательно являющейся его собственной функцией. Как и в предыдущем параграфе, вектор $\mathbf{r}$ в пространстве координат описывает n степеней свободы системы. Любая группа $\mathcal{G}$ преобразований координат $G_a \mathbf{r} = \mathbf{r}'$ будет задавать соответствующий набор индуцированных преобразований $T(G_a)$ в пространстве волновых функций в соответствии с определением (3.37):

$$T(G_a) \psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = \psi(G_a^{-1} \mathbf{r}).$$

Согласно формуле (3.24), ею определяется также трансформированный оператор Гамильтона $T(G_a) H T^{-1}(G_a) = H'$. Если гамильтониан инвариантен при этих преобразованиях, т. е. если

$$T(G_a) H T^{-1}(G_a) = H \quad (5.10)$$

для всех элементов G_a группы $\mathcal{G}$, то группу $\mathcal{G}$ называют группой симметрии гамильтониана. Вскоре мы увидим, что существование группы симметрии приводит ко многим важным следствиям. При умножении справа на T условие (5.10) приобретает эквивалентную форму $T(G_a) H - H T(G_a) = 0$, или $[T(G_a), H] = 0$, т. е. гамильтониан коммутирует со всеми индуцированными преобразованиями группы.

Элементы G_a группы симметрии называют элементами симметрии. Практически, определив один-два элемента симметрии гамильтониана, обычно можно построить всю группу симметрии, перемножая эти элементы и возводя их в степень до тех пор, пока не перестанут появляться новые элементы симметрии. [Из равенства (5.10) сразу же следует, что произведение двух элементов симметрии дает новый элемент симметрии.] Однако довольно трудно удостовериться в том, что найдены именно все элементы симметрии данного гамильтониана, а не просто элементы подгруппы полной группы симметрии.

При многих преобразованиях, таких, как повороты, отражения и трансляции, оператор кинетической энергии инвариантен, так что условие инвариантности гамильтониана сводится здесь к следующему условию, налагаемо-

му на функцию потенциальной энергии V :

$$V(\mathbf{r}) = V(G_a \mathbf{r}). \quad (5.11)$$

Выше мы дали достаточно строгое определение индуцированного преобразования, но можно представить себе и более абстрактный набор преобразований $T(G_a)$ в функциональном пространстве, которые не связаны с преобразованиями координат, но тем не менее удовлетворяют групповым аксиомам и, следовательно, определяют некоторую группу симметрии.

§ 3. ВЫРОЖДЕНИЕ И КЛАССИФИКАЦИЯ ПО СИММЕТРИИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Первые два следствия существования группы симметрии $\mathcal{G}$ гамильтониана тесно взаимосвязаны, и мы рассмотрим их вместе. Сначала мы их сформулируем, а затем покажем, как их можно вывести.

1. Собственные функции ψ и собственные значения E гамильтониана H можно классифицировать по неприводимым представлениям $T^{(\alpha)}$ группы симметрии $\mathcal{G}$ и обозначать через $\psi^{(\alpha)}$ и $E^{(\alpha)}$.
2. Энергетический уровень $E^{(\alpha)}$ должен быть по меньшей мере s_α -кратно вырожден, если s_α — размерность соответствующего представления $T^{(\alpha)}$.

Для вывода этих следствий вначале отметим, что набор всех вырожденных собственных функций, соответствующих некоторому данному собственному значению E , образует векторное пространство V . (Если функции ϕ и ψ обе соответствуют энергии E , то любая их линейная комбинация тоже соответствует энергии E .) Далее докажем, что пространство V должно быть инвариантным по отношению к преобразованиям $T(G_a)$, индуцированным группой $\mathcal{G}$. Чтобы продемонстрировать инвариантность, достаточно определить обычным образом трансформированную функцию $\psi' = T(G_a)\psi$, и тогда получим, что если ψ есть собственная функция оператора H с энергией E , то ψ' — тоже собственная функция оператора H с энергией E , так как

$$H\psi' = HT(G_a)\psi = T(G_a)H\psi = ET(G_a)\psi = E\psi'. \quad (5.12)$$

[Здесь мы использовали формулу (5.10).] Таким образом, представление группы симметрии осуществляется в векторном пространстве V через преобразования $T(G_a)$.

Это представление либо является неприводимым, либо может быть приведено к своим неприводимым компонентам, так что в любом случае можно выбрать в V базис, векторы которого $\psi_i^{(\alpha)}$ обозначены индексом α неприводимого представления группы $\mathcal{G}$ и индексом строки представления i . Степень вырождения определяется размерностью пространства V : она по меньшей мере равна s_α и превышает s_α , если пространство V приводимо.

Всем изложенным доказываются следствия, сформулированные в начале параграфа, но остается пояснить один важный момент. Если представление, соответствующее пространству V , не является неприводимым, то для обозначения энергии требуется не один, а несколько индексов α всех неприводимых представлений, входящих в его разложение. В действительности, если используется полная группа симметрии, подобная ситуация встречается крайне редко — настолько редко, насколько редко встречаются равные собственные значения для произвольной матрицы. Поэтому употребляют выражения «нормальное вырождение» для неприводимого представления и «случайное вырождение» для ситуации, когда два или более неприводимых представлений отвечают одинаковой энергии. Случайное вырождение возможно при изменении некоторых параметров гамильтониана H (таких, например, как напряженность магнитного или электрического поля), если при определенных значениях этих параметров два обычно невырожденных уровня пересекаются. Если для некоторого вида гамильтониана в группе симметрии $\mathcal{G}$ систематически обнаруживается случайное вырождение, то это обычно объясняется наличием более высокой симметрии. Как мы видели в гл. 4, § 18, неприводимое представление группы $\mathcal{H}$ в общем случае сводится к сумме нескольких неприводимых представлений одной из подгрупп. Таким образом, в группе более высокой симметрии случайно вырожденные уровни превращаются в компоненты одного-единственного неприводимого представления. Некоторые хорошо известные примеры этого можно найти в т. 2, гл. 19. Примеры гораздо более важного случая обычного вырождения приведены в § 6.

§ 4. ПРАВИЛА ОТБОРА И МАТРИЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ ОПЕРАТОРОВ

Мы установили, что в системах с группой симметрии $\mathcal{G}$ можно классифицировать собственные функции ψ гамильтониана по неприводимым представлениям группы $\mathcal{G}$. В гл. 4, § 20 было показано, что если преобразования, задаваемые оператором $O^{(\alpha)}$, соответствуют неприводимому представлению $\Gamma^{(\alpha)}$, то его матричные элементы, вычисленные для функций, также преобразующихся по неприводимым представлениям той же группы, имеют ряд простых свойств. Поэтому ясно, что мы сможем делать некоторые простые заключения о физически интересных матричных элементах, разлагая операторы на их неприводимые компоненты. Наиболее удивительный результат заключается в том, что если процесс перехода задан оператором $O^{(\alpha)}$, то переход из некоторого состояния $\psi^{(\beta)}$ может осуществляться лишь в те конечные состояния $\psi^{(\gamma)}$, представление которых $\Gamma^{(\gamma)}$ содержится в разложении произведения (4.44)

$$\Gamma^{(\alpha)} \otimes \Gamma^{(\beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} \Gamma^{(\gamma)}.$$

Таким образом, из состояния $\psi^{(\beta)}$ под действием оператора $O^{(\alpha)}$ система может перейти только в те конечные состояния $\psi^{(\gamma)}$, которые преобразуются по одному из представлений в правой части равенства (4.44). Для других конечных состояний матричные элементы равны нулю и переход не происходит. Это явление называется «правилами отбора»; те переходы, которые не могут происходить, называют «запрещенными». Правило отбора не указывает, что переход будет наблюдаться, а лишь свидетельствует о том, что он разрешен по симметрии. В отдельных случаях всегда могут найтись те или иные причины, по которым отдельные матричные элементы будут равны нулю. Чтобы найти полный перечень правил отбора, нужно последовательно перебрать неприводимые представления $\Gamma^{(\beta)}$ и определить коэффициенты m_{γ} по формуле (4.45), используя известные таблицы характеров групп симметрии; переход может происходить при тех γ , при которых $m_{\gamma} \neq 0$.

До сих пор мы считали, что переход определяется оператором $O^{(\alpha)}$, преобразующимся по неприводимому представлению α . В действительности же оператор O может

преобразовываться и по приводимому представлению. В этом случае его можно либо разложить на неприводимые составляющие,

$$O = \sum_{\alpha} O^{(\alpha)},$$

и установить переходы, разрешенные для каждой неприводимой компоненты отдельно, либо, если нам непосредственно известен характер $\chi(G_a)$ «приводимого» представления, определить коэффициенты m_{γ} по формуле

$$m_{\gamma} = \frac{1}{g} \sum_a \chi^{(\gamma)}(G_a)^* \chi(G_a) \chi^{(\beta)}(G_a)$$

вместо формулы (4.45).

Операторы $\mathbf{R}=(X, Y, Z)$ электрических дипольных переходов преобразуются подобно векторам при поворотах и являются нечетными относительно инверсии. Следовательно, они образуют трехмерное представление любой группы вращений и инверсий. Для собственного вращения вокруг оси z на угол θ , согласно формуле (4.6), характер равен просто $(2\cos\theta + 1)$, и, поскольку след матрицы не зависит от базиса, эта величина является характером также и для вращения вокруг любой оси. Аналогично для магнитных дипольных переходов соответствующий оператор $\mathbf{L} = \sum_i \mathbf{r}_i \times \mathbf{p}_i$ также является вектором и потому имеет то же значение характера относительно вращений. Однако при инверсии $\mathbf{R}$ изменяет знак, а $\mathbf{L}$ — не изменяет, поскольку при этом одновременно меняют знаки $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$, и, таким образом, для несобственных вращений характеры для $\mathbf{R}$ и $\mathbf{L}$ имеют разные знаки. Эти два трехмерных представления группы вращений и инверсий часто называют представлениями векторов и псевдовекторов (или аксиальных векторов).

Теорема Вигнера — Экарта [формула (4.62)] не имеет отношения к правилам отбора, она связывает матричные элементы, имеющие одинаковые α, β и γ и разные индексы строк i, j и k . Другими словами, она показывает, как изменяются матричные элементы при замене одной волновой функции другой из того же вырожденного мультиплета. Так как простые процессы переходов включают суммиро-

вание по всем вырожденным конечным состояниям, эта особенность симметрии менее существенна. Далее о применении теоремы Вигнера — Экарта см. гл. 8.

§ 5. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ

Говорят, что наблюдаемая величина O сохраняется в данной системе, если ее среднее значение в любом состоянии системы $\psi(\mathbf{r}, t)$ не изменяется со временем. Эквивалентным является утверждение о том, что если в некоторый момент времени волновая функция системы совпадает с некой собственной функцией оператора O , то она будет оставаться собственной функцией оператора O с тем же собственным значением в течение всего времени. Теперь мы покажем, что оператор O обладает свойством сохраняться, если он коммутирует с гамильтонианом и не зависит от времени. Имеем

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}(\psi, O\psi) &= \left(\frac{d\psi}{dt}, O\psi\right) + \left(\psi, O\frac{d\psi}{dt}\right) = \\ &= \{- (H\psi, O\psi) + (\psi, OH\psi)\} / i\hbar = \\ &= (\psi, [O, H]\psi) / i\hbar = 0 \end{aligned} \quad (5.13)$$

(используя уравнение Шредингера и предполагаемую коммутативность $[H, O] = 0$).

Далее, если система обладает некоторой симметрией, то операторы $T(G_a)$ любого элемента G_a в группе $\mathcal{G}$ будут коммутировать с гамильтонианом и, следовательно, будут сохраняться. На первый взгляд это предполагает существование большого числа сохраняющихся величин, но они не являются независимыми. Очевидно, что сохранение оператора $T(G_c)$ связано с сохранением $T(G_a)$ и $T(G_b)$, если $G_a G_b = G_c$. Поэтому для каждой группы существует минимальное число сохраняющихся величин, соответствующее минимальному числу элементов группы, необходимому для вывода всех ее элементов путем перемножения. Так, для циклической группы, например C_3 , существует лишь одна сохраняющаяся величина, ибо по определению циклической группы все ее элементы получаются возведением в степень одного-единственного элемента. В группе D_3 (гл. 2, табл. 2.5) для генерирования всех элементов необходимы только два: R_1 и R_3 , и, таким образом, имеются две независимые сохраняющиеся вели-

чины. Для непрерывной группы $\mathcal{K}_2$, как это будет видно в гл. 7, § 3, п. Д, все элементы можно вывести из одного-единственного оператора.

Следует всегда помнить, что в силу постулатов квантовой механики только эрмитовы операторы могут соответствовать физическим наблюдаемым. Таким образом, для физически наблюдаемой сохраняющейся величины из $\Gamma(G_a)$ требуется построить эрмитов оператор. Далее мы увидим, что только в случае непрерывных групп эти сохраняющиеся величины соответствуют обычным классическим понятиям, таким, как импульс или угловой момент.

§ 6. ПРИМЕРЫ

Для иллюстрации следствий симметрии рассмотрим четыре примера, соответствующие группам симметрии C_2 , D_2 , S_2 и $\mathcal{K}_2$. Хотя детально определять вид волновых функций не требуется (в этом и состоит преимущество симметричного подхода), можно представить себе, что данные примеры относятся к движению частицы в поле с потенциалом $V(r)$. Оператор кинетической энергии ∇^2 , будучи скалярным произведением, инвариантен относительно любого вращения и поэтому во всех четырех примерах остается неизменным. Потенциал же можно выбрать инвариантным лишь по отношению к низшим из перечисленных групп вращений. Данный простой случай не такой уж искусственный — он может соответствовать движению электрона вокруг атомного ядра. Хотя кулоновское притяжение ядра сферически-симметрично, можно представить себе, что имеется внешнее поле, понижающее симметрию. Или же, если атом находится в кристалле, присутствие других атомов кристалла будет понижать симметрию от $\mathcal{K}_2$ до некоторой конечной группы вращений.

А. Группа симметрии C_2

Для этой группы потенциал $V(r)$ в обозначениях примера 5 из гл. 2, § 2 будет инвариантным относительно поворотов R_1 и $R_2 = R_1^2$ вокруг тройной оси z . Группа C_2 циклическая, три одномерных неприводимых представления $\tau^{(1)}$, $\tau^{(2)}$ и $\tau^{(3)}$, имеющиеся в табл. 4.3 (гл. 4, § 18), можно

записать в виде

$$\tau^{(\alpha)}(R_1) = \exp[2\pi(\alpha - 1)i/3], \quad (5.14)$$

где $\alpha = 1, 2$ и 3 . На основании общих выводов § 3 мы можем заключить, что собственные состояния должны быть невырожденными, что они могут классифицироваться в соответствии с индексом α неприводимого представления и что они обладают следующим свойством:

$$T(R_1)\psi^{(\alpha)} = \exp[2\pi(\alpha - 1)i/3]\psi^{(\alpha)}.$$

В нашем частном случае одной частицы это означает по определению (3.37), что

$$\psi^{(\alpha)}\left(\varphi - \frac{2\pi}{3}\right) = \exp[2\pi(\alpha - 1)i/3]\psi^{(\alpha)}(\varphi), \quad (5.15)$$

где φ — обычный полярный угол поворота относительно оси z . (Мы могли бы получить этот результат без непосредственного использования теории групп, отметив, что гамильтониан H коммутирует с оператором $\tau(R_1)$ поворота вокруг тройной оси z , следовательно, собственные состояния гамильтониана H можно выбрать так, чтобы оператор $\tau(R_1)$ был диагональным. Этим состояниям можно приписать индексы собственных значений $\tau(R_1)$, задаваемые формулой (5.14). Оператор $\tau(R_1)$ по отношению к группе C_3 представляет собой сохраняющуюся величину, но он не имеет простого физического смысла.)

Яснее свойства симметрии функций, удовлетворяющих равенству (5.15), видны из выражения

$$\psi^{(\alpha)}(\varphi) = u_{\alpha}(\varphi) \exp[-i(\alpha - 1)\varphi], \quad (5.16)$$

где $u_{\alpha}(\varphi)$ — периодическая функция переменной φ с периодом $2\pi/3$. Это можно проверить подстановкой выражения (5.16) в формулу (5.15):

$$\begin{aligned} u_{\alpha}(\varphi - (2\pi/3)) \exp\{-i(\alpha - 1)[\varphi - (2\pi/3)]\} &= \\ &= \exp[2\pi(\alpha - 1)i/3] u_{\alpha}(\varphi) \exp[-i(\alpha - 1)\varphi], \end{aligned}$$

т. е.

$$u_{\alpha}\left(\varphi - \frac{2\pi}{3}\right) = u_{\alpha}(\varphi). \quad (5.17)$$

Формула (5.16) дает функцию $\psi^{(\alpha)}(\varphi)$ при всех φ , если она известна в интервале $0 \leq \varphi < 2\pi/3$. Таким образом, сообра-

жения симметрии привели к заключению, что для решения уравнения Шредингера в системе симметрии C_3 необходимо решить лишь эквивалентное уравнение для $u_\alpha(\varphi)$ в интервале $0 \leq \varphi < 2\pi/3$ с периодическими граничными условиями.

Рассмотрим теперь правила отбора для электрических дипольных переходов между собственными состояниями $\psi^{(\alpha)}(\varphi)$. Для света, поляризованного вдоль оси z , соответствующий оператор равен ez (§ 1). Очевидно, что он инвариантен относительно поворотов вокруг тройной оси и, следовательно, принадлежит тождественному представлению $\tau^{(1)}$. Поскольку произведение представлений $\tau^{(1)} \otimes \tau^{(\alpha)} = \tau^{(\alpha)}$, этот оператор может вызывать переходы лишь между состояниями, принадлежащими одному и тому же неприводимому представлению с индексом α . Для света, поляризованного в плоскости xy , соответствующий оператор есть комбинация x и y . Так как $x \pm iy = r \sin \theta \exp(\pm i\varphi)$, из сравнения с (5.16) следует, что этот оператор преобразуется в соответствии с комбинацией представлений $\tau^{(2)}$ и $\tau^{(3)}$. Из табл. 4.3 мы находим, что произведения представлений дают $\tau^{(1)} \otimes \tau^{(2)} = \tau^{(2)}$, $\tau^{(2)} \otimes \tau^{(2)} = \tau^{(3)}$, $\tau^{(2)} \otimes \tau^{(3)} = \tau^{(1)}$ и $\tau^{(3)} \otimes \tau^{(3)} = \tau^{(2)}$. Следовательно, разрешенными переходами для света, поляризованного в плоскости xy , являются переходы $(1) \leftrightarrow (2)$, $(1) \leftrightarrow (3)$ и $(2) \leftrightarrow (3)$, т. е. возможны все переходы с изменением индекса α .

Б. Группа симметрии D_3

Эта группа была рассмотрена в гл. 2, § 2 (пример 6), и в данном случае потенциал инвариантен относительно поворотов вокруг тройной оси z и вокруг двойных осей в плоскости xy . Характеры представлений группы D_3 даны в табл. 4.2. Собственные состояния являются либо невырожденными с $\alpha=1$ или 2, либо дважды вырожденными с $\alpha=3$. Состояния $\psi^{(1)}$ будут инвариантными относительно всех операций группы. Состояния $\psi^{(2)}$ инвариантны относительно поворотов R_1 и R_2 вокруг тройной оси, но изменяют знак при поворотах R_3 , R_4 и R_5 вокруг двойных осей. В общем случае пары состояний $\psi_1^{(3)}$ и $\psi_2^{(3)}$ будут смешиваться под действием операций группы.

Найти правила отбора для электрических дипольных переходов можно довольно просто. Соответствующий опе-

ратор $O = eR$ есть вектор с характером $2 \cos \theta + 1$ (§ 4), так что из приведенной ниже таблицы характеров группы D_3 (табл. 5.1) мы видим, что он преобразуется как $T^{(2)} \oplus$

Таблица 5.1

D_3	$\mathcal{C}_1(E)$	$\mathcal{C}_2(R_1, R_2)$	$\mathcal{C}_3(R_3, R_4, R_5)$	
$T^{(1)}$	1	1	1	
$T^{(2)}$	1	1	-1	
$T^{(3)}$	2	-1	0	
O	3	0	-1	$= T^{(2)} \oplus T^{(3)}$
$O \otimes T^{(1)}$	3	0	-1	$= T^{(2)} \oplus T^{(3)}$
$O \otimes T^{(2)}$	3	0	1	$= T^{(1)} \oplus T^{(3)}$
$O \otimes T^{(3)}$	6	0	0	$= 2T^{(3)} \oplus T^{(2)} \oplus T^{(1)}$

$\oplus T^{(3)}$. Отсюда мы делаем вывод, что разрешены следующие переходы: $T^{(1)} \leftrightarrow T^{(2)}$, $T^{(1)} \leftrightarrow T^{(3)}$, $T^{(2)} \leftrightarrow T^{(3)}$ и $T^{(3)} \leftrightarrow T^{(3)}$, тогда как переходы $T^{(1)} \leftrightarrow T^{(1)}$ и $T^{(2)} \leftrightarrow T^{(2)}$ запрещены. Аналогичным образом разлагая O на компоненты $T^{(2)}$ (вдоль оси z) и $T^{(3)}$ (в плоскости xy), мы можем сделать вывод, что в случае поляризованного света разрешены следующие переходы:

- 1) поляризация вдоль z : $T^{(1)} \leftrightarrow T^{(2)}$, $T^{(3)} \leftrightarrow T^{(3)}$;
- 2) поляризация в плоскости xy : $T^{(1)} \leftrightarrow T^{(3)}$, $T^{(2)} \leftrightarrow T^{(3)}$, $T^{(3)} \leftrightarrow T^{(3)}$.

В. Группа симметрии S_2

Эта очень простая группа (гл. 2, § 2, пример 4) содержит лишь единичный элемент и инверсию I , причем $I^2 = E$. Она имеет два одномерных неприводимых представления: тождественное представление $T^{(1)}$ и представление $T^{(2)}$, в котором инверсии соответствует -1 . Собственные состояния гамильтониана, инвариантного относительно инверсии, будут, следовательно, принадлежать представлению $T^{(1)}$ или $T^{(2)}$. Соответственно этому они называются четными или нечетными и часто обозначаются знаками $\pm$. Поскольку представления одномерны, вырождение отсутствует. Правила отбора получаются очень просто

из правил умножения $\Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(2)} = \Gamma^{(2)}$ и $\Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(1)} = \Gamma^{(2)} \otimes \Gamma^{(2)} = \Gamma^{(1)}$. Таким образом, нечетный оператор, например оператор электрического дипольного момента, требует, чтобы начальное и конечное состояния различались по четности, тогда как оператор магнитного дипольного момента допускает переходы лишь между состояниями с одинаковой четностью.

Г. Группа симметрии $\mathcal{R}_2$

Группа $\mathcal{R}_2$ — это непрерывная группа всевозможных вращений вокруг оси z , так что потенциал $V(\mathbf{r})$, если он инвариантен относительно операций этой группы, должен зависеть лишь от r и θ . Элементы группы $R(a)$ и оператор $T(R(a))$ определены по формуле (3.37) таким образом, что при действии оператора на волновую функцию отдельной частицы мы имеем $T(R(a))\psi(r, \theta, \varphi) = \psi(r, \theta, \varphi - a)$. При таком подходе переменные r и θ роли не играют, и мы можем их опустить. Используя разложение в ряд Тейлора, можно написать

$$\begin{aligned} \psi(\varphi - a) &= \psi(\varphi) - a \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(\varphi) + \frac{1}{2!} a^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi(\varphi) + \dots = \\ &= \exp\left(-a \frac{\partial}{\partial \varphi}\right) \psi(\varphi), \end{aligned}$$

так что оператор $T(R(a))$ можно выразить в явной форме как

$$T(R(a)) = \exp\left(-a \frac{\partial}{\partial \varphi}\right). \quad (5.18)$$

Экспоненциальный вид оператора следует понимать как сокращенное обозначение соответствующего ряда. Поэтому очевидно, что единственный оператор $\partial/\partial\varphi$ генерирует все повороты относительно оси z .

Поскольку элементы группы коммутируют, группа является абелевой и, следовательно (гл. 4, § 8), неприводимые представления должны быть одномерными. Подробнее мы рассмотрим неприводимые представления группы $\mathcal{R}_2$ в гл. 7, § 3, но уже из выражения (5.18) ясно, что функции вида $\psi^{(m)}(\varphi) = A \exp(im\varphi)$, где m — любое целое число, могут быть базисными векторами одномерных неприводимых представлений, определяемых соотношением $T^{(m)}(R(a)) = \exp(-ima)$. Выбирая действительный индекс

m , мы делаем оператор $\Gamma^{(m)}$ унитарным, а при целых m убеждаемся в непрерывности функции $\psi^{(m)}(\varphi)$ при изменении φ в пределах 2π .

Правила отбора для электрических дипольных переходов можно найти, если заметить, что величина z инвариантна относительно всех вращений вокруг оси z и, следовательно, принадлежит представлению с $m=0$. Для света, поляризованного в плоскости xu , зависимость от φ соответствующего оператора, как и в предыдущем примере, дается комбинацией $\exp(i\varphi)$ с $\exp(-i\varphi)$ и, следовательно, является суперпозицией представлений с $m=1$ и $m=-1$. Правило для образования произведений представлений группы $\mathcal{R}_2$ особенно простое, так как

$$\Gamma^{(m)}(R(a)) \otimes \Gamma^{(m')}(R(a)) = \exp(-ima - im'a) = \Gamma^{(m+m')}(R(a)).$$

Таким образом, свет, поляризованный вдоль оси z , индуцирует переходы, при которых величина m не изменяется ($\Delta m=0$), тогда как свет, поляризованный в плоскости xu , индуцирует переходы, при которых величина m изменяется на единицу ($\Delta m=\pm 1$).

На основании сказанного в § 5 можно попытаться установить закон сохранения в случае симметрии $\mathcal{R}_2$, если оператор поворота (5.18) можно преобразовать в эрмитов оператор. Легко видеть, что таким оператором может быть оператор $\partial/\partial\varphi$, умноженный на i . Действительно, если мы напишем $l_z = -i(\partial/\partial\varphi)$ и перейдем к декартовым координатам, то получим

$$l_z = -i \frac{\partial}{\partial\varphi} = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = (xp_y - yp_x)/\hbar, \quad (5.19)$$

где $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$ — обычное квантовомеханическое выражение для импульса. Это означает, что сохраняющейся величиной l_z является угловой момент относительно оси z . В собственных состояниях $\psi^{(m)}(\varphi)$ оператор l_z имеет собственные значения m .

§ 7. ТЕОРИЯ ГРУПП И ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД

В большинстве реальных физических задач квантовой механики уравнение Шредингера не может быть решено точно ввиду его математической сложности, особенно если рассматривается большое число частиц. В таких случаях

при нахождении приближенного решения для основного состояния, а также, когда возможно, нескольких первых возбужденных состояний часто пользуются вариационным методом. Сущность метода заключается в том, что строят сравнительно простую нормированную пробную функцию ψ , которая содержит ряд варьируемых параметров, и вычисляют среднее значение гамильтониана (ψ , $H\psi$). Можно показать, что при любых значениях параметров оно дает верхнюю границу энергии основного состояния. Минимизируя это среднее значение по переменным параметрам волновой функции, мы найдем минимальную верхнюю границу, возможную при выбранной форме пробной функции. С увеличением числа варьируемых параметров среднее значение (ψ , $H\psi$) будет все точнее соответствовать энергии основного состояния, а пробная функция ψ — приближаться к волновой функции основного состояния. Затем выбирают пробные функции, ортогональные к функции основного состояния, и получают таким же образом приближения к первому возбужденному состоянию и т. д.

Если система обладает симметрией, то, не прибегая к расчетам, можно сказать, что под действием операций симметрии группы ее собственные функции преобразуются по неприводимым представлениям. Этим можно руководствоваться при выборе пробной варьируемой функции, отбрасывая функции, которые состоят из компонент, преобразующихся по разным неприводимым представлениям. Более того, в общем случае можно сказать, что физическая система, существующая за счет сил притяжения между своими компонентами, имеет основное состояние с максимальной симметрией. Математически это означает, что основное состояние должно преобразовываться подобно тождественному представлению, т. е. оно должно быть инвариантным относительно всех операций группы. Можно, например, строго показать, что основное состояние частицы, движущейся в поле со сферически-симметричным потенциалом $V(r)$, само является сферически-симметричным, т. е. $l=0$. Поэтому при аппроксимировании основного состояния следует брать только сферически-симметричные пробные функции. Чтобы найти первое возбужденное состояние, нужно сконструировать пробную функцию, преобразующуюся в соответствии с некоторым другим представлением, и обычно это представление имеет в не-

котором смысле наивысшую из оставшихся возможными симметрий. Например, в случае потенциала гармонического осциллятора первое возбужденное состояние соответствует значению $l=1$. Нам встретятся и другие случаи возбужденных состояний с максимальной симметрией (см., например, спектр атома водорода в гл. 8, § 5).

При вариационном методе в качестве пробной функции часто пользуются линейной комбинацией n определенных функций φ_i с коэффициентами c_i в качестве варьируемых параметров

$$\psi = \sum_{i=1}^n c_i \varphi_i. \quad (5.20)$$

В такой форме вариационный метод иногда называют методом Релея — Ритца, он эквивалентен диагонализации гамильтониана в конечном n -мерном пространстве выбранных функций φ_i . Если выбрать функции φ_i ортонормированными, то уравнение Шредингера $H\psi = E\psi$ сводится к матричному уравнению. В самом деле, из уравнения $H\psi = E\psi$ с учетом выражения (5.20) имеем

$$\sum_i c_i H \varphi_i = E \sum_i c_i \varphi_i,$$

т. е.

$$\sum_i c_i (\varphi_j, H \varphi_i) = E c_j.$$

Обозначая матричный элемент $(\varphi_j, H \varphi_i)$ через H_{ji} , получаем

$$\sum_i (H_{ji} - E \delta_{ji}) c_i = 0, \quad (5.21)$$

т. е. энергия E и коэффициенты c_i выступают как собственные значения и компоненты собственных векторов матрицы H_{ji} . Правда, из этого не следует, что точные собственные значения уравнения Шредингера могут быть получены из конечной матрицы $n \times n$. Она дает лишь приближение к E (верхнюю границу) и будет точной только в том случае, если точную волновую функцию ψ можно разложить в конечный ряд (5.20). В общем случае это невозможно, если только n не возрастает до бесконечности, что делает набор функций φ_i полным, но тогда становится бесконечной и матрица, которую надо диагонализировать.

Если функции φ_i не ортонормированы и их скалярное произведение обозначено через $S_{ji} = (\varphi_j, \varphi_i)$, то формула (5.21) принимает вид

$$\sum_i (H_{ji} - ES_{ji}) c_i = 0, \quad (5.22)$$

и тогда энергия находится из детерминантного уравнения

$$|\mathbf{H} - E\mathbf{S}| = 0. \quad (5.23)$$

В методе Релея — Ритца условие симметрии можно использовать двояко. Во-первых, в сумму (5.20) следует включать лишь такие базисные функции φ_i , которые преобразуются по одному и тому же неприводимому представлению $\Gamma^{(\alpha)}$. Если размерность представления больше единицы, что обычно бывает при описании возбужденных состояний, то в сумме (5.20) можно ограничиться функциями, которые преобразуются по некоторой строке представления $\Gamma^{(\alpha)}$. Это ясно из формулы (4.63), которая показывает, что инвариантный оператор, например гамильтониан, имеет нулевые матричные элементы между функциями, преобразующимися по разным строкам представления. Кроме того, формула (4.63) показывает, что матричные элементы не зависят от индекса строки. Отсюда следует, что матрица $\mathbf{H}$, определенная в базисе функций, преобразующихся по строке i неприводимого представления $\Gamma^{(\alpha)}$, будет в точности такой же, как и матрица $\mathbf{H}$ в соответствующем базисе, где все функции преобразуются по какой-либо другой строке этого представления. Таким образом, необходимо лишь записать и диагонализировать матрицу для одного выбранного i . В том, что любой другой выбор j приводит к той же матрице и потому к тем же собственным значениям, всего лишь находит выражение факт s_α -кратного вырождения, где s_α — размерность представления $\Gamma^{(\alpha)}$.

В следующем параграфе мы рассмотрим пример использования симметрии в методе Релея — Ритца (т. е. в матричном методе).

§ 8. НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ ПРИ ВОЗМУЩЕНИИ

Во многих физических задачах гамильтониан рассматриваемой системы состоит из основной части и малой добавки (или нескольких малых добавок). Напишем

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{H}_1, \quad (5.24)$$

где H_1 — малая добавка. Часто оказывается, что оператор H_0 намного проще оператора H_1 , и можно найти приближенное решение, рассматривая H_1 как возмущение точного решения H_0 . В принципе возмущение следует рассматривать как степенной ряд по H_1 , но мы здесь ограничимся поправками первого порядка, так как нас больше всего интересует влияние симметрии.

Для невырожденного уровня E_k напомним уравнение Шредингера невозмущенной системы в виде $H_0\psi_k = E_k\psi_k$. Тогда, если считать ψ_k пробной функцией для H , среднее значение энергии будет равно $(\psi_k, H\psi_k) = E_k + (\psi_k, H_1\psi_k)$. Это означает, что поправка первого порядка к невозмущенному значению энергии E_k равна $\Delta E = (\psi_k, H_1\psi_k)$.

Если энергетический уровень E_n вырожден и ему соответствует набор независимых волновых функций φ_{ni} , таких, что $H_0\varphi_{ni} = E_n\varphi_{ni}$, то, чтобы найти поправку первого приближения, обусловленную возмущением H_1 , мы должны взять пробную функцию типа (5.20) как линейную комбинацию вырожденных состояний. Из изложенного в § 7 явствует, что энергетические сдвиги определяются собственными значениями матрицы H_1 в базисе φ_{ni} .

Теперь предположим, что в разложении (5.24) гамильтониан H_0 принадлежит более высокой группе симметрии $\mathcal{G}_0$, а H_1 имеет более низкую группу симметрии $\mathcal{G}_1$, являющуюся лишь подгруппой группы $\mathcal{G}_0$. Разумеется, полный гамильтониан тоже принадлежит группе симметрии $\mathcal{G}_1$. Будем рассматривать случай, когда H_1 — малое возмущение, которое существенно не влияет на H_0 , так что функции, соответствующие разным энергетическим уровням оператора H_0 , не смешиваются. (Математически

мы требуем выполнения условия $|\int \psi_n^* H_1 \psi_m| \ll |E_n - E_m|$.)

Если имеется некоторое заданное собственное значение энергии E_n гамильтониана H_0 , то, согласно сказанному в § 3, его собственные функции будут базисными функциями $\psi_i^{(\alpha)}$ некоторого неприводимого представления $T^{(\alpha)}$ группы $\mathcal{G}_0$ и уровень будет s_α -кратно вырожденным. Интуиция подсказывает нам, что влияние гамильтониана H_1 должно приводить к снятию этого вырождения, так как группа $\mathcal{G}_1$ может не иметь неприводимого представления размерности s_α и поэтому не будет иметь собственных состояний с вырожденностью s_α . Пространство $L^{(\alpha)}$ собст-

венных функций уровня E_n по отношению к подгруппе $\mathcal{G}_1$ будет распадаться на подпространства, неприводимые относительно $\mathcal{G}_1$, т. е. в соответствии с обозначениями гл. 4, § 18

$$L^{(\alpha)} = \sum_{\tilde{\alpha}, q} L^{(\tilde{\alpha}), q}. \quad (5.25)$$

Индекс q служит для обозначения пространств, которые преобразуются по эквивалентному неприводимому представлению $\Gamma^{(\tilde{\alpha})}$ группы $\mathcal{G}_1$. Далее по таблице характеров для групп $\mathcal{G}_0$ и $\mathcal{G}_1$ нетрудно определить, какие индексы $\tilde{\alpha}$ группы $\mathcal{G}_1$ входят в формулу (5.25) для данного представления $\Gamma^{(\alpha)}$ группы $\mathcal{G}_0$.

А. Примеры

Примеры такого анализа были даны в гл. 4, § 18 для перехода $D_3 \rightarrow C_3$. Было показано, что двумерное представление $\Gamma^{(3)}$ группы D_3 сводится к сумме двух одномерных представлений C_3 . В действительности, однако, этот частный случай понижения симметрии обычно не приводит к расщеплению энергетического дублета, так как два представления группы, являясь комплексно-сопряженными, имеют одинаковую энергию в случае действительного потенциала $V(\mathbf{r})$ (или, в более общем случае, для любого инвариантного относительно обращения времени гамильтониана; т. 2, гл. 15, § 7, п. Г).

При понижении симметрии типа $\mathcal{R}_2 \rightarrow C_3$ вырождение также не снимается, поскольку представления группы $\mathcal{R}_2$ не вырождены. В этом случае состояния, которые при симметрии $\mathcal{R}_2$ обозначались индексами $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$, при симметрии C_3 будут обозначаться индексами $m=0, \pm 1$ с прибавлением или вычитанием любого числа, кратного трем.

Чтобы найти более интересный пример, нужно перейти к более сложной группе. Группа октаэдра O (гл. 9, § 3, п. А) имеет трехмерное неприводимое представление T_1 , и при переходе к подгруппе D_3 можно из таблицы характеров (приложение 1) увидеть, что оно приводится к двум неприводимым представлениям $T_1 = A_2 \oplus E$ группы D_3 с размерностью 1 и 2. Таким образом, при включении возмущения симметрии D_3 трижды вырожденный уровень T_1

гамильтониана группы симметрии O будет расщепляться на уровень A_2 и дублет E . Другие аналогичные примеры приведены в гл. 9, § 9, п. Б в связи с расщеплением атомных уровней в кристаллическом поле.

Б. Величина расщепления

Таблица характеров дала нам возможность установить характер расщепления вырожденных уровней, но она ничего не говорит ни о величине расщепления, ни даже о порядке возмущенных уровней. Полагая, что волновые функции невозмущенных уровней известны, эти характеристики расщепления можно найти, вычислив матричные элементы «возмущающего» гамильтониана H_1 и, если это необходимо, диагонализовав малую матрицу (§ 7). Как мы сейчас покажем, учет симметрии при выборе базиса матрицы и в этом случае упрощает расчет.

Из сказанного в конце предыдущего параграфа явствует, что в соответствии с разложением (5.25) матричные элементы возмущающего гамильтониана H_1 между функциями, преобразующимися по неэквивалентному неприводимому представлению $T^{(\tilde{\alpha})}$, равны нулю и что в пределах набора функций $\psi_i^{(\tilde{\alpha})}$ с $i=1, 2, \dots, s_{\tilde{\alpha}}$ матрица H_1 кратна единичной. Если какое-либо представление $T^{(\tilde{\alpha})}$ в разложении (5.25) встречается только один раз, то, чтобы найти энергетический сдвиг, обусловленный возмущением H_1 , нужно вычислить лишь среднее значение

$$(\psi_i^{(\tilde{\alpha})}, H_1 \psi_i^{(\tilde{\alpha})}) \quad (5.26)$$

для любой строки i . Если волновые функции невозмущенного уровня заданы в произвольном базисе, то найти возмущенные волновые функции $\psi_i^{(\tilde{\alpha})}$ можно с использованием проекционного оператора (4.50) или, в данном случае, с помощью более простого оператора (4.51). Затем можно прямо вычислить энергетический сдвиг (5.26). Если в разложении (5.25) представление $T^{(\tilde{\alpha})}$ встречается более одного раза, скажем $m_{\tilde{\alpha}}$ раз, то тогда будут существовать $m_{\tilde{\alpha}}$ линейно-независимых функций типа $\psi_i^{(\tilde{\alpha})}$, которые можно обозначить через $\psi_i^{(\tilde{\alpha})q}$, где $q=1, 2, \dots, m_{\tilde{\alpha}}$. В общем случае возмущение H_1 будет иметь между функциями

этого набора ненулевые матричные элементы, и энергетические сдвиги можно найти путем построения матрицы размера $m_{\tilde{\alpha}} \times m_{\tilde{\alpha}}$ в некотором удобном базисе и ее последующей диагонализации. Базисные функции снова находятся с использованием проекционного оператора (4.50), действующего на волновые функции невозмущенного вырожденного мультиплета. Применение общего метода, изложенного здесь, можно найти в гл. 8, § 5.

§ 9. НЕРАЗЛИЧИМОСТЬ ЧАСТИЦ

В классической механике может существовать система идентичных частиц, которые тем не менее можно различать между собой. Можно мысленно как-то выделить из них одну частицу в некоторый момент времени, а затем проследить ее путь. В квантовой же механике движение частицы описывается только волновой функцией, так что говорить о ее определенной траектории нельзя (принцип неопределенности). Поэтому в квантовой механике идентичные частицы неразличимы в том смысле, что если мы наблюдаем одну из них, то невозможно сказать, какая это частица. Математически утверждение неразличимости выражается в том, что все наблюдаемые величины представлены операторами, симметричными относительно перестановки частиц.

Гамильтониан системы n взаимодействующих частиц должен быть инвариантным относительно перестановок, а поэтому группа всех перестановок $\mathcal{S}_n$ (гл. 2, § 2, пример 10) является группой симметрии системы. Если не считать малых значений n , то имеется много разных неприводимых представлений группы $\mathcal{S}_n$, которые мы оставим до т. 2, гл. 17. Но если некоторое собственное состояние принадлежит неприводимому представлению $\Gamma^{(\alpha)}$ группы $\mathcal{S}_n$ с размерностью $s_{\alpha} > 1$, то вследствие симметрии всех физических операторов мы должны иметь вырождение, которое совершенно ненаблюдаемо. Никакой физический оператор не может привести к расщеплению уровней или индуцировать какие-либо переходы из одного вырожденного состояния в другое. В природе столь причудливая ситуация, по-видимому, не возникает. Опыт показывает, что единственными встречающимися представлениями групп

пы $\mathcal{S}_n$ являются два одномерных представления, соответствующие полностью симметричным или полностью антисимметричным состояниям. (Первое из них есть тождественное представление, и соответствующее состояние ψ_S удовлетворяет условию $P\psi_S = \psi_S$ для всех перестановок P . Антисимметричное состояние ψ_A обладает свойством $P_{ij}\psi_A = -\psi_A$ для всех пар ij , где P_{ij} обменивает местами частицы i и j , оставляя остальные частицы без изменения. Подробно мы остановимся на этих представлениях в т. 2, гл. 17, § 4.) К примеру, вся теория атомного строения, включая интерпретацию периодической системы элементов, рухнула бы, убери мы из нее предположение об антисимметричности волновых функций электронов. В общем случае установлено, что частицы с целым спином имеют полностью симметричные волновые функции, тогда как частицы с полуцелым спином имеют полностью антисимметричные волновые функции. В последнем случае очевидно, что любые две идентичные частицы не могут находиться в одном и том же одночастичном состоянии — эта закономерность носит название принципа Паули. Частицы, описываемые симметричными волновыми функциями, называют «бозонами», а антисимметричными — «фермионами», подразумевая, что они удовлетворяют статистикам Бозе — Эйнштейна и Ферми — Дирака.

В т. 2, гл. 16, § 3, п. Г мы рассмотрим теорему о статистиках спина, в которой на основе очень общих теоретических посылок делается заключение о том, что частицы с полуцелым спином не могут описываться симметричными волновыми функциями, а частицы с целым спином не могут иметь антисимметричных волновых функций. Эта теорема согласуется со сказанным выше, но не исключает существования для частиц с целым или полуцелым спином представлений со смешанной симметрией. Действительно, высказывались гипотезы (гл. 12, § 3), что все еще не обнаруженные кварки принадлежат представлениям со смешанной симметрией (случай так называемой парастатистики).

В заключение заметим, что если «нумерация» частиц не является физически наблюдаемой, то можно построить квантовую механику и не вводя ее. На практике это делается так называемым методом «чисел заполнения» или «вторичного квантования» (т. 2, гл. 16, § 3, п. А). Но во многих задачах подобную нумерацию вводить удобно (как

это мы уже сделали) лишь для того, чтобы определить симметричность или антисимметричность волновой функции, зная при этом, что подобная нумерация не имеет физического смысла.

§ 10. КОМПЛЕКСНОЕ СОПРЯЖЕНИЕ И ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ

Если $\psi(\mathbf{r}, t)$ есть зависящее от времени решение уравнения Шредингера (5.2) с действительным гамильтонианом, не зависящим от времени, то из этого уравнения прямо следует, что решением является и функция $\varphi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, -t)$. Другими словами, если функция $\psi(\mathbf{r}, t)$ описывает возможное состояние системы во времени, то его описывает и функция $\varphi(\mathbf{r}, t)$. Физическую взаимосвязь между функциями $\psi(\mathbf{r}, t)$ и $\varphi(\mathbf{r}, t)$ можно выяснить, сравнивая средние значения операторов наподобие $\mathbf{r}$ и $\mathbf{p}$ в двух состояниях. Учитывая определение (5.6) скалярного произведения, имеем

$$\begin{aligned}\langle \varphi(\mathbf{r}, t) | \mathbf{x} | \varphi(\mathbf{r}, t) \rangle &= \langle \psi(\mathbf{r}, -t) | \mathbf{x} | \psi(\mathbf{r}, -t) \rangle, \\ \langle \varphi(\mathbf{r}, t) | \mathbf{p}_x | \varphi(\mathbf{r}, t) \rangle &= - \langle \psi(\mathbf{r}, -t) | \mathbf{p}_x | \psi(\mathbf{r}, -t) \rangle.\end{aligned}$$

Но, согласно классической механике, при замене $x(t)$ на $x(-t)$ и $p_x(t)$ на $-p_x(-t)$ мы получим обращенную траекторию движения всех частиц. Например, частица, подброшенная вверх при $t=0$ и достигающая наивысшей точки A в момент $t=1$, должна быть заменена частицей, начинающей падать из точки A в момент $t=-1$ и достигающей земли при $t=0$. Поэтому мы рассматриваем переход от $\psi(\mathbf{r}, t)$ к $\varphi(\mathbf{r}, t)$ как обращение времени и вводим оператор $\hat{U}$, определяемый как $\varphi(\mathbf{r}, t) = \hat{U}\psi(\mathbf{r}, t) = \psi^*(\mathbf{r}, -t)$. В т. 2, гл. 15, § 7, п. Г будет введен более общий оператор, обращающий также и направление спина.

В случае стационарного состояния (5.3) операция обращения не изменяет множитель $\exp(-iEt/\hbar)$, так что состояния ψ и ψ^* имеют одинаковую энергию; этот же результат следует и из уравнения на собственные значения [формула (5.4)]. Следовательно, если ψ — комплексная функция, то функции ψ и ψ^* независимы и имеет место двукратное вырождение. Здесь мы имеем еще один пример вырождения вследствие симметрии гамильтониана, в данном случае симметрии в отношении обращения времени.

Поскольку последовательное применение двух операций обращения времени не изменяет физической ситуации, мы имеем дело с группой, изоморфной группе S_2 , и на этом основании могли бы ожидать следствий, аналогичных рассмотренным в § 6 для группы S_2 ; но это неверно. Дело в том, что оператор $\hat{U}$, который осуществляет обращение времени, не является ни линейным, ни унитарным. Поэтому здесь мы не вправе пользоваться теорией представлений, изложенной в гл. 4. Этот вопрос мы отложим до второго тома (гл. 15, § 7, п. Г), где будет показано, что «четным» относительно обращения времени может быть сделан оператор, но не волновая функция. Приводит или нет к увеличению вырожденности включение операции обращения времени в данную группу симметрии системы, это зависит от группы. Мы кратко остановимся еще на данном вопросе в гл. 9, § 8 и в т. 2, гл. 15, § 7, п. Г. В заключение отметим, что найти гамильтониан, не имеющий симметрии обращения времени, нетрудно. Например, введенный в § 1 оператор $\mathbf{L}$ взаимодействия с магнитным полем является нечетным, а оператор кинетической энергии — четным.

ЛИТЕРАТУРА

По нерелятивистской квантовой механике так много книг, что выбор затруднителен, но в качестве очень простого введения рекомендуем

Mathews P. T., Introduction to Quantum Mechanics, McGraw-Hill, London, 1963,

а как руководства более серьезного уровня рекомендуем учебники

Landau L. D., Lifschiz E. M., Quantum Mechanics, Pergamon, London, 1958.

[См. также: *Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М.* Квантовая механика. — М.: Наука, 1963.]

Messiah A., Quantum Mechanics, North-Holland, Amsterdam, 1961.

ЗАДАЧИ

В этой главе мы даем лишь несколько задач, поскольку все введенные в ней понятия снова встретятся в следующих главах в приложениях к различным физическим системам.

5.1. Покажите, что группа C_3 есть группа симметрии потенциала $V = \cos \theta \sin^3 \theta \cos 3\varphi$, а группа D_3 — потенциала $V = \sin^3 \theta \times \times \cos 3\varphi$. Обладают ли эти потенциалы дополнительной симметрией отражения или инверсии?

- 5.2. В соответствии с изложенным в § 3 собственные состояния гамильтониана с симметрией D_4 можно классифицировать по неприводимым представлениям этой группы, найденным в гл. 4, § 10. Имеется ли у этих состояний вырожденность и какова она? Выведите правила отбора для дипольных переходов в этой системе.
- 5.3. Покажите, что в случае частицы, движущейся в поле с потенциалом симметрии C_3 , оператор $\cos(2\pi l_z/3)$ соответствует сохраняющейся величине.
- 5.4. Рассмотрим частицу, движущуюся по окружности (так что существенна только одна координата φ), под действием потенциала $V(\varphi)$ с симметрией C_3 . Взяв собственную функцию в виде ряда Фурье $\psi(\varphi) = \sum_n a_n \exp(in\varphi)$, покажите, что эту сумму можно ограничить лишь целыми $n = m + k$, где m фиксировано ($m = 0, 1$ или 2), а k пробегает все целые числа.
- 5.5. Функции xe^{-r^2} , ye^{-r^2} и ze^{-r^2} являются собственными функциями для частицы, движущейся в поле с потенциалом сферически-симметричного гармонического осциллятора. Эти три состояния очевидно вырождены. Как будет сниматься это трехкратное вырождение при включении возмущающего потенциала симметрии D_3 ? (Найдите характер трехмерного представления группы D_3 и приведите его.)

Детально следствия сферической симметрии будут разобраны в гл. 7 и 8, а конечные точечные группы симметрии рассматриваются в гл. 9.

МОЛЕКУЛЯРНЫЕ КОЛЕБАНИЯ

В данной главе мы приступаем к применению теории симметрии при исследовании физических систем. Речь пойдет о колебаниях атомов, составляющих молекулу, относительно их равновесных положений. При этом атомы считаются точечными частицами, а функция потенциальной энергии, определяющая их движение, — квадратичной относительно смещений из положений равновесия. Равновесная конфигурация атомов обычно имеет симметрию группы вращений и отражений, приводящих к взаимному обмену идентичных атомов, и потенциальная энергия, как и кинетическая, является инвариантом группы симметрии. Хотя размеры молекул достаточно малы, так что

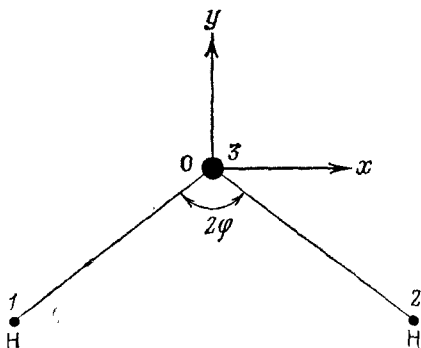


Рис. 6.1.

для описания этих систем необходима квантовая механика, удобнее сначала получить классическое решение, рассматривая нормальные моды колебаний, а затем выполнить квантование гамильтониана, который разлагается очень просто, если задача рассматривается в нормальных

координатах. Для классификации нормальных типов колебаний (нормальных мод) по неприводимым представлениям групп симметрии используется теория представлений, изложенная в гл. 4. Квантовомеханическое решение — отличный пример применения общей теории симметрии в

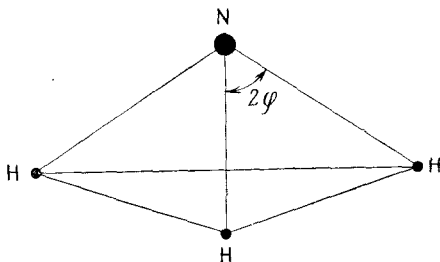


Рис. 6.2.

квантовых системах, причем получаемыми правилами отбора определяется вид инфракрасных спектров поглощения и спектров комбинационного рассеяния. Для конкретности мы будем рассматривать молекулы H_2O и NH_3 , равновесные конфигурации которых представлены на рис. 6.1 и 6.2.

§ 1. ГАРМОНИЧЕСКОЕ ПРИБЛИЖЕНИЕ

Мы будем рассматривать N атомов молекулы как точечные частицы, движущиеся в поле с потенциалом, который имеет минимум, когда они находятся в своих равновесных положениях. Когда атомы смещаются из своих равновесных положений, потенциальная энергия увеличивается, и при малых смещениях ее можно представить в виде разложения в ряд по степеням смещений отдельных атомов. Для определения смещения отдельного атома требуется задать три его компоненты в трех взаимно перпендикулярных направлениях x , y и z ; следовательно, для всей молекулы нужно задать $3N$ компонент. Обозначим их через $q_1, q_2, q_3, q_4, \dots, q_{3N}$, где q_1, q_2 и q_3 есть x -, y - и z -компоненты смещения первого атома, q_4, q_5 и q_6 — второго атома и т. д. При разложении потенциальной энергии в ряд Тейлора по q_i линейные члены должны исчезнуть, так как смещения q_i измеряются от равновесных позиций,

и первый ненулевой член имеет вид

$$V = V_0 + \sum_{i,j} \frac{1}{2} B_{ij} q_i q_j + \dots, \quad (6.1)$$

где $B_{ij} = (\partial^2 V / \partial q_i \partial q_j)$, а V_0 — потенциал в отсутствие смещений (его можно принять равным нулю). Гармоническое приближение для описания колебаний молекулы состоит в пренебрежении в разложении V членами более высокого порядка, чем квадратичные, и потому применимо лишь в случае малых смещений.

Таким образом, гамильтониан молекулы в гармоническом приближении можно записать в виде

$$H = \sum_{i=1}^{3N} \frac{1}{2} M_i \dot{q}_i^2 + \sum_{i,j=1}^{3N} \frac{1}{2} B_{ij} q_i q_j, \quad (6.2)$$

где M_i — масса частицы, связанная с компонентой смещения q_i . Член, соответствующий кинетической энергии, имеет здесь простую форму суммы квадратов скоростей $\dot{q}_i$, тогда как в выражение для потенциальной энергии входят перекрестные члены $q_i q_j$. Решение задачи значительно упрощается как в классической, так и в квантовой механике, если мы введем новые координаты Q_k путем преобразования

$$q_i = \sum_k A_{ik} Q_k,$$

которое выбирается так, чтобы в выражениях для T и V исчезли перекрестные члены и они приобрели простой вид

$$T = \frac{1}{2} \sum_k \dot{Q}_k^2, \quad V = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k^2 Q_k^2. \quad (6.3)$$

Это преобразование обычно выполняется в два приема. Сначала вводят взвешенные координаты $\alpha_i = (M_i)^{1/2} q_i$, так, что выражение для кинетической энергии приобретает простой вид $T = 1/2 \sum_i \dot{\alpha}_i^2$. Тогда потенциальную энергию можно записать в виде

$$V = \frac{1}{2} \sum_i D_{ij} \alpha_i \alpha_j, \quad (6.4)$$

$$D_{ij} = \frac{B_{ij}}{(M_i M_j)^{1/2}} = \frac{\partial^2 V}{\partial \alpha_i \partial \alpha_j}.$$

Потенциальной энергии можно придать требуемую диагональную форму, найдя собственные векторы $3N \times 3N$ -матрицы D_{ij} . Обозначим ее собственные значения через ω_k^2 ($k=1, 2, \dots, 3N$), а соответствующие собственные векторы через a_{jk} ($j=1, 2, \dots, 3N$), так что

$$\sum_j D_{ij} a_{jk} = \omega_k^2 a_{ik}. \quad (6.5)$$

Поскольку матрица D_{ij} симметрична, ее собственные векторы взаимно ортогональны (гл. 3, § 6) и мы вправе нормировать их в соответствии с равенством

$$\sum_i a_{ik} a_{il} = \delta_{kl}. \quad (6.6)$$

Теперь введем новые координаты Q_k путем преобразования

$$q_i M_i^{1/2} = \alpha_i = \sum_k a_{ik} Q_k, \quad (6.7)$$

из которого в силу равенств (6.5) и (6.6) следует, что

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} D_{ij} \alpha_i \alpha_j = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} D_{ij} a_{ik} a_{jl} Q_k Q_l = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,k,l} \omega_l^2 a_{ik} a_{il} Q_k Q_l = \frac{1}{2} \sum_k \omega_k^2 Q_k^2 \end{aligned}$$

и

$$T = \frac{1}{2} \sum_i \dot{\alpha}_i^2 = \frac{1}{2} \sum_{i,k,l} a_{ik} a_{il} \dot{Q}_k \dot{Q}_l = \frac{1}{2} \sum_k \dot{Q}_k^2.$$

Таким образом, в результате преобразования

$$A_{ik} = a_{ik} / (M_i)^{1/2} \quad (6.8)$$

мы получаем простые выражения (6.3).

§ 2. КЛАССИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Теперь нетрудно решить классические уравнения движения в форме уравнений Лагранжа (т. 2, гл. 16, § 1, п. А)

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}_k} \right) = \frac{\partial L}{\partial Q_k}, \quad (6.9)$$

где $L = T - V$.

Взяв для T и V выражения (6.3), из уравнения (6.9) получаем $\dot{Q}_k = -\omega_k^2 Q_k$. Это означает, что новые координаты

наты Q_k являются независимыми и каждой из них соответствуют колебания гармонического осциллятора вида

$$Q_k = c_k \cos(\omega_k t + \epsilon_k). \quad (6.10)$$

Координаты Q_k называются нормальными координатами системы. Исходные координаты даются формулой

$$q_i = \sum_k A_{ik} c_k \cos(\omega_k t + \epsilon_k), \quad (6.11)$$

где $6N$ констант c_k и ϵ_k даются начальными условиями.

Нормальной модой называют такие колебания, при которых только одна нормальная координата Q_p отлична от нуля. Ее можно получить, положив равным нулю все значения c_k , кроме одного, скажем с $k=p$. Для этой моды уравнение (6.11) имеет вид

$$q_i (p\text{-я мода}) = A_{ip} c_p \cos(\omega_p t + \epsilon_p), \quad (6.12)$$

т. е. все смещения q_i изменяются с одинаковой частотой ω_p ; их отношения определяются величинами A_{ip} , которые, если не считать массовых множителей M_i , есть компоненты собственного вектора матрицы D_{ij} , соответствующие собственному значению ω_p^2 . В общем случае колебательные смещения (6.11) являются суперпозицией всех нормальных мод, каждой со своей собственной частотой.

§ 3. КВАНТОМЕХАНИЧЕСКОЕ РЕШЕНИЕ

Квантовомеханическое решение тоже просто получить, поскольку гамильтониан молекулы теперь имеет вид

$$H = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{k=1}^{3N} \frac{\partial^2}{\partial Q_k^2} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N} \omega_k^2 Q_k^2 = \sum_{k=1}^{3N} H_k, \quad (6.13)$$

где

$$H_k = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial Q_k^2} + \frac{1}{2} \omega_k^2 Q_k^2$$

есть гамильтониан простого одномерного гармонического осциллятора. Квантование гамильтониана осуществляется обычным образом — заменой $\dot{Q}_k^2$ на $-\hbar^2 \partial^2 / \partial Q_k^2$. [Строго говоря, эту операцию следовало бы доказать первоначальным квантованием в исходных декартовых координатах q_i (6.2), а затем переходом к новым координатам Q_k .] Если $\psi_{n_k}(Q_k)$ — собственная функция гамильтониана H_k с

энергией ε_{n_k} , то собственные функции Ψ гамильтониана H суть произведения функций ψ_{n_k} :

$$\Psi(n_1, n_2, \dots, n_{3N}) = \prod_k \psi_{n_k}(Q_k). \quad (6.14)$$

Это нетрудно показать, ибо

$$\begin{aligned} H\Psi &= \sum_k H_k \prod_{k'} \psi_{n_{k'}}(Q_{k'}) = \\ &= \sum_k \varepsilon_{n_k} \prod_{k'} \psi_{n_{k'}}(Q_{k'}) = \\ &= \sum_k \varepsilon_{n_k} \Psi, \end{aligned}$$

так что полная энергия молекулы в состоянии Ψ равна

$$E(n_1, n_2, \dots, n_{3N}) = \sum_k \varepsilon_{n_k}.$$

Решения уравнения Шредингера для обычного одномерного гармонического осциллятора можно найти в любом учебнике по квантовой механике; они имеют вид

$$\begin{aligned} \psi_{n_k} &= A H_{n_k}(\mu_k Q_k) \exp\left(-\frac{1}{2} \mu_k^2 Q_k^2\right), \\ \varepsilon_{n_k} &= \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_k, \end{aligned} \quad (6.15)$$

где n_k — нуль или положительное целое число, H_{n_k} — полином Эрмита, $\mu_k = (\omega_k/\hbar)^{1/2}$ и A — нормировочный множитель. Полная энергия равна

$$E = \sum_k \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_k. \quad (6.16)$$

Этот результат мы можем также рассматривать как «квантование» классического случая, когда нормальной моде с частотой ω_k сообщается n_k квантов возбуждения, так что ее энергия равна $(n_k + 1/2)\hbar\omega_k$.

§ 4. РОЛЬ СИММЕТРИИ В МОЛЕКУЛЯРНЫХ КОЛЕБАНИЯХ

В гл. 5, § 3 было показано, что собственные функции симметричного гамильтониана можно классифицировать по неприводимым представлениям группы симметрии га-

милтониана и что может иметь место вырождение с кратностью, равной размерности этих представлений. Для молекулы, обладающей симметрией, кинетическая и потенциальная энергии не изменяются при операциях симметрии, и, следовательно, к ним применимы эти общие результаты. Более того, мы покажем, что нормальные координаты Q_k также можно классифицировать по неприводимым представлениям группы симметрии и что для представления $\Gamma^{(\alpha)}$ размерности s_α будет существовать набор линейно-независимых нормальных координат с одинаковой частотой колебаний. Доказательство этого почти аналогично приведенному в гл. 5, § 3, но нужно иметь в виду, что данный результат для колебаний справедлив как в классической, так и в квантовой механике. Это объясняется тем, что даже в классической механике задача о колебаниях сводится к уравнениям на собственные значения (6.5).

В этом и двух следующих параграфах мы остановимся на свойствах нормальных мод. В § 6 и 7 будут рассмотрены вид волновых функций, энергетический спектр и правила отбора для электромагнитных переходов.

Чтобы вывести свойства нормальных мод, представим общее смещение $\mathbf{q}$ в виде вектора в $3N$ -мерном пространстве со взвешенными координатами $\alpha_i = q_i M_i^{1/2}$, введенными в § 1. Базисный вектор $\mathbf{e}_j$ представляет собой смещение, при котором все координаты, кроме α_j , равны нулю, а $\alpha_j = 1$, т. е. $q_j = M_j^{-1/2}$. Таким образом,

$$\mathbf{q} = \sum_{i=1}^{3N} \alpha_i \mathbf{e}_i. \quad (6.17)$$

Скалярное произведение двух смещений $\mathbf{q}$ и $\mathbf{q}'$ удобно определить в виде

$$(\mathbf{q}, \mathbf{q}') = \sum_{i=1}^{3N} \alpha_i \alpha'_i, \quad (6.18)$$

так что, в частности, $(\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \delta_{ij}$. Оператор потенциальной энергии $\mathbf{D}$ в этом пространстве можно определить равенством

$$\mathbf{D} \mathbf{e}_j = \sum_i D_{ij} \mathbf{e}_i, \quad (6.19)$$

где D_{ij} — коэффициенты, даваемые выражением (6.4).

Тогда потенциальная энергия при смещении $\mathbf{q}$ равна

$$\begin{aligned} V(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2} (\mathbf{q}, \mathbf{D}\mathbf{q}) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \alpha_i \alpha_j (\mathbf{e}_i, \mathbf{D}\mathbf{e}_j) = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{i,j} a_i \alpha_j D_{ij}, \end{aligned} \quad (6.20)$$

что совпадает с формулой (6.4).

Координаты q_i нормальной моды p , как было показано [формула (6.12)], пропорциональны коэффициентам A_{ip} и, стало быть, если не рассматривать временного множителя, с учетом формулы (6.8) для смещения при нормальных колебаниях представляются вектором с $\alpha_i = A_{ip} M_i^{1/2}$:

$$\mathbf{u}_p = \sum_i A_{ip} M_i^{1/2} \mathbf{e}_i = \sum_i a_{ip} \mathbf{e}_i. \quad (6.21)$$

Следовательно, в этом приближении нормальные смещения ортогональны, так как с учетом равенства (6.6) получаем

$$(\mathbf{u}_p, \mathbf{u}_{p'}) = \sum_{i,j} a_{ip} a_{jp'} (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_j) = \sum_i a_{ip} a_{ip'} = \delta_{pp'}.$$

Нормальные координаты Q_k в данном базисе являются координатами смещения общего вида, так как из равенств (6.17) и (6.7) следует, что $\mathbf{q} = \sum_k Q_k \mathbf{u}_k$. Наиболее важное свойство нормальных смещений $\mathbf{u}_p$ заключается в том, что они являются собственными векторами оператора $\mathbf{D}$, поскольку в силу формулы (6.5) имеем

$$\mathbf{D}\mathbf{u}_p = \sum_{i,j} a_{ip} D_{ji} \mathbf{e}_j = \sum_j \omega_p^2 a_{jp} \mathbf{e}_j = \omega_p^2 \mathbf{u}_p. \quad (6.22)$$

Операция симметрии G_a , действуя на молекулу, преобразует смещение $\mathbf{q}$ в новое смещение $\mathbf{q}'$. В частности, каждый базисный вектор $\mathbf{e}_i$ переводится в новый вектор $\mathbf{e}'_i$, и мы определим преобразования $T(G_a)$, индуцированные в $3N$ -мерном пространстве операций симметрии G_a , в соответствии с равенством $\mathbf{q}' = T(G_a)\mathbf{q}$, где

$$\mathbf{e}'_i = T(G_a) \mathbf{e}_i = \sum_j T_{ji}(G_a) \mathbf{e}_j, \quad (6.23)$$

а G_a — элемент группы симметрии $\mathcal{G}$. Скалярное произведение $(\mathbf{q}, \mathbf{q}) = \sum_i M_i q_i^2$ вектора $\mathbf{q}$ самого на себя есть взве-

шенная сумма квадратов длин векторов смещения всех атомов и, следовательно, не изменяется при действии операций симметрии. Таким образом, $(\mathbf{q}', \mathbf{q}') = (\mathbf{q}, \mathbf{q})$, так что преобразование $T(G_a)$ является унитарным и действительным, а потому оно ортогонально. Поскольку же потенциальная энергия при действии операций симметрии не изменяется, оператор D инвариантен относительно преобразований $T(G_a)$, т. е. $D = TDT^{-1}$.

Теперь мы можем точно следовать рекомендациям, приведенным в гл. 5, § 3, в связи с вырождением в квантовомеханическом случае, опираясь на аналогию между равенствами (5.12) и (6.22). Кратко это сводится к следующему.

1. Если $\mathbf{u}_p$ — нормальное смещение с частотой ω_p , то $\mathbf{u}'_p = T(G_a) \mathbf{u}_p$ тоже есть нормальное смещение с частотой ω_p , так как

$$D\mathbf{u}'_p = DT(G_a)\mathbf{u}_p = T(G_a)D\mathbf{u}_p = \omega_p^2 T(G_a) \mathbf{u}_p = \omega_p^2 \mathbf{u}'_p.$$

2. Следовательно, набор нормальных смещений с одинаковой частотой образует базис представления группы симметрии $\mathcal{G}$.
3. Таким образом, в отсутствие случайного вырождения каждой частоте можно приписать индекс некоторого неприводимого представления $T^{(\alpha)}$ группы $\mathcal{G}$, и она будет состоять из s_α линейно-независимых нормальных мод.

Между рассмотренной задачей классификации нормальных колебаний и задачей классификации собственных функций квантовомеханического гамильтониана имеется одно очень существенное различие. Общее число нормальных мод конечно и равно $3N$, тогда как число собственных функций в общем случае бесконечно. Вычисляя характер $3N$ -мерного представления всех смещений с использованием любого подходящего базиса, мы можем пользоваться методами гл. 4, § 11 для его приведения и, следовательно, классифицировать все нормальные моды молекулы.

§ 5. КЛАССИФИКАЦИЯ НОРМАЛЬНЫХ МОД

Согласно формуле (6.23), $3N$ -мерное пространство всех возможных смещений образует представление группы симметрии $\mathcal{G}$. Обозначим это представление через $T^{(3N)}$.

Мы уже показали, что нормальные смещения с одинаковой нормальной частотой образуют базис неприводимого представления $\Gamma^{(\alpha)}$ группы $\mathcal{G}$. Но так как $3N$ -мерное пространство всех смещений распадается на сумму подпространств, соответствующих различным нормальным частотам, классификацию нормальных частот можно найти, исследуя разложение

$$\Gamma^{(3N)} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \Gamma^{(\alpha)} \quad (6.24)$$

представления $\Gamma^{(3N)}$ на его неприводимые компоненты $\Gamma^{(\alpha)}$ (гл. 4, § 11). Если при некотором значении индекса α коэффициент $m_{\alpha} > 1$, то будет наблюдаться m_{α} различных частот с одинаковым индексом α , каждая из которых представляет набор s_{α} линейно-независимых нормальных координат.

Приведение по формуле (6.24) легко осуществимо, если мы сможем найти характер $\chi_p^{(3N)}$ представления $\Gamma^{(3N)}$ для каждого из классов $\mathcal{C}_p$ группы $\mathcal{G}$. Сколько раз каждое неприводимое представление будет появляться при приведении, можно определить по формуле (4.28):

$$m_{\alpha} = \frac{1}{g} \sum_p c_p \chi_p^{(3N)} \chi_p^{(\alpha)*}. \quad (6.25)$$

Чтобы найти характер $\chi_p^{(3N)}$, напомним равенство (6.23) в немного более развернутой форме, обозначив базисные векторы $\mathbf{e}_i$ символами $\mathbf{e}_{ti}$, чтобы можно было различать отдельные атомы $t=1, 2, \dots, N$ и их декартовы координаты $i=x, y$ и z :

$$\Gamma(G_a) \mathbf{e}_{ti} = \sum_{t', i'} T_{t', i', ti}^{(3N)}(G_a) \mathbf{e}_{t' i'}. \quad (6.26)$$

В этом случае для любого элемента G_a в классе $\mathcal{C}_p$ характер равен

$$\chi_p^{(3N)} = \chi^{(3N)}(G_a) = \sum_{t, i} T_{ti, ti}^{(3N)}(G_a). \quad (6.27)$$

Однако вклады в $\chi_p^{(3N)}$ дают лишь те атомы t , которые остаются неподвижными при действии операции G_a , так как если G_a переводит атом t в t' , то диагональный элемент $T_{ti, ti}^{(3N)}$ в равенстве (6.26) равен нулю. Вклад в характер $\chi_p^{(3N)}$ отдельного атома t , который остается неподвижным

при действии G_a , равен $\sum_i T_{ii}^{(3N)}(G_a)$, но это есть просто характер вращения G_a произвольного трехмерного вектора относительно фиксированной точки (о его векторном представлении см. гл. 5, § 4). Если G_a есть собственное вращение $R(\theta)$ на угол θ , то его характер равен просто $2 \cos \theta + 1$ (гл. 5, § 4), а если $N_{R(\theta)}$ есть число атомов, остающихся неподвижными при действии $R(\theta)$, то общее выражение для характера приобретает вид

$$\chi^{(3N)}(R(\theta)) = N_{R(\theta)} (2 \cos \theta + 1).$$

В случае несобственного вращения $S(\theta)$, которое можно представить как собственное вращение $R(\theta)$ с последующим отражением σ_h в плоскости, перпендикулярной оси $R(\theta)$, характер определяется как

$$\chi^{(3N)}(S(\theta)) = N_{S(\theta)} (2 \cos \theta - 1),$$

где $N_{S(\theta)}$ — число атомов, остающихся неподвижными при действии оператора $S(\theta)$. В самом деле, рассмотрим несобственные вращения вокруг оси z . Легко показать, что в базисе декартовых координат матрица несобственно-го вращения имеет вид

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

где -1 появляется вследствие отражения σ_h . Характер этой операции равен следу $2 \cos \theta - 1$ данной матрицы.

Найдя $\chi^{(3N)}$, мы можем теперь по формуле (6.25) вычислить коэффициенты m_α в формуле (6.24). Но сначала для удобства вычтем из $\chi^{(3N)}$ вклад шести нормальных мод с нулевой частотой, которые не являются колебаниями и соответствуют трансляции и повороту молекулы в целом, без относительного движения атомов. При таких «колебаниях» молекула перемещается как жесткое тело и в качестве трансляционных составляющих можно выбрать смещения x , y и z вдоль осей декартовых координат. При вращении они, очевидно, преобразуются в соответствии с векторным представлением и имеют характеры

$$\chi_{\text{трансл}}(R(\theta)) = (2 \cos \theta + 1),$$

$$\chi_{\text{трансл}}(S(\theta)) = (2 \cos \theta - 1).$$

Три вращательные моды также преобразуются при поворотах подобно вектору, но они являются четными относительно инверсии, т. е. представляют собой компоненты псевдовектора (гл. 5, § 4). В доказательство этого утверждения отметим (гл. 7, § 4, п. А), что смещение $d(\mathbf{r})$ произвольной точки $\mathbf{r}$, обусловленное поворотом на малый угол, задаваемым вектором $\mathbf{a}$, равно $\mathbf{a} \times \mathbf{r}$. Если $\tilde{d}'$ есть смещение в результате поворота $\mathbf{R}$ вектора $\tilde{d}$ на конечный угол, то из геометрических соображений ясно, что $\tilde{d}'(\mathbf{r}) = \mathbf{R}(\mathbf{a} \times \times \mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}) = \mathbf{R}\mathbf{a} \times \mathbf{r}$ и, следовательно, смещение преобразуется подобно вектору $\mathbf{a}$. Аналогичным образом, если $\tilde{d}$ есть смещение, полученное из $\mathbf{d}$ инверсией $\mathbf{l}$, то $\tilde{d} = \mathbf{l}(\mathbf{a} \times \times \mathbf{l}\mathbf{r}) = \mathbf{a} \times \mathbf{r}$, т. е. $\mathbf{d}$ — действительно псевдовектор. Таким образом, для собственных вращений характер трех вращательных мод тоже является характером векторного представления, тогда как в случае несобственного элемента меняется знак:

$$\chi_{\text{вращ}}(\mathbf{R}(\theta)) = (2 \cos \theta + 1), \quad \chi_{\text{вращ}}(\mathbf{S}(\theta)) = -(2 \cos \theta - 1).$$

Вычитая эти величины из $\chi^{(3N)}$, получаем характер для оставшихся мод с ненулевой частотой $\chi_{\text{кол}} = \chi^{(3N)} - \chi_{\text{трансл}} - - \chi_{\text{вращ}}$:

$$\begin{aligned} \chi_{\text{кол}}(\mathbf{R}(\theta)) &= (N_{\mathbf{R}(\theta)} - 2)(2 \cos \theta + 1), \\ \chi_{\text{кол}}(\mathbf{S}(\theta)) &= N_{\mathbf{S}(\theta)}(2 \cos \theta - 1). \end{aligned} \quad (6.28)$$

Этот результат мы используем для классификации нормальных колебаний молекул воды и аммиака.

А. Молекула воды

Молекула воды H_2O имеет геометрию, показанную на рис. 6.1, и группу симметрии C_{2v} (подробнее см. гл. 9). Величина «валентного угла» 2ϕ не существенна в вопросе симметрии, но известно, что он составляет около 105° . Группа C_{2v} имеет четыре элемента симметрии: единичный $\mathbf{E}$, двойную ось вращения $\mathbf{C}_2$, лежащую в плоскости молекулы и проходящую через атом кислорода, отражение в σ_v плоскости молекулы, σ_v и отражение σ_v' в плоскости, перпендикулярной плоскости молекулы и проходящей по

биссектрисе валентного угла. Каждый элемент сам по себе образует класс. По формуле (6.28) можно вычислить характеры колебаний:

$$\begin{array}{ll} \text{E (собств., } \theta=0, N_E=3) & \chi_{\text{кол}}(\text{E})=3, \\ \text{C}_2 \text{ (собств., } \theta=180^\circ, N_{C_2}=1) & \chi_{\text{кол}}(\text{C}_2)=1, \\ \sigma_v \text{ (несобств., } \theta=0, N_{\sigma_v}=3) & \chi_{\text{кол}}(\sigma_v)=3, \\ \sigma'_v \text{ (несобств., } \theta=0, N_{\sigma'_v}=1) & \chi_{\text{кол}}(\sigma'_v)=1. \end{array}$$

Таблица 6.1

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ'_v
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1
$\chi_{\text{кол}}$	3	1	3	$1 = 2A_1 \oplus B_1$

Эти характеры собраны в табл. 6.1; разложение в этом случае очевидное (обозначение неприводимых представлений обычное; см. приложение 1). Мы заключаем, что имеются две невырожденные нормальные моды, преобразующиеся по неприводимому представлению A_1 , и одна невырожденная, преобразующаяся по представлению B_1 .

Б. Молекула аммиака

Молекула аммиака NH_3 неплоская: три атома водорода образуют равностороннее основание тетраэдра (рис. 6.2). Собственная группа симметрии молекулы — группа C_{3v} (гл. 9, § 3, п. Б). Как и в предыдущем случае, величина валентного угла 2φ , равная приблизительно 108° , в вопросах симметрии не важна. Плоскость трех атомов Н удобно считать «горизонтальной». Шесть элементов группы распадаются на три класса: единичный **E**, два поворота вокруг тройной «вертикальной» оси, проходящей через атом N, и отражения в трех вертикальных плоскостях, содержащих атом N и один из атомов Н. Согласно формуле

(6.28), характеры колебаний таковы:

$$\begin{aligned} E (\text{собств.}, \theta=0, N_E=4) & \quad \chi_{\text{гол}}(E)=6, \\ C_3 (\text{собств.}, \theta=2\pi/3, N_{C_3}=1) & \quad \chi_{\text{гол}}(C_3)=0, \\ \sigma_v (\text{несобств.}, \theta=0, N_{\sigma_v}=2) & \quad \chi_{\text{гол}}(\sigma_v)=2. \end{aligned}$$

Таблица 6.2

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	1	-1
E	2	-1	0
$\chi_{\text{гол}}$	6	0	$2=2A_1 \oplus 2E$

Далее из таблицы характеров (табл. 6.2) или по формуле (6.25) можно найти, что имеются две моды A_1 и две двукратно вырожденные моды E — всего четыре разные частоты для шести нормальных колебаний. (Обозначение $2C_3$ показывает, что в классе, содержащем C_3 , имеются два элемента. Обозначение E общепринято для двумерных представлений; см. приложение 1. Курсивное E не следует путать с прямым E , символом единичного элемента.)

§ 6. КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ И ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ

Классификация нормальных колебаний имеет прямое отношение к классической задаче о колебаниях, так как она дает нам возможность найти вид колебаний, руководствуясь только соображениями симметрии и не зная точного вида потенциала. Подробно мы рассмотрим этот вопрос в § 8. Здесь же и в § 7 мы остановимся на роли, которую классификация нормальных мод колебаний молекулы по симметрии играет при квантовомеханическом подходе.

Основное колебательное состояние обозначается набором квантовых чисел n_h , соответствующих числам квантов возбуждения для каждой моды. Как показано в § 3,

его можно записать в виде

$$\begin{aligned}\Psi(n_1, n_2, \dots, n_{3N-6}) &= B \prod_k H_{n_k}(\mu_k Q_k) \exp\left(-\frac{1}{2} \mu_k^2 Q_k^2\right) = \\ &= B \prod_k H_{n_k}(\mu_k Q_k) \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{k'} \mu_{k'}^2 Q_{k'}^2\right),\end{aligned}\quad (6.29)$$

где B — нормировочный множитель.

Поскольку нас интересует лишь собственная структура молекулы, мы исключили из волновой функции (6.29) шесть мод с нулевой частотой (соответствующих трансляциям и вращениям). Экспонента в выражении (6.29) инвариантна относительно преобразований симметрии группы $\mathcal{G}$, что можно показать, введя более подробное обозначение

$$\sum_k \mu_k^2 Q_k^2 = \hbar^{-1} \sum_k \omega_k Q_k^2 = \hbar^{-1} \sum_{\alpha} \sum_{p=1}^{m_{\alpha}} \omega_{\alpha p} \sum_{i=1}^{s_{\alpha}} Q_{\alpha p i}^2, \quad (6.30)$$

где α — индекс неприводимого представления группы $\mathcal{G}$, i — индекс строки этого представления и p — индекс для различения разных частот с одинаковым индексом α . В таком обозначении отражается то обстоятельство, что для каждой частоты $\omega_{\alpha p}$ имеется набор s_{α} координат, обозначаемый индексом i . Теперь покажем, что сумма $\sum_{i=1}^{s_{\alpha}} Q_{\alpha p i}^2$

инвариантна при всех α и p , и, следовательно, экспонента в формуле (6.29) тоже инвариант. Рассмотрим преобразование координаты $Q_{\alpha p i}$ под действием операции симметрии T :

$$Q'_{\alpha p i} = T Q_{\alpha p i} = \sum_j T_{ij}^{(\alpha)} Q_{\alpha p j}. \quad (6.31)$$

С учетом формулы (3.20) получаем

$$\sum_i (Q'_{\alpha p i})^2 = \sum_i \sum_{jk} T_{ij}^{(\alpha)} T_{ik}^{(\alpha)} Q_{\alpha p j} Q_{\alpha p k} = \sum_j Q_{\alpha p j}^2, \quad (6.32)$$

поскольку преобразование T является ортогональным (унитарным и действительным). Таким образом, экспонента в выражении для волновой функции (6.29) является инвариантом и симметрия функции Ψ определяется симметрией входящих в произведение полиномов Эрмита.

В основном состоянии молекулы все $n_k=0$ и, поскольку $H_0(\mu_k Q_k)$ является константой, функция $\Psi(0, 0, \dots, 0)$ есть инвариант. Таким образом, для всех молекул основное состояние преобразуется по единичному представлению A_1 .

Низшие возбужденные состояния — это состояния, в которых возбуждена только одна мода и одним-единственным квантом. В обозначениях (6.30) это соответствует значениям $n_{\alpha_1 p_1} = 1$ и $n_{\alpha p} = 0$ при $\alpha p \neq \alpha_1 p_1$. Такие состояния называют фундаментальными. Симметрия такого состояния есть симметрия $H_1(\mu_{\alpha_1 p_1} Q_{\alpha_1 p_1 i})$, и, поскольку $H_1(x) \sim x$, она соответствует симметрии набора нормальных координат $Q_{\alpha_1 p_1 i}$ с фиксированными $\alpha_1 p_1$ и $i=1, 2, \dots, s_{\alpha_1}$, преобразующихся по $\Gamma^{(\alpha_1)}$. Поэтому всего будет $3N-6$ фундаментальных состояний, которые обозначаются в точности так же, как и нормальные моды, рассмотренные в § 5. Энергии фундаментальных состояний равны $\hbar \omega_{\alpha p}$, а степень их вырождения равна s_{α_1} .

Возбужденные состояния, в которых возбуждены две и более нормальные моды с разными частотами, называются «комбинационными» уровнями, а состояния, в которых возбуждена одна мода, но более чем одним квантом, называются «обертонными» уровнями. Например, простой комбинационный уровень, для которого $n_{\alpha_1 p_1} = 1, n_{\alpha_2 p_2} = 1$, а все другие $n_{\alpha p} = 0$, будет иметь волновую функцию с симметрией $H_1(\mu_{\alpha_1 p_1} Q_{\alpha_1 p_1 i}) H_1(\mu_{\alpha_2 p_2} Q_{\alpha_2 p_2 j})$, т. е. с симметрией произведения $Q_{\alpha_1 p_1 i} Q_{\alpha_2 p_2 j}$, принадлежащего прямому произведению представлений $\Gamma^{(\alpha_1)} \otimes \Gamma^{(\alpha_2)}$. Поэтому такие простые комбинационные уровни можно обозначить произведениями представлений, которые в общем случае не являются неприводимыми (пример «случайного вырождения»). В действительности, если учитывать ангармонические члены в выражении для потенциала без нарушения симметрии, то вырождение будет сниматься и получаемый набор состояний будет обычным образом соответствовать неприводимым компонентам прямого произведения представлений. Например, в случае молекулы NH_3 , если оба дублета E однократно возбуждены, представление прямого произведения $E \otimes E$ сводится к $E \oplus A_1 \oplus A_2$ и ангармонические члены будут приводить к расщеплению четырехкратно вырожденного уровня на дублет E и два синглета A_1 и A_2 .

Структура оберточного уровня немного сложнее, так как состояния уже не преобразуются просто по представлениям прямого произведения. Так, если $Q_{\alpha p_1}$ и $Q_{\alpha p_2}$ — две вырожденные координаты дублета с энергией $\hbar\omega_{\alpha p}$, то для возбужденных состояний с энергией $2\hbar\omega_{\alpha p}$ мы можем образовать лишь три функции $H_2(\mu_{\alpha p} Q_{\alpha p_1})$, $H_1(\mu_{\alpha p} Q_{\alpha p_2}) H_1(\mu_{\alpha p} Q_{\alpha p_2})$, $H_2(\mu_{\alpha p}, Q_{\alpha p_2})$, а не четыре. Дело в том, что произведения $H_1(\mu_{\alpha p} Q_{\alpha p_1}) H_1(\mu_{\alpha p} Q_{\alpha p_2})$ и $H_1(\mu_{\alpha p} Q_{\alpha p_1}) H_1(\mu_{\alpha p} Q_{\alpha p_1})$ идентичны. Таким образом, в общем случае обертоны, определяемые двукратным возбуждением нормальной моды с симметрией $\Gamma^{(\alpha)}$, не описываются просто произведением $\Gamma^{(\alpha)} \otimes \Gamma^{(\alpha)}$ представления $\Gamma^{(\alpha)}$ самого на себя, как можно было бы ожидать по аналогии с комбинационными уровнями. Останутся только функции, симметричные относительно пары индексов, приводя к так называемому «симметризованному произведению представлений», характер которого для элемента группы G_a равен

$$\chi_{\text{симм}}^{(\alpha \times \alpha)}(G_a) = \frac{1}{2} [\chi^{(\alpha)}(G_a)]^2 + \frac{1}{2} \chi^{(\alpha)}(G_a^2). \quad (6.33)$$

Эта формула есть частный случай более общей формулы рассматриваемой в т. 2 (приложение 3, § 1), но ее можно достаточно просто вывести следующим образом. Обозначим всевозможные независимые произведения функций индексами ii или jj ($i < j$), где i и j — индексы строк оператора $\Gamma^{(\alpha)}$. Для функции типа ii вклад в характер равен просто $[T_{ii}^{(\alpha)}(G_a)]^2$, а для функции типа ij он равен $[T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) T_{jj}^{(\alpha)}(G_a) + T_{ji}^{(\alpha)}(G_a) T_{ij}^{(\alpha)}(G_a)]$, где второй из этих двух членов появляется в результате преобразования в функцию-произведение ji , идентичную функции ij . Поэтому характер симметризованного произведения равен сумме

$$\begin{aligned} \sum_i [T_{ii}^{(\alpha)}(G_a)]^2 + \sum_{i>j} (T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) T_{jj}^{(\alpha)}(G_a) + T_{ji}^{(\alpha)}(G_a) T_{ij}^{(\alpha)}(G_a)) = \\ = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) T_{jj}^{(\alpha)}(G_a) + T_{ji}^{(\alpha)}(G_a) T_{ij}^{(\alpha)}(G_a)) = \\ = \frac{1}{2} [\chi^{(\alpha)}(G_a)]^2 + \frac{1}{2} \sum_i T_{ii}^{(\alpha)}(G_a^2) = \frac{1}{2} [\chi^{(\alpha)}(G_a)]^2 + \frac{1}{2} \chi^{(\alpha)}(G_a^2). \end{aligned}$$

Так, в примере молекулы NH_3 характер симметризованного произведения $E \times E$ равен

$$\chi_{\text{сим}}^{(E \times E)} = \begin{array}{ccc} E & 2C_3 & 3\sigma_v \\ 3 & 0 & 1 \end{array} = E \oplus A_1,$$

т. е. первый обертона фундаментальной частоты E будет состоять из синглета A_1 и дублета E .

Вращение молекулы также приведет к появлению дискретных уровней энергии. Для каждого колебательного уровня имеется полоса вращательных. Однако энергетическая шкала вращательного движения приблизительно в 10 раз меньше, чем для колебательного. Поэтому обычно эти два эффекта можно разделить, хотя, строго говоря, в этом случае требуется рассмотрение колебательно-вращательного взаимодействия (см. книгу Вильсона и др. в литературе). Вращательное движение мы далее рассматривать не будем.

§ 7. ИНФРАКРАСНЫЕ СПЕКТРЫ ПОГЛОЩЕНИЯ И СПЕКТРЫ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ МОЛЕКУЛ

Квантовая система, вообще говоря, переходит, испуская излучение, из всех своих энергетических состояний в основное состояние. При обратном процессе она может поглощать падающее излучение, переходя из основного состояния в возбужденное. При подобном переходе из основного состояния с энергией E_0 в возбужденное с энергией E_1 по формуле Планка $E_1 - E_0 = \hbar\omega$ энергия поглощаемого излучения должна соответствовать разности $E_1 - E_0$, т. е. частота ω поглощаемого излучения определяется разностью энергии между уровнями системы. В молекулярной спектроскопии обычно записывают $\omega = 2\pi\nu$, где ν — скорость света, и вводят величину $\bar{\nu}$, обратную длине волны (волновое число), измеряемую в см^{-1} . Таким образом, чтобы получить энергию возбуждения в энергетических единицах, нужно умножить энергию в обратных сантиметрах на $\hbar c$.

А. Инфракрасные спектры

Обычная энергия возбуждения основного колебательного уровня молекулы составляет около 2000 см^{-1} , что соответствует излучению в инфракрасной области спектра (см. книги Герцберга). Основной механизм поглощения или испускания излучения связан с электрическим дипольным моментом, оператор которого преобразуется по векторному представлению группы $\mathcal{R}_3$ (гл. 5, § 4). Но так как основное состояние молекулы полносимметрично, из рассмотренных в гл. 5, § 4 правил отбора тотчас следует, что при поглощении инфракрасного излучения будут возбуждаться только те фундаментальные состояния, неприводимые представления которых появляются в разложении векторного представления по неприводимым представлениям группы симметрии молекулы. Как было показано в § 5, характер векторного представления равен

$$\chi^{(V)}(\mathbf{R}(\theta)) = 2 \cos \theta + 1,$$

$$\chi^{(V)}(\mathbf{S}(\theta)) = 2 \cos \theta - 1,$$

так что, например, для группы симметрии C_{2v} молекулы воды

$$\chi^{(V)} = A_1 \oplus B_1 \oplus B_2,$$

а для группы C_{2v} молекулы аммиака

$$\chi^{(V)} = A_1 \oplus E.$$

Таким образом, как в молекуле воды, так и в молекуле аммиака будут возбуждаться все фундаментальные состояния.

Б. Спектры комбинационного рассеяния

В рассмотренном выше случае инфракрасного поглощения при колебательном переходе поглощается один квант света. В спектроскопии комбинационного рассеяния образец облучают монохроматическим светом и регистрируют спектр рассеянного излучения. В спектре имеются интенсивная линия той же частоты, что и у падающего излучения, а также более слабые линии, симметрично расположенные по обе стороны от центральной. Линии с более низкой частотой называются стоксовыми;

их интенсивности выше, чем у антистоксовых линий, расположенных со стороны больших частот от центральной. Появление этих линий связано с молекулярными колебательными переходами, при которых расстояние между колебательными уровнями энергии равно удвоенной энергии фотона. Стоксовы линии соответствуют возбуждению молекулярного колебания, а антистоксовы — релаксации. Очевидно, что при низких температурах в спектре должны доминировать стоксовы линии, так как вероятность существования молекулы в возбужденном состоянии становится малой.

Квантовомеханическое описание комбинационного перехода включает взаимодействия второго порядка с электромагнитным полем; его можно рассматривать как переход сначала в некоторое виртуальное промежуточное состояние, а затем из последнего в конечное состояние. Подробнее о комбинационном рассеянии см. книгу Бирмана. В большинстве интересующих нас случаев промежуточное состояние имеет высокую энергию возбуждения, соответствующую иной, чем исходная, электронной конфигурации. При этом можно доказать, что процесс комбинационного рассеяния определяется квадратичными операторами $xу$, yz , zx , x^2 , y^2 и z^2 , вычисляемыми между двумя рассматриваемыми колебательными состояниями, в отличие от векторного оператора с компонентами x , y и z для поглощения инфракрасного излучения. Следовательно, чтобы найти правила отбора для процесса комбинационного рассеяния, нужно определить характер набора этих квадратичных операторов. Он дается симметризованным произведением векторного представления самого на себя [формула (6.33)]:

$$\chi_{\text{симм}}^{(V \times V)}(G_a) = \frac{1}{2} \chi^{(V)}(G_a^2) + \frac{1}{2} [\chi^{(V)}(G_a)]^2.$$

Далее этот характер можно использовать для разложения комбинационного оператора по его неприводимым компонентам и, следовательно, для вывода правил отбора в спектре комбинационного рассеяния. Так, для группы C_{2v} имеем

$$\chi_{\text{симм}}^{(V \times V)} \rightarrow 3A_1 \oplus A_2 \oplus B_1 \oplus B_2,$$

а для группы C_{3v}

$$\chi_{\text{симм}}^{(V \times V)} \rightarrow 2A_1 \oplus 2E.$$

Возвращаясь к примерам молекул воды и аммиака, рассмотренным в § 5, мы видим, что в обоих случаях в процессе комбинационного рассеяния будут возбуждаться все фундаментальные частоты. Вследствие простоты групп симметрии мы не находим в этих примерах запрещенных переходов. При более высокой симметрии такие запрещенные переходы появляются (задача 6.3).

Отметим, что комбинационный оператор является четным, тогда как оператор дипольного момента — нечетным. Поэтому для молекул, имеющих центр инверсии, линии, появляющиеся в инфракрасном спектре, будут отсутствовать в спектре комбинационного рассеяния, и наоборот.

§ 8. КАРТИНА СМЕЩЕНИЙ И ЧАСТОТЫ НОРМАЛЬНЫХ КОЛЕБАНИЙ

Нам удалось, исходя лишь из симметрии молекулы, установить ряд свойств энергетических уровней и внутримолекулярных переходов. Чтобы найти классические частоты ω_k и, следовательно, энергии возбуждения фундаментальных уровней $\hbar\omega_k$, разумеется, необходимо знать точный вид потенциала. В данном параграфе мы изложим метод расчета частот в том случае, когда функция потенциальной энергии известна. На практике, однако, обычно решают обратную задачу: экспериментально измерив частоты, отыскивают форму потенциала взаимодействия атомов в молекуле. Мы получим также картину смещений при нормальных колебаниях — шаг, который поможет нам наглядно представить движение атомов. Эти расчеты просто осуществить, если каждая рассматриваемая мода соответствует представлению $\Gamma^{(\alpha)}$, встречающемуся только один раз. Мы не будем рассматривать тонкости более общего случая, когда представление $\Gamma^{(\alpha)}$ появляется более одного раза.

Если в разложении (6.24) каждое из представлений $\Gamma^{(\alpha)}$ появляется лишь однажды ($m_\alpha=1$), то смещение для отдельной нормальной моды можно получить, используя проекционный оператор $P_{if}^{(\alpha)}$, даваемый формулой (4.52).

Если q — произвольное смещение, то без учета нормировки при всяком фиксированном j вектор

$$u_i^{(\alpha)} = P_{ij}^{(\alpha)} q \quad (6.34)$$

есть вектор нормального смещения, соответствующий i -й строке представления $\Gamma^{(\alpha)}$. Этот результат опять не требует знания других свойств потенциала, кроме его симметрии. Чтобы найти частоту, естественно, нужно знать потенциал; ее находят по формулам (6.22) и (6.20):

$$\omega_\alpha^2 = \frac{(u_i^{(\alpha)}, Du_i^{(\alpha)})}{(u_i^{(\alpha)}, u_i^{(\alpha)})} = \frac{2V(u_i^{(\alpha)})}{(u_i^{(\alpha)}, u_i^{(\alpha)})}. \quad (6.35)$$

Таким образом, для определения частоты достаточно вычислить потенциальную энергию при нормальных смещениях $u_i^{(\alpha)}$. Отметим, что вследствие инвариантности оператора D частота ω_α не будет зависеть от индекса строки i , в чем обнаруживается ожидаемое s_α -кратное вырождение. В действительности при вычислении частоты достаточно исследовать намного более простой проекционный оператор $P^{(\alpha)}$ [формула (4.51)], в который входят лишь характеры представлений группы, а не более сложный оператор $P_{ij}^{(\alpha)}$, включающий элементы матрицы представления.

В § 5 мы установили, что у молекулы воды, показанной на рис. 6.1, имеются две нормальные моды A_1 и одна

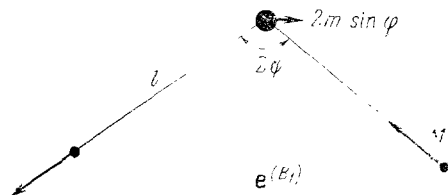


Рис. 6.3.

B_1 . Моду B_1 легко найти методом проектирования. В обозначениях § 5 проектированием на e_{1x} , e_{1y} и e_{3x} непосредственно находим, что три смещения

$$e_{3x}, e_{1x} + e_{2x} \text{ и } e_{1y} - e_{2y}$$

относятся к типу B_1 . Нормальная мода должна быть их линейной комбинацией, не содержащей трансляций и вращений; ею является смещение, показанное на рис. 6.3,

а именно

$$\sin \varphi \{2m^{1/2}e_{3x} - M^{1/2}(e_{1x} + e_{2x})\} - M^{1/2} \cos \varphi (e_{1y} - e_{2y}). \quad (6.36)$$

Для двух колебаний A_1 более сложный расчет приводит к линейной комбинации смещений, показанных на рис. 6.4, — величина каждого смещения зависит от детальной формы потенциала.

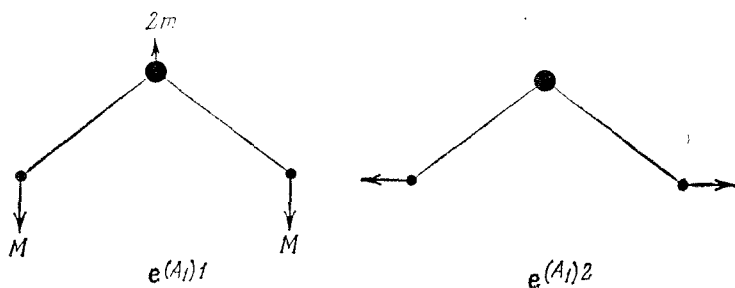


Рис. 6.4.

Другой пример расчета величин смещений можно найти в задаче 6.1 (ее решение имеется в приложении к т. 2).

ЛИТЕРАТУРА

Для дальнейшего ознакомления с теорией молекулярных колебаний рекомендуем книгу

Wilson E. B., Decius J. C., Cross P. C., *Molecular Vibrations. The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*, McGraw-Hill, New York, 1955. [Имеется перевод: Вильсон Е., Дешиус Дж., Кросс П. Теория колебательных спектров молекул. — М.: ИЛ, 1960.]

3. Более подробные вопросы спектроскопии рассматриваются в работах Herzberg G., *Infra-Red and Raman Spectra of Polyatomic Molecules*, Van Nostrand, Princeton, 1945. [Имеется перевод: Герцберг Г. Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул. — М.: ИЛ, 1949.]

Herzberg G., *Molecular Spectra and Molecular Structure*, III, Van Nostrand, Princeton, 1966. [Имеется перевод: Герцберг Г. Электронные спектры и строение многоатомных молекул. — М.: Мир, 1969.]

Birman J. L., *Theory of Space Groups and Infra-Red and Raman Lattice Processes in Insulating Crystals*. — В кн.: *Handbuch der Physik*, XXV (2b); *Light and Matter*. — В кн.: *Handbuch der Physik*, B. XXV (1b).

ЗАДАЧИ

- 6.1. Некая гипотетическая молекула состоит из четырех одинаковых атомов, расположенных по углам плоского прямоугольника (группа симметрии D_{2h} ; гл. 9). Определите характеры ее колебательных мод и классифицируйте последние по симметрии. Существует ли здесь вырождение? Изобразите на рисунке смещения атомов при нормальной моде симметрии B_3^- (в обозначениях таблицы характеров из приложения 1).
- 6.2. Плоская молекула трехфтористого бора BF_3 , в которой атомы фтора расположены по вершинам, а атом бора — в центре равностороннего треугольника, принадлежит к группе симметрии D_{3h} (гл. 9). Классифицируйте ее нормальные моды колебаний и отметьте все случаи вырождения.
- 6.3. Какую форму имеют инфракрасный спектр и спектр комбинационного рассеяния в случае молекулы из задачи 6.1?

Другие задачи на молекулярные колебания будут даны в конце гл. 9 после более подробного рассмотрения всех возможных точечных групп.

НЕПРЕРЫВНЫЕ ГРУППЫ И ИХ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ, ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ $\mathcal{R}_2$ И $\mathcal{R}_3$

В гл. 2 мы различали конечные и бесконечные группы, причем бесконечную группу, элементы которой задаются значениями из некоторого множества непрерывных параметров, называли «непрерывной группой». В примерах гл. 2, § 2 группа C_3 — это конечная группа, а $\mathcal{R}_2$ — непрерывная группа (однопараметрическая). В гл. 4 и 5 мы не делали различия между конечными и непрерывными группами, лишь в нескольких местах в гл. 4 проводилось суммирование по всем элементам группы, не имеющее, очевидно, смысла в случае непрерывной группы. В данной главе мы подробнее рассмотрим структуру непрерывных групп и покажем, что такое суммирование можно заменить интегрированием по групповым параметрам. В частности, мы исследуем группы $\mathcal{R}_2$ и $\mathcal{R}_3$. Унитарные группы рассматриваются в следующих главах.

§ 1. ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ

Элементы непрерывной группы будем обозначать символом $G(a_1, a_2, \dots, a_r)$, где все r непрерывных действительных параметров a_q существенны в том смысле, что с помощью меньшего числа параметров элементы группы различить между собой нельзя. Число r называется размерностью группы. Каждый параметр имеет вполне определенную область значений. Поскольку рассматриваемые элементы являются элементами группы, для них справедлив закон умножения, согласно которому произведение двух элементов

$$G(a_1, a_2, \dots, a_r) G(b_1, b_2, \dots, b_r) = G(c_1, c_2, \dots, c_r) \quad (7.1)$$

есть тоже элемент группы. Значит, новые параметры c_q должны быть функциями аргументов a и b :

$$c_q = \varphi_q(a_1, a_2, \dots, a_r; b_1, b_2, \dots, b_r). \quad (7.2)$$

Параметры обычно определяются так, чтобы единичному элементу группы соответствовали нулевые значения всех параметров. Чтобы выполнялись групповые законы, r функций φ_q должны удовлетворять целому ряду условий. Мы будем считать функции φ_q дифференцируемыми функциями параметров; для физических приложений, рассматриваемых в этой книге, такая степень общности достаточна. Группы такого типа иногда называются группами Ли в честь норвежского математика Софуса Ли (1842—1899). (Классификация группы Ли приведена в т. 2, гл. 20, § 4.)

В гл. 4 при выводе соотношений ортогональности неприводимых представлений, а также при вычислении характеров нам часто приходилось проводить суммирование по всем элементам группы. В случае конечной группы это не создает затруднений, а в случае непрерывной группы не только число элементов группы становится бесконечным, но и сами элементы группы распределяются непрерывно. Значит, любая такая сумма будет не просто содержать бесконечное число членов, а будет представлять собой интеграл по параметрам группы, например по углу вращения. Для произвольной группы такие интегралы могут расходиться, но для большинства интересных с физической точки зрения непрерывных групп можно, оказывается, определить соответствующий интеграл, который будет конечен. Для таких групп, обычно они называются «компактными», все суммы $\sum_{a=1}^g f(a)$, фигурирующие в гл. 4, можно заменить интегралами

$$\iint \dots \int f(a_1, a_2, \dots, a_r) \rho(a_1, a_2, \dots, a_r) da_1 da_2 \dots da_r$$

по параметрам $a_1, a_2, \dots, a_r$ непрерывной группы со специально выбранной «весовой функцией» $\rho(a_1, a_2, \dots, a_r)$. Число g элементов группы заменяется теперь объемом группы, который получается путем интегрирования по всем значениям параметров. Относительно выбора функции $\rho(a_1, a_2, \dots, a_r)$ и вычисления объема см. т. 2, при-

ложение 4, § 3. Соотношения ортогональности и все результаты гл. 4 и 5, являющиеся их следствиями, будут теперь справедливы и для компактных непрерывных групп. В частности, определения таких понятий, как представление, неприводимость и характер, остаются без изменения. Матричные элементы и характер представления являются теперь непрерывными функциями $T_{ij}^{(\alpha)}(a_1, a_2, \dots, a_r)$, $\chi^{(\alpha)}(a_1, a_2, \dots, a_r)$ параметров группы. Для непрерывной группы не существует больше конечной таблицы характеров. Поскольку число классов сопряженных элементов непрерывной группы бесконечно, эта таблица и не может быть конечной, а кроме того, подобно самим элементам группы, классы сопряженных элементов распределены непрерывно. Число неэквивалентных неприводимых представлений теперь тоже бесконечно, хотя размерность неприводимых представлений, как правило, конечна ¹⁾.

Бесконечное число неприводимых представлений означает, что разложение произвольной функции по функциям, принадлежащим неприводимым представлениям, может содержать бесконечное число членов. Таким разложением является, например, комплексный ряд Фурье

$$f(\varphi) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} c_m \exp(im\varphi)$$

для произвольной функции f угла φ , поскольку, как мы убедимся в § 3, каждая функция $\exp(im\varphi)$ преобразуется по одномерному неприводимому представлению группы $\mathcal{R}_2$.

§ 2. ИНФИНИТЕЗИМАЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ

Непрерывная группа размерности r с параметрами $a_1, a_2, \dots, a_r$ имеет бесконечное число элементов, но почти все свойства группы определяются конечным числом операторов, называемых инфинитезимальными. Для удобства обозначим множество параметров $a_1, a_2, \dots, a_r$ символом $\mathbf{a}$. Рассмотрим представление $\Gamma(\mathbf{a})$ группы $\mathcal{G}$ в пространстве L . Пусть параметры выбраны таким обра-

¹⁾ В случае непрерывной компактной группы все неприводимые представления имеют конечную размерность. — *Прим. перев.*

зом, что единичный элемент имеет все параметры $a_q=0$, т. е.

$$T(0, 0, \dots, 0) = 1. \quad (7.3)$$

Если все параметры a_q малы, то с точностью до членов первого порядка по этим параметрам

$$T(a) \approx 1 + \sum_{q=1}^r a_q X_q, \quad (7.4)$$

где X_q — некоторые фиксированные линейные операторы, не зависящие от параметров a_q . Эти операторы X_q называются инфинитезимальными операторами представления T , и из равенства (7.4) они определяются как частные производные:

$$X_q = \lim_{a_q \rightarrow 0} \{T(0, 0, \dots, a_q, \dots, 0) - 1\} / a_q = \left[\frac{\partial}{\partial a_q} T(a) \right]_{a=0}. \quad (7.5)$$

Вместо того чтобы излагать свойства этих инфинитезимальных операторов в общем случае, рассмотрим сначала частный случай однопараметрической группы $\mathcal{G}$ с законом умножения $G(c) = G(a)G(b)$, где $c = a + b$. Иначе говоря, параметр аддитивен, так же как в группе $\mathcal{R}_2$. Тогда мы можем записать оператор $T(a)$ в виде $T(a) = \{T(a/n)\}^n$, где n — целое число. При больших n параметр a/n мал, и в пределе при $n \rightarrow \infty$ нам достаточно сохранить в формуле (7.4) лишь члены нулевого и первого порядка. Тогда, пользуясь определением экспоненциальной функции, получаем

$$T(a) = \lim_{n \rightarrow \infty} \{1 + (a/n) X\}^n = \exp \{aX\}, \quad (7.6)$$

где экспонента определяется как обычный бесконечный ряд: $\exp(aX) = \sum_{n=0}^{\infty} a^n X^n / n!$.

Этот пример показывает, каким образом можно построить конечный оператор $T(a)$ из инфинитезимального оператора X . Таким же путем можно доказать, что в общем случае оператор $T(a)$ полностью определяется параметрами a_q и инфинитезимальными операторами X_q . Основные свойства инфинитезимальных операторов выражены в трех теоремах, которые мы приведем ниже без до-

казательств. Но сначала мы докажем простое утверждение о том, что если представление T унитарно, то операторы X_q антиэрмитовы, т. е. $X_q^\dagger = -X_q$. Оно сразу же следует из равенства (7.4). В самом деле, поскольку параметры a_q действительны, из условия унитарности при малых значениях параметров a_q получаем

$$\begin{aligned} 1 = T(a) T^\dagger(a) &\approx \left(1 + \sum_q a_q X_q\right) \left(1 + \sum_q a_q X_q^\dagger\right) \approx \\ &\approx \left\{1 + \sum_q a_q (X_q + X_q^\dagger)\right\}. \end{aligned} \quad (7.7)$$

Приравнявая член первого порядка нулю, получаем $X_q^\dagger = -X_q$. Если разделить операторы X_q на число $i = (-1)^{1/2}$, как это иногда делается, то они станут эрмитовыми.

Теорема 1. Если два представления группы $\mathcal{G}$ имеют одинаковые инфинитезимальные операторы, то эти представления эквивалентны.

Теорема 2. Для любого представления T группы $\mathcal{G}$ множество инфинитезимальных операторов X_q удовлетворяет перестановочным соотношениям

$$[X_q, X_p] = \sum_i c_{qp}^i X_i, \quad (7.7)$$

где числовые коэффициенты c_{qp}^i , называемые структурными константами, одинаковы для всех представлений T группы $\mathcal{G}$.

Теорема 3. Любой набор операторов X_q , определенных в пространстве L , образует множество инфинитезимальных операторов представления T группы $\mathcal{G}$ в пространстве L , если операторы удовлетворяют перестановочным соотношениям (7.7).

Смысл теоремы 1 заключается в том, что представление полностью определяется своими инфинитезимальными операторами. Этот результат является обобщением результата (7.6) для однопараметрической группы.

Вторая теорема дает «закон умножения» для инфинитезимальных операторов. В общем случае, инфинитезимальный оператор, соответствующий произведению двух элементов группы, совпадает с суммой инфинитезимальных операторов для сомножителей:

$$T(a) T(b) \approx \left(1 + \sum_q a_q X_q\right) \left(1 + \sum_p b_p X_p\right) \approx 1 + \sum_q (a_q + b_q) X_q$$

при малых параметрах $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$. Но в произведении $T(\mathbf{a})T(\mathbf{b})T^{-1}(\mathbf{a})T^{-1}(\mathbf{b})$ отсутствуют все члены первого порядка, хотя само произведение не является единицей. В самом деле,

$$T(\mathbf{a})T(\mathbf{b})T^{-1}(\mathbf{a})T^{-1}(\mathbf{b}) \approx 1 + \sum_{q,p} a_q b_p [X_q, X_p] + \text{члены порядка } > 2. \quad (7.8)$$

Из групповых свойств следует, что

$$T(\mathbf{a})T(\mathbf{b})T^{-1}(\mathbf{a})T^{-1}(\mathbf{b}) = T(\mathbf{c}) \approx 1 + \sum_t c_t X_t$$

для некоторых параметров $\mathbf{c}$. Сравнивая это выражение с предыдущим, заключаем, что параметры $\mathbf{c}$ должны быть порядка ab , а коммутатор $[X_q, X_p]$ должен быть линейной комбинацией операторов X_t . Следовательно, мы приходим к равенству (7.7), согласно которому коммутатор любых двух инфинитезимальных операторов должен быть линейной комбинацией инфинитезимальных операторов. Можно также доказать, что структурные константы c_{qp}^t полностью определяются законом умножения элементов группы, т. е. структурные константы не зависят от выбора представления.

В силу сформулированных теорем исследование непрерывных групп проще исследования конечных групп, поскольку можно рассматривать лишь алгебру инфинитезимальных операторов. Таблица умножения теперь заменяется набором структурных констант.

Из этих теорем следует также, что если подмножество инфинитезимальных операторов некоторой группы $\mathcal{G}$ замкнуто относительно операции коммутирования, т. е. если коммутатор двух элементов подмножества представляется линейной комбинацией элементов этого подмножества, то это подмножество есть множество инфинитезимальных операторов некоторой подгруппы группы $\mathcal{G}$.

Говорят, что набор функций $\varphi_i^{(\alpha)}$ преобразуется по неприводимому представлению $T^{(\alpha)}$, если преобразованные функции задаются соотношением (4.37):

$$T\varphi_i^{(\alpha)} = \sum_j T_{ji}^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)},$$

где $T^{(\alpha)}$ — обычная матрица представления. Для непрерывной группы достаточно показать только, что $\varphi_i^{(\alpha)}$ беско-

нечно малые изменения функций $\varphi_i^{(\alpha)}$ задаются матрицами инфинитезимальных операторов. Так, подставляя $T = 1 + \sum_q a_q X_q$ в условие (4.37), получаем для каждого индекса q

$$X_q \varphi_i^{(\alpha)} = \sum_j (X_q)_{ji}^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)}, \quad (7.9)$$

где $(X_q)_{ji}^{(\alpha)}$ — матричные элементы оператора X_q в представлении $T^{(\alpha)}$. В частности, если функция φ инвариантна, то она преобразуется по тривиальному представлению, для которого $T=1$. Тогда для всех индексов q инфинитезимальные операторы равны нулю, т. е. $X_q \varphi = 0$.

Аналогично для того, чтобы доказать, что множество операторов $S_i^{(\alpha)}$ преобразуется по представлению $T_{(\alpha)}$, мы должны показать, что при любом индексе q бесконечно малое изменение операторов задается теми же самыми известными матрицами. На основании формулы (4.56) при малых параметрах a_q получаем

$$S' = T S T^{-1} \approx \left(1 + \sum_q a_q X_q\right) S \left(1 - \sum_q a_q X_q\right) \approx S + \sum_q a_q [X_q, S].$$

Таким образом, бесконечно малое изменение операторов определяется коммутатором. Следовательно, условие, аналогичное (7.9), записывается для любого индекса q в виде

$$[X_q, S_i^{(\alpha)}] = \sum_j (X_q)_{ji}^{(\alpha)} S_j^{(\alpha)}. \quad (7.10)$$

Для определения трансформационных свойств функций и операторов обычно гораздо проще пользоваться уравнениями (7.9) и (7.10), чем уравнениями (4.37) и (4.56), которые связаны с конечными преобразованиями. Например, инвариантный оператор S должен удовлетворять уравнению $[X_q, S] = 0$ при любом индексе q . Иначе говоря, оператор S коммутирует со всеми инфинитезимальными операторами.

Инфинитезимальные операторы для произведения представлений имеют вид суммы инфинитезимальных операторов сомножителей. В случае инфинитезимальных приращений матричный элемент (4.41) приобретает вид

$$\begin{aligned} T_{ij, kl}^{(\alpha \times \beta)}(a) &= \left\{ \delta_{ik} + \sum_q a_q (X_q^{(\alpha)})_{ik} \right\} \left\{ \delta_{jl} + \sum_p a_p (X_p^{(\beta)})_{jl} \right\} = \\ &= \delta_{ik} \delta_{jl} + \sum_q a_q \{ (X_q^{(\alpha)})_{ik} \delta_{jl} + (X_q^{(\beta)})_{il} \delta_{ik} \}. \end{aligned}$$

Следовательно, в базисе произведений функций $\varphi_k^{(\alpha)}$ и $\psi_l^{(\beta)}$, которые мы рассматривали в гл. 4, § 17, любой инфинитезимальный оператор можно записать в форме

$$X_q = X_q(1) + X_q(2). \quad (7.11)$$

Здесь $X_q(1)$ — произведение инфинитезимального оператора X_q для $\varphi_k^{(\alpha)}$ на единичный оператор для $\psi_l^{(\beta)}$, а $X_q(2)$ — произведение единичного оператора для $\varphi_k^{(\alpha)}$ на инфинитезимальный оператор X_q для $\psi_l^{(\beta)}$.

§ 3. ГРУППА $\mathcal{R}_2$

Группа $\mathcal{R}_2$ — это абелева группа, единственный параметр которой, угол вращения a , изменяется в пределах $0 \leq a < 2\pi$. Он аддитивен, т. е. если $R(c) = R(a)R(b)$, то $c = a + b$ (или $c = a + b - 2\pi$ при $c \geq 2\pi$). Пока мы рассматриваем периодические функции, недоразумений со слагаемыми, кратными 2π , не возникает.

А. Неприводимые представления

В силу абелевости группы $\mathcal{R}_2$ ее неприводимые представления одномерны (гл. 4, § 8). Следовательно, чтобы найти возможные неприводимые представления группы $\mathcal{R}_2$, нужно найти функции $T(a)$, удовлетворяющие соотношениям $T(a+b) = T(a)T(b)$ и $T(0) = 1$. Дифференцируя первое из них по параметру b при фиксированном параметре a , получаем уравнение $T'(a+b) = T(a)T'(b)$, где T' — первая производная функции T . Затем, полагая параметр $b=0$, получаем уравнение $T'(a) = T(a)T'(0)$. Это простое дифференциальное уравнение для функции $T(a)$ имеет решение $T(a) = \exp[atT'(0)]$, если $T(0) = 1$. Значит, неприводимые представления группы $\mathcal{R}_2$ представляют собой экспоненциальные функции угла вращения a . Коэффициент $T'(0)$ может быть любым, но представление будет непрерывным, т. е. будет удовлетворять равенству $T(a) = T(a+2\pi)$, лишь в случае, когда коэффициент $T'(0)$ есть целое число, умноженное на мнимую единицу. Обычно вводят целое (положительное или отрицательное) число $m = iT'(0)$. Тогда непрерывные неприводимые представления группы $\mathcal{R}_2$ можно записать в виде

$$T^{(m)}(a) = \exp(-ima). \quad (7.12)$$

Целые числа $m=0, \pm 1, \pm 2, \dots$ нумеруют представления. Ясно, что такие представления унитарны. Вектор, преобразующийся по неприводимому представлению $T^{(m)}$, обозначается через e_m и удовлетворяет уравнению $T(a)e_m = \exp(-ima)e_m$.

Заметим, что, рассматривая $m=\pm 1/2, \pm 3/2, \dots$, можно построить унитарные представления, непрерывные на расширенной области значений $0 \leq a < 4\pi$. Эти представления будут двузначны в обычной области значений $0 \leq a < 2\pi$. В гл. 8, § 4 мы убедимся, что такие двузначные представления необходимы для описания спина в квантовой механике (см. также § 6).

Б. Характер

В случае одномерных представлений характер совпадает с самим представлением, а поскольку каждый элемент совпадает с классом своих сопряженных элементов, характер равен

$$\chi^{(m)} \equiv T^{(m)}(a) = \exp(-ima), \quad (7.13)$$

т. е. является непрерывной функцией параметра a .

Ортогональность

Соотношение ортогональности характеров, которое в случае конечной группы давалось формулами (4.25), теперь записывается в интегральном виде:

$$\int_0^{2\pi} \chi^{(m)} \chi^{(n)*} da = \int_0^{2\pi} \exp[ia(m' - m)] da = 2\pi \delta_{m'm}. \quad (7.14)$$

Такой выбор интеграла взамен суммы по элементам конечной группы очевиден, но мы вернемся к данному вопросу в т. 2, приложение 4, § 3. Весовая функция $\rho(a)$ (в обозначениях § 1) выбрана единичной. «Объем» 2π , который появился в соотношении (7.14), входит вместо числа g элементов группы в соотношении (4.25).

В. Произведение представлений

Характером произведения двух представлений $\Gamma^{(m_1)}$ и $\Gamma^{(m_2)}$ будет просто функция $\exp[-i(m_1+m_2)a]$, которая является характером представления $\Gamma^{(m_1+m_2)}$. Таким образом, мы можем написать довольно очевидную формулу

$$\Gamma^{(m_1)} \otimes \Gamma^{(m_2)} = \Gamma^{(m_1+m_2)}. \quad (7.15)$$

Г. Примеры базисных векторов

1. Рассмотрим единичные векторы e_x и e_y , направленные вдоль осей x и y . Пусть $\mathcal{R}_z$ — группа вращений относительно оси z . Тогда, как и в гл. 3, § 8, п. А, получаем

$$\begin{aligned} R_z(a) e_x &= \cos ae_x + \sin ae_y, \\ R_z(a) e_y &= -\sin ae_x + \cos ae_y, \end{aligned}$$

т. е.

$$R_z(a) (e_x \pm ie_y) = \exp(\mp ia) (e_x \pm ie_y). \quad (7.16)$$

Это означает, что вектор $e_x + ie_y$ преобразуется по неприводимому представлению с индексом $m=1$, а вектор $e_x - ie_y$ преобразуется по неприводимому представлению с индексом $m=-1$. Заметим, что для получения неприводимых представлений пришлось вводить комплексные коэффициенты. На основании геометрических соображений легко убедиться в том, что в xy -плоскости не существует вектора с действительными коэффициентами, который в результате произвольного вращения относительно оси z просто приобретал бы числовой множитель.

2. Далее рассмотрим на xy -плоскости функции $\psi(r, \varphi)$, которые будем считать функциями полярных координат лишь для удобства. Как и в гл. 3, § 8, п. Д, пользуясь общим определением (3.37) индуцированного преобразования функций, получаем

$$\Gamma(R_z(a)) \psi(r, \varphi) = \psi(r, \varphi - a). \quad (7.17)$$

Значит, функция вида $\psi(r, \varphi) = \psi(r) \exp(im\varphi)$ преобразуется по представлению $\Gamma^{(m)}$:

$$\Gamma(R_z(a)) \exp(im\varphi) = \exp[im(\varphi - a)] = \exp(-ima) \exp(im\varphi).$$

Следовательно, разложение произвольной функции в комплексный ряд Фурье

$$\psi(r, \varphi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \psi_m(r) \exp(im\varphi),$$

где

$$\psi_m(r) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \psi(r, \varphi) \exp(-im\varphi) d\varphi,$$

есть разложение ее на компоненты, каждая из которых преобразуется по определенному неприводимому представлению $\Gamma^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$.

Д. Инфинитезимальные операторы

Построим теперь для рассмотренных примеров единственный инфинитезимальный оператор группы $\mathcal{R}_2$. Начнем с того, что матрица оператора $R_z(a)$ имеет в пространстве векторов e_x и e_y вид (гл. 3, § 8, п. А):

$$R_z(a) = \begin{pmatrix} \cos a & -\sin a \\ \sin a & \cos a \end{pmatrix}.$$

При малых углах a эта матрица приблизительно равна

$$1 + \begin{pmatrix} 0 & -a \\ a & 0 \end{pmatrix} = 1 + a \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, для матрицы инфинитезимального оператора получаем выражение

$$X = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

На основании равенства $X^2 = -1$ можно убедиться в справедливости соотношения (7.6) для этого примера:

$$\begin{aligned} \exp aX &= 1 + aX + \frac{1}{2} a^2 X^2 + \frac{1}{6} a^3 X^3 + \frac{1}{24} a^4 X^4 + \dots = \\ &= \left(1 - \frac{1}{2} a^2 + \frac{1}{24} a^4 + \dots\right) + X \left(a - \frac{1}{6} a^3 + \dots\right) = \\ &= \cos a + X \sin a = \begin{pmatrix} \cos a & -\sin a \\ \sin a & \cos a \end{pmatrix} = R_z(a). \end{aligned}$$

Геометрически очевидно, что преобразование вектора $\mathbf{r}$ на x, y -плоскости при повороте $R_z(a)$ относительно оси z в первом приближении эквивалентно прибавлению к нему вектора длиной $a|\mathbf{r}|$, направленного перпендикулярно вектору $\mathbf{r}$ (рис. 7.1). Значит, при малых углах a имеем

$$R_z(a)\mathbf{r} \approx \mathbf{r} + a(\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}), \quad (7.18)$$

где $\mathbf{e}_z$ — единичный вектор, направленный по оси z . Поэтому мы можем написать для оператора R_z выражение

$$R_z(a) \approx 1 + a(\mathbf{e}_z \times .$$

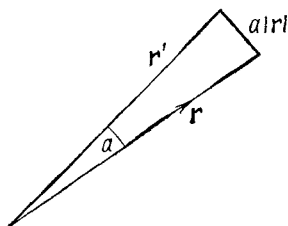


Рис. 7.1.

Следовательно, для примера 1 из п. Гинфинитезимальный оператор равен

$$X = \mathbf{e}_z \times . \quad (7.19)$$

Инфинитезимальный оператор на пространстве функций примера 2 можно найти, разложив правую часть равенства (7.17) в ряд Тэйлора:

$$\begin{aligned} T(R_z(a))\psi(r, \varphi) = & \psi(r, \varphi) - a \frac{\partial}{\partial \varphi} \psi(r, \varphi) + \\ & + \frac{1}{2} a^2 \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \psi(r, \varphi) + \dots \end{aligned}$$

При малых углах a этот оператор можно записать в виде $T(R_z(a)) \approx 1 - a(\partial/\partial \varphi)$. Значит, в этом примере инфинитезимальным оператором служит дифференциальный оператор

$$X = -\frac{\partial}{\partial \varphi}. \quad (7.20)$$

В самом деле, ряд Тэйлора представляет собой экспоненциальный ряд для дифференциального оператора $\partial/\partial \varphi$, т. е. $T(R_z(a)) = \exp[-a(\partial/\partial \varphi)]$, что снова согласуется с равенством (7.6). Связь с угловым моментом в квантовой механике уже установлена ранее [формула (5.19)]:

$$X = -\frac{\partial}{\partial \varphi} = -i(\mathbf{r} \times \mathbf{p})_z / \hbar = -i l_z, \quad (7.21)$$

где l_z — оператор z -компоненты углового момента (в единицах $\hbar$).

Рассматривая второй член разложения выражения (7.12) при малых углах a , убеждаемся в том, что для неприводимого представления $\Gamma^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$ матричный элемент инфинитезимального оператора X равен просто $-im$. Действительно, если функция ψ удовлетворяет уравнению $X\psi = -im\psi$, то она должна преобразоваться по неприводимому представлению $\Gamma^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$.

Относительно присоединения к группе $\mathcal{R}_2$ несобственных элементов (отражений и инверсий) см. гл. 9, § 6.

§ 4. ГРУППА $\mathcal{R}_3$

Вращение в трехмерном пространстве обычно обозначают через $R_k(a)$, где a — угол поворота ($0 \leq a \leq \pi$), а $\mathbf{k}$ — единичный вектор, направленный вдоль оси вращения (гл. 2, § 2, пример 9; гл. 3, § 8). Вращение зависит от трех параметров: угла поворота a и двух сферических углов вектора $\mathbf{k}$. Но в некоторых отношениях проще пользоваться тремя другими параметрами: $a_x = ak_x$, $a_y = ak_y$, $a_z = ak_z$, где k_q — это три составляющие вектора $\mathbf{k}$ в какой-либо фиксированной системе координат. В связи с этим вместо обозначения $R_k(a)$ мы введем обозначение $R(\mathbf{a})$.

Элементарные геометрические рассуждения показывают, что при операции вращения произвольный вектор $\mathbf{r}$ преобразуется в соответствии с равенством

$$R_k(a)\mathbf{r} = \cos a \mathbf{r} + (1 - \cos a)(\mathbf{r} \cdot \mathbf{k})\mathbf{k} + \sin a (\mathbf{k} \times \mathbf{r}).$$

Отсюда сразу же получаем матрицу преобразования $R_k(a)$ в декартовом базисе. Например:

$$\begin{aligned} [R_k(a)]_{xx} &= \cos a + (1 - \cos a)k_x^2, \\ [R_k(a)]_{yx} &= (1 - \cos a)k_x k_y + k_z \sin a \text{ и т. д.} \end{aligned}$$

Преобразование вращения сохраняет как длины, так и углы между векторами. Значит, вращение сохраняет скалярное произведение любых двух векторов $\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}_2$. Следовательно, если мы возьмем векторы $\mathbf{r}'_1 = R\mathbf{r}_1$ и $\mathbf{r}'_2 = R\mathbf{r}_2$, то (гл. 3, § 5) $(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = (R\mathbf{r}_1, R\mathbf{r}_2) = (\mathbf{r}_1, R^\dagger R\mathbf{r}_2)$, т. е. матрица R унитарна ($R^\dagger R = 1$) и модуль ее определителя равен единице.

Поскольку в обычном декартовом базисе матричные элементы матрицы R действительны, то сама матрица ортогональна и ее определитель равен ± 1 . Можно даже,

выбрав какой-либо ортонормальный базис, определить вращения как множество ортогональных 3×3 -матриц с определителем $+1$. Так как определитель тождественного преобразования равен $+1$, то в силу непрерывности группы $\mathcal{R}_3$ определители всех матриц вращений должны быть равны $+1$. С геометрической точки зрения матрицы с определителем -1 также играют определенную роль. Заметим, что матрица I преобразования инверсии, которое меняет знаки всех векторов, имеет вид

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

и, следовательно, ее определитель равен -1 . Таким образом, ортогональные матрицы с определителем, равным -1 , соответствуют произведениям вращений на инверсию. Иногда для обозначения группы $\mathcal{R}_3$ употребляется символ O_3^+ , указывающий, что речь идет о группе ортогональных преобразований трехмерного пространства, определитель которых равен $+1$. Символом же O_3 обозначают группу всех ортогональных преобразований, включая инверсии. Группа O_3 совпадает с произведением $\mathcal{R}_3 \times S_2$ группы вращений $\mathcal{R}_3$ на группу инверсий S_2 . Отметим, что преобразования с определителем, равным -1 , сами по себе не образуют группу.

А. Инфинитезимальные операторы

Выражение (7.18) для поворота на малый угол вокруг оси z непосредственно переносится на случай поворота $R_k(a)$ на малый угол вокруг произвольной оси k :

$$R_k(a) \mathbf{r} = \mathbf{r} + a (\mathbf{k} \times \mathbf{r}) =$$

$$= \mathbf{r} + a \sum_{q=x,y,z} k_q (\mathbf{e}_q \times \mathbf{r}) = \mathbf{r} + \sum_q a_q (\mathbf{e}_q \times \mathbf{r}), \quad (7.22)$$

где $a_q = a k_q$. Данное выражение конкретизирует общую формулу для изменения вектора $\mathbf{r}$ (с сохранением членов не выше первого порядка), которая следует из равенства (7.4). Таким образом, три инфинитезимальных оператора, соответствующие параметрам a_q , геометрически представляются как

$$X_q = (\mathbf{e}_q \times \cdot). \quad (7.23)$$

Они соответствуют бесконечно малым поворотам вокруг осей x , y и z . Значит, в базисе $\mathbf{e}_x$, $\mathbf{e}_y$, $\mathbf{e}_z$ матрицы инфинитезимальных операторов имеют вид

$$\mathbf{X}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.24)$$

На основании элементарных соотношений векторной алгебры можно для любого вектора $\mathbf{r}$ показать, что

$$[\mathbf{X}_x, \mathbf{X}_y] \mathbf{r} = \mathbf{e}_x \times (\mathbf{e}_y \times \mathbf{r}) - \mathbf{e}_y \times (\mathbf{e}_x \times \mathbf{r}) = x\mathbf{e}_y - y\mathbf{e}_x = (\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}) = \mathbf{X}_z \mathbf{r}.$$

Отсюда получаем перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов группы R_3 :

$$[\mathbf{X}_x, \mathbf{X}_y] = \mathbf{X}_z, \quad [\mathbf{X}_y, \mathbf{X}_z] = \mathbf{X}_x, \quad [\mathbf{X}_z, \mathbf{X}_x] = \mathbf{X}_y. \quad (7.25)$$

В силу уравнения (7.23) три оператора $\mathbf{X}_q$ образуют вектор, который при вращениях преобразуется как вектор $\mathbf{e}_q$. Инфинитезимальные операторы группы вращений связаны с операторами углового момента в квантовой механике [формула (7.22)], и, следовательно, эти перестановочные соотношения совпадают с перестановочными соотношениями для трех компонент вектора углового момента, с которыми читатель, возможно, познакомился при изучении квантовой механики. Многие алгебраические выводы данного пункта параграфа имеют соответствующие параллели в теории углового момента; в частности, это относится к анализу структуры неприводимых представлений.

Инфинитезимальные операторы $\mathbf{X}_q$ антиэрмитовы (§ 2). Поэтому для удобства можно вынести множитель $i = (-1)^{1/2}$, приняв обозначение $\mathbf{J}_q = i\mathbf{X}_q$. Под инфинитезимальным оператором мы будем понимать как оператор $\mathbf{X}_q$, так и оператор $\mathbf{J}_q$. Надеемся, что это не приведет к какому-либо недоразумению. Операторы $\mathbf{J}_q$ эрмитовы и удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$[\mathbf{J}_x, \mathbf{J}_y] = i\mathbf{J}_z, \quad [\mathbf{J}_y, \mathbf{J}_z] = i\mathbf{J}_x, \quad [\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_x] = i\mathbf{J}_y. \quad (7.26)$$

Эти соотношения совпадают с перестановочными соотношениями для операторов углового момента, разделенных на число $\hbar$. В § 3 мы доказали, что собственные значения оператора X_z равны $-im$; поэтому собственными значениями оператора J_z будут числа m . В дальнейшем нам будет удобнее вместо самих операторов J_x и J_y рассматривать их линейные комбинации

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y. \quad (7.27)$$

Преимущество такой замены — в перестановочных соотношениях операторов $J_{\pm}$ с оператором J_z :

$$[J_z, J_{\pm}] = iJ_y \pm J_x = \pm(J_x \pm iJ_y) = \pm J_{\pm}. \quad (7.28)$$

Из этих перестановочных соотношений следует, что если функция $\psi(m)$ есть собственный вектор оператора J_z , принадлежащий представлению $T^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$, то функции $J_{\pm}\psi(m)$ принадлежат представлениям $T^{(m\pm 1)}$ и, следовательно, операторы $J_{\pm}$ преобразуются по представлениям $T^{(\pm 1)}$:

$$\begin{aligned} J_z \{J_{\pm}\psi(m)\} &= (J_{\pm}J_z \pm J_{\pm})\psi(m) = J_{\pm}(J_z \pm 1)\psi(m) = \\ &= J_{\pm}(m \pm 1)\psi(m) = (m \pm 1)\{J_{\pm}\psi(m)\}. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Оператор J_+ называется «повышающим», а оператор J_- — «понижающим», так как первый увеличивает, а второй уменьшает собственное значение оператора J_z на единицу. Заметим, что данное свойство является следствием только перестановочных соотношений, а потому оно справедливо для инфинитезимальных операторов в любом представлении группы $\mathcal{R}_3$.

Б. Неприводимые представления

Для группы $\mathcal{R}_2$ нам легко удалось доказать, что неприводимые представления нумеруются целыми числами m и матричный элемент представления равен $\exp(-ima)$. Простота доказательства была следствием абелевости группы $\mathcal{R}_2$ и наличия единственного инфинитезимального оператора. В общем случае группы обладают целым набором инфинитезимальных операторов X_q , а свойства неприводимых представлений определяются перестановочными соотношениями (7.7) для операторов X_q . Для группы $\mathcal{R}_3$ эти соотношения даются равенствами

(7.25) или, что эквивалентно, соотношениями (7.28) и равенством

$$[J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = 2J_z. \quad (7.30)$$

В данном пункте параграфа мы постараемся вычислить размерности неприводимых представлений группы $\mathcal{N}_3$ и найти способ нумерации этих представлений. Мы также вычислим матричные элементы инфинитезимальных операторов в каждом неприводимом представлении. Пусть D — неприводимое представление группы $\mathcal{N}_3$ в векторном пространстве L . (Неприводимые представления группы $\mathcal{N}_3$ обычно обозначают буквой D , а не буквой T , которой обозначают представления произвольной группы.) Выберем базис, в котором инфинитезимальный оператор J_z диагонален. Векторы базиса e_m имеют индекс m , соответствующий собственному значению m оператора J_z , т. е. неприводимому представлению $T^{(m)}$ группы $\mathcal{N}_2$, которому они принадлежат. (Векторы базиса пространства представления e_m , где m — целое число, не нужно путать с тремя единичными векторами e_x, e_y, e_z в обычном физическом пространстве, которые рассматривались в п. А.)

На данном этапе представляется возможным, что у нескольких линейно-независимых векторов базиса окажутся одинаковые индексы m . Но в дальнейшем мы убедимся, что этого не происходит и одного индекса m достаточно, чтобы различать между собой векторы базиса неприводимого представления. Обозначим через j максимальное значение индекса m для векторов базиса представления D . Пусть e_j — вектор базиса с индексом $m=j$. Он называется вектором «старшего веса». Вектор e_j должен удовлетворять условию

$$J_+ e_j = 0, \quad (7.31)$$

так как иначе новый вектор $J_+ e_j$ имел бы вес больший, чем вес вектора e_j . Последовательно действуя на вектор e_j понижающим оператором J_- , построим последовательность нормированных векторов:

$$\begin{aligned} e_{j-1} &= A_{j-1} J_- e_j, \\ e_{j-2} &= A_{j-2} J_- e_{j-1}, \\ e_{j-3} &= A_{j-3} J_- e_{j-2} \text{ и т. д.} \end{aligned} \quad (7.32)$$

Коэффициенты A_m , которые еще не вычислены, вводятся для нормировки векторов e_m , причем вектор e_j считается

нормированным. Все векторы данной последовательности имеют разные индексы m . Поэтому они линейно независимы и взаимно ортогональны. Векторное пространство L должно быть инвариантным относительно групповых преобразований, и, следовательно, все векторы последовательности должны принадлежать пространству L . Если размерность пространства L конечна, то последовательность векторов должна обрываться. Это происходит на том шаге, когда в результате применения понижающего оператора получаем нуль. Иначе говоря, при некотором целом t

$$J_- e_{j-t} = 0. \quad (7.33)$$

Множество векторов

$$e_j, e_{j-1}, \dots, e_{j-t} \quad (7.34)$$

инвариантно относительно действия операторов J_z и J_- . Докажем, что оно также инвариантно относительно действия оператора J_+ . Тогда это множество векторов будет инвариантным относительно действия любого элемента группы $\mathcal{R}_3$, и, следовательно, оно образует базис некоторого представления группы $\mathcal{R}_3$. Для доказательства инвариантности множества по отношению к действию оператора J_+ построим оператор

$$J^2 = J \cdot J = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2.$$

В силу перестановочных соотношений (7.25) он удовлетворяет соотношениям

$$[J^2, J_q] = 0$$

при $q=x, y$ и z . Поэтому, согласно формуле (7.10), этот оператор является инвариантом. Заметим, что оператор J^2 можно выразить через повышающий и понижающий операторы:

$$J^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2.$$

Согласно соотношению (7.30), это выражение можно переписать в виде

$$J^2 = J_- J_+ + J_z^2 + J_z, \quad (7.35a)$$

или

$$J^2 = J_+ J_- + J_z^2 - J_z. \quad (7.35b)$$

Из соотношения (7.35а) и свойства (7.31) следует, что e_j — собственный вектор оператора J^2 :

$$J^2 e_j = (J_- J_+ + J_z^2 + J_z) e_j = j(j+1) e_j.$$

Тогда в силу перестановочного соотношения

$$[J^2, J_-] = 0$$

мы для любого вектора e_m из последовательности (7.34) получаем

$$J^2 e_m = j(j+1) e_m. \quad (7.36)$$

Теперь из соотношений (7.32) и (7.35б) вытекает инвариантность множества (7.34) относительно действия оператора J_+ :

$$\begin{aligned} J_+ e_m &= A_m J_+ J_- e_{m+1} = \\ &= A_m (J^2 - J_z^2 + J_z) e_{m+1} = \\ &= A_m \{j(j+1) - (m+1)^2 + (m+1)\} e_{m+1} = \\ &= A_m (j+m+1)(j-m) e_{m+1}. \end{aligned} \quad (7.37)$$

Значит, повышающий оператор не дает каких-либо векторов, отличных от векторов последовательности (7.34), которая была получена в результате действия понижающего оператора на вектор e_j . [Тот факт, что оператор J_+ является повышающим, еще не гарантирует правильности данного вывода, поскольку он может перевести вектор e_m в новый вектор e'_{m+1} , отличный от вектора e_{m+1} из множества (7.34).] Вектор e_j должен быть единственным вектором старшего веса среди векторов базиса пространства L , так как иначе представление будет приводимым. Таким образом, неприводимые представления группы $\mathcal{R}_3$ должны обладать базисом, аналогичным последовательности (7.34).

Отметим некоторые свойства неприводимого представления D . На основании равенств (7.35б) и (7.33) получаем

$$\begin{aligned} J^2 e_{j-t} &= (J_+ J_- + J_z^2 - J_z) e_{j-t} = \{(j-t)^2 - (j-t)\} e_{j-t} = \\ &= (j-t)(j-t-1) e_{j-t}. \end{aligned}$$

Сравнивая это равенство с равенством (7.36), находим, что $(j-t)(j-t-1) = j(j+1)$, т. е. $(2j-t)(t+1) = 0$. Так как t — положительное целое число, мы имеем $2j = t$ и число j может быть только либо целым, либо полуцелым. Размер-

ность представления D равна теперь $2j+1$. Следовательно, неприводимые представления группы $\mathcal{R}_3$ можно обозначать символом $D^{(j)}$, где $j=0, 1/2, 1, 3/2, 2$ и т. д., причем размерность этого представления равна $2j+1$, а векторы базиса e_m можно выбрать так, чтобы они преобразовались по неприводимым представлениям $T^{(m)}$ подгруппы $\mathcal{R}_2$, где $m=j, j-1, j-2, \dots, 1-j, -j$. При сужении группы $\mathcal{R}_3$ на ее подгруппу $\mathcal{R}_2$ разложение представления $D^{(j)}$ можно записать в виде

$$D^{(j)} = \sum_{m=-j}^{m=j} T^{(m)}. \quad (7.38)$$

Отметим, что полуцелые представления не периодичны на интервале 2π (§ 3, п. А). Они встречаются лишь при описании спина в квантовой механике (гл. 8, § 4).

Теперь нужно сделать всего один шаг, чтобы вывести матрицы инфинитезимальных операторов J_q в представлении $D^{(j)}$. Начнем с того, что оператор J_z в базисе векторов e_m диагонален и его матричные элементы даются равенством

$$J_z e_m = m e_m. \quad (7.39)$$

Матричные элементы операторов J_+ и J_- определяются по формулам (7.32) и (7.37), стоит лишь найти нормировочные множители A_m . Для вычисления этих множителей мы воспользуемся тем, что операторы J_q эрмитовы и поэтому $J_-^\dagger = J_+$. Отсюда

$$(e_m, J_- e_{m+1}) = (J_+ e_m, e_{m+1}) = (e_{m+1}, J_+ e_m)^*.$$

Тогда из равенств (7.32) и (7.37) получаем $|A_m|^{-2} = (j+m+1)(j-m)$. Отношения фазовых множителей векторов базиса не определяются ни условием ортогональности, ни нормировкой, и в множители A_m можно ввести любое комплексное число, равное по модулю единице. Обычно множители A_m считают действительными и положительными, так что матричные элементы операторов $J_\pm$ даются равенствами

$$\begin{aligned} J_- e_{m+1} &= [(j+m+1)(j-m)]^{1/2} e_m, \\ J_+ e_m &= [(j+m+1)(j-m)]^{1/2} e_{m+1}. \end{aligned} \quad (7.40)$$

Такой выбор фазовых множителей называется «условием Кондона — Шортли», и отношения фазовых множителей всех $2j+1$ векторов базиса определяются этим условием однозначно.

Можно показать, что множество представлений $D^{(j)}$ полно, причем в случае однозначной функции можно обойтись лишь целыми числами j :

$$\psi = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{m=-j}^j \psi_{jm}, \quad (7.41)$$

где j — целое число, а каждый член ψ_{jm} разложения преобразуется, как m -я строка представления $D^{(j)}$.

Построение матриц $D_{m'm}^{(j)}(a_x, a_y, a_z)$ конечных вращений с параметрами a_x, a_y, a_z — это сложная алгебраическая процедура. Мы ее отложим до т. 2, гл. 20, § 5. Матричный элемент $D_{m'm}^{(j)}$ обычно представляется в виде функции трех углов Эйлера, а не параметров a_x, a_y и a_z . Считаю долгом предупредить читателя о том, что разные авторы пользуются разными обозначениями для матриц представлений $D^{(j)}$. Наши обозначения согласуются с обозначениями книги Бринка и Сэтчлера (см. литературу). В основном они определяются формулами (4.2), (4.8) и (7.40).

В. Характеры

Независимо от направлений осей вращения все повороты на один и тот же угол лежат в одном классе сопряженных элементов группы $\mathcal{R}_3$. Следовательно, характер вращения зависит лишь от угла поворота. Поэтому для выделения характера неприводимого представления $D^{(j)}$ мы можем выбрать любую ось вращения. Вращения $R_z(a)$ вокруг оси z наиболее удобны, так как мы ранее пользовались базисом векторов e_m , которые преобразуются по одномерным неприводимым представлениям $T^{(m)}$ подгруппы $\mathcal{R}_2$ вращений вокруг оси z . Тогда на основании разложения (7.38) представления $D^{(j)}$ на неприводимые представления подгруппы $\mathcal{R}_2$ и в силу формулы (7.12) для характеров группы $\mathcal{R}_2$ мы можем вычислить характер

представления $D^{(j)}$ для поворота на угол a :

$$\begin{aligned}\chi_a^{(j)} &= \sum_{m=-j}^j \exp(-ima) = \exp(-ija) [1 + \exp(ia) + \\ &+ \exp(2ia) + \dots + \exp(2jia)] = \\ &= \exp(-ija) \{ \exp[(2j+1)ia] - 1 \} / [\exp(ia) - 1] = \\ &= \left\{ \exp \left[\left(j + \frac{1}{2} \right) ia \right] - \exp \left[- \left(j + \frac{1}{2} \right) ia \right] \right\} \times \\ &\quad \times \left\{ \exp \left(\frac{1}{2} ia \right) - \exp \left(- \frac{1}{2} ia \right) \right\}^{-1} = \\ &= \frac{\sin \left(j + \frac{1}{2} \right) a}{\sin \frac{1}{2} a}.\end{aligned}\quad (7.42)$$

В частности, характер представления с $j=1$, т. е. векторного представления, равен

$$\begin{aligned}\chi_a^{(1)} &= \sin \frac{3}{2} a / \sin \frac{1}{2} a = \cos a + \left(\cos \frac{1}{2} a \sin a / \sin \frac{1}{2} a \right) = \\ &= \cos a + 2 \cos^2 \frac{1}{2} a = 2 \cos a + 1,\end{aligned}$$

что согласуется с равенством (4.6). Единичному элементу соответствует угол вращения $a=0$, при котором характер (7.42) равен $2j+1$, что совпадает с размерностью представления $D^{(j)}$.

Можно показать (т. 2, приложение 4, §. 3), что соотношение ортогональности характеров группы $\mathcal{R}_2$ содержит в левой части интеграл

$$\frac{1}{2\pi} \int_{a=0}^{2\pi} \chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} (1 - \cos a) da = \delta_{j_1 j_2}.$$

Согласно сказанному в § 4, полная ортогональная группа O_3 — это прямое произведение группы $\mathcal{R}_3$ на группу инверсий S_2 . Ее неприводимые представления обозначаются символами $D^{(j)+}$ и $D^{(j)-}$. Тогда, согласно изложенному в гл. 4, § 21, получаем, что характеры группы O_3 определяются соотношениями

$$\begin{aligned}\chi^{(j)\pm}(R(a)) &= \chi^{(j)}(R(a)), \\ \chi^{(j)\pm}(S(a)) &= \chi^{(j)\pm}(R(a+\pi)I) = \pm \chi^{(j)}(R(a+\pi)),\end{aligned}$$

где $R(a)$ — собственное вращение, $S(a)$ — зеркальное вращение (гл. 9, § 1), а $\chi^{(j)}(R(a))$ — характер, даваемый выражением (7.42).

Г. Произведение представлений

Прямое произведение двух представлений (гл. 4, § 17) будет представлением, которое, вообще говоря, разлагается в сумму неприводимых представлений:

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_J c_J D^{(J)}.$$

Нашей целью в данном пункте параграфа будет вычисление коэффициентов c_J . Так же как для конечных групп, мы рассмотрим соответствующее соотношение для характеров

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \sum_J c_J \chi_a^{(J)}. \quad (7.43)$$

Для определенности будем считать, что $j_1 \geq j_2$. В силу равенства (7.42) левую часть этого уравнения можно записать в виде

$$\begin{aligned} \frac{\sin\left(j_1 + \frac{1}{2}\right)a \sin\left(j_2 + \frac{1}{2}\right)a}{\sin^2 \frac{1}{2}a} &= \frac{-\cos(j_1 + j_2 + 1)a + \cos(j_1 - j_2)a}{2\sin^2 \frac{1}{2}a} = \\ &= \frac{2\sin\left(j_1 + j_2 + \frac{1}{2}\right)a \sin \frac{1}{2}a - \cos(j_1 + j_2)a + \cos(j_1 - j_2)a}{2\sin^2 \frac{1}{2}a} = \\ &= \frac{\sin\left(j_1 + j_2 + \frac{1}{2}\right)a}{\sin \frac{1}{2}a} + \frac{\sin(j_1)a \sin(j_2)a}{\sin^2 \frac{1}{2}a}, \end{aligned}$$

или

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \chi_a^{(j_1 + j_2)} + \chi_a^{(j_1 - 1/2)} \chi_a^{(j_2 - 1/2)}.$$

Повторяя наши рассуждения, получаем

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \chi_a^{(j_1 + j_2)} + \chi_a^{(j_1 + j_2 - 1)} + \chi_a^{(j_1 - 1)} \chi_a^{(j_2 - 1)}$$

и т. д. Вспоминая, что характер тривиального представления $D^{(0)}$ равен $\chi_a^{(0)} = 1$, мы после еще $2j_2 - 2$ таких шагов

приходим к равенству

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \chi_a^{(j_1+j_2)} + \chi_a^{(j_1+j_2-1)} + \dots + \chi_a^{(j_1-j_2)}.$$

Сравнивая этот результат с соотношением (7.43), находим, что при $(j_1-j_2) \leq J \leq (j_1+j_2)$ коэффициенты $c_J = 1$, а при других значениях J коэффициенты $c_J = 0$. Ясно, что условие $j_1 \geq j_2$ не ограничивает общности рассмотрения. Поэтому мы окончательно получаем

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{J=j_1+j_2} D^{(J)}. \quad (7.44)$$

Эту формулу можно также вывести путем подсчета числа векторов базиса произведения представлений, которые преобразуются по каждому из представлений $T^{(M)}$ группы $\mathcal{R}_2$. При этом нужно также воспользоваться тем, что представление $D^{(J)}$ группы $\mathcal{R}_2$ содержит $2J+1$ векторов, каждому из которых соответствует одно из чисел $M = J, J-1, \dots, -J$. Ограничение $|j_1-j_2| \leq J \leq (j_1+j_2)$ иногда называется условием треугольника из-за его сходства с соотношением между длинами j_1, j_2 и J трех сторон треугольника.

Пользуясь терминологией гл. 4, § 17, группу $\mathcal{R}_2$ можно считать «просто приводимой», так как в разложении (7.44) каждое представление $D^{(J)}$ встречается не более одного раза. Исходя только из формул (7.40) для матричных элементов инфинитезимальных операторов, можно вывести явное выражение для коэффициентов Клебша — Гордана, введенных в гл. 4, § 17. Но ввиду его сложности мы не приводим его здесь. Выбор фазовых множителей, принятый в соотношениях (7.40), обеспечивает действительность этих коэффициентов. Подробные таблицы значений коэффициентов приведены в книге Ротенберга и др. (см. литературу). Простой способ вычисления этих коэффициентов приводится в задаче 7.8. Подробное описание коэффициентов Клебша — Гордана и связанных с ними коэффициентов можно найти в книге Бринка и Сэтчлера.

Разложение (7.44) приводит к соотношениям между произведениями матричных элементов представлений $D^{(j)}$. Коэффициенты Клебша — Гордана преобразуют параметризуемые числами m_1, m_2 векторы базиса произведения

представлений в левой части равенства (7.44) в параметризуемые числами JM векторы базиса суммы представлений в правой части равенства (7.44). Значит,

$$\sum_{m_1 m'_1 (m_2 m'_2)} C(j_1 j_2 J, m_1 m_2 M) C(j_1 j_2 J', m'_1 m'_2 M') D_{m_1 m_1}^{(j_1)} D_{m_2 m_2}^{(j_2)} = \delta_{JJ'} D_{M'M}^{(J)},$$

где все матричные элементы матриц D соответствуют одному и тому же вращению. (Числа m_2, m'_2 , стоящие в скобках, связаны с числами m_1, m'_1 соотношениями $m_1 + m_2 = M, m'_1 + m'_2 = M'$.) В силу свойства ортогональности коэффициентов данное соотношение можно обратить:

$$D_{m_1 m_1}^{(j_1)} D_{m_2 m_2}^{(j_2)} = \sum_J C(j_1 j_2 J, m_1 m_2 M) C(j_1 j_2 J, m'_1 m'_2 M') D_{M'M}^{(J)}.$$

Эти соотношения не нужно путать с определением представления [формула (4.3)]

$$D_{m'm}^{(j)}(R(c)) = \sum_n D_{m'n}^{(j)}(R(a)) D_{nm}^{(j)}(R(b)),$$

где $R(c) = R(a)R(b)$.

Д. Примеры базисных векторов

В качестве первого примера базиса неприводимого представления $D^{(j)}$ группы $\mathcal{R}_3$ рассмотрим три единичных вектора e_x, e_y и e_z в обычном трехмерном пространстве. Они задают базис представления с $j=1$. Очевидно, что трехмерное пространство, порождаемое этими тремя векторами, неприводимо. Таким представлением может быть лишь представление $D^{(1)}$. Подобное отождествление можно также провести на основании характера $2 \cos a + 1$. Чтобы записать матрицы операторов в обычной форме, введенной в предыдущем пункте параграфа, выберем в качестве векторов базиса e_m следующие линейные комбинации векторов:

$$\begin{aligned} e_1 &= -(e_x + ie_y)/2^{1/2}, \\ e_0 &= e_z, \\ e_{-1} &= (e_x - ie_y)/2^{1/2}. \end{aligned} \tag{7.45}$$

Нетрудно показать, что векторы e_m преобразуются по представлениям $\Gamma^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$ вращений вокруг оси z

[формула (7.13)]. Если отношения фазовых множителей выбрать в соответствии с условиями Кондона — Шортли [формула (7.40)], то, как мы убедимся ниже, три вектора e_m будут ортонормальны относительно скалярного произведения (3.7). Из равенств (7.23) непосредственно следуют соотношения

$$\begin{aligned} X_x e_x &= 0, & X_x e_y &= e_z, & X_x e_z &= -e_y, \\ X_y e_x &= -e_z, & X_y e_y &= 0, & X_y e_z &= e_x, \\ X_z e_x &= e_y, & X_z e_y &= -e_x, & X_z e_z &= 0. \end{aligned}$$

Путем замены $J_q = iX_q$ получаем

$$\begin{aligned} J_z e_1 &= e_1, & J_z e_0 &= 0, & J_z e_{-1} &= -e_{-1}, \\ J_+ e_1 &= 0, & J_+ e_0 &= 2^{1/2} e_1, & J_+ e_{-1} &= 2^{1/2} e_0, \\ J_- e_1 &= 2^{1/2} e_0, & J_- e_0 &= 2^{1/2} e_{-1}, & J_- e_{-1} &= 0. \end{aligned}$$

Поэтому в базисе векторов e_m матрицы операторов J_q имеют следующий вид:

$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad J_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.46)$$

Это согласуется с соотношениями (7.40) при $j=1$.

В качестве второго примера рассмотрим шестимерное пространство всех однородных квадратичных функций, введенное в гл. 3, § 2, п. Г. Оно инвариантно относительно любых поворотов, так как при вращении степень однородного полинома не меняется. Функция $x^2 + y^2 + z^2$ инвариантна. Значит, она порождает представление $D^{(0)}$. Оставшиеся пять функций образуют базис представления $D^{(2)}$. Это можно показать, вычислив характер представления или прямо построив эти функции, как это делается ниже.

Взяв выражение (7.21) для оператора X_z и проделав в нем циклическую перестановку индексов для двух других операторов, мы получим явные дифференциальные

выражения для инфинитезимальных операторов

$$J_z = i \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi},$$

$$J_y = i \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right),$$

$$J_x = i \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right).$$

Затем построим повышающий и понижающий операторы

$$J_+ = J_x + iJ_y = z \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - (x + iy) \frac{\partial}{\partial z},$$

$$J_- = J_x - iJ_y = -z \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) + (x - iy) \frac{\partial}{\partial z}.$$

Из тождества

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) (x + iy) = 0 \quad (7.47)$$

следует, что функция

$$\psi_2 = (x + iy)^2 = (x^2 - y^2) + 2ixy = r^2 \exp(2i\varphi)$$

отвечает старшему весу $m=2$, так как $J_+\psi_2=0$ и $J_z\psi_2=2\psi_2$. Последовательно применяя понижающий оператор, построим функции

$$\psi_1 = \frac{1}{2} J_- \psi_2 = -2z(x + iy),$$

$$\psi_0 = \left(\frac{1}{6} \right)^{1/2} J_- \psi_1 = - \left(\frac{2}{3} \right)^{1/2} (x^2 + y^2 - 2z^2),$$

$$\psi_{-1} = 2z(x - iy),$$

$$\psi_{-2} = (x - iy)^2.$$

Нормировочные множители мы взяли из равенств (7.40). Пять этих функций линейно-независимы. Вместе с инвариантной функцией $x^2 + y^2 + z^2$ они порождают шестимерное пространство квадратичных функций. Каждая функция ψ_m пропорциональна сферической функции $Y_m^{(l)}(\theta, \varphi)$ с $l=2$:

$$\psi_m = (32\pi/15)^{1/2} r^2 Y_m^{(2)}(\theta, \varphi).$$

Сферические функции удобнее всего определять именно таким способом. При других значениях l обычно начинают с функции $(x + iy)^l$, которая, согласно формуле (7.47), отвечает старшему весу. Затем последовательно приме-

няют понижающий оператор. Тогда при правильном выборе нормировочных и фазовых множителей получаются функции

$$Y_m^{(l)} = (-1)^m \left\{ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right\}^{1/2} \exp(im\varphi) \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l+m} \times \\ \times (\cos^2 \theta - 1)^{l/2} l! \quad (7.48)$$

для положительных чисел m , а также соотношение $Y_{-m}^l = (-1)^m Y_m^{(l)*}$. В частности, $Y_0^l = [(2l+1)/4\pi]^{1/2} P_l(\cos \theta)$, где P_l — полином Лежандра. Как мы покажем в § 5, сферические функции обладают тем свойством, что произведения $\psi(\mathbf{r}) = r^l Y_m^{(l)}(\theta, \varphi)$ являются решениями уравнения Лапласа $\nabla^2 \psi = 0$ при любом целом числе l . Это свойство часто рассматривают как определение сферических функций.

Преобразование сферических функций при вращении полезно записать в явном виде. Если θ, φ — угловые координаты вектора $\mathbf{r}$, а θ', φ' — угловые координаты вектора $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}$, то на основании общих определений (4.2) и (4.8) для преобразования функций получаем

$$D(\mathbf{R}) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) = Y_m^{(l)}(\theta', \varphi') = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(\mathbf{R}) Y_{m'}^{(l)}(\theta, \varphi).$$

Таким образом, сферическая функция, аргументами которой являются преобразованные координаты θ', φ' , представляется в виде суммы сферических функций первоначальных координат. Обратное преобразование вращения дается в виде

$$Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(\mathbf{R}^{-1}) Y_{m'}^{(l)}(\theta', \varphi') = \\ = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)*}(\mathbf{R}) Y_{m'}^{(l)}(\theta', \varphi'),$$

так как матрица представления унитарна. Координаты θ', φ' можно считать координатами точки $\mathbf{r}$ в новой системе координат, которая получается из первоначальной действием оператора вращения $\mathbf{R}$.

В качестве примера разложения (7.41) функции на ее неприводимые компоненты укажем разложение однозначной функции, зависящей от положения одной частицы,

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi). \quad (7.49)$$

Ортогональность сферических функций вытекает из общей формулы (4.38), поскольку индекс l соответствует неприводимому представлению группы $\mathcal{R}_3$, а индекс m — неприводимому представлению группы $\mathcal{R}_2$, т. е.

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_m^{(l)*}(\theta, \varphi) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{l'l} \delta_{m'm}. \quad (7.50)$$

Нормировочный множитель в определении функции $Y_m^{(l)}$ подобран в соответствии с этим равенством. Изложенный выше способ построения функций $Y_m^{(l)}$ гарантирует нам, что отношения фазовых множителей функций $Y_m^{(l)}$ при фиксированном числе l и различных индексах m согласованы с условиями (7.40).

Е. Неприводимые семейства операторов и теорема Вигнера — Экарта

В силу общего определения гл. 4, § 20 неприводимое относительно группы $\mathcal{R}_3$ семейство операторов — это множество операторов $S_p^{(k)}$ с фиксированными индексами $k=0, 1/2, 1, \dots$ и индексами $p=k, k-1, \dots, -k$, причем эти операторы преобразуются по неприводимому представлению $\mathbf{D}^{(k)}$. Число k называется степенью или рангом семейства. Мы убедились в § 2, что операторы из такого семейства должны удовлетворять следующим перестановочным соотношениям с инфинитезимальными операторами J_q группы $\mathcal{R}_3$:

$$[J_q, S_p^{(k)}] = \sum_r (J_q)_{rp}^{(k)} S_r^{(k)}, \quad (7.51)$$

где $(J_q)_{rp}^{(k)}$ — матричные элементы оператора J_q в представлении $\mathbf{D}^{(k)}$. Если матричные элементы из равенств (7.39) и (7.40) подставить в эти соотношения, определяющие неприводимое семейство операторов, то получим

$$\begin{aligned} [J_z, S_p^{(k)}] &= p S_p^{(k)}, \\ [J_{\pm}, S_p^{(k)}] &= \{(k \pm p + 1)(k \mp p)\}^{1/2} S_{p \pm 1}^{(k)}. \end{aligned} \quad (7.52)$$

Иногда для неприводимого семейства операторов пользуются введенным Рака термином «тензор-оператор». Неприводимые семейства операторов можно перемножать и затем разлагать вновь на неприводимые семейства с помощью коэффициентов Клебша — Гордана (п. Г).

Мы уже отмечали в гл. 3, § 8, п. В, что умножение на функцию можно рассматривать как оператор на пространстве функций. В этом смысле сферические функции $Y_p^{(k)}$ образуют неприводимое семейство при $p=k, k-1, \dots, -k$.

Сравнивая перестановочные соотношения (7.28) и (7.30) с соотношениями (7.52), мы видим, что сами инфинитезимальные операторы образуют неприводимое семейство с $k=1$. Оно называется «вектор-оператором». В самом деле, как нетрудно убедиться, неприводимое семейство

$$J_1^{(1)} = -J_+/2^{1/2}, \quad J_0^{(1)} = J_z, \quad J_{-1}^{(1)} = J_-/2^{1/2}$$

удовлетворяет обычным соотношениям (7.52), в которые включено условие Кондона — Шортли для фазовых множителей. Соотношения (7.52) не определяют операторы абсолютно. Поэтому мы произвольно положили $J_0^{(1)} = J_z$. После этого знаки и величины операторов $J_{\pm 1}^{(1)}$ определяются равенствами (7.52). Операторы $J_m^{(1)}$ иногда называют «сферическими» компонентами оператора J . Они аналогичны векторам базиса e_m , введенным в п. Д.

Согласно теореме Вигнера — Эккарта [формула (4.62)], матричные элементы операторов из неприводимого семейства связаны между собой. Группа $\mathcal{R}_3$ просто приводима. Поэтому индекс t в формуле (4.62) не нужен. Так как обычные коэффициенты Клебша — Гордана группы $\mathcal{R}_3$ действительны, теорему принято записывать в виде

$$\langle jm | S_q^{(k)} | j'm' \rangle = C(j'kj, m'qm) (-1)^{2k} \langle j | S^{(k)} | j' \rangle. \quad (7.53)$$

[Данное соотношение отличается от соотношения (4.62) тем, что в нем изменен порядок некоторых индексов коэффициента C , а также введен множитель $(-1)^{2k}$. Эти изменения незначительны и равносильны другому определению приведенного матричного элемента, которое лишь немного отличается от исходного. Мы пользовались обозначениями книги Бринка и Сэтклера (см. литературу). Они отличаются от обозначений, первоначально введенных Рака.]

Ж. Эквивалентные операторы

Чтобы пользоваться теоремой Вигнера — Эккарта [формула (7.53)] при решении практических задач, нужно знать коэффициенты векторного сложения (коэффициенты

Клебша — Гордана). Для этих коэффициентов имеются аналитические выражения, таблицы и вычислительные программы. Но в некоторых простых случаях так называемый метод эквивалентного оператора позволяет обойтись без этих коэффициентов. Сущность метода заключается в двукратном применении теоремы Вигнера — Экарта. Один раз теорема применяется к интересующему нас оператору, а второй — к эквивалентному оператору, который так же преобразуется при вращениях, но который легко вычислить. В отношении матричных элементов двух операторов коэффициент векторного сложения сокращается. При другом подходе эквивалентным оператором пользуются для вычисления коэффициента векторного сложения.

В качестве примера рассмотрим вектор-оператор V_q , т. е. семейство из трех операторов, которые преобразуются по неприводимому представлению $D^{(1)}$. Вектор углового момента J_q тоже является вектор-оператором. Тогда, согласно теореме Вигнера — Экарта [формула (7.53)], получаем

$$\begin{aligned}\langle JM | V_q | JM' \rangle &= C(J1J, M'qM) \langle J \| \mathbf{V} \| J \rangle, \\ \langle JM | J_q | JM' \rangle &= C(J1J, M'qM) \langle J \| \mathbf{J} \| J \rangle.\end{aligned}$$

Значит,

$$\langle JM | V_q | JM' \rangle = \langle JM | J_q | JM' \rangle \frac{\langle J \| \mathbf{V} \| J \rangle}{\langle J \| \mathbf{J} \| J \rangle}, \quad (7.54)$$

т. е. матричный элемент оператора V_q зависит от чисел M , M' и q так же, как матричный элемент оператора J_q , который определяется равенствами (7.39) и (7.40). От конкретного вида оператора V_q зависит лишь коэффициент пропорциональности. Такой способ применим к любой группе. Как и в разобранным примере, эквивалентный оператор обычно строится из инфинитезимальных операторов группы.

Метод эквивалентного оператора, как правило, непригоден для вычисления матричных элементов между функциями из разных представлений. В примере (7.54) матричные элементы эквивалентного оператора между векторами из представлений с числами J и $J' \neq J$ должны быть равны нулю, хотя для произвольного вектор-оператора, такого, как вектор положения $\mathbf{r}$, эти матричные элементы, вообще говоря, отличны от нуля.

§ 5. ОПЕРАТОР КАЗИМИРА

В случае группы $\mathcal{R}_2$ функцию, преобразующуюся по неприводимому представлению $\Gamma^{(m)}$, можно отождествить с собственным вектором единственного инфинитезимального оператора J_z , отвечающим собственному значению m . В случае группы $\mathcal{R}_3$ функцию $\psi(jm)$, преобразующуюся в соответствии с m -й строкой представления $D^{(j)}$, можно также отождествить с собственным вектором инвариантного квадратичного оператора

$$J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2. \quad (7.55)$$

Оператор J^2 инвариантен, так как нетрудно показать, что $[J^2, J_q] = 0$ при $q = x, y$ и z . Поэтому при сужении на неприводимое представление этот оператор должен быть пропорциональным единичному оператору. Иначе говоря, при фиксированном j все функции $\psi(jm)$ будут собственными векторами оператора J^2 , отвечающими одному и тому же собственному значению, не зависящему от m . В самом деле, мы доказали [формула (7.36)], что при любых m

$$J^2 \psi(jm) = j(j+1) \psi(jm). \quad (7.56)$$

Таким образом, функцию, принадлежащую представлению $D^{(j)}$, можно определить как собственный вектор оператора J^2 , отвечающий собственному значению $j(j+1)$.

Это общее утверждение для оператора J^2 проиллюстрируем на двух примерах из § 4, п. Д, где операторы J_q заданы в явном виде. Для первого примера, т. е. для трехмерного векторного пространства, пользуясь выражением (7.23), находим

$$J_x^2 \mathbf{r} = -X_x^2 \mathbf{r} = -\mathbf{e}_x \times (\mathbf{e}_x \times \mathbf{r}) = y\mathbf{e}_y + z\mathbf{e}_z.$$

Значит, $J^2 \mathbf{r} = 2\mathbf{r}$ и оператор J^2 равен удвоенному единичному оператору, что согласуется с выражением $j(j+1)$ при $j=1$.

Вид оператора J^2 на пространстве функций, зависящих от положения одной частицы, определяется операторами J_q , которые в § 4, п. Д заданы в явной дифференциальной форме. После некоторых алгебраических вычислений получаем

$$J^2 = -r^2 \left\{ \nabla^2 - \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right\}, \quad (7.57)$$

где $\nabla^2 = \partial^2/\partial x^2 + \partial^2/\partial y^2 + \partial^2/\partial z^2$. В § 4, п. Д мы убедились в том, что сферические функции $Y_m^{(l)}$ образуют базис представления $\mathbf{D}^{(l)}$. Поэтому $\mathbf{J}^2 Y_m^{(l)} = l(l+1)Y_m^{(l)}$, т. е.

$$r^2 \left\{ \nabla^2 - \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} \right) \right\} Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) = -l(l+1)Y_m^{(l)}(\theta, \varphi), \quad (7.58)$$

и, следовательно,

$$\nabla^2 r^l Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) = 0. \quad (7.59)$$

Иначе говоря, мы доказали, что функции $r^l Y_m^{(l)}(\theta, \varphi)$ — это решения уравнения Лапласа. Сферические функции действительно часто определяют таким способом. Мы же определили их в § 4, п. Д как векторы базиса представления $\mathbf{D}^{(l)}$. Теперь мы покажем, насколько важны сферические функции при решении уравнения Шредингера для одной частицы в поле со сферически-симметричным потенциалом $V(r)$. Соответствующее уравнение Шредингера [формула (5.4)] имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r) - E \right) \psi(\mathbf{r}) = 0.$$

Если мы представим решение в виде $\psi(\mathbf{r}) = u_{nl}(r) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi)$, то в силу равенства (7.58) радиальная волновая функция $u_{nl}(r)$ должна будет удовлетворять уравнению задачи на собственные значения

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2M} \left(\frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) + V(r) - E_{nl} \right] u_{nl}(r) = 0, \quad (7.60)$$

где n — радиальное квантовое число, которым различаются собственные числа E_{nl} с одинаковыми индексами l .

Оператор $\mathbf{J}^2$ называется оператором Казимира. Для любой группы Ли можно построить из инфинитезимальных операторов скалярный квадратичный оператор, называемый оператором Казимира (см. в литературе статью Рака). Кроме того, можно доказать, что этот оператор Казимира $\mathbf{C}$ дается выражением

$$\mathbf{C} = \sum_{p,q} (g^{-1})_{pq} \mathbf{X}_p \mathbf{X}_q, \quad (7.61)$$

где g — матрица с матричными элементами $g_{ij} = \sum_{st} c_{it}^s c_{js}^t$, а c_{it}^s — структурные константы из формулы (7.7).

Для перечисления неприводимых представлений групп, больших, чем группа $\mathcal{R}_3$, приходится вводить несколько чисел, подобных числу j . Число таких чисел называется рангом группы. Рассматривая кубические и более высокие степени операторов X_q , можно построить множество операторов Казимира данной группы. Все числа, нумерующие представления, связаны с собственными значениями операторов Казимира.

§ 6. ДВУЗНАЧНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

В случае конечных групп представление $\Gamma(G_a)$ каждому элементу группы G_a сопоставляет единственный оператор $\Gamma(G_a)$. В случае непрерывных групп представление $\Gamma(a)$ есть непрерывная функция параметров группы a . Поскольку существуют многозначные функции, возможны и многозначные представления непрерывных групп. Например, если в представлении $\Gamma^{(m)}(a) = \exp(-ima)$ группы $\mathcal{R}_2$, рассмотренном в § 3, п. А, выбрать $m = 1/2$, то мы получим $\Gamma^{1/2}(0) = 1$ и $\Gamma^{1/2}(2\pi) = -1$. Но поворот на угол 2π — это тот же элемент группы $\mathcal{R}_2$, что и поворот на нулевой угол. Значит, наше двузначное представление сопоставляет этому элементу как $+1$, так и -1 . Выбирая $m = 1/3$, получаем трехзначное представление. Аналогично из формулы (7.42) для характера представления $D^{(j)}$ группы $\mathcal{R}_3$ следует, что это представление однозначно, если j — целое число, и двузначно, если j — полуцелое число.

Среди решений уравнения Шредингера нет решений, соответствующих двузначным представлениям (§ 5), но с физической точки зрения такие представления в общем не исключаются в квантовой механике. В самом деле, представление $D^{(1/2)}$ группы $\mathcal{R}_3$ необходимо для описания спина, т. е. внутреннего углового момента электрона (гл. 8, § 4). Обратимся на некоторое время к квантовой механике. Допустим, что состояние $\Gamma(a)\psi$ представляет функцию ψ системы, преобразованную в соответствии с элементом группы $G(a)$. Тогда, если $G(a)G(b) = G(c)$, то система, преобразованная в соответствии с элементом группы $G(c)$, должна представляться как состоянием $\Gamma(c)\psi$, так и состоянием $\Gamma(a)\Gamma(b)\psi$. Фазовый множитель состояния не имеет физического смысла. Поэтому $\Gamma(a)\Gamma(b) = \omega(a, b)\Gamma(c)$, где ω — некоторый фазовый

множитель. Это более общее соотношение, нежели наше первоначальное определение представления [формула (4.1)]. Оно справедливо и для многозначных представлений, для которых не выполняется условие (4.1). Заметим, что определение (4.8) операторов представления $T(a)$ на пространстве однозначных функций приводит к фазовому множителю $\omega=1$ и, следовательно, исключает многозначные представления.

Удобный математический способ описания многозначных представлений состоит в расширении группы путем добавления новых элементов. Тогда многозначные представления становятся однозначными представлениями расширенной группы. (Такая расширенная группа называется «универсальной накрывающей группой».) В случае двузначных представлений группы $\mathcal{R}_2$ расширенную группу (ее часто называют «удвоенной группой») можно определить следующим образом. Обозначим символом $\bar{E}$ поворот на угол 2π . Этот оператор не совпадает с тождественным преобразованием E , но $\bar{E}^2=E$. Из соотношения (2.12) следует, что $\bar{E}R(a)\bar{E}=R(a)$, т. е. преобразование $\bar{E}$ коммутирует с любым преобразованием поворота. Значит, $R(a)\bar{E}R(a)^{-1}=\bar{E}$ и новый элемент $\bar{E}$ соответствует повороту на угол 2π вокруг *любой* оси. Расширенная группа строится путем включения новых элементов $\bar{E}R(a)$ наряду с первоначальными элементами $R(a)$, для которых $|a|\leq\pi$. При умножении двух элементов группы новый элемент $\bar{E}$ появляется в тех случаях, когда полный угол поворота превышает 2π . Такой геометрический способ описания удвоенной группы может показаться довольно туманным. Но, отождествив удвоенную группу с группой унитарных преобразований двумерного пространства, этому способу можно дать строгое алгебраическое обоснование (т. 2, гл. 18, § 13). (Введение удвоенной группы для исключения двузначных представлений имеет аналогию в теории функций комплексного переменного, где двузначная функция типа функции $z^{1/2}$ рассматривается как однозначная функция на двулистной римановой поверхности.)

То, что группа $\mathcal{R}_2$ имеет лишь однозначные и двузначные представления, тогда как группа $\mathcal{R}_2$ имеет n -значные

представления, причем n — любое целое число, можно было бы сказать заранее, тщательно проанализировав соотношение между множеством параметров и элементами группы. Мы лишь кратко рассмотрим этот вопрос, относящийся к так называемому свойству односвязности группы. У нас имеются три объекта: параметры группы $\mathbf{a}$, элемент группы $\mathbf{G}(\mathbf{a})$ и функция представления $T(\mathbf{a})$. Последовательное умножение бесконечно малых элементов группы соответствует некоторому пути в пространстве параметров $\mathbf{a}$. Предположим, что все пути, ведущие из единицы группы в какую-либо произвольную точку $\mathbf{a}$, можно получать один из другого за счет непрерывной деформации. Тогда представление $T(\mathbf{a})$ должно быть однозначным, так как у многозначной функции имеются скачки в значениях. Рассмотрим сначала группу $\mathcal{R}_2$. Ее единственный параметр a изменяется в интервале $0 \leq a \leq 2\pi$, причем оба конца интервала соответствуют единице группы. Наряду с прямым путем из точки 0 в точку a существуют пути, которые сначала достигают точки 2π и затем возобновляются в точке 0 (рис. 7.2). С точки зрения элементов группы такие пути непрерывны. В одномерном пространстве параметров невозможна какая-либо деформация путей. Поэтому пути вида I, II, III и т. д. нельзя деформировать один в другой. Существование таких различных путей приводит к появлению многозначных представлений. Пространство параметров группы $\mathcal{R}_3$ представляет собой шар радиусом π (§ 4), причем противоположные концы любого диаметра этого шара соответствуют одинаковым вращениям, т. е. $R_{\mathbf{k}}(\pi) = R_{-\mathbf{k}}(\pi)$ для любого вектора $\mathbf{k}$. Путь из единицы группы, т. е. из начала координат $\mathbf{a} = 0$, либо прямо ведет в заданную точку $\mathbf{a}$ (I на рис. 7.3), либо сначала доходит до граничной сферы, а затем возобновляется на противоположном конце диаметра (II на рис. 7.3). Интересным отличием группы $\mathcal{R}_3$

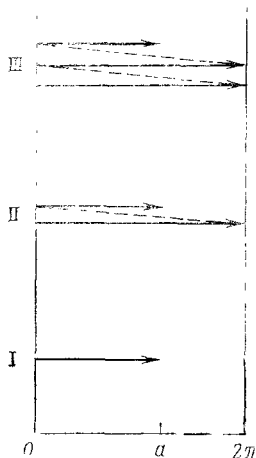


Рис. 7.2.

от группы $\mathcal{R}_2$ является то, что в группе $\mathcal{R}_3$ любой путь, который четное число раз подходит к граничной сфере, можно непрерывно деформировать в путь, который прямо ведет в конечную точку. Путь же, который подходит к граничной сфере нечетное число раз, можно также деформировать в путь, который подходит к граничной сфере лишь

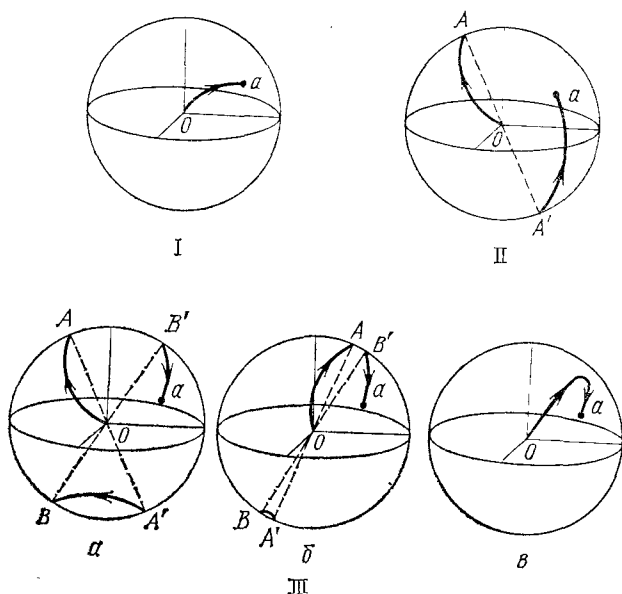


Рис. 7.3.

однажды (II на рис. 7.3). Поэтому для группы $\mathcal{R}_3$ возможны лишь однозначные и двужначные представления. Для пути, дважды подходящего к граничной сфере, на рис. 7.3, III показана последовательная деформация от положения a к положению b , а затем к положению $в$. При этом диаметр AA' поворачивается до тех пор, пока точка A не достигнет точки B' .

§ 7. КОМПЛЕКСНО-СОПРЯЖЕННОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ

В общем случае, если T — матричное представление группы, то матричным представлением будет также множество комплексно-сопряженных матриц T^* . Для группы

$\mathcal{R}_3$ представление $D^{(j)*}$ имеет тот же характер, что и представление $D^{(j)}$, так как характер (7.42) — действительная функция. Следовательно, эти представления эквивалентны. Найдем преобразование, связывающее эти представления. Прежде всего заметим, что матрицы (7.39) и (7.40) операторов J_z и $J_{\pm}$ действительны. Значит, матрицы операторов J_z и J_x действительны, а матрица оператора J_y — чисто мнимая. Поэтому при переходе от представления $D^{(j)}$ к представлению $D^{(j)*}$ из-за множителя i в определении оператора J_q (§ 4, п. А) знак операторов J_z и J_x должен меняться, а оператор J_y остается неизменным. Иначе говоря, $J_z \rightarrow -J_z$ и $J_{\pm} \rightarrow -J_{\mp}$. Из формул (7.39) и (7.40) видно, что такое преобразование получается при замене базиса e_m базисом $(-1)^{j-m} e_{-m}$. Фазовый множитель нужен для того, чтобы изменить знак повышающего и понижающего операторов.) Таким образом, матричные элементы представления $D^{(j)*}$ имеют вид

$$D_{m'm}^{(j)*} = (-1)^{m-m'} D_{-m'-m}^{(j)}.$$

Такое преобразование векторов базиса можно также осуществить с помощью матрицы $D^{(j)}(R_y(\pi))$, соответствующей повороту на угол π вокруг оси y , так как при таком вращении меняется на обратное направление осей x и z .

ЛИТЕРАТУРА

Последовательное изложение теории групп Ли можно найти в книге Бёрнера, 1963 (см. литературу к гл. 4) и в книге

Gilmor R., Lie Groups, Lie Algebras and Some of their Applications, Wiley, New York, 1974.

Теория углового момента, а также коэффициенты векторного сложения для группы $\mathcal{R}_3$ подробно разобраны в книгах

Brink D. M., Satchler G. R., Angular Momentum, Clarendon Press, Oxford, 1968.

Юцис А. П., Бандзайтис А. А. Теория момента количества движения в квантовой механике.— Вильнюс: Москлас, 1977¹⁾.

Таблицы коэффициентов векторного сложения для группы $\mathcal{R}_3$ приведены в книге

Rotenberg M., Bivins R., Metropolis N., Wooten J. K., The 3-j and 6-j Symbols, Technology Press, M. I. T., Cambridge, Mass., 1959.

Следующий сборник содержит среди других работ оригинальные статьи Рака, в которых впервые введены алгебраические соотношения для углового момента:

¹⁾ Добавлено при переводе.— Прим. ред.

Biedenharn L. C., van Dam H., Quantum Theory of Angular Momentum, Academic Press, New York, 1965.

Оператор Казимира описан в работе

Racah G., Rend. Accad. Lincei, 1950, v. 8, p. 108.

ЗАДАЧИ

- 7.1. На основании примера 2 из § 3, п. Г докажите, что функции $x \pm iy$ преобразуются по представлениям $T^{(\pm 1)}$ группы $\mathcal{R}_2$. Классифицируйте шесть квадратичных функций переменных x, y и z в соответствии с их трансформационными свойствами по отношению к группе $\mathcal{R}_2$.
- 7.2. Объясните, почему несобственные вращения (с определителем, равным -1), взятые сами по себе, не образуют группы.
- 7.3. Введя декартовы координаты, запишите инфинитезимальный оператор (7.20) вращений вокруг оси z в виде $X_z = y(\partial/\partial x) - x(\partial/\partial y)$. Рассматривая соответствующие выражения для инфинитезимальных операторов вращений вокруг двух других осей, проверьте перестановочные соотношения (7.25).
- 7.4. Покажите, что $[J_+, J_-] = 2J_z$ и $[J^2, J_q] = 0$. [Нужно воспользоваться соотношениями (7.26).]
- 7.5. С помощью равенств (7.40) постройте матрицы операторов J_x, J_y и J_z при $j = 1/2$ (матрицы Паули), а также соответствующие матрицы при $j = 1$ [формула (8.15)].
- 7.6. Найдите характер представления $D^{(2)}$ группы $\mathcal{R}_3$ для вращений, принадлежащих подгруппе D_3 . На основании таблицы характеров (табл. 4.2) найдите представления группы D_3 , которые получаются при разложении ограничения представления $D^{(2)}$ на подгруппу D_3 .
- 7.7. Согласно равенству (7.44), произведение представлений $D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)}$ содержит представление $D^{(1)}$. В обозначениях формулы (4.46) очевидно равенство $\Psi_1^{(1)} = \varphi_{1/2}^{(1/2)} \psi_{1/2}^{(1/2)}$, поскольку имеется только одна функция с $m = 1$. Действуя на $\Psi_1^{(1)}$ [формула (7.40)] понижающим оператором [формула (7.11)] $J_- = J_-(1) + J_-(2)$, где $J_-(1)$ — оператор, действующий на функцию φ , а $J_-(2)$ — на функцию ψ , постройте вектор $\Psi_0^{(1)}$ и затем найдите коэффициенты Клебша — Гордана $C(1/2, 1/2, 1, 1/2 - 1/2, 0)$ и $C(1/2, 1/2, 1, -1/2, 1/2, 0)$ [в обозначениях формулы (4.46)].
- 7.8. Вычислите коэффициенты Клебша — Гордана, выделяющие из произведения представлений $D^{(1)} \otimes D^{(2)}$ вектор с $j = 1, m = 0$. Вычисления нужно проводить в такой последовательности: I. Записать вектор $\Psi_1^{(1)}$ в виде $\Psi_1^{(1)} = \alpha \varphi_1^{(1)} \psi_0^{(2)} + \beta \varphi_0^{(1)} \psi_1^{(2)} + \gamma \varphi_{-1}^{(1)} \psi_2^{(2)}$ и с помощью условия $J_+ \Psi^{(1)} = 0$ вычислить отношения $\alpha : \beta : \gamma$. (В силу линейной независимости векторов из любого соотношения типа $a \varphi_1^{(1)} \psi_1^{(2)} + b \varphi_0^{(1)} \psi_2^{(2)} = 0$ следует, что $a = b = 0$.) II. Найти числа α, β, γ , считая, что они нормированы условием $\alpha^2 + \beta^2 + \gamma^2 = 1$, а число α положительно. III. Действуя понижающим оператором J_- на вектор $\Psi_1^{(1)}$, получить вектор $\Psi_0^{(1)}$.

- 7.9. Взяв коэффициенты Клебша — Гордана из задачи 7.7 и формулу для произведения D-матриц в конце § 4, п. Г, получите из матрицы $D^{(1/2)}$, заданной формулой (20.38), матрицу $D^{(1)}$. [Результат должен согласоваться с общей формулой (20.40).]
- 7.10. Постройте сферические функции $Y_m^{(3)}$ методом, изложенным в § 4, п. Д. Проверьте полученные выражения по общей формуле (7.48).
- 7.11. Применяя понижающий оператор, покажите, что набор трех функций $-(x+iy)/2^{(1/2)}$, z и $(x-iy)/2^{(1/2)}$ принадлежит представлению $D^{(1)}$.
- 7.12. Функции ψ_m с индексами $m=2, 1, \dots, -2$, построенные в § 4, п. Д, преобразуются по представлению $D^{(2)}$ и образуют тензор-оператор ранга два. Поэтому, согласно теореме Вигнера — Экарта [формула (7.53)], все их матричные элементы для векторов базиса задачи 7.11 должны быть связаны с одним приведенным матричным элементом. Проверьте это для некоторых матричных элементов двумя способами: а) пользуясь формулой (7.53) с коэффициентами Клебша — Гордана из задачи 7.8; б) вычислив интегралы с использованием скалярного произведения из § 2, п. Г, т. е. проинтегрировав по единичной сфере.
- 7.13. Покажите $\langle j \| J \| j \rangle = \{j(j+1)\}^{1/2}$. [Запишите оператор J^2 в виде $J^2 = \sum_q J_q J_q^\dagger$ и вычислите матричный элемент $\langle jm | J^2 | jm \rangle$, проводя суммирование по «промежуточным состояниям» $\sum_{q, m'} \langle jm | J_q | jm' \rangle \langle jm' | J_q^\dagger | jm \rangle$ с помощью формулы (7.53) и соотношения нормировки для коэффициентов векторного сложения.
- 7.14. Докажите, что коэффициенты Клебша — Гордана $C(l, l, 0, m-m, 0)$ имеют следующий простой вид:

$$C(l, l, 0, m-m, 0) = (-1)^{l-m} / (2l+1)^{1/2}.$$
 Указание. Воспользуйтесь методом задачи 7.8. Для этого нужно
 а) записать вектор $\Psi_0^{(0)}$ в виде $\Psi_0^{(0)} = \sum_m C(l, l, 0, m-m, 0) \psi_m^{(l)} \psi_{-m}^{(l)}$;
 б) из условия $J_+ \Psi_0^{(0)} = 0$ найти соотношения между коэффициентами; в) применить соотношение нормировки и условие $C(l, l, 0, l-l, 0) > 0$.
 Постройте из пяти сферических функций $Y_m^{(2)}$ инвариант относительно преобразований из группы $\mathcal{R}_3$.
- 7.15. Покажите, что для группы $\mathcal{R}_3$ общее определение (7.61) оператора Казимира приводит к оператору $G = -1/2 J^2$.

УГЛОВОЙ МОМЕНТ И ГРУППА $\mathcal{R}_3$, ПРИЛОЖЕНИЕ К СТРУКТУРЕ АТОМА

В гл. 7 мы исследовали свойства группы $\mathcal{R}_3$ и отметили связь между инфинитезимальными операторами этой группы и операторами углового момента. В данной главе мы рассмотрим эту связь подробнее на примере сначала одной частицы, а затем и системы частиц, причем введем понятие внутреннего спина. Далее будет рассмотрен реальный пример атомной структуры, в котором неоднократно проявляется наличие симметрии $\mathcal{R}_3$. Мы не ограничимся атомом водорода, но рассмотрим также многоэлектронные атомы.

§ 1. ВРАЩАТЕЛЬНАЯ ИНВАРИАНТНОСТЬ И ЕЕ СЛЕДСТВИЯ

Если гамильтониан сферически-симметричен, что означает отсутствие выделенных направлений в пространстве, то его группой симметрии является группа $\mathcal{R}_3$. Поэтому для него будут справедливы все общие следствия, перечисленные в гл. 5. Познакомившись с группой $\mathcal{R}_3$ в гл. 7, мы можем теперь более детально рассмотреть эти следствия.

Прежде всего, каждое собственное значение несет индекс $j=0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ неприводимого представления $\mathbf{D}^{(j)}$ группы $\mathcal{R}_3$. Каждый уровень энергии E будет вырожденным с кратностью $2j+1$, причем соответствующие собственные функции образуют базис представления $\mathbf{D}^{(j)}$. Эти собственные функции можно различать по их поведению при поворотах вокруг некоторой выбранной оси (назовем ее осью z). Это соответствует разложению (7.38)

$$\mathbf{D}^{(j)} = \sum_{m=-j}^j \Gamma^{(m)} \quad (8.1)$$

представления $\mathbf{D}^{(j)}$ на неприводимые представления $\Gamma^{(m)}$ подгруппы $\mathcal{R}_2$. Поэтому все уровни энергии можно обозначать через $E(\gamma j)$, а волновые функции — через $\psi(\gamma j m)$, где γ — совокупность всех остальных квантовых чисел, не имеющих отношения к вращательной инвариантности.

Поэтому волновая функция $\psi(\gamma j m)$, как мы видели в гл. 7, является собственной функцией двух операторов: оператора J_z бесконечно малых вращений вокруг оси z и оператора Казимира J^2 . Из равенств (7.39) и (7.36) следует, что

$$\begin{aligned} J_z \psi(\gamma j m) &= m \psi(\gamma j m), \\ J^2 \psi(\gamma j m) &= j(j+1) \psi(\gamma j m). \end{aligned} \quad (8.2)$$

На данном этапе мы не уточняли никаких свойств рассматриваемой физической системы, кроме ее сферической симметрии, так что пока нельзя говорить о явном виде и физическом смысле операторов J_q . Но тем не менее уже можно утверждать справедливость равенств (8.2).

Ввиду инвариантности гамильтониана операторы J_x , J_y , J_z , а также оператор J^2 коммутируют с ним и поэтому сохраняются в обычном смысле этого термина (гл. 5, § 5).

Если мы классифицируем все операторы перехода соответственно их поведению при вращениях, то правила отбора по j следуют непосредственно из результатов гл. 5, § 4 совместно с правилом (7.44) для разложения произведения представлений группы $\mathcal{R}_3$. Пусть, например, j и j' — индексы, характеризующие начальное и конечное состояния системы по отношению к группе $\mathcal{R}_3$; далее, пусть рассматриваемый оператор перехода преобразуется по представлению $\mathbf{D}^{(k)}$. Тогда при данном значении j индекс конечного состояния j' может принимать лишь одно из следующих значений:

$$j' = (j+k), (j+k-1), \dots, |j-k|. \quad (8.3)$$

Напомним (гл. 7, § 4, п. Д), что сферическая гармоника Y_q^k преобразуется по представлению $\mathbf{D}^{(k)}$. В частности, дипольные операторы перехода (гл. 5, § 4), преобразующиеся по векторному представлению $\mathcal{R}_3$, соответствуют значению $k=1$. Разложение (7.49) произвольной функции по сферическим гармоникам часто называется мультипольным разложением, причем член с Y_q^k соответ-

вует мультиполью степени 2^k . (Можно показать, что 2^k — это минимальное число точечных зарядов, необходимых для создания потенциального поля, пропорционального одной сферической гармонике Y_q^k с фиксированным k .) Переход, вызываемый оператором, преобразующимся по представлению $D^{(k)}$, называют 2^k -польным, а именно: дипольным при $k=1$, квадрупольным при $k=2$, октупольным при $k=3$ и т. д.

Если расширить группу с $\mathcal{R}_3$ до O_3 , включив в нее инверсию (отражение), то, поскольку группа $O_3 = \mathcal{R}_3 \times S_2$ есть прямое произведение групп, система будет наряду со свойствами, описанными выше в случае группы $\mathcal{R}_3$, иметь также свойства, соответствующие группе S_2 (гл. 5, § 6). Иными словами, состояния будут обозначаться индексами jm , а также четностью ± 1 . В частности, нетрудно видеть, что в силу своего построения (гл. 7, § 4, п. Д) сферические гармоники Y_q^k имеют четность $(-1)^k$.

§ 2. ОРБИТАЛЬНЫЙ УГЛОВОЙ МОМЕНТ СИСТЕМЫ ЧАСТИЦ

В квантовой механике орбитальный угловой момент одной частицы получают путем замены $\mathbf{r} \rightarrow -i\hbar \nabla$ в классическом выражении $\mathbf{r} \times \mathbf{p}$. Таким образом, имеем (в единицах $\hbar$)

$$l_z = -i [\mathbf{r} \times \nabla]_z = -i \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \quad (8.4)$$

где φ — угол в полярной системе координат на плоскости, перпендикулярной оси z . В то же время, как явствует из формулы (7.20), выражение для оператора бесконечно малых вращений в пространстве собственных функций одной частицы имеет вид

$$J_z = -i \frac{\partial}{\partial \varphi} = l_z. \quad (8.5)$$

Таким образом, в случае одной частицы инфинитезимальный оператор вращений идентичен оператору углового момента (в единицах $\hbar$). (Ввиду того что выделение оси z не имеет особого смысла, тот же вывод в равной мере справедлив для всех трех компонент углового момента.)

Волновые функции с полуцелым значением углового момента неприемлемы в качестве решений (гл. 7, § 3,

п. А), так как они не являются непрерывными функциями угла во всем интервале его значений от нуля до 2π .

Что касается обозначений, то мы до сих пор обозначали операторы углового момента символом J_q , а собственные значения — маленькими буквами j_m . Переходя к рассмотрению системы частиц, удобно сохранить в дальнейшем маленькие буквы за величинами, относящимися к одной частице (и за операторами, и за собственными значениями); заглавные же буквы будут применяться для систем, состоящих из нескольких частиц. Кроме того, мы обозначаем через L (или l) орбитальный угловой момент, а через S (или s) — внутренний спин (который будет введен в § 4). Символом J (или j) мы будем обозначать полный угловой момент (сумму орбитального и спинного моментов).

Рассмотрим теперь систему из n частиц. Полный орбитальный угловой момент системы, обозначаемый через $\mathbf{L}$, дается выражением

$$\mathbf{L} = \sum_{i=1}^n \mathbf{l}(i) = \sum_i [\mathbf{r}(i) \times \mathbf{p}(i)]/\hbar,$$

так что, в частности,

$$L_z = -i \sum_i \frac{\partial}{\partial \varphi_i}, \quad (8.6)$$

где, как и в выражении (8.4), величина φ_i есть полярный угол i -й частицы. Чтобы связать этот оператор с вращениями, проведем те же рассуждения, что привели нас к формуле (7.20). Обозначим произвольную волновую функцию системы через $\Psi(r_1, \theta_1, \varphi_1, r_2, \theta_2, \varphi_2, \dots, r_n, \theta_n, \varphi_n)$; тогда непосредственное обобщение формулы (7.17) будет состоять в том, что поворот всей системы на угол a вокруг оси z оставляет неизменными все r_i и θ_i , тогда как углы φ_i заменяются углами $\varphi_i - a$. Поэтому, опуская для краткости аргументы r_i и θ_i , имеем

$$T(\mathcal{R}_z(a)) \Psi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n) = \Psi(\varphi_1 - a, \varphi_2 - a, \dots, \varphi_n - a).$$

При малых a разложим правую часть этого уравнения как функцию n переменных в ряд Тейлора. Тогда, удерживая

живая лишь два первых слагаемых, получаем

$$\begin{aligned} T(R_z(a)) \Psi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n) \approx & \Psi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n) - \\ & - \sum_i a \frac{\partial}{\partial \varphi_i} \Psi(\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n), \end{aligned}$$

так что можно написать

$$R_z(a) \approx 1 - a \sum_i \frac{\partial}{\partial \varphi_i}. \quad (8.7)$$

Таким образом, оператор бесконечно малого поворота системы частиц имеет вид

$$J_z = -i \sum_i \frac{\partial}{\partial \varphi_i} = L_z.$$

Сравнивая это выражение с (8.6), мы приходим к выводу, что оператор полного углового момента для системы частиц в точности совпадает (в единицах $\hbar$) с оператором бесконечно малого поворота этой системы. Именно к такому выводу мы пришли ранее в случае одной частицы.

§ 3. СЛОЖЕНИЕ УГЛОВЫХ МОМЕНТОВ

Рассмотрим двухчастичную волновую функцию, равную произведению двух одночастичных волновых функций:

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \psi_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2). \quad (8.8)$$

Здесь индексы l — одночастичные угловые моменты, а индексы m — их z -компоненты. Под влиянием вращения $R(a)$ функция Ψ претерпевает преобразование

$$\begin{aligned} \Psi' = T(R(a)) \Psi = \psi'_{l_1 m_1} \psi'_{l_2 m_2} = \sum_{m'_1 m'_2} D^{(l_1)}_{m'_1 m_1}(a) D^{(l_2)}_{m'_2 m_2}(a) \times \\ \times \psi_{l_1 m'_1} \psi_{l_2 m'_2}. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что набор из $(2l_1+1)(2l_2+1)$ функций мультипликативного вида (8.8) образует базис в произведении представлений $D^{(l_1)} \otimes D^{(l_2)}$ группы $\mathcal{R}_3$. Разложение произведения представлений на его неприводимые составляющие

$$D^{(l_1)} \otimes D^{(l_2)} = \sum_{|l_1-l_2|}^{(l_1+l_2)} D^{(L)} \quad (8.9)$$

было получено в гл. 7, § 4, п. Г. Но поскольку полный угловой момент пары частиц соответствует вращению всей пары, он может принимать только значения

$$L = (l_1 + l_2), (l_1 + l_2 - 1), \dots, |l_1 - l_2|. \quad (8.10)$$

Равенство (8.10) называется правилом векторного сложения угловых моментов. В классической механике угловой момент есть вектор, так что сумма двух угловых моментов $\mathbf{l}_1$ и $\mathbf{l}_2$ получается путем обычного сложения векторов $\mathbf{L} = \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2$. Поэтому модуль вектора $\mathbf{L}$ зависит от угла между векторами $\mathbf{l}_1$ и $\mathbf{l}_2$ и лежит в пределах от $|\mathbf{l}_1| + |\mathbf{l}_2|$ до $||\mathbf{l}_1| - |\mathbf{l}_2||$. Эта классическая аналогия и дала название «правила векторного сложения» равенству (8.10); оно стремится к классическому результату в пределе больших угловых моментов и малых значений $\hbar$.

В случае вращений вокруг оси z имеет место простое свойство аддитивности представлений группы $\mathcal{R}_2$ (гл. 7, § 3, п. В)

$$\Gamma^{(m_1)} \otimes \Gamma^{(m_2)} = \Gamma^{(m_1 + m_2)}.$$

Оно означает, что z -компонента полного углового момента точно равна сумме соответствующих z -компонент обеих частиц. Собственные функции оператора полного углового момента даются теми комбинациями мультипликативных функций (8.8), которые обеспечивают разложение (8.9); как было показано выше (гл. 7, § 4, п. Г), этому требованию удовлетворяют коэффициенты Клебша — Гордана. Запишем эти собственные функции в виде

$$\Psi_{LM}(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \sum_{\substack{m_1 \\ (m_2 = M - m_1)}}^{m_1, l_2, L, m_1, m_2, M} C(l_1 l_2 L, m_1 m_2 M) \psi_{l_1 m_1}(\mathbf{r}_1) \psi_{l_2 m_2}(\mathbf{r}_2). \quad (8.11)$$

Они обладают следующими свойствами:

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^2 \Psi_{LM} &= L(L+1) \Psi_{LM}, \\ \mathbf{L}_z \Psi_{LM} &= M \Psi_{LM}. \end{aligned}$$

Добавляя последовательно угловой момент каждой новой частицы, по правилу (8.10) можно вычислить полный угловой момент любого числа частиц. В силу принципа Паули некоторые состояния полного углового момента могут оказаться неприемлемыми с физической точки зрения, но этот вопрос мы рассмотрим позже (§ 6, п. Г), когда уже введем понятие внутреннего спина.

§ 4. ВНУТРЕННИЙ СПИН

Считается, что все физические системы состоят из частиц, таких, как электроны, протоны, нейтроны и т. п. Каждой точечной частице приписываются конечная масса и конечный заряд. Эксперимент же показывает, что такая картина неполна и, в частности, не позволяет объяснить поведение уровней энергии атома водорода при наличии слабого магнитного поля. Как мы увидим ниже, приходится сделать вывод, что точечным частицам нужно приписать еще и внутренний угловой момент (спин) и, следовательно, внутренний магнитный момент. Внутренний спин и магнитный момент считают столь же фундаментальными характеристиками частиц, как их масса и заряд. Даже в состоянии покоя частица имеет некий спин и отличный от нуля магнитный момент. Более того, магнитный момент может иметь (и имеет) частица, подобная нейтрону и не обладающая зарядом. Можно считать, что этот магнитный момент обусловлен зарядовыми токами внутри частицы, которая обладает отличным от нуля полным магнитным моментом, но равным нулю полным зарядом. Почти все элементарные частицы, такие, как электрон, протон и нейтрон, обнаруживают в эксперименте спин, равный $\frac{1}{2}\hbar$, но, например, ρ -мезон имеет спин $\hbar$, а Ω^- -гиперон — спин $\frac{3}{2}\hbar$. Полуцелые значения углового момента (в единицах $\hbar$) не встречались при описании орбитального движения частиц, но их появление нельзя считать совершенно неожиданным. Достаточно вспомнить о связи, установленной в § 2, между оператором углового момента и операторами вращений, а также описание (гл. 7, § 4) неприводимых представлений $D^{(J)}$ группы вращений целыми или полуцелыми значениями J . Причина, по которой мы отказались от функций с полуцелыми значениями J при описании орбитального движения частиц, становится несущественной в случае спиновых переменных. Дело в том, что орбитальное движение описывается дифференциальным уравнением Шредингера, решения которого должны быть непрерывными функциями. Волновая же функция, соответствующая полуцелым значениям J , приобретает множитель -1 при повороте на полный угол 2π и, следовательно, не является непрерывной. Спиновая степень

свободы не описывается уравнением Шредингера, но, как будет показано в т. 2 (гл. 15), естественно возникает при релятивистском описании. При решении подобных уравнений появление полужелтого спина не приводит к трудностям, а изменение знака волновой функции не влияет на вероятность $|\Psi|^2$.

Чтобы показать необходимость введения понятия спина для объяснения наблюдаемых явлений, рассмотрим прежде всего влияние однородного внешнего магнитного поля на уровни энергии электрона, движущегося в сферически-симметричном потенциальном поле. Рассмотрим, в частности, $(2l+1)$ -кратно вырожденный уровень энергии E_l , соответствующий значению l углового момента импульса, а также набор волновых функций $\psi(lm)$, где $m=l, l-1, \dots, -l$. Дополнительное слагаемое в гамильтониане, учитывающее наличие постоянного магнитного поля с напряженностью B , имеет вид

$$\frac{e\hbar B l_z}{2M_e c}. \quad (8.12)$$

Здесь ось z выбрана в направлении магнитного поля, $-e$ и M_e — заряд и масса электрона, а c — скорость света. Оператор $-e\hbar l_z/2M_e c$ называется оператором магнитного момента, а коэффициент при $B l_z$ называют магнетоном Бора и обозначают через μ_B :

$$\mu_B = e\hbar/2M_e c. \quad (8.13)$$

Заметим, что вклад (8.12) в гамильтониан пропорционален угловому моменту частицы и напряженности поля. Слагаемое (8.12) коммутирует с исходным гамильтонианом $T+V(r)$, и его влияние на спектр сводится просто к снятию вырождения и расщеплению спектра. Функции $\psi(lm)$ будут также собственными функциями нового гамильтониана и будут соответствовать энергиям $E_{nl} + \mu_B B m$. Такое расщепление уровней в магнитном поле носит название эффекта Зеемана. С точки зрения теории групп симметрия гамильтониана понизилась с $\mathcal{R}_3$ до $\mathcal{R}_2$, так что $(2l+1)$ -кратно вырожденный уровень расщепляется на $(2l+1)$ подуровней, индицируемых по неприводимым представлениям $\Gamma^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$.

Основное состояние атома водорода и почти любой системы со сферически-симметричным потенциалом при-

тяжения соответствует значению $l=0$, а потому является невырожденным и не может быть расщеплено. Однако эксперименты все же обнаруживают его расщепление на два уровня. Этот факт заставляет предположить наличие другой степени свободы, кроме пространственных координат, причем по крайней мере для основного состояния эта дополнительная степень свободы допускает лишь два возможных состояния. Кроме того, взаимодействие с магнитным полем говорит о том, что это расщепление, по-видимому, обусловлено наличием некоего дополнительного углового момента. Тот факт, что состояние с $l=0$ расщепляется на два уровня, указывает на значение спина, равное $1/2\hbar$, поскольку $2J+1=2$ при $J=1/2$. Спиновый угловой момент обычно обозначают символом s . Можно без труда убедиться в том, что расщепление возбужденных состояний с $l \neq 0$ также вполне совместимо с гипотезой $s=1/2\hbar$ для электрона. Посмотрим теперь, как выразить сказанное в строгой математической форме.

Любой частице определенного типа, например электрону, приписывается спин s ; предположим, что возможные спиновые состояния частицы натягиваются на базисный набор $2s+1$ состояний $\chi_{ms}^{(s)}$ с $m_s=s, s-1, \dots, -s$. Предполагается, что при вращениях эти состояния преобразуются по неприводимому представлению $D^{(s)}$ группы $\mathcal{R}_3$:

$$(\chi_{m_s}^{(s)})' = T(R(a)) \chi_{m_s}^{(s)} = \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(a) \chi_{m'_s}^{(s)}, \quad (8.14)$$

где s может быть как целым, так и полужелым. Иными словами, предполагается, что эти состояния ведут себя подобно собственным функциям углового момента. Поскольку размерность пространства спиновых состояний конечна и равна $2s+1$, операторы бесконечно малых вращений имеют для них ту же форму, что и матрицы инфинитезимальных операторов, полученные в общем виде в гл. 7, § 4, п. Б. Обозначив эти операторы через s_x, s_y, s_z , находим по формуле (7.40) при конкретных значениях s

$$s = \frac{1}{2} \quad s_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2} i \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix};$$

$$s=1 \quad s_x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix},$$

$$s_y = \frac{1}{2} i \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{2} & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.15)$$

При $s=1/2$ принято обозначение $\sigma=2s$, причем три оператора σ называются спинowymi матрицами Паули. Согласно формулам (7.36) и (7.39), базисные состояния являются собственными состояниями операторов s_z и s^2 :

$$s_z \chi_{m_s}^{(s)} = m_s \chi_{m_s}^{(s)},$$

$$s^2 \chi_{m_s}^{(s)} = s(s+1) \chi_{m_s}^{(s)}.$$

Оператор s_z принято называть z -компонентой спина, а оператор s^2 — квадратом полного спина. Как справедливо для углового момента вообще, можно составить из линейных комбинаций базисных состояний $\chi_{m_s}^{(s)}$ новый базис, в котором любая другая выбранная компонента спина будет диагональна.

Для системы частиц можно определить операторы полного спина частиц $S_q = \sum_i s_q(i)$ точно так же, как был определен в § 2 полный орбитальный угловой момент L_q . Тогда из результатов § 3 сразу следует правило сложения спинов.

Полная волновая функция частицы со спином s должна описывать как орбитальное, так и спиновое состояние, и ее можно записать в общем виде

$$\Psi = \sum_{m_s=-s}^s \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}, \quad (8.16)$$

где коэффициенты $\varphi_{m_s}(\mathbf{r})$ — произвольные функции координат. В каждой точке $\mathbf{r}$ волновая функция Ψ имеет не просто численное значение: ей соответствует также определенное спиновое состояние. Споровое состояние частицы может быть представлено вектором-столбцом с

$2s+1$ компонентами. Если ввести обозначения

$$\chi_s^{(s)} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \chi_{s-1}^{(s)} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix} \text{ и т. д.,}$$

то произвольную волновую функцию (8.16) можно записать в виде

$$\Psi = \begin{pmatrix} \varphi_s(\mathbf{r}) \\ \varphi_{s-1}(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (8.17)$$

Считается, что спиновые состояния $\chi_{m_s}^{(s)}$ образуют ортонормированную систему базисных векторов в $(2s+1)$ -мерном векторном пространстве, описывающем спиновое состояние частицы. Иными словами, предполагается существование скалярного произведения, обладающего свойством

$$(\chi_{m'_s}^{(s)}, \chi_{m_s}^{(s)}) = \delta_{m'_s, m_s}.$$

Для двух полных волновых функций $\tilde{\Psi}$ и Ψ , определенных равенством (8.16), скалярное произведение предполагается содержащим две операции: интегрирование по пространству координат $\mathbf{r}$ и скалярное произведение в спиновом пространстве, т. е.

$$\begin{aligned} (\tilde{\Psi}, \Psi) &= \sum_{m_s m'_s} \int \tilde{\varphi}_{m'_s}^*(\mathbf{r}) \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} (\chi_{m'_s}^{(s)}, \chi_{m_s}^{(s)}) = \\ &= \sum_{m_s} \int \tilde{\varphi}_{m_s}^*(\mathbf{r}) \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}. \end{aligned}$$

Действие вращения на Ψ состоит в изменении как φ , так и χ , а потому на основании формул (3.37) и (8.14) имеем

$$\mathbf{T}(\mathbf{R}) \Psi = \sum_{m_s} \varphi_{m_s}(\mathbf{R}^{-1} \mathbf{r}) (\chi_{m_s}^{(s)})'.$$

При малом вращении вокруг оси z на угол a имеем по определению (7.4) [вводя, как указано перед формулой (7.26), множители i]

$$\begin{aligned} T(R) \Psi &\approx \sum_{m_s} (1 - ial_z) \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) (1 - ias_z) \chi_{m_s}^{(s)} \approx \\ &\approx \sum_{m_s} [1 - ia(l_z + s_z)] \varphi_{m_s}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)} \approx \\ &\approx [1 - ia(l_z + s_z)] \Psi. \end{aligned} \quad (8.18)$$

Таким образом, инфинитезимальным оператором для полной волновой функции Ψ является сумма $l_z + s_z$ орбитального и спинного угловых моментов. Введем обозначение $j_z = l_z + s_z$ и будем далее называть j полным угловым моментом частицы (в единицах $\hbar$).

Действие конечного вращения $R(\mathbf{a})$ на функцию Ψ таково:

$$\begin{aligned} T(R) \Psi &= \sum_{m_s} \varphi_{m_s}(R^{-1}\mathbf{r}) (\chi_{m_s}^{(s)})' = \\ &= \sum_{m_s} \varphi_{m_s}(R^{-1}\mathbf{r}) \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{a}) \chi_{m'_s}^{(s)} = \\ &= \sum_{m'_s} \left\{ \sum_{m_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{a}) \varphi_{m_s}(R^{-1}\mathbf{r}) \right\} \chi_{m'_s}^{(s)}. \end{aligned} \quad (8.19)$$

Поэтому если ввести теперь преобразованные функции $\tilde{\varphi}_{m'_s}(\mathbf{r})$, определив их равенством $T(R)\Psi = \sum_{m'_s} \tilde{\varphi}_{m'_s}(\mathbf{r}) \chi_{m'_s}^{(s)}$

или с учетом выражения (8.17) равенством

$$T(R) \Psi = \begin{pmatrix} \tilde{\varphi}_s(\mathbf{r}) \\ \tilde{\varphi}_{s-1}(\mathbf{r}) \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix},$$

то получим

$$\tilde{\varphi}_{m'_s}(\mathbf{r}) = \sum_{m_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{a}) \varphi_{m_s}(R^{-1}\mathbf{r}). \quad (8.20)$$

Заметим, что суммирование здесь проводится по второму индексу матрицы вращения, а не по первому, как было в формуле (8.14). Это объясняется тем, что равен-

ство (8.20) выражает преобразование «координат», а не базисных векторов.

Действие вращения на Ψ [формула (8.19)] выражается в преобразованиях как функций координат, так и спинных состояний. В ряде случаев удобно рассматривать действие вращения на эти две части волновой функции отдельно. Операторы s_q можно рассматривать как инфинитезимальные операторы группы вращений $\mathcal{R}_3^s$ в спинном пространстве, тогда как операторы l_q описывают группу вращений $\mathcal{R}_3^l$ в пространстве координат. Набор из шести операторов r_q, l_q описывает прямое произведение групп $\mathcal{R}_3^l \times \mathcal{R}_3^s$, а три оператора $j_q = s_q + l_q$ — подгруппу $\mathcal{R}_3$ одновременных вращений в обоих пространствах.

Рассмотрим волновую функцию (8.16) в частном случае, когда частица находится в определенном спинном состоянии m_s , а также в определенном орбитальном состоянии с угловым моментом l и проекцией m_l . В этом случае волновая функция имеет вид простого произведения

$$\Psi(lsm_l m_s) = \psi_{lm_l}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}. \quad (8.21)$$

При фиксированных l и s существует всего $(2s+1)(2l+1)$ таких произведений, соответствующих всем возможным различным значениям m_l и m_s . Под действием вращений этот набор будет преобразовываться по произведению представлений $D^{(l)} \otimes D^{(s)}$ группы $\mathcal{R}_3$, причем, согласно результатам § 3, для этого произведения справедливо разложение

$$D^{(l)} \otimes D^{(s)} = \sum_{j=|l-s|}^{(l+s)} D^{(j)}. \quad (8.22)$$

Таким образом, как и в случае двух орбитальных угловых моментов, полный угловой момент определяется правилом векторного сложения:

$$j = (l+s), (l+s-1), \dots, |l-s|. \quad (8.23)$$

Собственные функции полного углового момента $j=l+s$ строятся аналогично из простых произведений (8.21) с коэффициентами векторной связи:

$$\Psi(lsjm) = \sum_{\substack{m_l \\ (m_s = m - m_l)}} C(lsj, m_l m_s m) \psi_{lm_l}(\mathbf{r}) \chi_{m_s}^{(s)}. \quad (8.24)$$

Двузначность представлений с полуцелым индексом не приводит к какой-либо неоднозначности в коэффициентах векторной связи, поскольку последние определяются коммутационными соотношениями между инфинитезимальными операторами. Однако нужно быть осторожным при анализе конечных вращений. Рассмотрим, например, вращение вокруг оси z :

$$R_z(a) \psi_{jm} = \exp(-ima) \psi_{jm},$$

причем, если m — полуцелое, то

$$R_z(2\pi) \psi_{jm} = \exp(-2\pi mi) \psi_{jm} = -\psi_{jm}.$$

Изменение знака волновой функции под действием операции, возвращающей систему в прежнее физическое положение, не приводит к каким-либо противоречиям, поскольку знак волновой функции не имеет никакого физического смысла. Необходимо, однако, внимательно следить за согласованностью различных стадий любого вычисления. (В т. 2, гл. 18, § 13 мы покажем, что полуцелые представления можно рассматривать как однозначные представления несколько более широкой группы, чем $\mathcal{R}_3$.)

Теперь мы можем учесть вклад магнитного момента, обусловленного спином частицы, находящейся в магнитном поле. Это достигается путем включения в гамильтониан члена

$$Bg_s \mu_B s_z, \quad (8.25)$$

по форме совпадающего с (8.12), но содержащего в качестве множителя спиновый g -фактор g_s . Для электрона экспериментально установлено, что величина g_s очень близка к 2, и этот факт можно объяснить теоретически (т. 2, гл. 15, § 8, п. Б).

Кроме взаимодействия между спиновым магнитным моментом и внешним полем имеется также взаимодействие между спиновым магнитным моментом и эффективным магнитным полем, обусловленным орбитальным движением электрона^{*} (или другой заряженной частицы). Это взаимодействие удобнее всего вычислить в рамках релятивистского подхода; результат вычислений — дополнительный член

$$\xi(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \xi(r) (l_x s_x + l_y s_y + l_z s_z) \quad (8.26)$$

в гамильтониане. Подчеркнем, что этот член присутствует независимо от наличия или отсутствия внешнего поля; он носит название спин-орбитального взаимодействия. Радиальная функция $\xi(r)$ связана с центральным полем, в котором движется частица.

§ 5 АТОМ ВОДОРОДА

В оставшейся части данной главы мы рассмотрим структуру атомов в качестве иллюстрации следствий инвариантности по отношению к группе $\mathcal{R}_3$ и введения понятия спина. Начнем с атома водорода в нерелятивистском подходе, когда можно рассматривать движение электрона в поле фиксированного сферически-симметричного кулоновского потенциала $V(r) = -e^2/r$, создаваемого протоном (ядром атома водорода). Без учета спина волновые функции будут иметь вид (гл. 7, § 5)

$$\psi_{nlm_l} = u_{nl}(r) Y_{m_l}^{(l)}(\theta, \varphi).$$

Решение дифференциального уравнения задачи на собственные значения [уравнения (7.60)] приводит (см. любой учебник по квантовой механике) к следующему выражению для уровней энергии электрона:

$$E_{nl} = -m_e e^4 / 2\hbar^2 n^2,$$

где $n=1, 2, \dots$, а $l=0, 1, \dots, (n-1)$. Нам не понадобится точная форма радиальной волновой функции $u_{nl}(r)$. Несколько низших уровней энергии показаны на рис. 8.1, а, где использованы общепринятые спектроскопические обозначения, в которых символы s, p, d, f, g и т. д. соответствуют состояниям с $l=0, 1, 2, 3, 4$ в том же порядке. (Вырождение состояний с одинаковыми n , но разными l обусловлено не вращательной симметрией, а наличием весьма абстрактной группы симметрии относительно вращений в четырехмерном пространстве. Кратко об этом будет сказано в т. 2, гл. 19.) Для каждой разрешенной комбинации nl имеется $(2l+1)$ -кратное вырождение, описываемое индексом m_l . Если приписать электрону спин $1/2$, но не учитывать спин-орбитальное взаимодействие, то кратность вырождения возрастет еще вдвое соответственно значениям проекции спина $m_s = \pm 1/2$. Так, например, уровень $2p$ шестикратно вырожден; ему соот-

ветствуют значения $m_l = \pm 1, 0$ и $m_s = \pm 1/2$ и волновые функции вида (8.21).

Включим теперь в гамильтониан спин-орбитальное слабое (8.26), но не будем учитывать внешнее поле. Учи-

3s 3p 3d

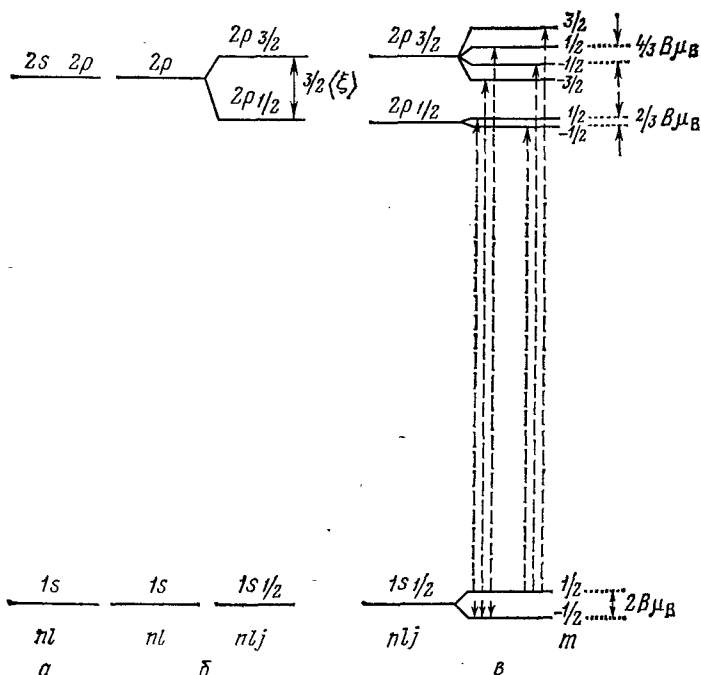


Рис. 8.1.

тывая, что $\mathbf{j}^2 = (\mathbf{l} + \mathbf{s})^2 = \mathbf{l}^2 + \mathbf{s}^2 + 2(\mathbf{l} \cdot \mathbf{s})$, можно переписать спин-орбитальное взаимодействие в виде

$$\xi(r) \mathbf{l} \cdot \mathbf{s} = \frac{1}{2} \xi(r) (\mathbf{j}^2 - \mathbf{l}^2 - \mathbf{s}^2). \quad (8.27)$$

Поскольку интенсивность этого взаимодействия мала по сравнению с разностью энергий E_{nl} , достаточно учесть его влияние лишь в первом порядке теории возмущений для каждого вырожденного уровня E_{nl} (гл. 5, § 8). Если

вместо базиса $m_l m_s$ в пространстве вырожденных состояний (при данных nl) мы выберем связанный базис jm , определенный в формуле (8.24), то получим

$$\xi(r) (\mathbf{l} \cdot \mathbf{s}) \Psi(lsjm) = \frac{1}{2} \left[j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right] \xi(r) \Psi(lsjm).$$

Поскольку функция $\xi(r)$ инвариантна при вращениях, она не приведет к перемешиванию состояний с разными l , так что сдвиг энергии, обусловленный спин-орбитальным взаимодействием, дается выражением

$$\Delta_{nlj} = \frac{1}{2} \langle \xi \rangle_{nl} \left\{ j(j+1) - l(l+1) - \frac{3}{4} \right\}; \quad (8.28)$$

здесь

$$\langle \xi \rangle_{nl} = \int_0^{\infty} u_{nl}^2(r) \xi(r) r^2 dr$$

есть радиальный интеграл. Например, шестикратно вырожденный $2p$ -уровень расщепляется на два: на четырехкратно вырожденный уровень с $j=3/2$, сдвинутый на величину $\Delta=1/2 \langle \xi \rangle_{2p}$, и на двукратно вырожденный уровень с $j=1/2$, сдвинутый на $\Delta=-\langle \xi \rangle_{2p}$.

Расщепление $2p$ -уровня показано на рис. 8.1, б. Точно так же любой уровень с $l \neq 0$ расщепится на два уровня с $j=l \pm 1/2$; следовательно, наблюдаемые в спектре линии излучения и поглощения будут выглядеть как дублетные линии. Например, переход $1s \rightarrow 2p$ (первая линия серии Лаймана) с теоретическим значением энергии $(1-1/4)m_e c^4/2\hbar \approx 82\,000 \text{ см}^{-1}$ в действительности наблюдается в виде дублета с расщеплением $\sim 0,4 \text{ см}^{-1}$, которое, как можно показать, согласуется с теоретическим значением $3/2 \langle \xi \rangle_{2p}$. В более тяжелых атомах этот эффект выражен гораздо сильнее.

Рассмотрим теперь влияние однородного внешнего магнитного поля и выберем ось z вдоль направления поля. В этом случае в силу формул (8.12) и (8.25) к гамильтониану добавляется член

$$[(l_z + 2s_z) B \mu_B]. \quad (8.29)$$

Волновые функции в виде произведений (8.21) с определенными m_l и m_s будут собственными функциями оператора (8.29); как мы видели, спин-орбитальное взаимодей-

ствие (8.27) перемешивает эти функции. Таким образом, слагаемые (8.27) и (8.29) играют противоположные роли: первое из них стремится связать l и s в определенное результирующее j , а второе — напротив, стремится разделить их и оставить волновые функции в виде простых произведений с определенными m_l и m_s . Мы остановимся далее лишь на случае слабого поля, когда поле B настолько мало, что расщепление, вызванное членом (8.29), намного меньше расщепления, вызванного членом (8.27). В этом пределе действие магнитного поля сводится к снятию $(2j+1)$ -кратного вырождения уровней nlj , обусловленных спин-орбитальным взаимодействием. Оператор (8.29) инвариантен относительно группы $\mathcal{R}_2$ вращений вокруг оси z , и потому вырождение снимается до расщепления на синглетные уровни, соответствующие одномерным неприводимым представлениям группы $\mathcal{R}_2$ и отмеченные индексом $m=j, j-1, \dots, -j$. Здесь мы находим пример возмущения, нарушающего симметрию, о котором в общих чертах говорилось в гл. 5, § 8. Чтобы найти сдвиг уровня энергии при каждом m , следует вычислить среднее значение

$$\langle jm | l_z + 2s_z | jm \rangle.$$

Мы пользуемся здесь обозначениями, введенными в гл. 5 после формулы (5.8), с тем дополнительным упрощением, что опущен символ Ψ и оставляются лишь существенные индексы jm .

Рассуждения, подобные проведенным в гл. 7, § 4, п. Е, показывают, что l и s — векторные операторы и, значит, сумма $l_z + 2s_z$ тоже есть компонента векторного оператора. По теореме Вигнера — Экарта [формула (7.53)] матричные элементы этого оператора пропорциональны матричным элементам любого другого векторного оператора (гл. 7, § 4, п. Ж). Поэтому, в частности,

$$\langle jm | l_z + 2s_z | jm \rangle = A, \quad \langle jm | j_z | jm \rangle = mA_j, \quad (8.30)$$

где A_j — константа, не зависящая от m . Простейший способ вычислить эту константу состоит в том, чтобы прежде всего выбрать максимальное значение $m = l + 1/2$, что возможно лишь при $j = l + 1/2$, причем в этом случае волновая функция представляется в виде простого произведения с $m_l = l$, $m_s = 1/2$. Тогда из равенства (8.30)

следует, что

$$A_{l+1/2} = (l+1)/(l+1/2). \quad (8.31)$$

Чтобы найти $A_{l-1/2}$, рассмотрим два возможных состояния с $m=l-1/2$. В связанном базисе этим состояниям соответствуют значения индекса $j=l+1/2$ и $j=l-1/2$, тогда как в мультипликативном базисе — значения индексов $m_l=l$, $m_s=-1/2$ и $m_l=l-1$, $m_s=+1/2$. Не рассматривая общего преобразования между этими двумя базисами, мы можем найти искомую константу, приравняв друг другу следы оператора l_z+2s_z , вычисленные в обоих базисах, и применив равенство (8.30):

$$l+2\left(-\frac{1}{2}\right)+(l-1)+2\left(\frac{1}{2}\right)=(A_{l+1/2}+A_{l-1/2})\left(l-\frac{1}{2}\right),$$

так что $A_{l+1/2}+A_{l-1/2}=2$. Отсюда, учитывая равенство (8.31), получаем $A_{l-1/2}=l/(l+1/2)$. Более общий метод — написать выражение для среднего значения

$$\langle jm | (l+2s) \cdot j | jm \rangle = A_j \langle jm | j \cdot j | jm \rangle = j(j+1) A_j \quad (8.32)$$

и затем вычислить в левой части скалярное произведение

$$(l+2s) \cdot j = l^2 + 2s^2 + 3l \cdot s = \frac{3}{2} j^2 - \frac{1}{2} l^2 + \frac{1}{2} s^2.$$

Таким образом, если использовать обозначение $n l j$, уровень $1s_{1/2}$ расщепится на два уровня с $m=\pm 1/2$, сдвинутых по энергии на ± 1 в единицах $B\mu_B$. Уровень $2p_{1/2}$ расщепится тоже на два, но со сдвигом на $\pm 1/3$, а уровень $2p_{3/2}$ — на четыре уровня: два с $m=\pm 3/2$ и сдвигами ± 2 , и два — с $m=\pm 1/2$ и сдвигами $\pm 2/3$. Такое расщепление, называемое зеемановским, показано на рис. 8.1, в.

В гл. 5, § 6 были высказаны общие соображения относительно правил отбора дипольного излучения, соответствующих группе $\mathcal{N}_2$. Рассмотренный пример показывает, что для излучения, поляризованного в плоскости xy ($\Delta m=\pm 1$), линия поглощения, соответствующая переходу $1s \rightarrow 2p$, расщепляется на шесть линий (рис. 8.1, в). Относительные интенсивности переходов также можно вычислить на основании соображений симметрии (т. 2, приложение 5, § 3).

§ 6. СТРОЕНИЕ МНОГОЭЛЕКТРОННЫХ АТОМОВ

А. Гамильтониан

Для иллюстрации дальнейших проявлений (R_3 -симметрии в физических системах мы от атома водорода перейдем к строению многоэлектронных атомов. Для нейтрального атома с зарядом ядра Ze и Z электронами можно записать гамильтониан в виде

$$H = \sum_i T_i - \sum_i Ze^2/r_i + \left[\sum_{i < j} e^2/r_{ij} + \sum_i \xi(r_i) s_i \cdot l_i \right]. \quad (8.33)$$

Четыре слагаемых в выражении (8.33) соответствуют кинетической энергии, кулоновскому притяжению электронов к «неподвижному» ядру, кулоновскому отталкиванию между всеми парами электронов и спин-орбитальному взаимодействию, введенному в § 4. Приближение, в котором ядро рассматривается как неподвижное, допустимо, поскольку масса ядра более чем в 1800 раз превышает массу электронов. Очевидно, что все вклады в гамильтониан (кроме третьего слагаемого) представляют собой суммы одночастичных операторов. Поэтому, как и в гл. 6, § 3, это приводит к сепарабельному решению Z -частичного уравнения Шредингера. Даже третье слагаемое частично эквивалентно сумме одночастичных операторов, поскольку сумма сил отталкивания, испытываемых отдельным электроном со стороны остальных, аналогична одному эффективному отталкиванию со стороны ядра, находящегося в центре электронного облака. Можно считать, что отрицательно заряженные электроны в какой-то мере экранируют ядро от электронов, расположенных на «периферии» атома. Этот эффект можно использовать, добавляя к гамильтониану (и вычитая из него) дополнительное одночастичное слагаемое $\sum_i U(r_i)$. Тогда

можно написать

$$H = H_0 + H_1 + H_2, \quad (8.34)$$

где

$$H_0 = \sum_i [T_i - Ze^2/r_i + U(r_i)], \quad (8.35a)$$

$$H_1 = \sum_{i < j} e^2/r_{ij} - \sum_i U(r_i), \quad (8.35b)$$

$$H_2 = \sum_i \xi(r_i) s_i \cdot l_i. \quad (8.35b)$$

Здесь H_0 — сумма не зависящих от спина одночастичных операторов, в которую входит экранирующий потенциал $U(r_i)$, а H_1 — остаточное взаимодействие, получающееся после вычитания экранирующего потенциала из суммы кулоновских отталкиваний. Поэтому $U(r_i)$ выбирается так, чтобы член H_1 был мал, но мы не будем подробно останавливаться на этом вопросе, так как он не имеет отношения к симметрии.

Уравнение Шредингера решается методом теории возмущений. Член H_0 принимается за невозмущенный гамильтониан, и для него существует точное решение в сепарабельной форме (п. Б). Из двух остающихся частей гамильтониана H обычно наиболее существенно остаточное взаимодействие H_1 , и оно рассматривается далее в п. В на основе теории возмущений для вырожденного уровня в первом порядке (гл. 5, § 8). Это приводит к так называемой LS -связи. В дальнейшем учитывается (тоже в рамках теории возмущений для вырожденного уровня) слагаемое H_2 , которое предполагается малым по сравнению с H_1 . В некоторых атомах спин-орбитальное взаимодействие сравнительно велико, и тогда приходится рассматривать совместно сумму $H_1 + H_2$ по теории возмущений; этот случай называют случаем промежуточной связи. Иногда член H_1 оказывается малым по сравнению с H_2 ; в этом случае проще рассматривать в качестве невозмущенного гамильтониана сумму $H_0 + H_2$, которая, хотя и зависит от спина, является все же суммой только одночастичных операторов. Остаточное взаимодействие H_1 рассматривается затем с помощью теории возмущений для вырожденного уровня как малое по отношению к новому невозмущенному гамильтониану. Такой предел называют случаем jj -связи; мы не будем его рассматривать.

Б. Принцип Паули и заполнение оболочек

Согласно формуле (8.35а), невозмущенный гамильтониан $H_0 = \sum_i H_0(i)$ является сферически-симметричным и не зависит от спина. Поэтому собственные функции оператора $H_0(i)$ имеют тот же вид: $\psi = u_{nl}(r) Y_{m_l}^{(l)}(\theta, \varphi) \chi_m^{(1/2)}$, что и в атоме водорода, за одним исключением: радиальные волновые функции $u_{nl}(r)$ и энергии E_{nl} даются теперь

решением радиального дифференциального уравнения, содержащего множитель Z и экранирующее слагаемое $U(r_i)$. Таким образом, решение для Z -электронного гамильтониана может быть записано в сепарабельной форме в виде произведений одночастичных волновых функций

$$\prod_i \psi_{\gamma_i}(\mathbf{r}_i), \quad (8.36)$$

где символом γ_i обозначен набор одночастичных индексов nlm_s для частицы i ; соответствующий уровень энергии обозначается через $\sum_i E_{\gamma_i}$.

В связи с неразличимостью тождественных частиц в квантовой механике (гл. 5, § 9) пришлось постулировать, что волновая функция системы частиц должна быть либо полностью симметричной, либо полностью антисимметричной. Полностью симметричной является волновая функция, которая не меняется при перестановке любой пары частиц. Тогда, если обозначить через P_{ij} оператор обмена пары частиц i и j , можно написать $P_{ij}\Psi = \Psi$. Полностью антисимметричная функция определяется так, чтобы для всех пар частиц i и j выполнялось соотношение $P_{ij}\Psi = -\Psi$. Согласно экспериментальным данным, частицы с целым спином (например, мезоны) обладают симметричными волновыми функциями, а частицы с полуцелым спином (например, электроны) — антисимметричными волновыми функциями. Отсюда следует, что произведения типа (8.36) неприемлемы для Z -электронного атома. Однако для каждого набора индексов $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_Z$ в формуле (8.36) (все индексы предполагаются различными) имеется всего $Z!$ различных произведений (8.36), получаемых с помощью всех $Z!$ различных перестановок номеров частиц. Единственная комбинация этих произведений обладает требуемым свойством антисимметрии. Эту комбинацию удобно записать в виде определителя — так называемого детерминанта Слэтера:

$$\Psi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_Z) = (Z!)^{-1/2} \begin{vmatrix} \psi_{\gamma_1}(1) & \psi_{\gamma_2}(1) & \dots & \psi_{\gamma_Z}(1) \\ \psi_{\gamma_1}(2) & \psi_{\gamma_2}(2) & \dots & \psi_{\gamma_Z}(2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{\gamma_1}(Z) & \psi_{\gamma_2}(Z) & \dots & \psi_{\gamma_Z}(Z) \end{vmatrix}. \quad (8.37)$$

Величина, стоящая перед детерминантом, — это нормировочный множитель. После раскрытия детерминанта становится ясно, что $\Psi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_Z)$ есть сумма произведений вида (8.36). Действие оператора P_{ij} состоит в перестановке двух строк детерминанта и потому приводит к изменению его знака. Следовательно, функция $\Psi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_Z)$ полностью антисимметрична и все-таки является собственной функцией оператора H_0 с собственным значением энергии $\sum_i E_{\gamma_i}$. (С точки зрения теории групп

полностью антисимметричная функция преобразуется по одномерному неприводимому представлению симметрической группы $\mathcal{S}_Z$ всех перестановок, а $\Psi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_Z)$ является проекцией произведения (8.36) на это представление. Свойства группы $\mathcal{S}_Z$ подробно рассматриваются в т. 2, гл. 17.)

При совпадении любой пары индексов γ_i два столбца детерминанта (8.37) оказываются одинаковыми, так что детерминант обращается в нуль при всех значениях координат $r_1, r_2, \dots$. Поэтому в произведениях (8.36), из которых построена функция $\Psi(\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_Z)$, два электрона не могут занимать одинаковых одночастичных состояний γ_i ; это положение известно под названием принципа Паули.

Таким образом, низшие уровни энергии атома можно получить, выбрав значения γ_i , соответствующие низшим одночастичным энергиям. Ввиду вырождения одночастичных энергий по отношению к m_l и m_s для Z -электронной волновой функции (8.37) имеет место еще большее вырождение. Например, шестикратное вырождение p -уровня приводит к 15-кратному вырождению возможных детерминантов (8.37) для двух электронов на p -орбитах (15 — это число способов, которыми можно выбрать два разных одночастичных состояния $m_l m_s$ из шести). Максимальное число электронов, которое можно поместить на орбиты с энергией $E_{n,l}$ и с фиксированными значениями nl , равно кратности вырождения $2(2l+1)$ данного одночастичного уровня; такую систему электронов принято называть заполненной оболочкой. Очевидно, что заполненная оболочка является невырожденной системой, поскольку она по определению содержит число частиц, необходимое и достаточное для того, чтобы каждое воз-

можное одночастичное состояние γ с некоторыми выбранными значениями n и l появилось в детерминанте (8.37). Можно также показать, что полный спин и полный орбитальный угловой момент заполненной оболочки равны нулю, т. е. $L=S=0$. Для этого мы прежде всего заметим, что в заполненной оболочке в суммы $M_s = \sum m_s$ и $M_L = \sum m_l$ положительные и отрицательные значения m_s и m_l входят в равной мере; следовательно, $M_s = M_L = 0$. Аналогично, если обозначить через Ψ волновую функцию заполненной оболочки, то $L_+ \Psi = S_+ \Psi = 0$, а потому в силу формулы (7.31) мы имеем $L=S=0$. Равенство $L_+ \Psi = 0$ следует из того, что оператор $L_+ = \sum l_+$ (i) увеличивает значение m_l некоторой частицы, и, поскольку все возможные m_l уже встречаются в детерминанте, функция $L_+ \Psi$ описывается детерминантом с двумя одинаковыми столбцами, а потому равна нулю. Так же доказывается равенство $S_+ \Psi = 0$.

Несмотря на то что входящий в H_0 эффективный одночастичный потенциал несколько иной, нежели в случае атома водорода, порядок следования одночастичных уровней энергии $E_{n,l}$ для легких атомов сохраняется тем же. Оказывается, что заполнение оболочек происходит при значениях $Z=2, 4, 10, 12$ и 18 , т. е. заполняются оболочки $1s, 2s, 2p, 3s$ и $3p$. Для атомов, имеющих один электрон вне заполненной оболочки, таких, как литий ($Z=3$), бор ($Z=5$), натрий ($Z=11$) и алюминий ($Z=13$), спиновый и орбитальный угловые моменты атома будут в точности совпадать с соответствующими значениями для последнего электрона: $S=1/2$ и $L=0, 1, 0, 1$ в перечисленных примерах. Многие свойства атома определяются электронами, находящимися вне заполненных оболочек, и именно эта закономерность лежит в основе периодической системы элементов. В частности, в атомах инертных газов все оболочки заполнены, а в атомах щелочных металлов имеется один электрон вне заполненных оболочек, так называемый валентный электрон.

Поскольку основное состояние заполненной оболочки является невырожденным, учет возмущений H_1 и H_2 , входящих в выражение (8.35), приводит к малому сдвигу уровня энергии без какого-либо расщепления.

Для атома с одним электроном вне заполненной обо-

лочки влияние возмущения H_1 вновь сводится просто к сдвигу энергии основного состояния. Хотя основное состояние имеет $2(2l+1)$ -кратное вырождение одночастичного уровня валентного электрона, оно все же не расщепляется возмущением H_1 , поскольку оператор H_1 , подобно оператору H_0 , инвариантен по отношению к вращениям отдельно в спиновом и координатном пространстве. Влияние возмущения H_2 качественно такое же, как и ранее описанное для атома водорода (рис. 8.1, б).

Если рассматривать инверсии, то четность каждого одноэлектронного состояния равна $(-1)^l$, причем четность детерминанта Слэтера равна произведению четностей заполненных одноэлектронных состояний. Поэтому заполненная оболочка обладает положительной четностью и все состояния, образованные помещением t электронов в валентное состояние nl , будут иметь одинаковую четность $(-1)^t$.

В. Атомы с несколькими валентными электронами, LS -связь

Пусть в атоме имеется t электронов на валентном уровне nl . Тогда существует набор определителей (8.37), соответствующих разным выборам чисел m_s и m_l для t занятых состояний. Число таких определителей будет равно числу способов выбора t различных одночастичных состояний $m_s m_l$ из их полного возможного числа $2(2l+1)$, т. е. оно равно $(4l+2)!/(4l+2-t)!t!$. Возмущение H_1 снимает это вырождение, и мы кратко рассмотрим характер возникающего расщепления. Прежде всего упростим задачу на том основании, что для понимания эффекта расщепления достаточно учесть лишь взаимодействие между валентными электронами, а потому нужно рассмотреть лишь определители для t валентных электронов. Можно показать, что взаимодействие между двумя электронами в заполненных оболочках или между электроном, находящимся в заполненной оболочке, и валентным электроном приводит к одинаковому сдвигу энергий всех состояний $m_l m_s$ валентных электронов.

Как отмечалось выше, возмущение H_1 инвариантно относительно вращений порознь в координатном и спиновом пространствах, так что H_1 коммутирует с обоими

наборами операторов L_q и S_q . Можно даже рассматривать L_q как инфинитезимальные операторы одной группы $\mathcal{R}_3$, а S_q — другой такой же группы. Набор из шести инфинитезимальных операторов L_q, S_q описывает группу, являющуюся прямым произведением групп

$$\mathcal{R}_3^L \times \mathcal{R}_3^S,$$

ее неприводимые представления отмечаются парами индексов L и S , соответствующими каждой из групп-сомножителей (гл. 4, § 21). В теории возмущений для вырожденного уровня (гл. 5, § 8) мы должны снабдить матрицу оператора H_1 наборами определителей, каждый из которых вырожден по отношению к невозмущенному гамильтониану H_0 . Но так как оператор H_1 инвариантен по отношению к данному произведению групп, при использовании базисных векторов, принадлежащих неприводимому представлению $D^{(LS)}$ этого произведения, матрица гамильтониана H_1 разобьется на меньшие матрицы с индексами LS , причем матричные элементы между состояниями с разными индексами LS будут равны нулю. Кроме того, будет отсутствовать связь между состояниями с разными значениями M_L и M_S и будет существовать вырождение кратности $(2L+1)(2S+1)$, соответствующее размерности представления $D^{(LS)}$. Вопрос о том, какие значения L и S могут возникать при заданных значениях l и t , довольно сложен; мы кратко рассмотрим его в п. Г. Еще более сложной задачей является фактическое вычисление матричных элементов гамильтониана H_1 (случаи $t=2$ и $t=3$ см. в т. 2, приложение 5). Вообще говоря, состояния с определенными значениями L и S представляют собой весьма сложные суммы детерминантов Слэтера, и их обычно в таком виде не выражают.

Рассмотренная выше ситуация носит название LS -связи. Набор из $(2L+1)(2S+1)$ состояний с данными L и S часто называют термом. Рассмотрим теперь действие возмущения H_2 , предполагая, что оно достаточно мало и не вызывает смешивания между различными собственными значениями матрицы гамильтониана H_1 . Тогда действие возмущения H_2 сводится к расщеплению $(2L+1)(2S+1)$ -кратного вырождения, или с точки зрения теории групп к сужению группы симметрии от $\mathcal{R}_3^L \times \mathcal{R}_3^S$ до группы $\mathcal{R}_3$ одновременных вращений пространствен-

ных и спиновых переменных, которая описывается инфинитезимальными операторами $J_q = L_q + S_q$. Возмущение H_2 , не будучи инвариантным относительно произведения групп, инвариантно относительно группы одновременных вращений. Это следует из равенства $[J_q, \mathbf{l} \cdot \mathbf{s}] = 0$, которое вытекает непосредственно из перестановочных соотношений для $\mathbf{l}$ и $\mathbf{s}$ (с учетом того, что операторы $\mathbf{l}$ и $\mathbf{s}$ коммутируют; задача 8.4). Таким образом, уровни с кратностью вырождения $(2L+1)(2S+1)$ расщепляются на уровни с кратностью вырождения $2J+1$, отмеченные значениями индекса J

$$J = (L+S), (L+S-1), \dots, |L-S|. \quad (8.38)$$

Эта формула для возможных значений J — не что иное, как обычное правило векторного сложения (8.9), поскольку при одновременном вращении представление $D^{(LS)}$ есть просто произведение представлений $D^{(L)} \otimes D^{(S)}$ группы $\mathcal{R}_3$. Простое выражение для зависимости этого расщепления от J при фиксированных значениях LS можно получить на основании теоремы Вигнера — Экарта. Обозначим через α все индексы волновой функции, кроме LS и J ; тогда расщепление, обусловленное возмущением H_2 , дается выражением

$$\begin{aligned} \Delta_J &= \langle \alpha LSJM | \sum_i \xi(r_i) \mathbf{l}_i \cdot \mathbf{s}_i | \alpha LSJM \rangle = \\ &= A_{\alpha LS} \langle \alpha LSJM | \mathbf{L} \cdot \mathbf{S} | \alpha LSJM \rangle = \\ &= \frac{1}{2} A_{\alpha LS} \{J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)\}. \end{aligned} \quad (8.39)$$

Здесь мы воспользовались тем, что произведение $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$, вообще говоря, не пропорциональное спин-орбитальному взаимодействию, обладает все-таки теми же трансформационными свойствами по отношению как к $\mathcal{R}_3^L$, так и к $\mathcal{R}_3^S$. Доказать справедливость такого вывода выражения (8.39) можно методами, изложенными в гл. 7, § 4, п. Ж. Постоянные $A_{\alpha LS}$ нельзя вычислить, не зная точного вида волновых функций, но зависимость от J дается, очевидно, выражением (8.39). В частности, уровни энергии упорядочены по J и их разности даются выражением

$$\Delta_J - \Delta_{J-1} = \frac{1}{2} A_{\alpha LS} \{J(J+1) - (J-1)J\} = JA_{\alpha LS}.$$

Эта формула известна под названием правила интервалов Ланде. Вообще говоря, величины $A_{\alpha LS}$ положительны (одного знака с ξ), когда оболочка занята менее чем наполовину, и отрицательны в противоположном случае. Это означает, что наименьшее значение $|L - S|$ числа J соответствует минимальной энергии в нижней половине оболочки, а наибольшее $L + S$ — в верхней. Эти выводы иллюстрируются в п. Г в случае двух и трех валентных p -электронов.

Действие магнитного поля на атом с многими электронами выражается в том, что к гамильтониану добавляется слагаемое

$$H_{\text{магн}} = (L_z + 2S_z) B\mu_B,$$

полученное суммированием слагаемых вида (8.29) по всем электронам. Это приводит к расщеплению уровня J с $(2J+1)$ -кратным вырождением. Поскольку оператор $H_{\text{магн}}$ является z -компонентой вектора, в силу теоремы Вигнера — Экарта его матричные элементы (как и в § 5) пропорциональны матричным элементам оператора J_z для состояний из данного J -мультиплета. Поэтому можно написать, что

$$H_{\text{магн}} = g_J J_z B\mu_B.$$

В теории LS -связи константу g_J , называемую g -фактором Ланде, при данных L и S можно вычислить по формуле (8.32):

$$g_J = \frac{3}{2} + [S(S+1) - L(L+1)]/2J(J+1). \quad (8.40)$$

Поэтому расщепление J -мультиплета пропорционально величине $\langle J_z \rangle = M_J$ и собственные состояния отмечаются индексом M . Благодаря наличию формулы (8.40) экспериментально измеренное расщепление дает информацию о L и S .

Г. Классификация термов

Атомы с двумя валентными электронами

Если атом состоит из замкнутых оболочек и содержит всего два валентных электрона в состояниях с орбитальным угловым моментом l , то в соответствии с обычным

правилом векторного сложения единственными возможными значениями L и S могут быть $L=0, 1, 2, \dots, 2l$ и $S=0, 1$. Но не все комбинации этих значений L и S оказываются разрешенными, когда на волновую функцию налагается необходимое условие антисимметрии. Как будет показано ниже, состояния с четными L симметричны относительно перестановки орбитальных координат, а состояния с нечетными L — антисимметричны. Будет показано также, что относительно перестановки спиновых переменных двух частиц состояния с $S=1$ являются симметричными, а состояния с $S=0$ — антисимметричными. Таким образом, для полностью анти-

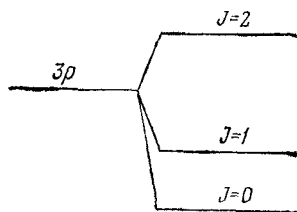


Рис. 8.2.

симметричных состояний разрешенными являются следующие комбинации: $S=1$ при нечетном L и $S=0$ при четном L .

Для состояний с данными L и S , которые иногда называют термами, принято обозначение ^{2S+1}L . Индекс $2S+1$ называют мультиплетностью терма, поскольку им определяется число уровней J , на которые расщеп-

ляется терм при включении возмущения H_2 [формула (8.38)]. Так, в случае двух валентных электронов с $l=1$ (например, в атоме углерода с $Z=6$) должны быть термы 3P , 1S и 1D (здесь мы по-прежнему пользуемся спектроскопическими обозначениями $S, P, D, \dots$ для $L=0, 1, 2, \dots$). Учет возмущения H_2 не может привести к расщеплению «синглетных» термов 1S и 1D , поскольку при $S=0$ имеется единственная возможность $J=L$. Однако «триплетный» терм расщепляется на три уровня с $J=2, 1$ и 0 , энергии которых даются формулой (8.39); уровни представлены на рис. 8.2.

Доказательство перестановочной симметрии двухчастичной волновой функции

Здесь мы выведем указанное выше соотношение между значениями L и S для двух электронов и симметрией по отношению к независимой перестановке координатных и спиновых переменных этих электронов. Рассмотрим

сначала возможные координатные волновые функции. Если у двух частиц одинаковые наборы одночастичных индексов nl , то двухчастичные волновые функции могут отмечаться либо индексом $m_1 m_2$ в базисе простого произведения, либо индексом LM , где $L=2l, 2l-1, \dots, 1, 0$, в связанном базисе. Заметим, что состояние с максимальным значением $M=L=2l$ соответствует простому произведению с $m_1=m_2=l$ и поэтому является симметричным: обе частицы находятся в одном и том же состоянии. Поскольку понижающий оператор $L_- = l_-(1) + l_-(2)$ тоже симметричен, ясно, что все состояния с максимальным значением $L=2l$ и любыми значениями M тоже симметричны. Рассмотрим далее состояния с $M=2l-1$. В базисе простых произведений имеются два таких состояния: с $m_1=l, m_2=l-1$ и с $m_1=l-1, m_2=l$; в связанном базисе они будут различаться индексами $L=2l$ и $L=2l-1$. В базисе простых произведений оператор перестановки P_{12} просто меняет местами два состояния, так что ему соответствует матрица $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ с нулевым характером. Отсюда мы заключаем, что и в случае связанного базиса, в котором состояние с $L=2l$ симметрично, состояние с $L=2l-1$ должно быть антисимметричным, чтобы обеспечивалось равенство нулю характера. Продолжая такие рассуждения, мы видим, что при $M=2l-2$ имеется набор из трех состояний, причем характер матрицы равен 1, так что состояние с $L=2l-2$ симметрично. Обобщая данный результат, мы приходим к выводу, что состояния с четным L симметричны, а с нечетным — антисимметричны.

В случае полуцелого спина s аналогичные рассуждения показывают, что состояние с максимальным спином $S=2s$ вновь симметрично, со спином $S=2s-1$ антисимметрично и т. д. Но поскольку s — полуцелое, это означает, что нечетным S соответствуют симметричные состояния, а четным — антисимметричные. В частности, для электрона с $s=1/2$ двухчастичное состояние с $S=1$ является симметричным, а с $S=0$ — антисимметричным.

Атомы с тремя валентными электронами

Классификация термов двух валентных электронов была установлена путем анализа перестановочной симметрии орбитальной и спиновой частей волновой функ-

пии. В случае трех частиц следует точно так же использовать группу $\mathcal{S}_3$ всех перестановок трех объектов. Эта группа была введена в гл. 2, § 2 (пример 10), и был показан ее изоморфизм точечной группе D_3 (гл. 2, § 3; гл. 2, § 7, п. В). Следовательно, она имеет таблицу характеров, совпадающую с приведенной в табл. 4.2 для D_3 (табл. 8.1).

Таблица 8.1

$\mathcal{S}_3$	E	$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$	P_{12}, P_{23}, P_{31}
$\Gamma^{(s)}$	1	1	1
$\Gamma^{(a)}$	1	1	-1
$\Gamma^{(m)}$	2	-1	0

Для различения неприводимых представлений мы введем индексы s, a, m , соответствующие симметричному, антисимметричному и смешанному представлению. Представление $\Gamma^{(s)}$ является единичным, а потому оно симметрично по отношению к любым перестановкам. Представление $\Gamma^{(a)}$ является антисимметричным, поскольку любая парная перестановка P_{ij} приводит к изменению знака. Заметим, что элементы второго класса, подобные $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$, являются произведением двух парных перестановок $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} = P_{13}P_{12}$ и потому имеют индекс $+1$ в таблице для $\Gamma^{(a)}$. Двумерное представление $\Gamma^{(m)}$ обладает базисными функциями, которые не являются ни симметричными, ни антисимметричными; оно называется просто смешанным. (Для группы $\mathcal{S}_n$ с $n > 3$ имеется более одного типа смешанных представлений, и их следует отмечать более сложными индексами; т. 2, гл. 17.)

Пользуясь таблицей характеров, можно проанализировать (как в гл. 4, § 17) разложение произведения представлений, и тогда оказывается, что $\Gamma^{(a)}$ входит только в произведения

$$\Gamma^{(s)} \otimes \Gamma^{(a)}, \Gamma^{(a)} \otimes \Gamma^{(s)}, \Gamma^{(m)} \otimes \Gamma^{(m)}. \quad (8.41)$$

Следовательно, полностью антисимметричную волновую функцию для трех электронов можно построить из отдельных орбитальной и спиновой частей только при

условии, что эти части преобразуются согласно представлениям (8.41). Перейдем теперь к определению возможных значений L и S , связанных с перестановочной симметрией (по аналогии со случаем двух электронов). Вообще говоря, поскольку операторы $L_{\pm}$ (и $S_{\pm}$) симметричны, при данном значении L (или S) состояния с разными M_L (или M_S) обладают одинаковой перестановочной симметрией.

Если частицы 1 и 2 в силу векторной связи дают $S=1$, то связь с частицей 3 может дать $S=3/2$ и $S=1/2$. Если же частицы 1 и 2 дают $S=0$, то за счет частицы 3 возникает другое состояние — с $S=1/2$. Учитывая мультиплетность состояний $2S+1$, мы получаем правильное полное число состояний $2^3=8$. Рассуждая так же, как и в случае двух частиц, приходим к выводу, что четыре состояния с $S=3/2$ должны быть симметричными. Этим и исчерпывается число симметричных состояний, поскольку в общем случае число симметричных тройных произведений, которые можно образовать из n разных одночастичных состояний, равно $1/6 n(n+1)(n+2)$; при $n=2$ это число равно четырем. Аналогично число антисимметричных состояний равно $1/6 n(n-1)(n-2)$, причем при $n=2$ оно равно нулю. Это и понятно, если имеются только два одночастичных состояния, поскольку в этом случае две частицы из трех должны были бы находиться в одинаковых состояниях, так что антисимметрия невозможна. Поэтому состояния с $S=1/2$ обладают смешанной симметрией, и то, что таких состояний должно быть два (в дополнение к мультиплетности $2S+1$), можно было сказать заранее, так как представление $\Gamma^{(m)}$ двумерно.

Аналогичные рассуждения для орбитальных состояний показывают, что при $l=1$ имеется одно антисимметричное состояние; поэтому оно должно иметь $L=0$ и соответствует просто определителю, построенному на трех одночастичных состояниях с $m=1, 0, -1$. По правилу векторного сложения $3^3=27$ состояний следующим образом подразделяются по значениям L : $S+3P+2D+F$, причем вновь F -состояние как состояние с максимальным L должно быть симметричным. Однако общее число симметричных состояний равно теперь $1/6 \times 3 \times 4 \times 5 = 10$; это указывает на то, что одно из P -состояний также должно быть симметричным. Поэтому остающаяся пара

P - и D -состояний должна обладать смешанной симметрией.

Объединяя эти выводы с помощью формулы (8.41), мы заключаем, что, например, для атома азота ($Z=7$) с тремя валентными p -электронами возможные термы таковы: 4S , 2P и 2D . Для детального построения волновых функций последних двух состояний необходимо использовать коэффициенты Клебша — Гордана для группы $\mathcal{S}_3$ при разложении произведения представлений $\Gamma^{(m)} \otimes \Gamma^{(m)}$ с целью образования антисимметричной функции.

Результаты, полученные выше в какой-то мере искусственно, могут быть получены также путем использования характеров симметризованных произведений (т. 2, приложение 3, §. 1; см. также гл. 18, § 10). Обобщение на случай большего числа валентных частиц, будучи в принципе простым, оказывается более трудоемким.

Д. Упорядочение термов

Чтобы вычислить относительные энергии различных возможных термов на основе описанных ниже методов, в частности чтобы найти значения S и L основного состояния, необходимо вычислить матрицу возмущения H_1 в этих состояниях. В простых примерах, приведенных выше, имелось не более одного терма с заданными значениями S и L , так что матрица, записанная в связанном LS -базисе, будет диагональной. Вычисление матричных элементов, как правило, оказывается весьма сложным процессом, который мы не будем рассматривать детально. Существует, однако, ряд общих моментов в такого рода вычислениях, обусловленных наличием симметрии и находящих простые объяснения.

Имеется тесная связь между значением полного спина S и симметрией волновой функции при перестановках как спиновых, так и пространственных переменных, выполняемых порознь. В частности, мы видели, что волновые функции для системы t электронов с максимальным спином $S=1/2 t$ должны быть полностью симметричными при перестановках спиновых переменных и потому полностью антисимметричными при перестановках пространственных переменных. При произвольных значениях S можно получить некую меру симметрии, если заметить,

что для любой пары частиц i и j существует следующее соотношение между оператором полного спина $\mathbf{S}(ij) = \mathbf{s}(i) + \mathbf{s}(j)$ и оператором спинowego обмена P_{ij}^S , представляющим спинowe переменные частиц i и j :

$$\mathbf{S}^2(ij) = 1 + P_{ij}^S. \quad (8.42)$$

Действительно, в полном наборе четырех спинowych состояний двух частиц со спином $1/2$ обе части равенства (8.42) имеют одинаковую матрицу (задача 8.8). Переходя далее к системе t электронов и суммируя левую часть равенства (8.42) по всем парам частиц, получаем

$$\sum_{i < j} [\mathbf{s}(i) + \mathbf{s}(j)]^2 = \sum_{i < j} [\mathbf{s}^2(i) + \mathbf{s}^2(j)] + 2 \sum_{i < j} \mathbf{s}(i) \cdot \mathbf{s}(j),$$

тогда как для квадрата полного спина имеем

$$\mathbf{S}^2 = \left(\sum_i \mathbf{s}(i) \right)^2 = \sum_i \mathbf{s}^2(i) + 2 \sum_{i < j} \mathbf{s}(i) \cdot \mathbf{s}(j).$$

Объединив последние два соотношения с (8.42), получим

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 &= \sum_{i < j} P_{ij}^S + \sum_i \mathbf{s}^2(i) + \sum_{i < j} [1 - \mathbf{s}^2(i) - \mathbf{s}^2(j)] = \\ &= \sum_{i < j} P_{ij}^S + t - \frac{1}{4} t^2, \end{aligned} \quad (8.43)$$

если учтем, что $\mathbf{s}^2(i) \equiv 3/4$ для любой частицы с $s = 1/2$. Оператор $M^S = \sum_{i < j} P_{ij}^S$ есть искомая прямая мера перестановочной симметрии, поскольку каждая симметричная пара дает собственное значение $+1$, а антисимметричная — собственное значение -1 . Из равенства (8.43) видна связь между оператором M^S и полным спином S . В частности, состояния с максимальным спином $S = 1/2 t$ одновременно являются собственными функциями оператора M^S , соответствующими собственным значениям $1/2 t(t-1)$, чем подтверждается полная симметрия всех пар спинов. Для состояний с $S = 1/2$ при $t=3$ формула (8.43) дает, что M^S имеет нулевое собственное значение, так что состояние смешанной симметрии $\Gamma^{(m)}$ для трех частиц содержит симметричные и антисимметричные пары в одинаковой пропорции. Вообще говоря, из формулы (8.43) явствует, что при уменьшении S уменьшается и собственное зна-

чение оператора M^S , т. е. постепенно снижается число симметричных пар спинов.

По определению любая полностью антисимметричная волновая функция Ψ должна удовлетворять соотношению $P_{ij}\Psi = -\Psi$, где P_{ij} — оператор перестановки всех переменных для частиц i и j . Однако $P_{ij} = P'_{ij}P^S_{ij}$, где P'_{ij} — оператор перестановки только пространственных координат, так что $P'_{ij}\Psi = -P^S_{ij}\Psi$. Поэтому на классе антисимметричных волновых функций мы всегда имеем точное соотношение $P'_{ij} \equiv -P^S_{ij}$. Определив далее оператор $M^r = \sum_{i < j} P'_{ij}$, имеем $M^r \equiv -M^S$, откуда с учетом соотношения (8.43) находим

$$\langle \alpha LS | M^r | \alpha LS \rangle = t - \frac{1}{4} t^2 - S(S+1). \quad (8.44)$$

При фиксированном числе t электронов уменьшение полного спина S означает увеличение M^r и, стало быть, возрастание числа пар частиц, симметричных по отношению к перестановке их пространственных координат. При максимальном значении спина $S = \frac{1}{2}t$ величина M^r , согласно формуле (8.44), равна $-\frac{1}{2}t(t-1)$, что соответствует полной антисимметрии по пространственным координатам для всех пар частиц.

Вернемся теперь к уровням энергии атомов и рассмотрим следствия, вытекающие из связи между спином и перестановочной симметрией. Поскольку упорядочение термов определяется отталкиванием между электронами, основным состоянием будет то, в котором отталкивание минимально. Как правило, отталкивание минимально при минимальной симметрии электронов относительно перестановок пространственных координат. Согласно формуле (8.44), это соответствует максимальному значению спина $S = \frac{1}{2}t$, когда все пары частиц антисимметричны по координатам. Поэтому основное состояние должно соответствовать максимальному спину $S = \frac{1}{2}t$, а энергии при других значениях S должны возрастать с уменьшением S . Этот вывод интересен тем, что он относится к спину, хотя возмущение H_1 от спина не зависит. Это объясняется тем, что значениями S определяется спиновая симметрия, которой через условие полной антисимметрии волновой функции определяется координатная симметрия системы электронов.

Значение $1/2 t$ максимального спина системы t валентных электронов с одинаковыми квантовыми числами nl требует модификации при заполнении оболочки более чем наполовину. В оболочке может находиться не более $2(2l+1)$ электронов, но лишь половина из них будет иметь значение $m_s = +1/2$. Поэтому значение $S = +1/2 t$ может быть достигнуто лишь при заполнении первой половины оболочки $t \leq 2l+1$. При дальнейшем заполнении максимальное значение S убывает с ростом t , причем термы для $[2(2l+1)-t]$ электронов фактически оказываются теми же, что и для t электронов.

Упорядочение термов с одинаковыми значениями t и S проанализировать несколько труднее, но и здесь имеется простое общее правило. Экспериментальные данные показывают, что в основных состояниях величина L имеет максимальное из возможных значений. Это можно качественно объяснить тем, что вероятность нахождения двух частиц вблизи друг от друга уменьшается в состояниях с высоким орбитальным угловым моментом. Учитывая форму кулоновского потенциала, отсюда можно сделать вывод о меньшем значении энергии отталкивания в состояниях с высоким L .

То положение, что атомные основные состояния соответствуют максимальному значению S и максимальному значению L , совместимому с данным значением S , было эмпирически установлено Хундом в 1927 г. и носит название правила Хунда. Некоторые детальные вычисления упорядочения уровней энергии можно найти в т. 2, приложение 5, § 1.

ЛИТЕРАТУРА

Рекомендуем классический учебник
Condon E. U., Shortley G. H., The Theory of Atomic Spectra, Cambridge University Press, London, 1935. [Имеется перевод: *Кондон Е., Шортли Г. Теория атомных спектров. — М.: ИЛ, 1949.*], хотя многие из изложенных в нем методов были благодаря работам Рака заменены изложенными в нашей книге.

Из более новых учебников рекомендуем
Slater J. C., Quantum Theory of Atomic Structure, McGraw-Hill, New York, 1960.

Подробно о применении теории симметрии в атомных структурах см. в книге

Judd B. R., Operator Techniques in Atomic Spectroscopy, McGraw-Hill, New York, 1963.

Дополнительная литература ¹⁾:

Джадд Б. Вторичное квантование и атомная спектроскопия.— М.: Мир, 1970.

Джадд Б., Вайнборн Б. Д. Теория сложных атомных спектров.— М.: Мир, 1973.

Слэтер Дж. Электронная структура молекул.— М.: Мир, 1965.

ЗАДАЧИ

- 8.1. Состояние с $j=4$ распадается и переходит в состояние с $j'=2$. Каковы возможные значения мультипольности перехода?
 - 8.2. Пользуясь формулой (8.3), найдите минимальное значение углового момента j для состояния, в котором квадрупольный момент ($k=2$) отличен от нуля.
 - 8.3. Вычислите коэффициенты Клебша — Гордана, как в задаче 7.8, или возьмите их из работы Ротенберга и др. (см. литературу к гл. 7) и напишите волновую функцию (8.24) для случая, когда $l=2$, $s=1/2$, $j=3/2$, $m=3/2$.
 - 8.4. Пользуясь соотношениями (7.26), докажите перестановочное соотношение
- $$[J_q, (i \cdot s)] = 0, \text{ где } J_q = L_q + S_q.$$
- 8.5. Методом, основанным на формуле (8.32), введите представленные в § 5 выражения для амплитуд A_j зеемановского расщепления.
 - 8.6. Покажите, что электронная конфигурация атома азота ($Z=7$) такова: $(1s)^2 (2s)^2 (2p)^3$.
 - 8.7. Исходя из ответа задачи 7.7, докажите, что состояние с $S=0$ двух частиц со спином $s=1/2$ антисимметрично по отношению к перестановкам этих частиц.
 - 8.8. Докажите соотношение (8.42), вычислив матричные элементы обеих его частей в четырехмерном пространстве спиновых состояний двух частиц со спином $1/2$. (Используйте связанный базис с индексами SM_S .)
 - 8.9. Найдите возможные комбинации значений L и S для трех d -электронов.

¹⁾ Добавлено при переводе.— Прим. ред.

ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ В ТЕОРИИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ

В предшествовавших главах мы уже встречались с несколькими примерами точечных групп, а также с их применениями при изучении молекулярных колебаний (гл. 6). В данной главе мы выведем формальные свойства всех точечных групп, являющихся конечными подгруппами группы O_3 ортогональных преобразований в трехмерном пространстве. Эти группы имеют важное физическое значение, так как они описывают симметрию молекул и геометрических фигур (таких, как правильные многогранники). Некоторые из точечных групп, а именно 32 кристаллографические точечные группы, особенно важны, так как они описывают симметрию идеальных кристаллических решеток и потому широко применяются в физике твердого тела.

В последней части данной главы (§ 9) рассматривается атом в поле с потенциалом, обладающим симметрией точечной группы. Этот случай соответствует кристаллу, где ионы, окружающие атом, расположены в соответствии с симметрией кристалла. Такой пример очень ясно показывает большие возможности симметричного подхода и хорошо иллюстрирует большую часть методов анализа систем, обладающих симметрией точечной группы.

§ 1. ОПЕРАЦИИ ТОЧЕЧНОЙ ГРУППЫ И ОБОЗНАЧЕНИЯ

К сожалению, существует несколько разных систем принятых обозначений для элементов точечных групп. В данной книге, как и почти во всей литературе по физическим приложениям теории точечных групп, используются обозначения Шенфлиса ¹⁾. Другой системой обозна-

¹⁾ В советской литературе также принята эта система, хотя иногда используется так называемая международная система (см., например, книгу Штрайтвольфа, а также И. С. Желудева).— *Прим. перев.*

чений является так называемая «международная» система. Сводная таблица этих двух систем обозначений приведена в приложении 1 (т. 2).

Элементами точечных групп являются собственные и несобственные вращения, т. е. вращения, включающие и не включающие инверсию. Начало координат остается фиксированным относительно всех преобразований — элементов точечной группы; иными словами, все оси вращения и плоскости отражений содержат начало координат. Если поворот на угол α является элементом точечной группы, то и любая конечная целая степень его также является элементом группы; какая-либо степень его должна быть равной единичному оператору E , поскольку точечная группа конечна. Следовательно, можно написать $[R(\alpha)]^n = R(n\alpha) = E = R(2\pi m)$, так что угол α должен иметь вид $2\pi m/n$, где m и n — целые числа. Если для данной оси симметрии наименьший угол поворота равен $2\pi/n$, то ось называется осью симметрии n -го порядка. Поворот на угол $2\pi/n$, согласно Шенфлису, обозначается через C_n .

Ось симметрии максимального порядка обычно считают вертикальной; тогда перпендикулярная плоскость, естественно, оказывается горизонтальной. Отражение в горизонтальной плоскости обозначается через σ_h , а в вертикальной — через σ_v . Произведение поворота C_n на отражение σ в плоскости, перпендикулярной оси вращения C_n , называется зеркальным поворотом и обозначается через S_n . Зеркальный поворот можно выразить через инверсию I и собственное вращение, поскольку произведение σC_2 эквивалентно инверсии всех осей, т. е. $\sigma C_2 = I$, так что $\sigma = IC_2$, и поэтому

$$S_n = \sigma C_n = IC_2 C_n.$$

Теперь мы можем строить точечные группы, начав с простейших и добавляя к ним элементы симметрии. Добавление одного нового элемента симметрии к существующей группе приводит к появлению других элементов. Из простых геометрических соображений можно сформулировать следующие правила:

1) при добавлении операции инверсии (коммутирующей со всеми остальными элементами группы) полное число элементов группы удваивается;

2) при добавлении горизонтальной оси 2-го порядка к вертикальной оси n -го порядка появляются $n-1$ других горизонтальных осей 2-го порядка;

3) при добавлении вертикальной плоскости симметрии σ_v к вертикальной оси n -го порядка появляются $n-1$ других вертикальных плоскостей симметрии.

§ 2. СТЕРЕОПРОЕКЦИЯ

Для описания симметрии точечной группы вращений можно взять сферу с центром в начале координат, выбрать на ее поверхности произвольную точку и затем отмечать все положения, которые она будет занимать в результате операций вращений группы. Чтобы представить результаты в двух измерениях, отмеченные точки следует отобразить на плоскости следующим образом. Всякая точка «северной» полусферы проектируется на экваториальную плоскость прямой линией, проходящей через «южный» полюс; эта проекция отмечается крестиком. Всякая точка «южной» полусферы проектируется на экваториальную плоскость прямой, проходящей через «северный» полюс; эта проекция отмечается кружком. Такой способ отображения характеризуется тем, что точки, лежащие на окружности в одной из полусфер, отображаются в окружность на плоскости, но центры этих окружностей не отображаются друг в друга. Ряд подобных стереопроекций показан на рис. 9.1. На них использованы следующие обозначения. Оси вращения помечены значками, обладающими симметрией n -го порядка: темными эллипсами, треугольниками, квадратами и шестиугольниками обозначены оси C_2 , C_3 , C_4 и C_6 , а светлыми — оси S_2 , S_3 , S_4 и S_6 . Плоскости отражения обозначаются сплошными линиями, а другие линии построения и оси вращения — пунктирными. Такой способ представления особенно удобен в случае простейших групп, обладающих лишь одной осью симметрии n -го порядка с $n > 2$. Другие группы удобнее представлять себе как группы операций симметрии правильных многогранников (например, тетраэдра и куба).

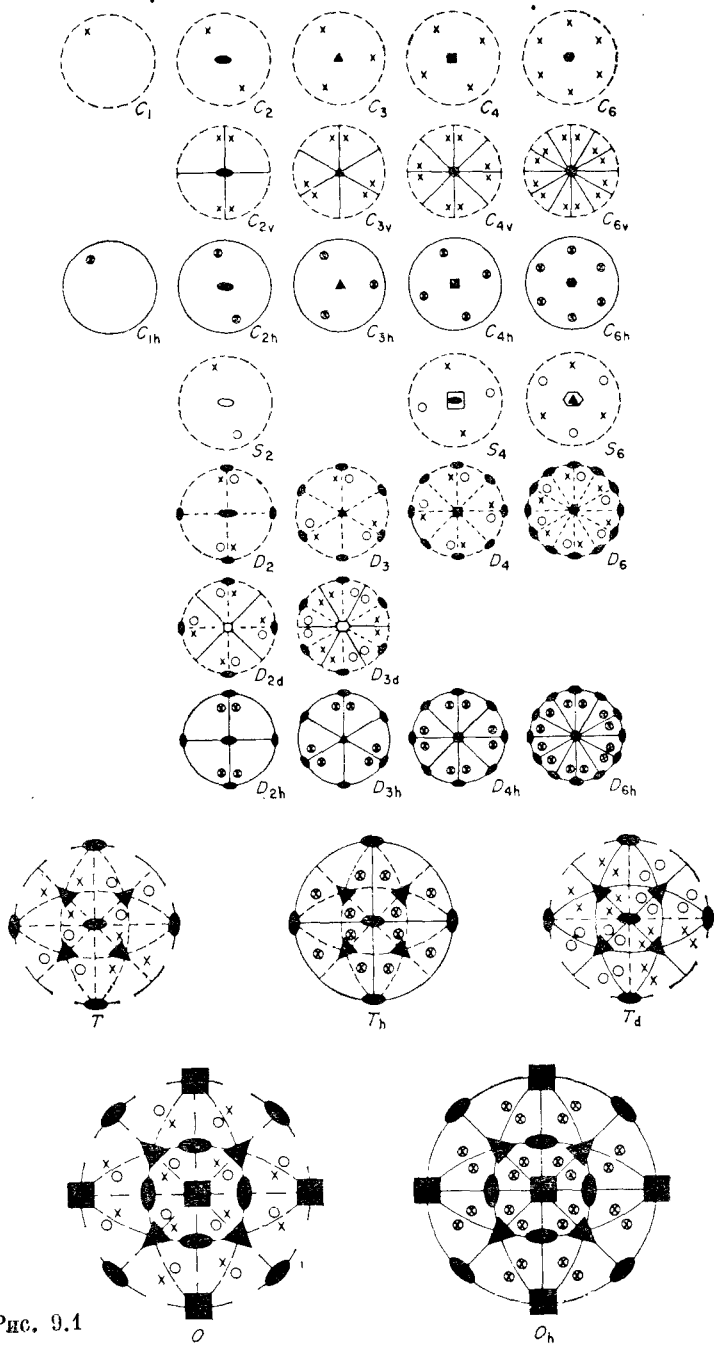


Рис. 9.1

§ 3. ПЕРЕЧИСЛЕНИЕ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

В этом параграфе мы ограничимся тем, что опишем геометрически операции каждой группы. Для полного изучения какой-либо конкретной группы читателю следует обратиться к стереопроекции на рис. 9.1 и определить геометрически произведение любой пары операций группы, построив таким образом таблицу произведений. В § 4 мы остановимся на разбиении элементов по классам. Рассмотрим прежде всего группы, содержащие лишь собственные вращения.

А. Собственные группы

Группы C_n

Простейшие точечные группы, которые мы можем построить, обладают одной осью симметрии n -го порядка для собственных вращений. Эти группы являются абелевыми порядка n , поскольку вращения вокруг одной оси коммутируют друг с другом. Они являются также циклическими, так как образованы одним элементом C_n и его степенями $C_n^2, C_n^3, \dots, C_n^n = E$.

Группы диэдра D_n

Единственный способ, которым можно добавить еще одну ось симметрии к группе C_n без того, чтобы образовались новые оси симметрии порядка n (в дополнение к имеющейся оси C_n), состоит в добавлении горизонтальной оси второго порядка. Согласно правилу 2 из § 1, это приводит к появлению $n-1$ других горизонтальных осей второго порядка. Группу D_2 , имеющую в точности три взаимно перпендикулярные оси второго порядка, иногда обозначают через V . Группа D_1 не является новой, так как это просто группа C_2 , у которой ось симметрии горизонтальна.

Выше говорилось, что любая другая собственная точечная группа должна иметь две или более осей порядка n ; выясним теперь, какие из них действительно возможны, рассмотрев группу с несколькими осями порядка n , пересекающимися в центре сферы. Если отметить на сфере точки P_i , в которых оси n -го порядка пересекают ее, то

в силу n -кратной вращательной симметрии относительно любой из осей точки P_i будут вершинами правильного многогранника (полиэдра). Если теперь соединить соседние точки P_i сегментами больших кругов на поверхности сферы (ребрами), то мы получим на ней некоторую

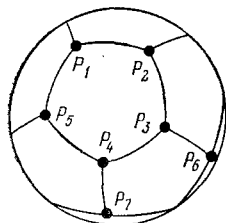


Рис. 9.2

«сеть». На рис. 9.2 изображено подобное построение для случая десяти осей третьего порядка. Имеется замечательная геометрическая теорема, доказанная Эйлером, о соотношении между числом вершин V , числом ребер P и числом граней Γ у построенной геометрической фигуры. Согласно этой теореме,

$$V - P + \Gamma = 2. \quad (9.1)$$

Кроме того, следует учесть, что каждое ребро имеет на своих концах по две вершины, а в каждой вершине пересекается n ребер, так что $P = nV/2$. Если обозначить число ребер каждой грани через s , то, учитывая, что каждое ребро принадлежит двум граням, мы получим также $P = \Gamma s/2$, откуда $nV = \Gamma s$. Теперь можно переписать равенство (9.1) в виде

$$\frac{\Gamma s}{n} - \frac{\Gamma s}{2} + \Gamma = 2 \quad (9.2)$$

или

$$\frac{1}{n} + \frac{1}{s} = \frac{1}{2} + \frac{2}{\Gamma s}.$$

Поскольку величина Γs положительна, отсюда следует ограничение

$$\frac{1}{n} + \frac{1}{s} > \frac{1}{2}. \quad (9.3)$$

При $n=2$ из (9.2) следует, что $\Gamma=2$, и нетрудно сообразить, что подобная процедура просто удвоит рассмотренные выше группы диэдра. При $n>2$ мы получим возможности, перечисленные в табл. 9.1, где приведены также соответствующие значения Γ , V и P . В последнем столбце таблицы указаны названия правильных многогранников, образуемых точками P_i в каждом случае. При $n \geq 6$ получаем $s=2$, и это вновь приводит нас к группам диэдра. Полные группы симметрии для каждого

Таблица 9.1

n	s	Γ	V	P	Многогранник
3	3	4	4	6	Тетраэдр
3	4	6	8	12	Куб
3	5	12	20	30	Додекаэдр
4	3	8	6	12	Октаэдр
5	3	20	12	30	Икосаэдр

из этих случаев будут включать помимо осей вращения n -го порядка и другие элементы симметрии, о которых будет сказано ниже. Таблицы характеров этих групп приведены в приложении 1 (т. 1).

Группа тетраэдра T

Согласно первой строке табл. 9.1, через вершины тетраэдра, как показано на рис. 9.3, проходят четыре оси третьего порядка. Очевидно, что произведение вра-

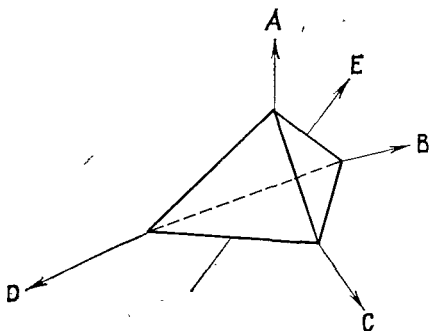


Рис. 9.3

щений вокруг осей третьего порядка эквивалентно вращениям вокруг осей второго порядка, проходящих через центры противоположных ребер тетраэдра. Например, если за поворотом на угол $2\pi/3$ вокруг оси C на рис. 9.3

последует поворот на угол $-2\pi/3$ вокруг «вертикальной» оси A , то это приведет к перестановке между собой пар осей A и B , C и D . Такой комбинированный поворот эквивалентен повороту вокруг оси второго порядка E . Никаких других поворотов при этом не возникает, так

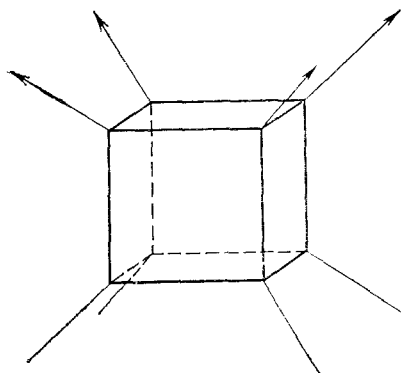


Рис. 9.4

что группа T является по существу набором собственных операций, преобразующих в себя правильный тетраэдр.

Группа октаэдра O

Согласно второй строке таблицы 9.1, через противоположные вершины куба (рис. 9.4) проходят оси вращений третьего порядка. Полная группа симметрии, как и ранее в случае тетраэдра, будет включать в себя все собственные операции, преобразующие куб в себя, так как именно эти операции переводят друг в друга оси четвертого порядка. Новыми элементами являются повороты вокруг осей четвертого порядка, проходящих через центры противоположных граней, и вокруг осей второго порядка, проходящих через центры противоположных ребер.

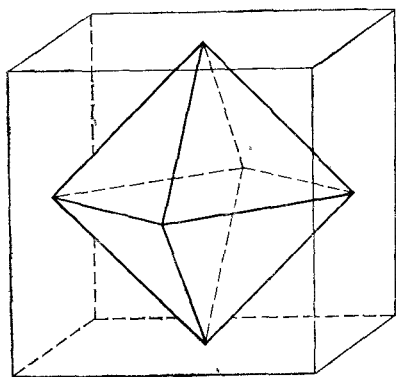


Рис. 9.5

Та же группа элементов симметрии получается, если начать с четвертой строки табл. 9.1, соответствующей октаэдру; при этом никакие новые элементы симметрии не возникают. На рис. 9.5 изображен октаэдр, вписанный в куб, что наглядно демонстрирует эквивалентность их симметрий; по этой причине группа носит название группы октаэдра.

Группа икосаэдра Y

Группа, соответствующая третьей строке табл. 9.1, обладает осями вращений третьего порядка, проходящими так, как показано на рис. 9.6. Полная группа симметрии содержит вновь все собственные операции, преобразующие

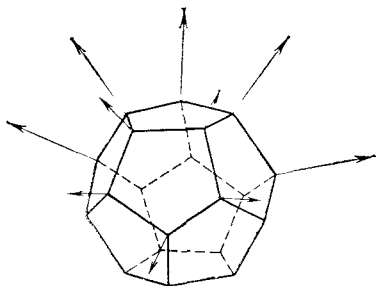


Рис. 9.6

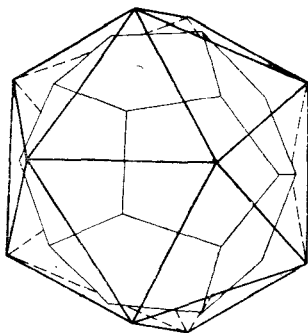


Рис. 9.7

додекаэдр в себя. Новыми элементами являются повороты вокруг осей пятого порядка, проходящих через центры противоположных граней, и осей второго порядка, проходящих через середины противоположных ребер додекаэдра.

Как и ранее, та же группа симметрии получится, если начать с икосаэдра (пятая строка табл. 9.1); на рис. 9.7 изображен додекаэдр, вписанный в икосаэдр.

Б. Несобственные группы

Несобственные группы образуются путем добавления несобственного элемента S_n к описанным выше собственным группам. Это должно быть сделано так, чтобы не возникало ни одного нового собственного вращения, во избежание удвоения группы. В случае групп C_n , обладающих единственной осью собственных вращений, можно добавить в качестве несобственного элемента отражение в горизонтальной или вертикальной плоскости, не приводящее ни к какому собственному вращению. Так могут быть получены две новые точечные группы C_{nh} и C_{vn} .

Группы C_{nh}

Эти группы образуются добавлением отражения в горизонтальной плоскости σ_h к группе C_n . Они содержат в качестве элемента инверсию, если порядок n четный, так как при этом $C_n^{1/2n} \sigma_h = I$.

Группы C_{nv}

Эти группы образуются добавлением отражения в вертикальной плоскости σ_v к группе C_n , что автоматически ведет к появлению n вертикальных плоскостей зеркального отражения. Разумеется, между группами C_{1h} и C_{1v} нет никакого различия, так как каждая из них содержит лишь по одному отражению и единичному элементу.

Группы S_{2n}

В частном случае к группе C_1 (сводящейся просто к единичному элементу) можно добавить любой из элементов S_p и получить группу S_p с единственной осью порядка p для зеркальных поворотов. При этом, однако, группы S_p с нечетным p тождественны группам C_{ph} , так как они содержат C_p и σ_h в качестве элементов. Это доказывается тем, что $S_p^{p+1} = (C_p \sigma_h)^{p+1} = C_p^{p+1} \sigma_h^{p+1} = C_p$ при нечетных p , и, следовательно, группа C_p включена в S_p . Аналогично $S_p^p = (C_p \sigma_h)^p = C_p^p \sigma_h^p = \sigma_h$ при нечетных p , а значит, σ_h также содержится в S_p . В случае четных $p = 2n$ (n целое) образуется новая группа S_{2n} . При этом, если n нечетное, группа S_{2n} содержит в качестве своего элемента также инверсию, поскольку $S_{2n}^n = C_{2n}^n \sigma_h^n = C_2 \sigma_h = I$; в частности, группа S_2 содержит только единичный элемент E и инверсию I . Группы S_{2n} являются циклическими группами порядка $2n$ и состоят из элементов $S_{2n}, S_{2n}^2, \dots, S_{2n}^{2n} = E$.

В случае групп D_n можно аналогичным образом добавлять горизонтальные и вертикальные плоскости отражения.

Группы D_{nh}

Эти группы образуются добавлением отражения в горизонтальной плоскости σ_h к группам D_n ; согласно

правилу 3 из § 1, в этом случае должны существовать также вертикальные плоскости отражения, содержащие все n горизонтальных осей второго порядка.

Группы D_{nd}

Эти группы образуются добавлением отражения в вертикальной плоскости σ_v , причем эта плоскость делит пополам угол между двумя соседними горизонтальными осями второго порядка. Дополнительные $n-1$ плоскостей этого типа образуются, конечно, вращением на углы, кратные $2\pi/n$; соответствующие отражения обозначаются через σ_d , где индекс d , как и в обозначении D_{nd} , означает «диагональный». Эти группы можно рассматривать как результат добавления «горизонтальной» оси второго порядка к группам S_{2n} .

Рассмотрим далее несобственные группы, образованные из групп T , O , Y добавлением несобственных элементов.

Полная группа тетраэдра T_d

Она включает в себя все собственные и несобственные операции, преобразующие тетраэдр в себя; эта группа образуется добавлением к группе T плоскостей отражения, проходящих через пары вершин тетраэдра и середину противоположного ребра. Существование шести таких плоскостей отражения, перпендикулярных осям второго порядка, означает наличие шести зеркальных поворотов S_4 вокруг этих осей.

Группа T_h

Эта группа образуется добавлением к группе T операции инверсии. Инверсия не является операцией симметрии для тетраэдра и потому не содержится в T_d . Группа T_h есть прямое произведение групп T и S_2 , т. е. $T_h = T \times S_2$.

Полная группа октаэдра O_h

Эта группа образуется добавлением к группе O инверсии I . Поэтому группа O_h является прямым произ-

ведением групп O и S_2 ($O_h = O \times S_2$). Группа O_h включает в себя все собственные и несобственные операции симметрии, преобразующие в себя куб или октаэдр.

Группа Y_h

Эта группа образуется добавлением инверсии к группе Y и, таким образом, равна прямому произведению групп Y и S_2 ($Y_h = Y \times S_2$). Она является полной группой, включающей в себя все собственные и несобственные операции симметрии, преобразующие икосаэдр или додекаэдр в себя.

§ 4. СТРУКТУРА КЛАССОВ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

Для упрощения построения неприводимых представлений точечных групп методами, изложенными в гл. 4, разобьем прежде всего элементы групп на классы, используя частично результаты гл. 2, § 6 и 7. Классы обозначаются по типичному элементу, принадлежащему этому классу, поскольку все элементы данного класса — это вращения на один и тот же угол (например, поворот C_n или зеркальный поворот S_n). Перед обозначением типичного элемента указывается число элементов в классе. Если элемент класса представляет собой m -ю степень поворота C_n вокруг оси порядка n , то он обозначается символом $(C_n)^m \equiv C_n^m$, перед которым ставится число элементов класса. Вместо обозначений S_1 и S_2 обычно используются символы σ и I , причем индекс у σ показывает, относительно какой плоскости (горизонтальной или вертикальной) происходит отражение. Если имеется несколько неэквивалентных классов вращений C_n , то они различаются штрихами или индексами, обозначающими ось вращения (обычно ось z является осью максимальной симметрии).

А. Собственные точечные группы

Группы C_n

Поскольку эти группы являются абелевыми, каждый элемент сам по себе является классом.

Группы D_n

Наличие дополнительных осей второго порядка приводит к тому, что элементы C_n^p и C_n^{-p} попадают в один класс; такие оси называют двусторонними. (Эти элементы не различаются, если $p=n/2$ при четном n , поскольку тогда C_n^p есть поворот на угол π .) При нечетном n все повороты на угол π вокруг горизонтальных осей относятся к одному классу, однако при четном n операции поворотов вокруг двух последовательных осей второго порядка попадают в два неэквивалентных класса. Например, для группы D_4 классами являются E , $2C_4$, C_2 , $2C_2$, $2C_2'$, а для группы D_5 — E , $2C_5$, $2C_5^2$, $5C_2$.

Группа тетраэдра T

Для этой группы все повороты на угол π переводят оси второго порядка друг в друга. Из восьми поворотов на угол $2\pi/3$ не все принадлежат одному классу, но разделяются на два класса по четыре элемента в каждом (этими элементами можно считать повороты по и против часовой стрелки вокруг четырех осей третьего порядка). При этом повороты, в результате которых ось становилась бы двусторонней, отсутствуют; группа состоит из следующих классов: E , $3C_2$, $4C_3$, $4C_3'$.

Группа октаэдра O

Восемь поворотов на угол $2\pi/3$ принадлежат одному классу, поскольку имеется поворот на угол π вокруг оси, перпендикулярной каждой оси третьего порядка, который и делает эти оси двусторонними. Указанные шесть поворотов на π принадлежат одному классу, но отличаются от трех других поворотов на π вокруг осей четвертого порядка. Таким образом, группа O разбивается на классы E , $8C_3$, $3C_4^2$, $6C_2$, $6C_4$.

Группа икосаэдра Y

В этой группе имеется шесть двусторонних осей пятого порядка, пятнадцать осей второго порядка и десять двусторонних осей третьего порядка. Эта группа имеет следующее разбиение на классы (см. книгу Мурнагана): E , $12C_5$, $12C_5^2$, $15C_2$, $20C_3$.

Б. Несобственные точечные группы

Прежде чем подробно рассматривать несобственные точечные группы, отметим общие особенности их структуры. Прежде всего, произведение двух несобственных элементов является элементом собственным. Действительно, детерминант несобственных вращений равен -1 (гл. 7, § 4), а их произведение должно иметь детерминант $+1$; следовательно, оно должно быть собственным вращением. Аналогично произведение несобственного и собственного элементов должно быть несобственным элементом. Рассмотрим теперь несобственную группу $\mathcal{G}$, элементы которой разделены на два множества: собственные элементы $\mathcal{H}$ и несобственные $\mathcal{K}$, так что можно написать $\mathcal{G} = \mathcal{H} + \mathcal{K}$. Умножив обе части этого равенства на какой-либо несобственный элемент K_i , по теореме о перечислении групп (гл. 2, § 9) получим

$$G = K_i G = K_i H + K_i K. \quad (9.4)$$

Поскольку элементы $K_i H$ являются несобственными, а $K_i K$ — собственными, мы имеем $K_i H = K$, а $K_i K = H$, что позволяет написать

$$G = H + K_i H. \quad (9.5)$$

Если в качестве одного из несобственных элементов в группе имеется инверсия I , то можно выбрать $K_i = I$ и, учитывая коммутативность I со всеми другими элементами группы, записать группу $\mathcal{G}$ в виде прямого произведения $\mathcal{G} = \mathcal{H} \times \{E + I\} = \mathcal{H} \times S_2$. Если группа не содержит инверсию, то ее все же можно записать в виде прямого произведения $\mathcal{G} = \mathcal{H} \times \{E + K_i\}$, если существует несобственный элемент K_i , коммутирующий со всеми элементами группы. Кроме того, если инверсия отсутствует, группа $\mathcal{G}$ изоморфна группе $\mathcal{G}' = \mathcal{H} + IK$, которая является собственной точечной группой, поскольку IK — собственное вращение. Чтобы установить этот изоморфизм, заметим, что, поскольку I не содержится в $\mathcal{G}$, элементы группы IK_j не могут совпадать ни с одним элементом группы $\mathcal{H}$. Далее можно элементарно доказать искомый изоморфизм, ассоциируя элемент IK_j группы $\mathcal{G}'$ с элементом K_j группы $\mathcal{G}$ и учитывая, что все элементы группы $\mathcal{H}$ являются общими

для обеих групп; например, если $H_e K_j = K_m$, то, следовательно, $H_e (IK_j) = IH_e K_j = (IK_m)$. Используем далее эти свойства для разбиения на классы несобственных точечных групп.

Группы S_{2n}

Эти группы — циклические порядка $2n$, причем каждый их элемент образует отдельный класс. При нечетном n эти группы можно записать в виде прямого произведения групп, так как они содержат инверсию: в этом случае $S_{4m+2} = C_{2m+1} \times S_2$.

Группы C_{nh}

Отражение в горизонтальной плоскости коммутирует с поворотами на угол $2\pi/n$, так что группы C_{nh} являются абелевыми и каждый элемент этих групп образует отдельный класс. При четном n в группы входит инверсия и их можно записать в виде прямого произведения $C_{2mh} = C_{2m} \times S_2$. При нечетном n группы C_{nh} также могут быть записаны в виде прямого произведения групп C_n и S_1 (последняя состоит только из единичного элемента и отражения σ): $C_{2m+1h} = C_{2m+1} \times S_1$.

Группы C_{nv}

Входящее в эти группы отражение в вертикальной плоскости не коммутирует с поворотами на угол $2\pi/n$, так что группы C_{nv} не являются абелевыми, например: $C_n^k \sigma_v = \sigma_v C_n^{-k}$. Последнее равенство показывает также, что элементы C_n^k и C_n^{-k} принадлежат одному классу. Все отражения входят в один класс, если n нечетно, но при четном n они разбиваются на два класса. Из общих результатов, приведенных выше, следует, что группы C_{nv} будут изоморфны группам, полученным умножением несобственных элементов (отражений) на инверсии. Эта операция дает оси вращения второго порядка, перпендикулярные осям вращения n -го порядка; следовательно, группы C_{nv} изоморфны группам D_n и обладают тем же разбиением на классы. Например, для группы C_{4v} классами будут являться E , $2C_4$, C_4^2 , $2\sigma_v$, $2\sigma'_v$, а классы группы C_{5v} таковы: E , $2C_5$, $2C_5^2$, $5\sigma_v$.

Группы D_{nh}

Для этих групп отражение в плоскости σ_h коммутирует со всеми элементами D_n , так что эти группы можно записать в виде прямых произведений $D_{nh} = D_n \times S_1$. При четном n в группы входит инверсия и их можно записать в ином виде: $D_{2mh} = D_{2m} \times S_2$. В любом случае разбиение на классы просто связано с таким же разбиением групп D_n : для каждого класса из группы D_n имеется два класса из группы D_{nh} . Так, например, классами для группы D_{3h} являются E , σ_h , $2C_3$, $2S_6$, $3C_2$, $3\sigma_v (=C_2\sigma_h)$.

Группы D_{nd}

При нечетном n имеется ось второго порядка, перпендикулярная каждой из вертикальных плоскостей отражения, так что группы содержат инверсию и могут быть записаны в виде $D_{2m+1d} = D_{2m+1} \times S_2$; соответственно этому их разбиение на классы следует из разбиения групп D_{2m+1} . При четном n инверсия не входит в группы D_{nd} , но, умножая несобственные элементы на инверсию, мы получаем дополнительные оси второго порядка, лежащие в вертикальных плоскостях отражения; следовательно, группа переходит в D_{2n} . Таким образом, при четном n группа D_{nd} изоморфна группе D_{2n} и имеет одинаковое с ней разбиение на классы. Например, для группы D_{2d} имеем классы E , $2S_4$, C_2 , $2C_2'$, $2\sigma_d$, а для группы D_{3d} — классы E , I , $2C_3$, $2S_6$, $3C_2$, $3\sigma_d$.

Группа T_d

По определению группы T_d , данному выше, она разбивается на классы E , $3C_2$, $8C_3$, 6σ и $6S_4$, поскольку оси третьего порядка группы T становятся теперь двусторонними.

Группы T_h , O_h и Y_h

Все эти группы содержат инверсию и потому являются прямыми произведениями групп T , O и Y с группой S_2 . Их разбиение на классы непосредственно следует из соответствующего разбиения групп T , O , Y .

§ 5. КРИСТАЛЛОГРАФИЧЕСКИЕ ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ

Одна из основных областей применения теории точечных групп — кристаллические твердые тела, в которых расположение атомов может быть инвариантным относительно операций точечной группы. Лишь немногие из групп, перечисленных в § 3, могут быть привлечены к исследованию таких тел, и целью данного параграфа как раз и является отыскание так называемых «кристаллографических точечных групп». Кристалл представляет собой периодическое повторение в пространстве одного или нескольких атомов. Для математического описания кристалла введем некую пространственную решетку как совокупность точек

$$\mathbf{n} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (9.6)$$

где n_1, n_2, n_3 — целые числа, а $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ — фиксированные векторы элементарных частиц из данной точки решетки в соседнюю. Тогда в кристалле с каждой точкой введенной нами решетки будет связана некая система атомов с определенной взаимной ориентацией, называемая его базисом. Рассмотрим сначала все возможные элементы симметрии пространственной решетки и убедимся в том, что реально возможны лишь некоторые точечные группы. Затем мы перейдем к вопросу о связи между группами симметрии решетки и кристаллографическими точечными группами.

Чтобы вращение R оставляло решетку инвариантной, оно должно переводить каждую точку решетки $\mathbf{n}$ в другую точку той же решетки $\mathbf{m}$; покажем, что это налагает ограничения на возможные углы поворота. Напишем

$$R\mathbf{n} = \mathbf{m} = m_1 \mathbf{a}_1 + m_2 \mathbf{a}_2 + m_3 \mathbf{a}_3.$$

Очевидно, что можно записать трехмерное матричное представление операции вращения R , переводящей точку $\mathbf{n}$ в точку $\mathbf{m}$:

$$\begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_{11} & R_{12} & R_{13} \\ R_{21} & R_{22} & R_{23} \\ R_{31} & R_{32} & R_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \end{pmatrix}.$$

Рассмотрим частный случай, когда $n_2 = n_3 = 0$, $n_1 = 1$. Мы видим, что $m_p = R_{p1}$, т. е. R_{p1} — целое число. Анало-

гично, полагая $n_1 = n_3 = 0$, $n_2 = 1$ и т. п., получим, что R_{p_2} и R_{p_3} также являются целыми числами. Следовательно, след матрицы R также должен быть целым числом. Производя затем преобразование подобия к декартову набору базисных векторов, мы оставляем след инвариантным и по-прежнему целочисленным. Однако в декартовом базисе оператор поворота вектора на угол φ имеет след, равный $1 + 2 \cos \varphi$ [формула (4.6)]. Стало быть, единственно возможные значения углов φ таковы: 0° , 60° , 90° , 120° и 180° , так что оси симметрии пятого порядка и более шестого порядка исключаются. Аналогично для несобственного вращения $S(\varphi)$ след равен $2 \cos \varphi - 1$ и тоже должен быть целым числом, так что угол φ принимает те же возможные значения. Пространственная решетка, определенная равенством (9.6), очевидно, обладает инверсионной симметрией; если она содержит при этом ось вращения n -го порядка с $n > 2$, то для нее будут существовать также n «вертикальных» осей зеркального отражения. Если совместить эти условия, то они, очевидно, приведут к ограничению числа возможных точечных групп пространственных решеток следующими семью: S_2 , C_{2h} , D_{2h} , D_{3d} , D_{4h} , D_{6h} , O . Эти семь различных решеточных симметрий, или сингоний, носят названия триклинной, моноклинной, орторомбической, ромбоэдрической, тетрагональной, гексагональной и кубической.

Для простых одноатомных кристаллов (с одним атомом в элементарной ячейке) указанные семь групп являются единственно возможными кристаллическими точечными группами. Для более сложных кристаллов, у которых с каждой точкой решетки связана молекула или несколько атомов, симметрия понизится до той подгруппы, которая оставляет все эти объекты инвариантными. Таким образом, полный набор всех возможных кристаллографических точечных групп будет включать в себя указанные семь групп совместно со всеми их подгруппами. Таких групп всего 32, именно: C_1 , C_{1h} , C_n , C_{nv} , C_{nh} , D_n , D_{nh} с $n=2, 3, 4, 6$; S_2 , S_4 , S_6 , D_{2d} , D_{3d} , T , T_d , T_h , O , O_h . В этом списке нет символов C_{1v} , D_1 , D_{1h} , S_1 и S_3 , но обозначаемые ими группы совпадают с группами C_{1h} , C_2 , C_{2v} , C_{1h} и C_{3h} .

§ 6. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

После разбиения точечных групп на классы, можно, следуя гл. 4, построить неприводимые представления этих групп. В частности, введенными в гл. 4 методами можно определить их характеры. Поскольку 32 кристаллографические точечные группы часто встречаются в задачах физики твердого тела, в приложении 1 даны таблицы характеров для 11 собственных точечных групп и групп, изоморфных им. Все остальные группы, как указано выше, можно получить в виде прямых произведений с группами S_1 или S_2 . Указанные изоморфизмы и результаты взятия прямых произведений перечислены в табл. 9.2. Все 32 кристаллографические точечные группы приведены в первых трех строках табл. 9.2; оставшиеся две строки содержат другие полезные соотношения. При построении таблицы характеров нам понадобится лишь первая строка табл. 9.2. Первые пять групп в этой строке являются циклическими абелевыми с тривиальными одномерными представлениями (гл. 4, § 8). С неприводимыми представлениями группы D_3 мы уже

Таблица 9.2

Собственная точечная группа $\mathcal{G}$	C_1	C_2	C_3	C_4	C_6	D_2	D_3	D_4	D_6	T	O
Прямое произведение групп $\mathcal{G} \times S_2$	S_2	C_{2h}	S_6	C_{4h}	C_{6h}	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{6h}	T_h	O_h
Несобственная группа, не содержащая инверсию I и изоморфная группе $\mathcal{G}$		S_1		S_4	C_{3h}	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v} D_{2d}	C_{6v} D_{3h}		T_d
Другая несобственная группа, изоморфная группе $\mathcal{G}$		S_2			S_6	C_{2h}			D_{3d}		
Прямое произведение групп $\mathcal{G} \times S_1$	S_1	C_{2h}	C_{3h}	C_{4h}	C_{6h}	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{6h}		

встречались в гл. 4, § 10. Группа D_2 изоморфна группе $C_{2h} = C_2 \times S_2$, а группа D_6 — группе $D_{3h} = D_3 \times S_1$ (она может быть записана также в виде $D_6 = D_3 \times C_2$; см. задачу 2.7). Поэтому единственные таблицы характеров, которые необходимо составлять заново, — это таблицы для групп D_4 , T и O .

В пределе при $n \rightarrow \infty$ группа C_n стремится к непрерывной группе $\mathcal{R}_2$ (гл. 7, § 3). Аналогичные пределы существуют для групп C_{nv} , C_{nh} , D_n , D_{nh} при $n \rightarrow \infty$; они обозначаются через ¹⁾ $C_{\infty v}$, $C_{\infty h}$, D_∞ и $D_{\infty h}$. Группа $C_{\infty v}$ получается из $\mathcal{R}_2$ добавлением любой вертикальной плоскости отражения, что приводит к появлению и всех остальных возможных плоскостей. Нетрудно убедиться в том, что вся бесконечная совокупность отражений в вертикальных плоскостях принадлежит одному и тому же классу. Как и при конечных n , повороты на углы a и $-a$ образуют класс из двух элементов. Соотношение $\sigma_v R(a) = R(-a) \sigma_v$, справедливое для любого отражения в вертикальной плоскости, означает, что произведение вращения и отражения в точности равно отражению в плоскости, повернутой на половинный угол:

$$R(a) \sigma_v = R\left(\frac{1}{2}a\right) R\left(\frac{1}{2}a\right) \sigma_v = R\left(\frac{1}{2}a\right) \sigma_v R\left(-\frac{1}{2}a\right) = \sigma'_v.$$

Это означает также, что отражения и вращения не коммутируют друг с другом и, следовательно, группа $C_{\infty v}$ не является прямым произведением. Но эта группа изоморфна группе O_2 всех двумерных ортогональных матриц, поскольку в базисе, образованном единичными векторами e_x и e_y в горизонтальной плоскости, вращениям соответствуют все ортогональные матрицы с определителем $+1$, а отражениям — все ортогональные матрицы с определителем -1 . (Заметим, что соотношение между O_2 и $\mathcal{R}_2$ отличается от соотношения между O_3 и $\mathcal{R}_3$, так как в последнем случае имеет место прямое произведение,

¹⁾ Такие группы с осями симметрии бесконечного порядка называются также предельными или группами Пьера Кюри. Полное число таких групп — семь: в дополнение к пяти перечисленным в тексте существуют еще две паровые — скалярная (с плоскостью симметрии) и псевдоскалярная (без плоскости симметрии). См. об этом книгу И. С. Желудева, указанную в литературе, стр. 11. — *Прим. ред.*

см. гл. 7, § 4.) Другие группы из упоминавшихся выше просто связаны с $C_{\infty v}$, поскольку $C_{\infty h} = \mathcal{R}_2 \times S_2$, группа D_∞ изоморфна группе $C_{\infty v}$, а $D_{\infty h} = C_{\infty h} \times S_2$. Группа $C_{\infty v}$ является группой симметрии линейной молекулы без центра симметрии; если же молекула симметрична относительно средней точки, как в случае двухатомной молекулы с одинаковыми ядрами, то ее группой симметрии является группа $D_{\infty h}$.

Неприводимые представления группы $C_{\infty v}$ можно построить из неприводимых представлений подгруппы $\mathcal{R}_2$. Если e_m — базисный вектор, принадлежащий представлению $\Gamma^{(m)}$ группы $\mathcal{R}_2$ [например, функция $\exp(im\phi)$], то отражение в вертикальной плоскости преобразует его в вектор e_{-m} , принадлежащий представлению $\Gamma^{(-m)}$. Таким образом, при $m \neq 0$ неприводимые представления группы $C_{\infty v}$ являются двумерными с характером

$$\chi^{(m)}(a) = \exp(ima) + \exp(-ima) = 2\cos ma$$

для вращений и характером $\chi^{(m)} = 0$ для отражений (в последнем случае отсутствуют диагональные матричные элементы). В особом случае, когда $m=0$, отражение преобразует e_0 в другой вектор e'_0 , также соответствующий значению $m=0$. Если e'_0 отличается от e_0 скалярным множителем, то, поскольку $\sigma_0^2=1$, отражение должно иметь характер ± 1 . К тому же выводу можно прийти, если e_0 и e'_0 вообще независимы, поскольку в этом случае можно образовать две комбинации $e_0 \pm e'_0$, которые имеют при отражениях характер ± 1 . Итак, при $m=0$ имеется два одномерных неприводимых представления. Эти результаты сведены в табл. 9.3.

Таблица 9.3

$C_{\infty v}$	E	$2 \mathcal{R}(a)$	σ_v
A_+	1	1	1
A_-	1	1	-1
E_m ($m \geq 1$)	2	$2 \cos ma$	0

§ 7. ДВУЗНАЧНЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

В гл. 7 мы познакомились с двузначными представлениями группы $\mathcal{R}_3$; о них говорилось в гл. 7, § 6, а также в гл. 8, § 4 в связи со спином. Поскольку точечные группы являются подгруппами группы $\mathcal{R}_3$, можно ожидать необходимость двузначных представлений также и для точечных групп. В гл. 7, § 6 мы указали особый прием — интерпретировать двузначные представления как однозначные представления двойных групп в случае группы $\mathcal{R}_3$.

Применим теперь тот же прием для точечных групп. Напомним, что двойная группа состоит из обычных вращений R , дополненных новыми элементами $\bar{E}R$, где $\bar{E}$ — поворот на угол 2π вокруг любой оси. Единичный элемент E связывается теперь с поворотом на угол 4π , так что $\bar{E}^2 = E$. Новый элемент $\bar{E}$ коммутирует со всеми вращениями.

Таким образом, если задана точечная группа $\mathcal{G}$ с элементами G_a , то соответствующая точечная группа $\bar{\mathcal{G}}$ строится путем введения новых элементов $\bar{E}G_a$, которые в дальнейшем обозначаются через $\bar{G}_a$. Если группа содержит вращение C_n , то

$$C_n^n = \bar{E}, \quad C_n^{2n} = E, \quad \bar{C}_n = \bar{E}C_n.$$

В отличие от группы $\mathcal{R}_3$ методы, использованные в гл. 4 для вывода неприводимых представлений конечных групп, основывались на соотношении (4.1) и потому не приводили ни к каким двузначным представлениям. Используем теперь для их нахождения понятие двойной группы. Двойная группа будет иметь представления двух типов в зависимости от знака в соотношении $\chi(\bar{G}_a) = \pm \chi(G_a)$. (Это соотношение можно доказать следующим образом. Поскольку элемент E коммутирует со всеми элементами группы, по лемме Шура он должен быть кратен единичной матрице в любом неприводимом представлении. С учетом того, что $\bar{E}^2 = E$, соответствующий множитель должен быть равен ± 1 .) Представления, соответствующие знаку плюс, являются, очевидно, однозначными представлениями группы $\mathcal{G}$, поскольку новый элемент $\bar{E}$ имеет ту же матрицу, что и единичный элемент. Дву-

значные представления группы $\mathcal{G}$ будут совпадать с теми представлениями группы $\mathcal{G}$, для которых в указанном соотношении стоит минус. Для определения числа таких представлений и таблицы их характеров, будем следовать общим методам гл. 4 применительно к группе $\mathcal{G}$. Прежде всего необходимо найти число классов, совпадающее с числом неприводимых представлений. Зная таблицу характеров однозначных представлений, мы сможем затем непосредственно достроить и всю остальную таблицу, используя ортогональность и другие методы, согласно изложенному в гл. 4.

Структура классов собственных двойных групп легко выводится из соответствующей структуры исходных точечных групп. Поскольку элемент $\bar{E}$ коммутирует со всеми элементами, он образует отдельный класс. Каждому классу поворотов на угол $2\pi/n$ ($n \neq 2$) соответствуют два класса поворотов в двойной группе, обозначаемые через C_n и $\bar{C}_n$. В особом случае поворотов на угол π элементы C_2 и $\bar{E}C_2 = \bar{C}_2$ окажутся сопряженными (т. е. принадлежащими одному классу), если ось — двусторонняя, т. е. если имеется элемент группы, меняющий направление оси второго порядка на обратное). В самом деле, вращения $R(\pm\theta)$ вокруг двусторонней оси являются сопряженными, так что, в частности, сопряженными являются и вращения $R(\pm\pi)$. Однако в двойной группе эти вращения уже не являются идентичными, но $R(-\pi) \equiv R(3\pi)$, так что $R(\pi)$ — элемент, сопряженный с $R(3\pi)$. Иными словами, C_2 и $\bar{E}C_2$ принадлежат одному классу.

В качестве примера рассмотрим собственную группу $\bar{D}_4$. Группа D_4 состоит из классов E , C_4^2 , $2C_4$, $2C_2$, $2C_2'$. Как показано выше, новые элементы $\bar{E}C_2$ лежат в том же классе, что и C_2 , так что группа $\bar{D}_4$ состоит из классов E , $\bar{E}$, $2C_4^2$, $2C_4$, $2\bar{C}_4$, $4C_2$, $4C_2'$. Добавление двух новых классов означает также добавление еще двух неприводимых представлений, характеры которых удовлетворяют соотношению $\chi(\bar{G}_a) = -\chi(G_a)$. Отсюда следует, что для двусторонней оси второго порядка характер должен быть равен нулю. Можно построить и полную таблицу характеров (табл. 9.4), заметив, что мы уже

Таблица 9.4

$\bar{D}_4$	E	$\bar{E}$	$2C_4^2$	$2C_4$	$2\bar{C}_4$	$4C_2$	$4C_2'$
A_1	1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	1	-1	-1
B_1	1	1	1	-1	-1	1	-1
B_2	1	1	1	-1	-1	-1	1
E	2	2	-2	0	0	0	0
$\bar{E}_1$	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0
$\bar{E}_2$	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0

располагаем пятью неприводимыми представлениями одинарной группы D_4 , которые образуют также представления двойной группы с $\chi(\bar{G}_a) = \chi(G_a)$ и имеют размерности 1, 1, 1, 1 и 2. Если размерность двух новых неприводимых представлений равна s_6 и s_7 , то, согласно формуле (4.33),

$$16 = 1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 + s_6^2 + s_7^2,$$

так что $8 = s_6^2 + s_7^2$ и единственное возможное решение дает $s_6 = s_7 = 2$. Отсюда мы сразу получаем характеры E и $\bar{E}$, и остающиеся значения для $2C_4$ и $2\bar{C}_4$ легко найдутся из соотношений ортогональности (4.25) и (4.36).

Структуру классов и неприводимые представления двойных несобственных точечных групп можно получить из соответствующей структуры для собственных, пользуясь теми же методами, что и в § 4, п. Б и в § 6. Группы, содержащие инверсию, вновь могут быть представлены в виде прямого произведения с группой S_2 , а группы, не содержащие инверсии, изоморфны с некоторыми двойными собственными группами. Заметим, что если инверсия имеется, то она коммутирует со всеми элементами группы и, как и ранее, удовлетворяет соотношению $I^2 = E$, но отражение σ дает теперь

$$\sigma^2 = (IC_2)^2 = EC_2^2 = \bar{E},$$

откуда $\sigma^4 = E$.

Полная сводка таблиц характеров для всех кристаллографических двойных точечных групп приведена в приложении 1 (т. 2).

§ 8. ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ И МАГНИТНЫЕ ТОЧЕЧНЫЕ ГРУППЫ

В гл. 5, § 10 был введен оператор обращения времени $\hat{U}$, который является оператором симметрии для гамилтонианов многих физических систем. В случае кристаллической системы с симметрией относительно обращения времени полная точечная группа симметрии будет представлять собой прямое произведение обычной точечной группы на тождественное преобразование и обращение времени (последнее коммутирует со всеми операциями точечной группы). Заметим, однако, что данное утверждение может быть верным только для немагнитных кристаллов, поскольку оператор $\hat{U}$ меняет на обратное направление токов и спинов, а следовательно, и направление намагниченности в магнитоупорядоченных кристаллах. Тогда магнитные кристаллы должны были бы обладать симметрией только обычной точечной группы. Но это не всегда так, поскольку некоторые магнитные кристаллы могут быть инвариантными относительно произведения операции $\hat{U}$ на некоторое вращение, хотя они не инвариантны относительно операции $\hat{U}$. Например, в ферромагнитном кристалле с намагниченностью вдоль оси z операция $\hat{U}$ может быть операцией симметрии (здесь R — поворот на угол π вокруг оси x), поскольку R меняет направление намагниченности на противоположное, а $\hat{U}$ восстанавливает исходное положение. Группы симметрии этого типа, содержащие операцию обращения времени лишь в комбинации с вращением или отражением, называются магнитными точечными группами; таких групп существует всего 58 (см. книгу Брэдли и Крекнелла). Эти группы называются также цветными или шубниковскими, так как А. В. Шубников впервые изучал их, рассматривая симметрию правильных твердых многогранников с «цветными» (черными и белыми) гранями. Он

включил в число допустимых операцию смены цветов, которая аналогична операции обращения времени)¹⁾.

Рассмотрим в качестве примера ферромагнитный кристалл, который (если отвлечься от операции обращения времени) описывается группой симметрии D_3 . В магнитно-разупорядоченном состоянии выше температуры перехода T_N (при которой устанавливается магнитный порядок) добавление обращения времени приводит к большей группе симметрии $D_3 \times \{E, \Gamma\}$ ввиду отсутствия магнитного момента. Ниже температуры T_N кристалл становится ферромагнитным, причем его магнитный момент направлен вдоль оси третьего порядка. Поскольку три поворота C_2 на угол π вокруг осей в плоскости xu приводят к обращению направления намагниченности, они не являются более операциями симметрии; то же относится и к обращению времени Γ . Однако произведения ΓC_2 сохраняют значение операций симметрии, причем новая группа симметрии включает в себя операторы E , C_3 , C_3^2 и три оператора ΓC_2 , содержащие обращение времени. Заметим, что магнитная точечная группа содержит подгруппу C_3 исходной точечной группы D_3 и в терминологии т. 2, гл. 20, § 3 группа C_3 является нормальной подгруппой с индексом 2 группы D_3 . Можно показать, что этим свойством (наличие нормальной подгруппы с индексом 2) обладают все магнитные точечные группы и это условие позволяет построить все 58 таких групп. Обозначение таких групп иллюстрируется на приведенном выше примере, в котором принято записывать $D_3(C_3)$.

Мы не будем рассматривать здесь неприводимые представления ни произведения групп на обращение времени, ни магнитных точечных групп ввиду их сложности (см., однако, книгу Брэдли и Крекнелла). В первом случае следует различать представления точечных групп, которые а) эквивалентны действительным представлениям;

¹⁾ Шубниковскими принято называть пространственные группы симметрии, базирующиеся на черно-белых точечных. Под цветными группами понимают прежде всего точечные, использующие несколько пар противоположных цветов. Такие группы были введены в рассмотрение Н. В. Беловым (см. книги А. В. Шубникова и А. В. Шубникова и Н. В. Белова, указанные в литературе).—*Прим. ред.*

б) не эквивалентны их комплексно-сопряженным представлениям и в) эквивалентным их комплексно-сопряженным представлениям, но не эквивалентны действительным. Во всех случаях следует иметь в виду антилинейную и антиунитарную природу оператора Υ (т. 2, гл. 15, § 7, п. Г).

§ 9. РАСЩЕПЛЕНИЕ АТОМНЫХ УРОВНЕЙ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Посмотрим теперь, как симметрия точечных групп помогает объяснить свойства атомов в кристаллическом поле. Дальнейшее приложение изложенной теории к электронным состояниям в молекуле см. в т. 2, гл. 13. При правильном расположении атомов в бесконечном кристалле возможна симметрия по отношению к операциям точечной группы с центром на любом из атомов. Кроме того, полная симметрия кристалла включает в себя не только локальную точечную группу на каком-либо выделенном узле решетки, но также трансляции, смещающие данный атом на целое число ячеек и оставляющие при этом неизменной совокупность атомов внутри каждой ячейки. Свойства, обусловленные трансляционной симметрией, можно в известной мере рассматривать отдельно (т. 2, гл. 14). Здесь мы остановимся лишь на том влиянии, которое локальная точечная группа симметрии оказывает на свойства одного из атомов, составляющих кристалл.

А. Постановка физической задачи

В гл. 8 мы рассматривали состояния свободного атома, пользуясь инвариантностью гамильтониана относительно группы O_3 вращений и отражений в трехмерном пространстве при классификации уровней энергии. Будучи помещен в кристалл, атом подвергается действию электрических и магнитных полей, создаваемых окружающими атомами и понижающих симметрию до одной из кристаллографических точечных групп. Как показано в гл. 5, § 8, такое понижение симметрии вызывает расщепление некоторых вырожденных уровней энергии свободного атома, причем остаточное вырождение будет определяться точечной группой. Детальный характер расщепления и точные значения энергии состояний зависят, конечно, от точного вида потенциала кристаллического поля и вол-

новых функций, но некоторые отношения величин расщеплений можно вычислить на основе только теории групп (точнее, теоремы Вигнера — Эккарта). Экспериментально низколежащие уровни энергии можно исследовать разными методами. В первых экспериментах расщепление исследовалось путем измерения теплоемкости и магнитной восприимчивости, а в дальнейшем более детально — на основе метода оптического поглощения. Наконец, спектроскопия парамагнитного резонанса позволила накопить большое количество данных высокой точности для ионов переходных и редкоземельных металлов в кристаллических солях.

Когда атомы объединяются в кристалл, обычно происходит некоторая перестройка внешних электронов с тенденцией к ионизации и образованию структур с замкнутыми оболочками. С точки зрения симметрии это не представляет интереса, так как замкнутая оболочка не вырождена и не может быть расщепления, обусловленного сужением симметрии от группы O_3 до точечной группы. Но некоторые элементы из групп переходных металлов (лантаниды, актиниды, группа железа) обладают незаполненной внутренней электронной оболочкой, окруженной полностью заполненными оболочками. Когда такие атомы объединяются в кристалл, их внутренние оболочки остаются незаполненными, поскольку они экранируются внешними электронами. Такие кристаллы — удобные объекты для исследования влияния кристаллического поля на энергетические уровни атома именно благодаря незаполненной внутренней электронной оболочке. Детальное сравнение теоретических выводов с экспериментальными данными для таких систем не только дало информацию об интенсивности кристаллических полей, но и внесло ясность в фундаментальную теорию атомных состояний.

Гамильтониан атома или иона в кристаллическом поле дается выражением $H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3$ (в обозначениях гл. 8, § 6, п. А). Здесь H_0 описывает центральное поле, H_1 — кулоновское отталкивание между электронами, H_2 — спин-орбитальное взаимодействие, H_3 — кристаллическое поле. При анализе влияния кристаллического поля H_3 нужно рассмотреть три простых предельных случая:

1. Слабое поле, когда $H_3 \ll H_2 \ll H_1 \ll H_0$.
2. Промежуточное поле, когда $H_2 \ll H_3 \ll H_1 \ll H_0$,
3. Сильное поле, когда $H_2 \ll H_1 \ll H_3 \ll H_0$.

Соли лантанидов, или редкоземельных элементов (например, церийэтилсульфата), могут служить примером случая слабого поля. В электронную конфигурацию иона лантанида входят все заполненные оболочки до $4d$ -оболочки включительно; далее следует не полностью заполненная $4f$ -оболочка, содержащая от 1 до 13 электронов (по мере продвижения от начала группы к ее концу), а завершают конфигурацию две заполненные оболочки $5s^2 5p^6$. Эти две оболочки окружают электроны $4f$ -оболочки и экранируют их от действия кристаллического поля, так что испытываемое ими эффективное поле очень слабое. В этом случае $(2J+1)$ -кратный спин-орбитальный мультиплет J , описанный в гл. 8, § 6, п. В, будет расщеплен малым возмущением H_3 .

Соли группы железа (например, бромат ванадия) могут служить примером поля в интервале от промежуточного до сильного. В этом случае в электронную конфигурацию входят все заполненные оболочки до $3p$ -оболочки включительно. При этом самой внешней является незаполненная $3d$ -оболочка; она испытывает полное действие кристаллического поля. В зависимости от конкретной выбранной соли поле в этом случае будет меняться от промежуточного до сильного. В промежуточном случае H_3 считается малым возмущением кулоновского взаимодействия; его действие сводится к расщеплению $(2L+1)$ -кратного вырождения мультиплета ${}^{2S+1}L$, возникшего вследствие LS -связи. При этом спин-орбитальное взаимодействие играет роль самого слабого возмущения. В случае сильного поля кристаллическое поле H_3 является вторым по величине непосредственно после центрального поля H_0 , так что его действие сводится к возмущению центрального поля, в котором движутся электроны.

Б. Определение характера расщеплений из соображений симметрии

Выберем в качестве объекта для иллюстрации методов расчета влияния кристаллического поля в случаях 1—3 одну соль — бромат ванадия (это удобнее, чем брать три

разные соли). По существу для этого соединения кристаллическое поле относится к случаю 2, но на практике не всегда можно быть априори уверенным, какой именно случай из трех возможных осуществляется для данной конкретной соли. Может оказаться необходимым провести

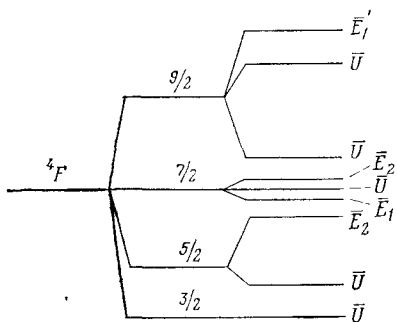


Рис. 9.8

вычисления несколькими способами, и только последующее сравнение с экспериментом может указать наилучший из них.

Химическая формула бромата ванадия такова: $\text{Vd}(\text{BrO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$. Выбор такой на первый взгляд достаточно сложной гидратированной соли оправдан тем, что нас интересует поведение одного иона ванадия в кристал-

лическом поле. Если бы мы выбрали молекулу с высоким содержанием ванадия, то между самими ионами ванадия возникли бы сложные взаимодействия. В выбранной нами соли ионы ванадия расположены на больших расстояниях друг от друга, так что их взаимодействием можно пренебречь. В этой соли шесть молекул воды окружают ион ванадия, образуя конфигурацию почти правильного октаэдра, так что в качестве соответствующей группы симметрии можно принять группу O . (В действительности существует небольшое тригональное искажение, которым можно пренебречь.) Ион ванадия Vd^{++} обладает электронной конфигурацией $1s^2 \dots 3p^6 3d^3$, т. е. в неполностью заполненной оболочке находится три электрона. Основное состояние этого свободного иона — 4F с $L=3$ и $S=3/2$. Это можно показать методом гл. 8, § 6, п. Г. В отсутствие кристаллического поля спин-орбитальное взаимодействие расщепило бы мультиплет 4F на четыре уровня с $J=3/2$, $5/2$, $7/2$ и $9/2$ в соответствии с формулой (8.39) (рис. 9.8, средняя система уровней).

Слабое поле

Если кристаллическое поле слабое, то каждый $(2J+1)$ -кратно вырожденный уровень J слегка расщепится, при-

Таблица 9.5

	E	$\bar{E}$	$8C_3$	$8\bar{C}_3$	$\frac{3\bar{C}_2}{3C_2}$	$6C_4$	$6\bar{C}_4$	$\frac{6\bar{C}_2}{6C_2}$
A_1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	1	1	-1	-1	-1
E	2	2	-1	-1	2	0	0	0
T_1	3	3	0	0	-1	1	1	-1
T_2	3	3	0	0	-1	-1	-1	1
$\bar{E}_1$	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
$\bar{E}_2$	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
$\bar{U}$	4	-4	-1	1	0	0	0	0
$D^{(3/2)}$	4	-4	-1	1	0	0	0	0 = $\bar{U}$
$D^{(5/2)}$	6	-6	0	0	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0 = $\bar{E}_2 \oplus \bar{U}$
$D^{(7/2)}$	8	-8	1	-1	0	0	0	0 = $\bar{E}_1 \oplus \bar{E}_2 \oplus \bar{U}$
$D^{(9/2)}$	10	-10	-1	1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0 = $\bar{E}_1 \oplus 2\bar{U}$
$D^{(3)}$	7	7	1	1	-1	-1	-1	-1 = $A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$
$\bar{U} \times A_2$	4	-4	-1	1	0	0	0	0 = $\bar{U}$
$\bar{U} \times T_1$	12	-12	0	0	0	0	0	0 = $\bar{E}_1 \oplus \bar{E}_2 \oplus 2\bar{U}$
$\bar{U} \times T_2$	12	-12	0	0	0	0	0	0 = $\bar{E}_1 \oplus \bar{E}_2 \oplus 2\bar{U}$
$D^{(2)}$	5	5	-1	-1	1	-1	-1	1 = $E \oplus T_2$
$\{T_2 \times T_2 \times T_2\}_a$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1 = A_2
$\{T_2 \times T_2\}_a$	3	3	0	0	-1	1	1	-1 = T_1
$T_1 \times E$	6	6	0	0	-2	0	0	0 = $T_1 \oplus T_2$
$\{E \times E\}_a$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1 = A_2
$A_2 \times T_2$	3	3	0	0	-1	1	1	-1 = T_1
$D^{(1)}$	3	3	0	0	-1	1	1	-1 = T_1
$D^{(4)}$	9	9	0	0	1	1	1	1 = $A_1 \oplus E \oplus T_1 \oplus T_2$
$D^{(5)}$	11	11	-1	-1	-1	1	1	-1 = $E \oplus 2T_1 \oplus T_2$

чем характер расщепления можно определить, исследуя разложение представления группы $\mathcal{R}_3$:

$$D^{(J)} = \sum_{\alpha} m_{\alpha} \Gamma^{(\alpha)}, \quad (9.7)$$

где $\Gamma^{(\alpha)}$ — неприводимые представления точечной группы O . Мы воспроизводим из приложения 1 таблицу характеров (в том числе двузначных представлений) в первых восьми строках табл. 9.5. Здесь же приведены характеры для представлений $D^{(J)}$, вычисленные по формуле (7.42). С их помощью легко вычисляются коэффициенты m_{α} . Получающееся расщепление показано на рис. 9.8 (третья система уровней). Описание упорядочения уровней $T^{(\alpha)}$ в пределах каждого мультиплетта мы отложим до т. 2 (приложение 5, § 4).

Промежуточное поле

В предыдущем примере было проиллюстрировано действие слабого поля; еще раз напомним о том, что в действительности поле в бромате ванадия достаточно сильно для того, чтобы его можно было рассматривать в приближении промежуточного поля (случай 2). Перейдем теперь к случаю, когда кристаллическое поле велико по сравнению со спин-орбитальным взаимодействием. Начнем

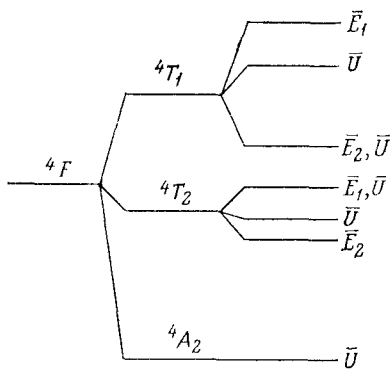


Рис. 9.9

вновь с одного мультиплетта $4F$ и рассмотрим действие кристаллического поля до включения малого спин-орбитального поля. При этом можно сначала пренебречь наличием спина и рассмотреть разложение орбитального состояния с $L=3$ по неприводимым представлениям точечной группы O . Для этого нужно всего лишь знать характер представления $D^{(3)}$, вычисляемый вновь по формуле (7.42) и пред-

ставленный в табл. 9.5 (там же приведено разложение представления $D^{(3)}$ на $A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$). Отсюда получается вторая система уровней на рис. 9.9, где показано

расщепление уровня 4F_2 на три уровня 4A_2 , 4T_1 и 4T_2 , обладающие кратностями вырождения 4, 12 и 12 (с учетом четырехкратного вырождения по спину).

При учете малого спин-орбитального взаимодействия произойдет дальнейшее расщепление. Чтобы определить его величину, заметим, что спиновое состояние $S=3/2$ преобразуется как $\bar{U}$ под действием группы O (табл. 9.5, $D^{(3/2)}$), так что, например, уровень 4A_2 преобразуется как произведение $\bar{U} \oplus A_2$. Однако подобные произведения можно разложить по неприводимым представлениям группы O следующим образом:

$$\begin{aligned}\bar{U} \otimes A_2 &= \bar{U}, \\ \bar{U} \otimes T_2 &= 2\bar{U} \oplus \bar{E}_2 \oplus \bar{E}_1, \\ \bar{U} \otimes T_1 &= 2\bar{U} \oplus \bar{E}_2 \oplus \bar{E}_1;\end{aligned}$$

это следует из таблицы характеров.

Данный этап вычислений аналогичен разложению $D^{(3/2)} \otimes D^{(3)} = D^{(9/2)} \oplus D^{(7/2)} \oplus D^{(5/2)} \oplus D^{(3/2)}$ для группы $\mathcal{R}_3$, использованному при выводе второй (слева) системы уровней на рис. 9.8. Окончательно спин-орбитальное взаимодействие приводит к третьей системе уровней на рис. 9.9. Мы не будем далее останавливаться на расщеплении и упорядочении уровней, обусловленных спинорбитальными силами.

Сильное поле

В заключение рассмотрим на том же примере бромата ванадия расщепление, которое следует ожидать в пределе сильного поля. В этом случае кристаллическое поле сильнее кулоновского взаимодействия e^2/r_{ij} между электронами, так что его следует учитывать в первую очередь. Это, однако, несложно, так как кристаллическое поле описывается одночастичным оператором и его влияние сводится к искажению центрального поля, в котором движутся электроны. Таким образом, вместо сферически-симметричного поля с обычным пятикратным вырождением уровня (значения $m=2, 1, \dots, -2$ для трех валентных электронов в d -состояниях) мы получим единственное состояние электрона, отвечающее неприводимому представлению группы симметрии O (ту же симметрию

имеет теперь и само поле). Из табл. 9.5 видно, что $D^{(2)} = E \otimes T_2$, так что пять d -орбит расщепляются в дублет, обозначаемый через e , и триплет t_2 . Практически оказывается, что для бромата ванадия состояние t_2 имеет более низкую энергию, чем состояние e .

При наличии трех электронов возникает вопрос о том, какую из орбит, e или t_2 , использовать, но ясно, что основное состояние будет иметь конфигурацию t_2^3 , в которой все три частицы находятся на орбите t_2 с более низкой энергией. При повышении энергии возбуждения должны также наблюдаться состояния, соответствующие конфигурациям t_2^2e , t_2e^2 и e^3 . Полный спин S все еще будет в отличие от L хорошим квантовым числом, и правило Хунда, благоприятствующее состояниям с большим S , все еще будет применимо. Поэтому мы, как и в случаях 1 и 2, ограничимся случаем максимального спина $S = 3/2$.

Кулоновское взаимодействие между электронами приведет теперь к снятию орбитального вырождения каждой конфигурации типа t_2^3 и ее расщеплению. На этом этапе расчета гамильтониан, включающий H_0 , H_1 и H_3 , остается, разумеется, инвариантным относительно группы O и вновь возникающие состояния будут классифицироваться по тем неприводимым представлениям группы O , которые появляются при разложении представления произведений, подобных $T_2 \otimes T_2 \otimes T_2$ для конфигурации t_2^3 . Поскольку, однако, спинная часть волновой функции, соответствующей значению $S = 3/2$, симметрична относительно всех перестановок, в силу принципа Паули необходимо, чтобы орбитальное состояние было полностью антисимметричным. Следовательно, нам нужно знать характеры антисимметризованных произведений. В гл. 6, § 6 была выведена формула (6.33) для характера симметризованного произведения двух сомножителей; вычтя из него $\{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^2$ в случае полного пространства произведения, получим

$$\chi_{\text{антисимм}}^{(\alpha \times \alpha)}(G_a) = \frac{1}{2} \{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^2 - \frac{1}{2} \chi^{(\alpha)}(G_a^2),$$

где использованы обозначения гл. 6, § 6. Для произведения трех сомножителей получим (т. 2, приложение 3, § 1) аналогичную формулу

$$\chi_{\text{антисимм}}^{(\alpha \times \alpha \times \alpha)}(G_a) = \frac{1}{6} [\{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^3 - 3\chi^{(\alpha)}(G_a^2)\chi^{(\alpha)}(G_a) + 2\chi^{(\alpha)}(G_a^3)].$$

Для наинизшей конфигурации t_2^3 характер произведения $T_2 \otimes T_2 \otimes T_2$ показан в табл. 9.5; как нетрудно видеть, только состояние A_2 имеет правильную симметрию, так что основным состоянием в сильном поле вновь является A_2 . Аналогичное вычисление для e^3 привело бы к нулевому значению характера, откуда видно, что для этой конфигурации отсутствуют антисимметричные состояния. Это можно было бы сказать заранее, так как e — лишь дублет и два из трех электронов должны были бы неизбежно находиться в одинаковых состояниях. Для других конфигураций $t_2^2 e$ и $t_2 e^2$ необходимо найти характеры антисимметризованных произведений $\{T_2 \otimes T_2\}_a$ и $\{E \otimes E\}_a$ и затем умножить первый на E , а второй — на T_2 . Как явствует из табл. 9.5, эта процедура приведет к второй слева системе уровней рис. 9.10. (Определение величины расщепления между новыми уровнями на рис. 9.10 потребовало бы вычислений с двухчастичным кулоновским потенциалом, в какой-то мере аналогичных вычислениям, приведенным в т. 2, приложение 5.) Большее число уровней на рис. 9.10 обусловлено тем, что учитывались все состояния с $S=3/2$. Соответствующие вычисления для случаев 1 и 2 потребовали бы дополнительного учета возбужденного мультиплетта 4P . Картина спин-орбитального расщепления в случае сильного поля совпадает с аналогичной картиной в случае промежуточного поля, хотя величина расщепления может быть иной.

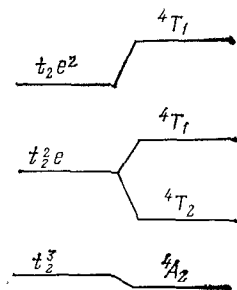


Рис. 9.10

Для получения точных результатов, а также для анализа случаев, когда величина поля не находится вблизи одного из трех предельных случаев, следует учитывать возможность смешивания состояний с одинаковыми индексами по отношению к группе O . Это весьма громоздкая численная задача, включающая диагонализацию матриц. Разумеется, переход от случая слабого поля к сильному через промежуточные значения является непрерывным.

Правила отбора

Правила отбора, рассмотренные в гл. 5, § 4 и 6, находят прямое применение в задаче о кристаллическом поле. В гл. 5, § 4 мы видели, что оператор диагональных переходов преобразуется согласно векторному представлению $D^{(1)}$ группы $\mathcal{R}_3$, а следовательно (табл. 9.5), согласно представлению T_1 группы O . Поскольку $T_1 \otimes \bar{U} = \bar{E}_1 \oplus \bar{E}_2 + 2\bar{U}$ (табл. 9.5), все состояния, изображенные на рис. 9.8—9.10, должны возбуждаться из основного состояния $\bar{U}$. Но более тщательный анализ свойств этих состояний обнаруживает наличие правил отбора. В случае слабой связи (рис. 9.8) правило отбора по J , согласно формуле (8.3), запрещает переходы в состояния с $J=7/2$ и $J=9/2$, так что возбуждаться могут лишь первые два состояния $\bar{U}$ и $\bar{E}_2$. В случаях промежуточного и сильного полей (рис. 9.9 и 9.10) разложение $T_1 \otimes A_2 = T_2$ (табл. 9.5) показывает, что состояния T_1 не могут возбуждаться в результате дипольных процессов. Таким образом, должны возбуждаться лишь первые четыре состояния $\bar{U}$, $\bar{E}_2$, $\bar{E}_1$ и $\bar{U}$.

Но нужно помнить, что все рассмотренные в этом примере состояния возникли из конфигурации d^3 и потому имеют положительную четность (гл. 8, § 6, п. Б). Следовательно, электрические дипольные переходы между этими состояниями запрещены (см. о группе S_2 в гл. 5, § 6); разрешены лишь значительно более медленные магнитные дипольные переходы. На практике часто имеет место небольшая примесь состояний противоположной четности (ввиду отсутствия инверсионной симметрии кристалла), из-за чего могут происходить слабые электрические дипольные переходы.

В. Влияние магнитного поля

Экспериментальные измерения магнитной восприимчивости и спектра парамагнитного резонанса при низких температурах дают информацию о низколежащих уровнях энергии при наличии слабого электромагнитного поля.

Измеренная магнитная восприимчивость косвенным образом характеризует разности энергий уровней (энерге-

тические щели), так как в нее входит населенность этих уровней как функция температуры. Спектроскопия электронного парамагнитного резонанса измеряет эти разности непосредственно с помощью радиочастотных переходов между ними. При полном описании указанных расщеплений необходимы многочисленные уточнения (см. монографию Абрагама и Блинн) — например, учет спин-спинового и сверхтонкого взаимодействий, имеющих во многих случаях сравнимые значения. Но здесь мы рассмотрим только влияние магнитного поля для соли бромата ванадия, о которой уже говорилось выше.

Как и в гл. 8, § 6, учет магнитного поля добавляет к гамильтониану H из п. А слагаемое

$$H_{\text{магн}} = (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) \cdot \mathbf{B}_{\text{в}}, \quad (9.8)$$

которое трактуется далее как малое возмущение.

Слабое поле

В этом случае основное состояние было $\bar{U}$ -квартетом, соответствующим значениям $J = 3/2$, $M_J = 3/2, 1/2, -1/2, -3/2$.

Поскольку в этом случае отсутствовало расщепление, вызванное кристаллическим полем, а основное состояние по-прежнему характеризуется определенным значением J , расщепление, обусловленное магнитным полем, в точности совпадает с описанным в гл. 8, § 6, причем фактор Ланде $g_J = 0,4$ [формула (8.40)], а расщепление пропорционально величине M .

Промежуточные и сильные поля

Вычисления, проиллюстрированные на рис. 9.9, показывают, что если кристаллическое поле превышает спин-орбитальное взаимодействие в основном состоянии, то последнее, бывшее квартетом $\bar{U}$, становится орбитальным синглетом A_2 . Поэтому в отсутствие спинового момента оно не может быть расщеплено магнитным полем, что следует из общих соображений о правилах отбора. Оператор $\mathbf{L}$ преобразуется подобно вектору $\mathbf{D}^{(1)}$ при вращениях, или, согласно табл. 9.5, по представлению $T^{(1)}$ группы O . Такой оператор должен иметь нулевое среднее значение по состоянию A_2 , что следует из обычных пра-

вил отбора, так как произведение $T_1 \otimes A_2$ не содержит A_2 . Сдвиг энергии, обусловленный магнитным полем, дается просто формулой (9.8):

$$\Delta E_{M_S} = 2\mu_B \langle \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} \rangle = 2\mu_B B M_S$$

с g -фактором, равным 2. Такую ситуацию (магнитные свойства основного состояния обусловлены исключительно спином) часто называют «замораживанием» орбитального движения сильным кристаллическим полем.

Заметим, что, хотя основное состояние имеет одинаковую симметрию $\bar{U}$ относительно группы O во всех трех случаях, g -фактор равен 0,4 в случае 1 и 2,0 — в двух других. Эксперимент дает значение 1,96, согласующееся со случаями сильного и промежуточного поля.

ЛИТЕРАТУРА ¹⁾

Впервые точечные группы для описания расщепления в кристаллическом поле были использованы в работе

Bethe H. A., Ann. der Phys., 1929, В. 3, S. 3, 133.

Очень подробные таблицы, относящиеся к кристаллографическим точечным группам, даны в книге

Koster G. F., Dimmock J. O., Wheeler R. G., Statz H., Properties of the Thirty-two Point Groups, Technology Press, M. I. T., Cambridge, Mass., 1963.

Группа октаэдра описана в книге

Murnaghan F. D., Theory of Group Representations, Johns Hopkins Press, Baltimore, 1938. [Имеется перевод: Мурнаган Ф. Д. Теория представлений групп.— М.: ИЛ, 1955.]

Подробное обсуждение двузначных представлений можно найти в работах

Opechowski W., Physica, 1940, v. 7, p. 552.

Bradley C. J., Cracknell A. P., The Mathematical Theory of Symmetry in Solids, Oxford University Press, 1972.

Штрайтвольф Г. Теория групп в физике твердого тела.— М.: Мир, 1971*.

Желудев И. С. Симметрия и ее приложения.— М.: Атомиздат, 1976*.

Shubnikov A. V., Belov N. V., Coloured Symmetry.— London: Pergamon Press, 1964*.

Для дальнейшего чтения по теории кристаллических полей рекомендуем книгу Джадда (см. литературу к гл. 8), а также монографию

¹⁾ Литература, помеченная звездочкой, добавлена при переводе.— *Прим. ред.*

Abragam A., Bleaney B., Electron Paramagnetic Resonance of Transition Johns, Oxford University Press, 1970. [Имеется перевод: Абрагам А., Блани Б. Электронный парамагнитный резонанс.— М.: Мир, 1972.]

ЗАДАЧИ

- 9.1. Пользуясь стереопроекцией, получите все элементы группы O из четырех поворотов на угол $2\pi/3$.
- 9.2. Кубический кристалл обладает группой симметрии O . а) Если деформировать его, растянув вдоль направления (111) (оси третьего порядка), то какова будет после этого его группа симметрии? б) Если, напротив, растянуть его вдоль оси четвертого порядка, то какова будет группа его симметрии в этом случае?
- 9.3. Кубический кристалл с группой симметрии O обладает набором собственных состояний, индицируемых по неприводимым представлениям O . Симметрия кристалла понижается так, как в задаче 9.2. Определите, какие состояния в каждом случае расщепляются, и снабдите их индексами, соответствующими неприводимым представлениям новых групп симметрии.
- 9.4. Покажите, что функция $f(\theta, \varphi) = Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) + Y_{-m}^{(l)}(\theta, \varphi)$, где m и l — четные целые числа, инвариантна относительно группы симметрии D_{2h} .
- 9.5. Взяв в качестве базиса функции x, y, z , постройте матрицы для одного элемента в каждом из классов группы O . Сравните характеры этих матриц с их значениями в таблице характеров (см. приложение) и покажите, что функции x, y, z принадлежат представлению T_1 . Отсюда следует, что атомное p -состояние не расщепляется возмущением, имеющим кубическую симметрию.
- 9.6. Покажите, что пространство полиномов второго порядка по x, y, z разлагается на сумму $A \oplus E \oplus T_2$ представлений группы O . Возьмите симметризованное произведение (§ 9, п. Б) представления T_1 на самого себя. Путем проектирования или другим способом постройте полиномы, преобразующиеся по каждому из этих представлений.
- 9.7. По формуле (7.42) вычислите характер представления группы O , порожденного набором семи сферических гармоник $Y_m^{(3)}$. Разложите это представление по неприводимым представлениям группы O . Выведите отсюда характер расщепления атомного f -состояния в присутствии возмущающего поля кубической симметрии.
- 9.8. Электрон движется в потенциальном поле, описываемом группой симметрии C_{4v} , а его волновая функция имеет симметрию A_1 . (Таблицу характеров см. в приложении 1.) Меняется ли энергия состояния (в первом порядке теории возмущений при наложении слабого электрического поля: а) вдоль оси четвертого порядка, б) в плоскости, перпендикулярной оси четвертого порядка. (В случае поля, направленного вдоль оси z , соответствующий оператор пропорционален z .)

- 9.9. Электрон движется в потенциальном поле с группой симметрии D_{2h} , так что его собственные состояния индицируются по его неприводимым представлениям A_1^+ , B_1^+ , B_2^+ , B_3^+ , A_1^- , B_1^- , B_2^- , B_3^- (приложение 1). Выведите правила отбора для электрических и магнитных дипольных переходов между этими состояниями.
- 9.10. Исходя из таблицы характеров для D_3 , выведите таблицу характеров двойной группы $\bar{D}_3$. (Проверьте результаты по таблице A_2 приложения 1.)
- 9.11. Для каждой из следующих молекул определите группу симметрии и дайте классификацию колебательных мод, используя методы, изложенные в гл. 6: а) молекула фосфора P_4 с атомами в вершинах правильного тетраэдра; б) молекула метана CH_4 , у которой четыре атома H расположены в вершинах правильного тетраэдра, атом C — в его центре; в) молекула этилена C_2H_4 , компланарная с двумя атомами H, связанными с каждым из атомов C, причем связи CH составляют угол 120° со связью CC. (Считайте, что молекула лежит в плоскости xz и и ось z направлена вдоль связи CC.)
- 9.12. Атом имеет один валентный электрон в d -состоянии и находится в кристаллическом окружении, имеющем симметрию точечной группы O_h . Считая кристаллическое поле слабым и пренебрегая влиянием спина, найдите число уровней, на которые должно расщепляться d -состояние.
- 9.13. Если в условиях предыдущей задачи учесть влияние спина и считать спин-орбитальное взаимодействие большим по сравнению с кристаллическим полем, каков будет характер состояния?
- 9.14. Выведите правила отбора для дипольных переходов между состояниями, найденными в задаче 9.3.

ИЗОСПИН И ГРУППА SU .

Все симметрии, о которых говорилось ранее, относились к пространственным координатам частиц, составляющих исследуемую систему. В частности, мы рассмотрели физические следствия симметрии системы по отношению как к полной группе вращений, так и к конечным группам вращений, а также к инверсиям и отражениям. Спин же частицы не связан с пространственными координатами, он описывает ее внутренние свойства. Однако компоненты спина преобразуются при вращениях системы, а потому спин можно рассматривать как величину, характеризующую поведение системы при вращениях. В этой и следующей главах мы познакомимся с симметриями, которые никак не связаны с пространственными координатами и с обычным трехмерным пространством. Эти симметрии относятся исключительно к внутренним свойствам частиц, таким, например, как электрический заряд.

Считается, что в природе существуют четыре разных типа сил, или четыре типа взаимодействий: гравитационное, электромагнитное, сильное и слабое взаимодействия. Первые два из них знакомы нам из повседневного опыта. Сильное взаимодействие связывает атомное ядро в одно целое. Это взаимодействие ответственно за выделение огромной энергии при взрыве атомной бомбы и в ядерном реакторе. В данной главе мы рассмотрим симметрию сильного взаимодействия, которая называется изоспиновой. (Вместо термина «изоспин» иногда употребляют термины «изотопический спин» и «изобарический спин».) Расширение изоспиновой симметрии применительно к очень короткоживущим элементарным частицам — так называемая SU_3 -симметрия — будет темой гл. 11. В данной главе мы не касаемся вопросов слабого взаимодействия, ответственного за β -распад и другие аналогичные процессы в ядрах.

Математическое описание изоспина полностью аналогично математическому описанию спина в системе частиц со спином $1/2$. Таким образом, мы сможем использовать все результаты, полученные в гл. 7 для группы $\mathcal{R}_3$. Причина этого кроется в том, что изоспиновая симметрия связана с группой SU_2 , гомоморфной группе $\mathcal{R}_3$. Подробно соотношение между этими двумя группами будет рассмотрено в т. 2 (гл. 18, § 13).

§ 1. ИЗСПИН В ЯДРАХ

Самый простой пример проявления изоспиновой симметрии можно найти при рассмотрении строения атомных ядер. Атомные ядра с положительным зарядом Ze (это заряд, равный по абсолютной величине заряду Z электронов) состоят из Z протонов и N нейтронов. Сильное взаимодействие удерживает эти протоны и нейтроны в области с размерами порядка 10^{-12} см. Протон несет положительный заряд, равный заряду электрона, а нейтрон не имеет электрического заряда. Массы протона и нейтрона приблизительно одинаковы: $M_p c^2 = 938,26$ МэВ, $M_n c^2 = 939,55$ МэВ; спин обеих частиц равен $1/2$. Протон мы обозначаем через p , а нейтрон — через n . Эксперимент показывает, что если исключить вклад электромагнитного взаимодействия, то силы, действующие в системах pp , pn и nn , одинаковы с точностью до 1%. Таким образом, эксперимент говорит о том, что сильное взаимодействие не различает протонов и нейтронов. Это указывает на наличие симметрии в сильном взаимодействии. Мы будем рассматривать следствия этой симметрии главным образом в сложных ядрах, состоящих из большого числа протонов и нейтронов. Из-за сходства между протоном и нейтроном иногда пользуются для того и другого общим названием «нуклон» и вводят «нуклонное число» $A = Z + N$, которое ввиду приблизительного равенства масс протона и нейтрона иногда называют массовым числом ядра. Можно даже рассматривать протон и нейтрон как два разных состояния одной частицы. В таком утверждении нет особого физического смысла: любые две частицы можно рассматривать как разные состояния одной. Но как правило, это будет приводить лишь к ненужным усложнениям. В случае же с протоном и нейтроном при-

близительное равенство масс и неразличимость по отношению к сильному взаимодействию приводят, как мы скоро увидим, к существенным упрощениям. А именно все сказанное выше означает, что гамильтониан, описывающий сильное взаимодействие протонов и нейтронов, инвариантен по отношению к преобразованиям, смешивающим протонные и нейтронные состояния. Рассмотрим сначала математическую сторону этих преобразований.

Два вектора состояния нуклона (протонный и нейтронный) можно использовать для того, чтобы определить абстрактное двумерное векторное пространство, так что $|p\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ и $|n\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$. Рассмотрим группу U_2 унитарных преобразований этого пространства. (Преобразования, не принадлежащие группе U_2 , не сохраняли бы нормировку векторов состояния.) Как показано в гл. 7, § 2, матрицы инфинитезимальных операторов унитарной группы должны быть антиэрмитовыми. Обратно, для любой эрмитовой матрицы H соотношением $U = \exp(iH)$ определяется унитарная матрица U . Заметим, что любую эрмитову матрицу 2×2 можно представить в виде линейной комбинации четырех матриц

$$\begin{aligned} 1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \tau_x &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\ \tau_y &= \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, & \tau_z &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (10.1)$$

Таким образом, эти четыре матрицы можно рассматривать как инфинитезимальные операторы группы U_2 . Группа, состоящая из унитарных матриц 2×2 с определителем, равным $+1$, называется группой SU_2 . Ограничение, наложенное на определитель унитарной матрицы, означает, что для группы SU_2 след матрицы инфинитезимального оператора должен быть равен нулю. Это значит, что единичная матрица не входит в число инфинитезимальных операторов группы SU_2 . (То, что мы ограничились группой SU_2 , соответствует исключению из рассмотрения преобразований, состоящих в одновременном изменении фазы обоих базисных векторов состояния нуклона.) Сравнивая формулы (10.1) и (8.15), легко заметить, что с точностью до множителя $1/2$ матрицы τ_q совпадают со спиновыми мат-

рицами частицы спина $1/2$. Следовательно, матрицы $t_q = = 1/2 \tau_q$ совпадают со спиновыми матрицами s_q и удовлетворяют перестановочным соотношениям (7.26) для инфинитезимальных операторов группы $\mathcal{R}_3$.

Так как все свойства неприводимых представлений группы $\mathcal{R}_3$ были выведены в гл. 7, § 4 лишь из этих перестановочных соотношений, мы получим те же неприводимые представления и для группы SU_2 . Будем обозначать эти неприводимые представления символом $D^{(T)}$, $T=0, 1/2, 1, \dots$, как и в случае группы $\mathcal{R}_3$. Величину T назовем изоспином. Принимая во внимание установленную в гл. 8 связь между группой $\mathcal{R}_3$ и угловым моментом, мы можем ожидать, что собственные функции гамильтониана, инвариантного относительно группы SU_2 , будут иметь такую же структуру, как и собственные функции $\mathcal{R}_3$ -инвариантного гамильтониана. (Буквой T будем обозначать полный изоспин системы, сохраняя обозначение t за изоспином отдельного нуклона, в соответствии с обозначениями L и l для углового момента, использованными в гл. 8, § 2.) В частности, состояния нуклона $|p\rangle$ и $|n\rangle$ имеют изоспин $t=1/2$, и им приписываются значения $m_t = = 1/2$ для протона и $m_t = -1/2$ для нейтрона, причем m_t — собственное значение оператора t_z . Оператор заряда нуклона может теперь быть представлен в виде $Q = e(1/2 + t_z)$, так что $Q|p\rangle = e|p\rangle$, $Q|n\rangle = 0$ в соответствии с величиной заряда протона и нейтрона. Выбранные нами значения величин m_t для протона и нейтрона приняты в физике элементарных частиц. В ядерной физике обычно выбираются противоположные значения, что делает положительной величину T_z для большинства ядер. Это объясняется тем, что из-за наличия кулоновского отталкивания между протонами последних в ядре, как правило, меньше, чем нейтронов.

А. Описание состояний с помощью изоспина, вырождение

Понятие изоспина оказывается особенно ценным при рассмотрении одновременного изотопического преобразования векторов состояния всех нуклонов, составляющих исследуемую систему. Векторное пространство V_A , описывающее всевозможные зарядовые состояния системы из A нуклонов, имеет размерность 2^A . Мы рассматриваем

преобразования этого пространства, индуцированные одно-временным SU_2 -преобразованием вектора состояния каждого нуклона. Это унитарное преобразование, действующее в пространстве V_A , формально можно представить в виде произведения $U = \prod_{i=1}^A U(i)$, где $U(i)$ — преобразование из группы SU_2 , действующее в двумерном пространстве векторов состояния нуклона с номером i . Для инфинитезимальных операторов такая структура оператора U означает, что $T = \sum_{i=1}^A t(i)$. Отсюда прямо следует, что операторы T удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и 2×2 -матрицы $t(i)$. Таким образом, мы видим, что в пространстве V_A действует, вообще говоря, приводимое представление группы SU_2 . Это представление может быть разложено на неприводимые представления $D^{(T)}$, что и приводит к классификации состояний системы по изоспину T . Эта процедура перехода от изоспина отдельного нуклона к изоспину системы нуклонов полностью аналогична той, которая использовалась в гл. 8, § 2 при переходе от углового момента отдельной частицы к полному угловому моменту L системы частиц. Изоспины отдельных нуклонов объединяются точно так же, как угловые моменты частиц. Таким образом, в системе из A нуклонов можно получить состояния с полным изоспином, принимающим значения до $1/2 A$. Так как сильное взаимодействие зарядово-независимо, т. е. не зависит от зарядовых состояний нуклонов, описывающие это взаимодействие операторы будут единичными на двумерном изотопическом пространстве каждого нуклона. Отсюда следует, что гамильтониан сильного взаимодействия коммутирует с операторами группы SU_2 и, согласно результатам гл. 5, § 3, собственные функции этого гамильтониана можно классифицировать по неприводимым представлениям $D^{(T)}$ группы SU_2 или, другими словами, по изоспину T .

Для системы, состоящей из Z протонов и N нейтронов, т. е. имеющей значение $A = Z + N$, оператор изоспина записывается в виде $T_q = \sum_i t_q(i)$, где $q = x, y, z$, а i пробегает значения от 1 до A . Отсюда следует, что оператор полного заряда для этой системы можно записать в виде

$Q = \sum_i Q(i) = e\{1/2(N+Z) + T_z\}$. Ясно, что для каждого

ядра оператор заряда должен быть кратен единичному с собственным значением $\langle Q \rangle = eZ$. Стало быть, и оператор T_z кратен единичному с собственным значением $M_T = 1/2(Z-N)$. Так как размерность представления $D^{(T)}$ равна $2T+1$, собственные значения с полным изоспином T являются $(2T+1)$ -кратно вырожденными. В случае группы $\mathcal{R}_3$ было удобно различать вырожденные состояния по собственным значениям оператора J_z , т. е. $M = J, J-1, \dots, -J$. Точно так же $(2T+1)$ -кратно вырожденные состояния с полным изоспином T различаются по собственным значениям оператора T_z , принимающим значения $M_T = T, T-1, \dots, -T$. Как было показано выше, $M_T = 1/2(Z-N)$. Это значит, что различные компоненты мультиплета с данным T соответствуют разным ядрам, а именно ядрам с одним и тем же значением A , но разными значениями $(Z-N)$.

В качестве первого примера рассмотрим систему из двух нуклонов, которые обозначим индексами i и j . Мы ожидаем получить в этой системе состояния с $T=1$ и $T=0$. Четыре возможных состояния системы

$$\psi_1 = |p_i p_j\rangle, \psi_2 = |p_i n_j\rangle, \psi_3 = |n_i p_j\rangle, \psi_4 = |n_i n_j\rangle$$

имеют значения M_T , равные 1, 0, 0 и -1. Можно показать, что симметричная комбинация $\psi'_1 = (\psi_2 + \psi_3)/\sqrt{2}$ вместе с ψ_1 и ψ_4 образует триплет с $T=1$, а $\psi'_3 = (\psi_2 - \psi_3)/\sqrt{2}$ — синглет с $T=0$. Для этого заметим сначала, что, так как ψ_1 имеет значение $M_T = +1$, этот вектор соответствует значению $T=1$. Теперь мы можем построить состояние с $T=1$, $M_T=0$ при помощи понижающего изоспинового оператора T_- , определенного по аналогии с оператором J_- [формула (7.40)]. В случае одной частицы из выражений (10.1) следует, что матрица t_- имеет вид

$$t_- = \frac{1}{2}(\tau_x - i\tau_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

и обладает свойством $t_-|p\rangle = |n\rangle$, $t_-|n\rangle = 0$. Для двух частиц $T_- = t_-(i) + t_-(j)$, так что

$$T_-|p_i p_j\rangle = |n_i p_j\rangle + |p_i n_j\rangle = \psi_2 + \psi_3 = \sqrt{2}\psi'_1.$$

Появление множителя $\sqrt{2}$ ясно из формулы (7.40). Аналогично $T_\psi = 0$, и, так как ψ имеет значение $M_T = 0$, этот вектор соответствует значению $T = 0$. Отметим, что, хотя зарядовая независимость ведет к вырождению между состояниями ψ_1 , ψ_2 и ψ_4 , образующими мультиплет с $T = 1$, вырождение между состояниями с $T = 0$ и $T = 1$ отсутствует. Дело в том, что состояния с $T = 1$ являются четными по отношению к перестановкам индексов i и j , а состояния с $T = 0$ — нечетными. Следовательно, в силу принципа Паули состояния с $T = 1$ являются нечетными по отношению к перестановкам спиновых и пространственных переменных, а состояния с $T = 0$ — четными. В действительности сильное взаимодействие носит такой характер, что состояния, четные по спиновым и пространственным координатам, имеют меньшую энергию. Следовательно, основное состояние (np) -системы (дейтона) обладает изоспином $T = 0$. В случае же $T = 1$ ядерные силы оказываются недостаточными для образования связанных состояний. Этим объясняется тот факт, что, несмотря на зарядовую независимость, в (np) -системе есть связанное состояние, а в системе двух нейтронов — нет.

В атоме основное состояние всегда характеризуется максимальным возможным значением полного спина S . Этот результат, так называемое правило Хунда, был объяснен в гл. 8, § 6, п. Д. В атомном же ядре основное состояние обладает минимальным значением полного изоспина T , и это можно объяснить аналогичным образом. Минимальным, а не максимальным, потому что в ядре между нуклонами действуют силы притяжения, а между электронами в атоме — силы отталкивания. Поскольку данное ядро характеризуется определенными значениями N и Z , оно обладает также и фиксированным значением M_T . Таким образом, поскольку всегда $T \geq |M_T|$, минимально возможное для данного ядра значение T дается величиной $|M_T| = \frac{1}{2}|Z - N|$. Состояния с большими значениями T являются возбужденными.

В качестве второго примера использования изоспиновой симметрии и связанного с ней вырождения рассмотрим ядра с массовым числом $A = 13$. Единственное стабильное ядро с таким массовым числом — это углерод 13 с $Z = 6$, $N = 7$. При ядерных реакциях был получен и довольно хорошо исследован азот 13 ($Z = 7$, $N = 6$). Наблю-

дались также бор ^{13}B ($Z=5$, $N=8$) и кислород ^{13}O ($Z=8$, $N=5$), но они очень нестабильны и об их свойствах мало что известно. Учитывая вышеизложенные соображения относительно величины изоспина основного состояния, следует ожидать, что ^{13}C и ^{13}N имеют изоспин $T=1/2$ и соответствуют двум возможным значениям $M_T=\mp 1/2$. С другой стороны, ^{13}B и ^{13}O должны иметь изоспин $T=3/2$ и $M_T=\mp 3/2$ соответственно. Два оставшихся состояния, принадлежащих мультиплету с $T=3/2$ и имеющих значения $M_T=\mp 1/2$, должны соответствовать возбужденным состояниям ядер ^{13}C и ^{13}N . Таким образом, низшие состояния, соответствующие этим значениям изоспина, должны быть расположены так, как это показано на рис. 10.1. Пунктирные линии соответствуют значению $T=3/2$.

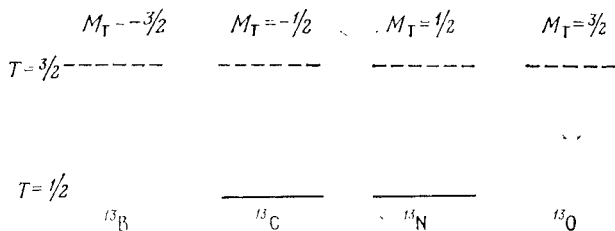


Рис. 10.1.

На самом деле ситуация осложняется наличием электромагнитного кулоновского взаимодействия между протонами. Ясно, что это взаимодействие не является зарядово-независимым и, следовательно, нарушает изоспиновую симметрию. Однако вклад электромагнитного взаимодействия в энергию ядра мал по сравнению с вкладом сильного взаимодействия. Если кулоновскую энергию, которую сравнительно просто вычислить, вычесть из экспериментальных значений энергии ядер, то для низших энергетических уровней получится картина, представленная на рис. 10.2. Здесь указаны спин J , четность и энергия возбуждения каждого уровня. Мы видим, что для основных состояний фактически имеет место изоспиновое вырождение, как это было изображено на предыдущем рисунке. Более того, с точностью до небольших поправок на кулоновские силы вырождение наблюдается и для возбужденных состояний, т. е. каждому возбужденному со-

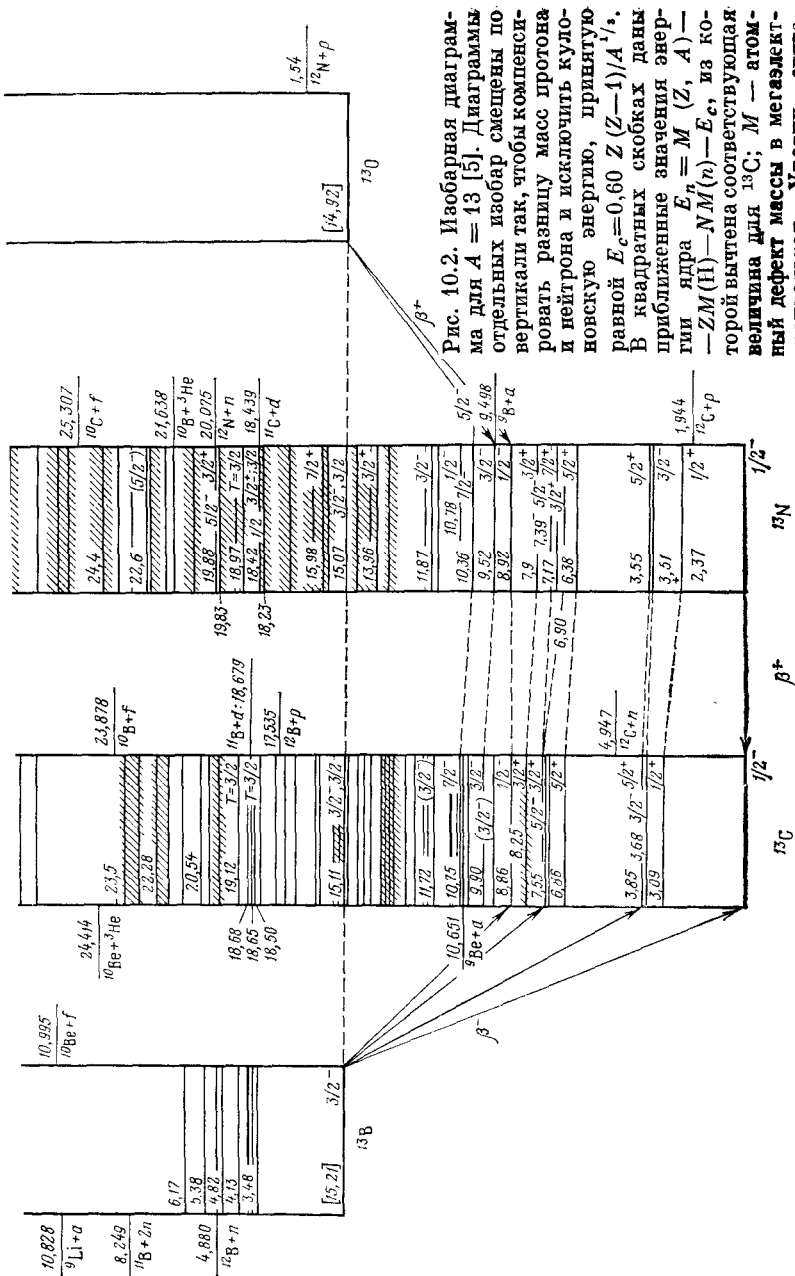


Рис. 10.2. Изобарная диаграмма для $A = 13$ [5]. Диаграммы отдельных изобар смещены по вертикали так, чтобы компенсировать разницу масс протона и нейтрона и исключить кулоновскую энергию, принявную равной $E_c = 0,60 Z(Z-1)/A^{1/3}$. В квадратных скобках даны приближенные значения энергии ядра $E_n^* = M(Z, A) - ZM(H) - NM(n) - E_c$, из которой вычтена соответствующая величина для ^{13}C ; M — атомный дефект массы в мегаэлектронвольтах. Уровни, считаясь, соединены пунктиром.

ЮЩИЕСЯ КОМПОНЕНТАМИ ИЗОСПИНОВОГО

стоянию ядра ^{13}C соответствует возбужденное состояние ядра ^{13}N с теми же спином J и четностью, отличающееся лишь значением величины M_T . Таким образом, хотя ^{13}N и ^{13}C — ядра разных химических элементов, структура их ядер почти одинакова.

Вследствие того что изоспин связывает между собой ядра с одним и тем же массовым числом A , его иногда называют изобарическим спином. Первоначально использовался термин «изотопический спин», но он не совсем соответствует существу дела. Изотопы — это ядра с одинаковыми химическими свойствами, т. е. с одинаковым Z и разными N и, следовательно, с разными массовыми числами A . Изоспин не связывает между собой свойства изотопов, таких, например, как ^{12}C , ^{13}C и ^{14}C . Для состояний, различающихся только величиной M_T , как на рис. 10.1, пользуются термином «изобарные аналоги».

Б. Расщепление изоспинового мультиплета

Как говорилось выше, кулоновские силы, действующие между протонами, приводят к расщеплению изоспинового мультиплета. Однако малость этого эффекта позволяет рассматривать расщепление методом теории возмущений. В п. А мы приводили экспериментальные значения энергий ядер без учета кулоновской энергии (рис. 10.2). Это было сделано для того, чтобы продемонстрировать изоспиновое вырождение. Остановимся теперь подробнее на эффектах, связанных с наличием электромагнитного взаимодействия (см., например, [1]). Хотя кулоновские силы и не изоскалярны, электромагнитные взаимодействия сохраняют электрический заряд и, следовательно, M_T остается по-прежнему хорошим квантовым числом. Таким образом, расщепление изоспинового мультиплета с фиксированным значением T и с $M_T = T, T-1, \dots, -T$ аналогично зеемановскому расщеплению мультиплета с фиксированным значением полного углового момента J и с $M_J = J, J-1, \dots, -J$, вызванному наличием магнитного поля, направленного по оси z (гл. 8, § 5). В случае эффекта Зеемана чисто групповые соображения привели нас к заключению, что расщепление пропорционально величине M_J . Это было обусловлено тем, что соответствующий оператор возмущения был

векторным. При рассмотрении электромагнитного расщепления изоспинового мультиплета мы должны выяснить характер оператора кулоновского взаимодействия. Это позволит нам найти вид зависимости величины расщепления от M_T , не обращаясь к детальному описанию конкретных ядер. Кулоновскую энергию можно представить в виде суммы по протонам

$$V_c = \sum_{\substack{i < j \\ \text{протоны}}} e^2/r_{ij}$$

или, если пользоваться операторами изоспина, по всем нуклонам, составляющим ядро:

$$V_c = \sum_{i < j} \left[\frac{1}{2} + t_z(i) \right] \left[\frac{1}{2} + t_z(j) \right] e^2/r_{ij}. \quad (10.2)$$

(Поскольку для нейтрона $\langle t_z(i) \rangle = -1/2$, вклад во вторую сумму будут давать только слагаемые, у которых индексы i и j соответствуют протонам.) Изоспиновая зависимость энергии V_c определяется произведением

$$\left[\frac{1}{2} + t_z(i) \right] \left[\frac{1}{2} + t_z(j) \right] = \frac{1}{4} + \frac{1}{2} [t_z(i) + t_z(j)] + t_z(i) t_z(j).$$

Так же как это было сделано в гл. 7, § 4, п. Е для группы $\mathcal{R}_3$, мы можем определить тензорные операторы $S_q^{(k)}$ для изоспиновой группы SU_2 . Для этого нужно просто заменить в формуле (7.52) операторы J операторами изоспина T . Инфинитезимальные операторы T образуют изовектор, аналогично тому как операторы углового момента образуют вектор J относительно группы $\mathcal{R}_3$. Следовательно, обычное правило сложения угловых моментов [формула (7.44)] приводит к тому, что оператор V_c , содержащий произведение самое большее двух операторов t_z , может быть представлен в виде суммы изоскаляра, изовектора и изотензора второго ранга. Каждое из этих слагаемых должно иметь $q=0$, так как оператор V_c диагонален по отношению к полному заряду. Изоскалярная часть V_c не может приводить к расщеплению. Изовекторная часть, как и в случае эффекта Зеемана, дает вклад в расщепление, пропорциональный M_T . Чтобы найти зависимость от M_T вклада изотензорной части V_c в расщепление, можно воспользоваться теоремой

Вигнер — Экарта [формула (7.53)]. Эта зависимость определяется коэффициентом векторного сложения $C(T2T, M_T 0 M_T)$, который равен $\{3M_T^2 - T(T+1)\} / \{T(T+1) \times \times (2T-1)(2T+3)\}^{1/2}$. Для получения вида зависимости величины расщепления от M_T можно также построить эквивалентный (в том же смысле, что и в гл. 7, § 4, п. Ж) оператор. Исходя из векторного оператора $\mathbf{T}$, легко показать, что оператор $2T_z^2 - T_x^2 - T_y^2$ является компонентой тензора второго ранга $T_q^{(k)}$ с $k=2$, $q=0$ (задача 10.2). Но этот оператор можно записать в виде оператора $3T_z^2 - \mathbf{T} \cdot \mathbf{T}$, собственное значение которого в состоянии с данными T и M_T равно $3M_T^2 - T(T+1)$.

Итак, мы показали, что кулоновское расщепление изомультиплета с фиксированным значением T имеет вид

$$\Delta E(M_T) = a + bM_T + cM_T^2. \quad (10.3)$$

Для того чтобы найти коэффициенты в этом выражении, групповых соображений уже недостаточно; необходимы сложные вычисления с привлечением явного вида ядерных волновых функций. Но общий вид зависимости (10.3) не связан с конкретными особенностями ядер и является фактически простым обобщением формулы для зеемановского расщепления, примененной к другому типу симметрии. Если $T > 1$, то имеется больше трех возможных значений M_T . Это позволяет проверить формулу (10.3), так как в нее входят только три постоянные a , b и c . Таким образом, четверка состояний с $T = 3/2$, показанная на рис. 10.1 и 10.2, может быть использована для проверки нашей формулы. Зная энергии связи ядер ^{13}B , ^{13}C и ^{13}N , а также энергии возбуждения состояний с $T = 3/2$ в ^{13}C и ^{13}N , можно вычислить энергию связи ядра ^{13}O . (Энергия связи есть разность массы ядра и суммарной массы составляющих его нуклонов. Энергия связи служит мерой энергии ядра, обусловленной сильным взаимодействием.) В первых четырех столбцах табл. 10.1 даны измеренные значения энергии связи четырех состояний с $T = 3/2$ в мегаэлектронвольтах. В последнем столбце приведена энергия связи ядра ^{13}O , вычисленная по формуле (10.3) и первым трем энергиям связи, приведенным в таблице. Нетрудно видеть, что разница между измеренным и вычисленным значениями энергии связи не превышает ошибки эксперимента.

Таблица 10.1

^{13}B	^{13}C	^{13}N	^{13}O	^{13}O (вычисленная)
84,45	82,00	79,04	75,56	75,57

В. Правила отбора

Амплитуды перехода в системах, обладающих изоспиновой симметрией, подчиняются правилам отбора по изоспину, полностью аналогичным правилам отбора (8.3) по угловому моменту. Если оператор, ответственный за переход, является изоспиновым тензором ранга k , то имеет место следующее правило отбора:

$$|T_i - k| \leq T_f \leq T_i + k, \quad (10.4)$$

где T_i и T_f — изоспин начального и конечного состояния. Типичные процессы распада, такие, как β - и γ -распад, описываются одночастичными операторами вида

$$S = \sum_i S_p(i) + \sum_i S_n(i),$$

где первая сумма распространяется на протоны, а вторая на нейтроны. Оператор S_p может не совпадать с S_n . Замечая, что оператор $\frac{1}{2} + t_z$ имеет значение $+1$ для протона и -1 для нейтрона, можно переписать оператор S в виде

$$S = \frac{1}{2} \sum_i [S_p(i) + S_n(i)] + \sum_i t_z(i) [S_p(i) - S_n(i)],$$

где суммирование ведется по всем нуклонам. В такой записи первое слагаемое — изоскаляр, а второе — изовектор. Этот факт вместе с неравенствами (10.4) приводит к сильным ограничениям на возможные значения T_f при данном T_i . Оказывается, что эти правила отбора выполняются с хорошей точностью. Значительный интерес представляют поиски процессов, запрещенных этим правилом отбора [1]. Такие процессы несут информацию о слабом смешивании изоспиновых состояний из-за электромагнитного взаимодействия.

§ 2. ИЗОСПИН И ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ ЧАСТИЦЫ

Хотя протон и нейтрон являются единственными стабильными или существующими в стабильных ядрах сильно взаимодействующими частицами, в столкновениях элементарных частиц при высоких энергиях рождается множество новых сильновзаимодействующих частиц. Они быстро распадаются (за время $\sim 10^{-8}$ с и менее). Сильно взаимодействующие частицы называются адронами, и к ним, в частности, относятся π -мезоны, Λ - и Σ -частицы. Подробно мы остановимся на них в гл. 11, сейчас же заметим только, что π -мезон бывает трех типов: π^+ , π^0 и π^- с зарядами 1, 0 и -1 в единицах e . Точно так же Σ -частицы имеют заряды ± 1 и 0, тогда как Λ -частица не заряжена. Массы трех зарядовых состояний π -мезона приблизительно одинаковы. То же относится и к Σ -частицам. Эта ситуация очень напоминает ту, которая наблюдается в случае с протоном и нейтроном, и дает основания полагать, что π -мезоны и Σ -частицы имеют изоспин $T=1$, а Λ -частицы — изоспин $T=0$. Оказывается, что вообще все адроны объединяются в изоспиновые мультиплеты и, следовательно, им может быть приписан изоспин T . Таким образом, изоспин является еще одной внутренней характеристикой частиц, такой, как масса, спин, заряд и четность. Заметим, однако, что в то время как у нуклона связь заряда с третьей проекцией изоспина дается выражением $Q=e(1/2+T_z)$, для π -мезонов, Λ - и Σ -частиц соответствующая формула имеет вид $Q=eT_z$. Две эти формулы будут объединены в одну в гл. 11 в рамках более широкой SU_3 -симметрии.

Инвариантность сильных взаимодействий по отношению к изоспиновым преобразованиям и правильность значений изоспина, приписанного нами различным частицам, могут быть проверены при рассмотрении ядерных столкновений, в которых участвуют нуклоны, π -мезоны, Λ - и Σ -частицы. Приписывая определенный изоспин различным частицам, мы полагаем, что имеется некое абстрактное преобразование, действующее на изоспиновые переменные всех частиц. Это соответствует тому, что, хотя разные частицы имеют разный спин, вращение системы координат действует на спиновые переменные всех частиц одновременно. Таким образом, изоспины складываются

по правилам векторного сложения, и, как мы увидим, эксперименты согласуются с инвариантностью сильного взаимодействия по отношению к таким одновременным изоспиновым преобразованиям.

А. Взаимодействие π -мезонов с нуклонами.

Так как изоспин π -мезона T равен 1, а для нуклона $T = 1/2$, изоспин системы, состоящей из π -мезона и нуклона, согласно правилу сложения угловых моментов, может принимать значения $T = 3/2$ или $T = 1/2$. Пользуясь соотношениями (7.40) для повышающих и понижающих операторов, можно показать, что состояния системы с определенными значениями T и M_T , которые мы обозначаем через $|TM_T\rangle$, даются формулами:

$$\begin{aligned} \left| \frac{3}{2} \frac{3}{2} \right\rangle &= |\pi^+ p\rangle, \\ \left| \frac{3}{2} \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} |\pi^+ n\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^0 p\rangle, \\ \left| \frac{3}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^0 n\rangle + \sqrt{\frac{1}{3}} |\pi^- p\rangle, \\ \left| \frac{3}{2} -\frac{3}{2} \right\rangle &= |\pi^- n\rangle, \\ \left| \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^+ n\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |\pi^0 p\rangle, \\ \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle &= \sqrt{\frac{1}{3}} |\pi^0 n\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} |\pi^- p\rangle. \end{aligned} \quad (10.5)$$

Эти равенства можно обратить. Например,

$$|\pi^- p\rangle = \sqrt{\frac{1}{3}} \left| \frac{3}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle - \sqrt{\frac{2}{3}} \left| \frac{1}{2} -\frac{1}{2} \right\rangle. \quad (10.6)$$

Тогда предположение об изоспиновой инвариантности сильного взаимодействия приведет к многочисленным соотношениям между сечениями рассеяния π -мезонов на нуклонах. Например, два процесса упругого рассеяния $\pi^+ + p \rightarrow \pi^+ + p$ и $\pi^- + n \rightarrow \pi^- + n$ должны иметь одинаковые сечения, так как они соответствуют состояниям с $T = 3/2$ и различаются только значениями M_T . В то же время из равенства (10.6) следует, что в процессе $\pi^- + p \rightarrow \pi^- + p$ участвуют состояния как с $T = 3/2$, так и с $T = 1/2$. Изоспи-

новая симметрия ничего не говорит о соотношении между сечениями рассеяния состояний с $T=3/2$ и $T=1/2$. Следовательно, если не предполагать наличие какой-либо дополнительной симметрии, нет оснований считать сечения π^-p - и π^+p -рассеяния одинаковыми. Эксперимент согласуется со следствиями, выведенными из изоспиновой симметрии, и не указывает на наличие дополнительной симметрии. Другими словами, рассеяние в состояниях с $T=3/2$ и $T=1/2$ происходит по-разному. Действительно, при низких энергиях доминирует рассеяние в состояниях с $T=3/2$, и из формул (10.6) и (10.5) следует, что отношение амплитуд π^+p - и π^-p -рассеяния равно 3 : 1, т. е. отношение соответствующих сечений равно 9 : 1. Эксперимент подтверждает этот результат [2].

§ 3. ИЗОСПИНОВАЯ СИММЕТРИЯ И ЗАРЯДОВАЯ НЕЗАВИСИМОСТЬ

Когда в § 1 мы вводили понятие изоспина в ядрах, мы видели, что изоспиновая инвариантность гамильтониана сильного взаимодействия эквивалентна его зарядовой независимости. Далее понятие изоспиновой инвариантности было распространено на другие частицы, и эксперимент показывает, что с точностью до электромагнитных поправок изоспиновая инвариантность имеет место в сильных взаимодействиях всех адронов. Однако такая расширенная изоспиновая инвариантность уже *не эквивалентна* зарядовой независимости. Точная зарядовая независимость привела бы к тому, что в примере из § 2 сечения π^+p - и π^-p -рассеяния были бы одинаковыми, а это противоречит экспериментальным данным.

Точно так же при взаимодействии двух π -мезонов имеет место изоспиновая инвариантность, однако *нет* зарядовой независимости. Два π -мезона с $T=1$ каждый, находящиеся в z -состоянии по относительному угловому моменту, могут иметь суммарный изоспин $T=2$ или $T=0$, так как π -мезоны являются бозонами (гл. 5, § 9). Эксперименты по $\pi\pi$ -рассеянию подтверждают наличие изоспиновой симметрии, но показывают в то же время, что взаимодействия в состояниях с $T=2$ и $T=0$ различны. Таким образом, и в этом случае нет зарядовой инвариантности.

Мы столкнулись здесь с примечательной ситуацией. Хотя именно зарядовая независимость взаимодействия между нуклонами привела нас к понятию изоспиновой симметрии, наблюдающейся во всех процессах сильного взаимодействия, сама зарядовая независимость наблюдается не во всех сильных взаимодействиях. Этот факт, по-видимому, еще не нашел полного объяснения. Дело в том, что сильное взаимодействие обнаруживает приближенную симметрию по отношению к более широкой группе SU_3 , содержащей изоспиновую группу SU_2 в качестве подгруппы. Группе SU_3 посвящена следующая глава.

ЛИТЕРАТУРА

Подробное изложение вопросов, связанных с изоспиновой симметрией в ядерной физике, можно найти в работах:

1. *Isospin in Nuclear Physics*, ed. *Wilkinson D. H.*, North-Holland. Amsterdam, 1969.
2. *Bohr A., Mottelson B. R.*, Nuclear Structure, Benjamin, New York, 1969. [Имеется перевод: *Бор О., Моттelson Б.* Структура атомного ядра. Т. 1.— М.: Мир, 1971.]

Относительно применений в физике элементарных частиц см. работу [2] в литературе к гл. 11, а также следующие работы ¹⁾:

3. *Новожилов Ю. В.* Введение в теорию элементарных частиц.— М.: Наука, 1972.

4. *Газиорович С.* Физика элементарных частиц. Пер. с англ.— М.: Наука, 1969.

ЗАДАЧИ

- 10.1. Исходя из изоспина, объясните положение нескольких энергетических уровней ядер ^{18}O ($Z=8$), ^{18}Fe ($Z=9$) и ^{18}Ne ($Z=10$).
- 10.2. Покажите, что оператор $2T_z^2 - T_x^2 - T_y^2 = 3T_z^2 - T^2$ является тензорным оператором $T_q^{(k)}$ с $k=2$, $q=0$. Начните с T_+^2 и примените формулу (7.52).
- 10.3. Оператор, ответственный за электрические дипольные переходы ($E1$) в ядрах, имеет вид $\sum_p r_p$, где r_p — радиус-вектор протона p . Покажите, что этот оператор можно представить в виде суммы по всем нуклонам $\sum_i (1/2 + t_z(i)) r_i$. Таким образом, $E1$ -переходы между состояниями с $T=0$ запрещены.

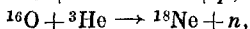
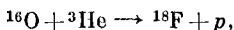
¹⁾ Добавлено при переводе.— *Прим. ред.*

(Воспользуйтесь тем обстоятельством, что оператор $\sum_i r_i$

является вектором центра масс ядра. Он не зависит от внутренних координат и не может вызывать переходов.)

10.4. Предполагая сохранение изоспина в реакции $^{16}\text{O} + ^2\text{H} \rightarrow ^{18}\text{F}$, определите изоспин конечных состояний ^{18}F . Считайте, что ядро ^{16}O находится в основном состоянии, а ядро ^2H имеет $T=0$.

10.5. Вычислите отношение сечений реакций



в которых ^{18}F и ^{18}Ne имеют изоспин $T=1$.

ГРУППА SU_3 И ПРИЛОЖЕНИЯ К ЭЛЕМЕНТАРНЫМ ЧАСТИЦАМ

Создание в последние 25 лет очень мощных ускорителей частиц привело к открытию все возрастающего числа новых элементарных частиц. Под «новыми» мы подразумеваем частицы, отличные от электрона, протона и нейтрона, составляющих стабильные атомы, из которых, как известно, состоит вещество. Можно даже считать первой среди этих новых частиц нейтрон, поскольку он сам по себе не стабилен. Его среднее время жизни составляет около 15 мин, и в результате β -распада нейтрон переходит в протон, электрон и еще одну частицу — так называемое антинейтрино. Стабилен нейтрон только в комбинации с протонами в ядрах.

Нейтрон был открыт еще в 1932 г. при исследовании столкновений α -частиц, получаемых из естественных радиоактивных источников. Такие α -частицы имеют энергию порядка 5 МэВ. Если энергия протона превышает 300 МэВ, то в соответствии с формулой $E=Mc^2$ при столкновении с протоном мишени может образоваться π -мезон. При еще больших энергиях, порядка 1000 МэВ ($=1$ ГэВ), парами рождаются K -мезоны, а при энергиях около 4 ГэВ рождается пара протон — антипротон. Получив в протон-протонных столкновениях π -мезоны, можно сформировать из них пучок и исследовать результаты его столкновения с протонами следующей мишени. Точно так же получают пучки K -мезонов и изучают их столкновения. Таким образом, имеются широкие возможности для образования множества новых частиц при различных столкновениях. Поначалу в этом обилии результатов не было никакой ясности, но постепенно из хаоса начал возникать порядок. В настоящее время элементарные частицы весьма четко классифицируются по изоспину и с привлечением более широкой группы унитарных преобразований

в трех измерениях — группы SU_3 . При переходе от изоспиновой группы SU_2 к группе SU_3 появляется новое квантовое число — гиперзаряд, во многих отношениях аналогичный электрическому заряду.

В первых трех параграфах данной главы мы кратко изложим свойства некоторых наиболее стабильных элементарных частиц, а также укажем причины, по которым вводится гиперзаряд (см. также [1, 2]). Три следующих параграфа мы посвятим математическим свойствам группы SU_3 , а затем обратимся к физическим применениям SU_3 -симметрии.

§ 1. НЕКОТОРЫЕ СВЕДЕНИЯ ОБ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦАХ

Термин «адрон» был введен в гл. 10, § 2 для частиц, участвующих в сильных взаимодействиях. В табл. 11.1 приведены некоторые важнейшие характеристики наиболее стабильных адронов [1]. О различии между барионами и мезонами, представленными в табл. 11.1 раздельно, будет сказано в § 3. К сожалению, обозначения частиц сложились исторически и в них нет особой логики. Так, протон и нейтрон обозначаются латинскими буквами p и n , а другие частицы — греческими. Например, буквой Λ обозначается лямбда-частица. Верхние индексы «+» и «—» указывают электрический заряд в единицах e ; так, частица Δ^{++} несет заряд $2e$. Звездочкой в Σ^* и Ξ^* отмечаются частицы с таким же названием, но большей массой. Частицы с одинаковыми значениями T и Y принято обозначать одними и теми же буквами. Массы частиц M приведены во втором столбце таблицы как значения Mc^2 в мегаэлектронвольтах. В третьем столбце даны значения спина, в четвертом — заряда частиц. Для полноты в третьем столбце приведены также значения четности частиц. Например, $1/2^+$ означает спин $1/2\hbar$ и положительную четность. (Точный смысл понятия четности, не имеющей отношения к движению частицы и являющейся ее внутренней характеристикой, будет указан в т. 2, гл. 15, § 7, п. В.)

Мы уже показали в гл. 10, как протон и нейтрон могут быть объединены в изоспиновый дублет. Из табл. 11.1 видно, что все перечисленные в ней частицы распадаются на изоспиновые мультиплеты, состоящие из $(2T+1)$

частиц с совпадающими в пределах нескольких мегаэлектронвольт массами и с зарядами, различающимися последовательно на e . Так, например, Ξ^0 и Ξ^- объединяются в изодублет $T=1/2$, а Σ^+ , Σ^0 и Σ^- имеют $T=1$. Правильность значений изоспина, приписываемых частицам, подтверждается тем, что в экспериментах наблюдаются правила отбора, типа указанных в гл. 10, § 2, п. В. Заметим, однако, что соотношение $Q=M_T+1/2$ между зарядом Q и третьей проекцией изоспина M_T , справедливое для нуклонов (p и n), не выполняется для других барионов. В гл. 11, § 2 мы рассмотрим необходимость введения нового квантового числа Y — гиперзаряда, представленного в седьмом столбце таблицы. Мы увидим, что более общее соотношение $Q=M_T+1/2Y$ справедливо уже для всех адронов.

В восьмом столбце приведены средние времена жизни частиц τ . Среднее время жизни определяется как постоянная, входящая в показатель экспоненты $\exp(-t/\tau)$ в законе распада частицы. Таким образом, меньшими значениями τ характеризуются менее стабильные, быстрее распадающиеся частицы. В последнем столбце указаны главные каналы распада частицы. В случае, когда имеется более одного канала распада со сравнимыми вероятностями, указано также отношение этих вероятностей. Символом γ обозначен фотон (γ -распад); ν и μ — это нейтрино и мюон.

Чертой над символом частицы обозначается соответствующая античастица. Из теории поля и из эксперимента следует, что для каждой частицы имеется античастица, хотя получить античастицу иногда довольно трудно. Античастица имеет ту же массу и спин, что и частица, но несет противоположный заряд. Некоторые нейтральные частицы, такие, как π^0 , совпадают со своими античастицами. К вопросу об античастицах мы вернемся в т. 2, гл. 16.

Некоторые из более тяжелых частиц, приведенных в табл. 11.1, могут распадаться за счет сильного взаимодействия за времена порядка 10^{-23} с. Ввиду столь малых времен жизни проблематично, заслуживают ли они названия «частиц». Иногда частицы с такими малыми временами жизни называют резонансами. Вообще говоря, в квантовой механике резонансы в процессе рассеяния свя-

Таблица 11.1

Свойства самых легких адронов

а) Бароны

Частица	Масса, МэВ	Спин	Заряд	Изоспин, T	M_T	Гипер- заряд Y	Среднее, время жизни, с	Главные каналы распада
p	938,28	$\frac{1}{2}^{+}$	1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	1	∞	Стабильный
n	939,57	$\frac{1}{2}^{+}$	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	$1,0 \cdot 10^3$	$p + e^{-} + \bar{\nu}$
Λ	1115,6	$\frac{1}{2}^{+}$	0	0	0	0	$2,5 \cdot 10^{-10}$	$p + \pi^{-}$ (65%), $n + \pi^0$ (35%)
Σ^{+}	1189,4	$\frac{1}{2}^{+}$	1	1	1	0	$0,8 \cdot 10^{-10}$	$p + \pi^0$ (53%), $n + \pi^{+}$ (47%)
Σ^0	1192,5	$\frac{1}{2}^{+}$	0	1	0	0	$< 10^{-14}$	$\Lambda + \gamma$
Σ^{-}	1197,4	$\frac{1}{2}^{+}$	-1	1	-1	0	$1,7 \cdot 10^{-10}$	$n + \pi^{-}$
Ξ^0	1315	$\frac{1}{2}^{+}$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-1	$2,9 \cdot 10^{-10}$	$\Lambda + \pi^0$
Ξ^{-}	1324	$\frac{1}{2}^{+}$	-1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	$1,7 \cdot 10^{-10}$	$\Lambda + \pi^{-}$

Δ^{++}	1232 ¹⁾	$\frac{3}{2}^+$	2	$\frac{3}{2}$	$\frac{3}{2}$	1	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\}$	$p + \pi^+$
Δ^+		$\frac{3}{2}^+$	1	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	1		$p + \pi^0, n + \pi^+$
Δ^0		$\frac{3}{2}^+$	0	$\frac{3}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1		$p + \pi^-, n + \pi^0$
Δ^-		$\frac{3}{2}^+$	-1	$\frac{3}{2}$	$-\frac{3}{2}$	1		$n + \pi^-$
Σ^{++}	1385 ¹⁾	$\frac{3}{2}^+$	1	1	1	0	$\left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\}$	$\Lambda + \pi$ (88%), $\Sigma + \pi$ (12%)
Σ^{0*}		$\frac{3}{2}^+$	0	1	0	0		
Σ^{*-}		$\frac{3}{2}^+$	-1	1	-1	0		
Ξ^{0*}		$\frac{3}{2}^+$	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-1		
Ξ^{*-}	1535	$\frac{3}{2}^+$	-1	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	-1	$\left. \begin{array}{l} \\ \end{array} \right\}$	$\Xi + \pi$
Ω^-		$\frac{3}{2}^+$	-1	0	0	-2		
	1672							$1, 1 \cdot 10^{-10} \Xi + \pi, \Lambda + \bar{K}^-$

¹⁾ Экспериментальные массы и времена жизни для этих мультиплетов содержат большие ошибки, а потому мы приводим лишь приближенные средние значения.

Таблица 11.1 продолжение

б) Мезоны

Частица	Масса, МэВ	Спин	Заряд	Изоспин T	M_T	Гипер- заряд Y	Среднее время жизни, с	Главные каналы распада
$\pi^\pm$	139,6	0 ⁻	± 1	1	± 1	0	$2,6 \cdot 10^{-8}$	$\mu + \bar{\nu}$
π^0	135,0	0 ⁻	0	1	0	0	$0,9 \cdot 10^{-16}$	$\gamma + \gamma$
$K^\pm$	493,7	0 ⁻	± 1	$\frac{1}{2}$	$\pm \frac{1}{2}$	± 1	$1,2 \cdot 10^{-8}$	$\mu + \nu$ (64%), 2π (21%), 3π (7%)
K^0	497,7	0 ⁻	0	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	1	$\left\{ \begin{array}{l} 0,9 \cdot 10^{-10} \quad \pi^+ + \pi^- \quad (68\%), \quad \pi^0 + \pi^0 \quad (32\%) \\ 5,3 \cdot 10^{-8} \quad 3\pi \quad (38\%), \quad \pi e \nu \quad (35\%), \quad \mu \nu \quad (27\%) \end{array} \right.$	
$\bar{K}^0$	497,7	0 ⁻	0	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$	-1		
η^0	549	0 ⁻	0	0	0	0	$3 \cdot 10^{-19}$	2γ (42%), 3π (51%), $2\pi\gamma$ (6%)

Примечание. Для K^0 - и $\bar{K}^0$ -частиц имеют место оба типа распада, объединенных фигурной скобкой (т. 2, гл. 16, § 3, п. Б).

зываются с возбужденными состояниями сложной системы, которая может быть нестабильной. Многие из частиц, перечисленных в табл. 11.1, можно рассматривать как возбужденные состояния других частиц, аналогично тому, как в гл. 10 мы говорили о протоне и нейтроне как о двух состояниях нуклона.

§ 2. ГИПЕРЗАРЯД

Подобно большинству новых понятий гиперзаряд был поначалу введен феноменологически для описания некоторых необъясненных явлений. Но по мере того как с учетом гиперзаряда получало объяснение все большее число явлений, новое понятие постепенно утверждалось. Во-первых, требовал объяснения тот факт, что в $p-p$ -соударениях π -мезоны могут рождаться по одному, а K -мезоны — только парами. Во-вторых, время распада K -мезонов имеет порядок 10^{-10} с. Но когда процессы, происходящие благодаря сильному взаимодействию, характеризуются энергиями порядка сотен мегаэлектрон-вольт, из соотношения неопределенностей $\Delta E \Delta t \approx \hbar$ следует, что характерные для этих процессов времена имеют порядок 10^{-23} с ($\hbar = 6,6 \cdot 10^{-22}$ МэВ·с). Это говорит о том, что существует правило отбора, запрещающее распад K -мезона на более легкие частицы. На этом основании было постулировано, что все сильновзаимодействующие частицы обладают новым квантовым числом Y (гиперзарядом) и что гиперзаряд сохраняется в сильных взаимодействиях. Другими словами, в любых реакциях рождения или распада частиц, происходящих благодаря сильному взаимодействию, полный гиперзаряд начального и конечного состояний должен быть одинаковым. Таким образом, для того, чтобы π -мезонам было разрешено рождаться поодиночке, им следует приписать гиперзаряд $Y=0$. В то же время K -мезоны, рождающиеся только парами, бывают четырех типов: K^+ , K^0 , $\bar{K}^0$ и K^- . Оказалось, что гиперзаряд будет сохраняться, если положить $Y=+1$ для K^+ и K^0 и $Y=-1$ для $\bar{K}^0$ и K^- . В этом случае одна из частиц родившейся пары будет иметь $Y=+1$, а другая $Y=-1$. Значения гиперзаряда, приписанные частицам, можно многократно перепроверить благодаря большому количеству разнообразных изученных реакций. Оконча-

тельные значения гиперзаряда приведены в седьмом столбце табл. 11.1. Подобно заряду, гиперзаряды частицы и античастицы равны по величине и противоположны по знаку. В распаде K^0 -мезона с $Y=+1$ на два π^0 -мезона с $Y=0$ сохранение гиперзаряда нарушается. Но, как было отмечено выше, этот распад происходит в 10^{12} раз медленнее, чем должно быть при сильном взаимодействии. Это как раз такая скорость распада, к которой, как это известно из других данных, приводило бы слабое взаимодействие, ответственное за β -распад. Таким образом, мы приходим к выводу, что в слабых взаимодействиях, в отличие от сильных, гиперзаряд не сохраняется. Этот вывод подтверждается и всеми остальными экспериментальными данными.

[Иногда гиперзаряд характеризуют так называемой странностью. Странность обозначают буквой S ; она связана с Y соотношениями $S=Y$ для мезонов и $S=Y-1$ для барионов. (Вообще говоря, $S=Y-B$, где B — барионное число, определение которого будет дано в § 3.) Преимущество квантового числа S в том, что для наиболее известных частиц, таких, как π -мезоны и нуклоны, оно равно нулю ($S=0$), а более «новые» частицы (например, K -мезоны), частицы со «странными» свойствами, характеризуются ненулевыми значениями S . С точки зрения классификации более удобен гиперзаряд, как мы увидим в § 7.

§ 3. БАРИОННЫЙ ЗАРЯД

Так как протон значительно тяжелее π - и K -мезонов, возникает вопрос, почему он абсолютно стабилен и не распадается. Единственным ответом на этот вопрос может быть введение еще одного сохраняющегося квантового числа — «барионного заряда». В гл. 10, § 2 мы ввели термин «адрон» для всех сильновзаимодействующих частиц. Теперь мы делим все адроны на мезоны, имеющие целый спин, и на барионы — адроны с полуцелым спином. Две эти группы частиц — мезоны и барионы — различаются и по массе. Как видно из табл. 11.1, барионы — более тяжелые частицы.

Барионный заряд B определяется так, что бариону приписывается значение $B=+1$, мезону — значение $B=0$

и антибариону — значение $B = -1$. Экспериментальные данные говорят о том, что барионный заряд сохраняется во всех реакциях, даже обусловленных слабым взаимодействием. В этом смысле он подобен электрическому заряду, который тоже сохраняется во всех процессах без исключения. Распад протона на мезоны нарушал бы сохранение барионного заряда, а потому он невозможен. Для полноты картины заметим, что электрон, мюон и нейтрино, не участвующие в сильных взаимодействиях, называются лептонами. Все они имеют спин, равный $1/2$, и $B = 0$. Электрон, μ^- -мезон и нейтрино имеют «лептонный заряд» $L = 1$, а позитрон, μ^+ -мезон и антинейтрино — «лептонный заряд» $L = -1$.

§ 4. ГРУППА SU_3

Выше мы показали, как частицы объединяются в изоспиновые мультиплеты, и ввели новое квантовое число — гиперзаряд Y . Теперь мы на время оставим физику и обратимся к математическим свойствам группы SU_3 с тем, чтобы в § 7 рассмотреть объединение определенных комбинаций изоспина T и гиперзаряда Y в большие мультиплеты, соответствующие неприводимым представлениям группы SU_3 .

Группа U_3 определяется как множество унитарных 3×3 -матриц U и является естественным обобщением рассмотренной в гл. 10, § 1 группы U_2 . Эта группа является также частным случаем группы U_N с произвольным N , которая будет рассмотрена в т. 2, гл. 18. Но вместо того чтобы использовать общую теорию, мы получим необходимые результаты непосредственно при $N = 3$. Условие унитарности накладывает девять условий на девять комплексных матричных элементов матрицы 3×3 , оставляя, таким образом, девять действительных параметров. Выделяя из матрицы U фазовый множитель $\exp(i\varphi)$, так чтобы определитель оставшейся матрицы был равен $+1$, мы приходим к группе SU_3 , имеющей, очевидно, 8 параметров. Соответствующие восемь инфинитезимальных операторов должны, как и ранее, быть антиэрмитовыми и иметь нулевой след. Обобщая естественным образом формулы (10.1), мы можем выбрать эти восемь инфинитези-

мальных операторов такими:

$$\begin{aligned} X_1 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_2 = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_3 = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ X_4 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_5 = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ X_6 &= -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad X_7 = -\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \\ X_8 &= -\begin{pmatrix} i & 0 & 0 \\ 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & -2i \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.1)$$

Первые три из них — это просто инфинитезимальные операторы группы SU_2 , действующие на двумерном подпространстве, получающемся, если игнорировать третий базисный вектор. Следующие две пары аналогичны X_1 и X_2 с той лишь разницей, что они действуют на подпространствах, натянутых на первый и третий и второй и третий базисные векторы. Два соответствующих аналога матрицы X_3 не являются линейно независимыми от X_3 . (Если бы это было не так, то мы имели бы девять операторов вместо восьми.) В качестве восьмого инфинитезимального оператора мы выбираем диагональную антиэрмитову матрицу с нулевым следом X_8 , которая, очевидно, линейно независима от X_3 .

§ 5. ПОДГРУППЫ ГРУППЫ SU_3

Подгруппу SU_2 группы SU_3 можно построить, взяв любое двумерное подпространство трехмерного пространства, в котором определена группа SU_3 . Такой подгруппе соответствуют, например, инфинитезимальные операторы X_1 , X_2 и X_3 . Тройки операторов X_4 , X_5 , $1/2(X_3 + 1/2 X_8)$ и X_6 , X_7 , $1/2(-X_3 + 1/2 X_8)$ также соответствуют SU_2 -подгруппам. Эти подгруппы могут быть расширены, так как оператор X_8 , например, коммутирует с операторами X_1 , X_2 и X_3 . Таким образом, эта четверка операторов порож-

дает прямое произведение $SU_2 \times U_1$. Если обозначить базисные векторы пространства, в котором действует группа SU_3 , через e_1 , e_2 и e_3 , то на подпространстве, натянутом на векторы e_1 и e_2 , действует подгруппа SU_2 , порожденная инфинитезимальными операторами X_1 , X_2 и X_3 . Элемент подгруппы U_1 может быть представлен в виде $U(a) = \exp(aX_8)$, так что $U(a)e_1 = \exp(-ia)e_1$, $U(a)e_2 = \exp(-ia)e_2$, а $U(a)e_3 = \exp(2ia)e_3$.

Группа U_1 абелева, так как $U(a)U(b) = U(a+b)$; поэтому ее неприводимые представления одномерны. Фактически группа U_1 изоморфна группе $\mathcal{R}_2$, рассмотренной нами в гл. 7, § 3, и ее однозначные неприводимые представления параметризуются целыми числами. Для дальнейшего нам удобно записывать эти целые числа в виде $3Y$. Таким образом, представления группы U_1 даются формулой $T^{(1)} = \exp(-i3Ya)$. Оператор X_8 в этом представлении равен $-3iY$. При построении неприводимых представлений мы воспользуемся наличием в группе SU_3 подгруппы $SU_2 \times U_1$.

Если мы ограничимся действительными унитарными 3×3 -матрицами, то найдем еще одно семейство подгрупп группы SU_3 . Они изоморфны группе $\mathcal{R}_3$, о которой говорилось в гл. 7, § 4. В самом деле, нетрудно показать, что действительные матрицы X_2 , X_5 и X_7 удовлетворяют перестановочным соотношениям группы $\mathcal{R}_3$ и фактически идентичны матрицам $\mathcal{R}_3$, даваемым формулой (7.24) для представления $D^{(1)}$. Мы не будем исследовать соотношение между SU_3 и подгруппой $\mathcal{R}_3$. Заметим только, что наличие этой подгруппы в SU_3 используется при объяснении коллективных движений в легких ядрах (т. 2, гл. 19, § 2).

§ 6. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ SU_3

Обратимся теперь к структуре, классификации и свойствам неприводимых представлений группы SU_3 . При этом мы будем следовать методам, применявшимся в гл. 7, § 4, п. Б для группы $\mathcal{R}_3$. Мы будем систематически пользоваться наличием трех SU_2 -подгрупп в группе SU_3 , о которых шла речь в предыдущем параграфе. Для каждой из этих подгрупп необходимо ввести повышающие и понижающие операторы по аналогии с формулой (7.27). Таким

образом, оказывается удобным перейти от операторов X_q к следующим их комбинациям:

$$\begin{aligned}
 T_+ &= i(X_1 + iX_2) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 T_- &= i(X_1 - iX_2) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 U_+ &= i(X_6 + iX_7) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 U_- &= i(X_6 - iX_7) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
 V_+ &= i(X_4 - iX_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 V_- &= i(X_4 + iX_5) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 T_z &= iX_3 = \begin{pmatrix} 1/2 & 0 & 0 \\ 0 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
 Y &= 1/3 iX_8 = \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 1/3 & 0 \\ 0 & 0 & -2/3 \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{11.2}$$

Можно убедиться, что коммутатор любых двух из этих восьми матриц является их линейной комбинацией. Это, конечно, следствие общего свойства (7.7) инфинитезимальных операторов группы. Например, три матрицы $T_{\pm}$ и T_z , будучи инфинитезимальными операторами SU_2 -подгруппы, удовлетворяют перестановочным соотношениям (7.28) и (7.30):

$$[T_+, T_-] = 2T_z, \quad [T_z, T_{\pm}] = \pm T_{\pm}. \tag{11.3a}$$

Если мы положим $U_z = \frac{3}{4}Y - \frac{1}{2}T_z$ и $V_z = -\frac{3}{4}Y - \frac{1}{2}T_z$, то операторы U и V будут удовлетворять точно таким же перестановочным соотношениям, так как и они определяют SU_2 -подгруппы:

$$[U_+, U_-] = 2U_z, \quad [U_z, U_{\pm}] = \pm U_{\pm}, \quad (11.36)$$

$$[V_+, V_-] = 2V_z, \quad [V_z, V_{\pm}] = \pm V_{\pm}.$$

Говоря об этих трех SU_2 -подгруппах, мы будем пользоваться терминами T -спин, U -спин и V -спин. Из формул (11.2) следует, что матрица Y коммутирует с $T_{\pm}$ и T_z . В дальнейшем нам понадобятся также и следующие перестановочные соотношения, которые легко вывести из определений (11.2):

$$[T_z, U_{\pm}] = \mp \frac{1}{2} U_{\pm}, \quad [Y, U_{\pm}] = \pm U_{\pm},$$

$$[T_z, V_{\pm}] = \mp \frac{1}{2} V_{\pm}, \quad [Y, V_{\pm}] = \mp V_{\pm}, \quad (11.3в)$$

$$[T_+, U_-] = [T_-, U_+] = [T_+, U_-] = 0,$$

$$[T_-, V_+] = [U_+, V_-] = [U_-, V_+] = 0, \quad (11.3г)$$

$$[V_-, U_-] = T_+, \quad [U_+, V_+] = T_-, \quad [U_-, T_-] = V_+,$$

$$[T_+, U_+] = V_-, \quad [T_-, V_-] = U_+, \quad [V_+, T_+] = U_-.$$

Напомним (гл. 7, § 2), что в случае группы Ли такие же перестановочные соотношения выполняются во всех представлениях. Таким образом, перестановочные соотношения, полученные для 3×3 -матриц (11.2), справедливы в общем случае.

Теперь мы воспользуемся этими перестановочными соотношениями для построения и классификации неприводимых представлений группы SU_3 , так же как ранее мы использовали перестановочные соотношения (7.26) для получения неприводимых представлений $D^{(j)}$ группы $\mathcal{R}_3$. Но сначала напомним последовательность шагов, предпринятых для построения представлений $D^{(j)}$. Во-первых, был выбран базис, в котором один из операторов, а именно J_z , диагонален. Затем, учитывая, что ни один из оставшихся операторов нельзя диагонализировать одновременно с J_z , из них были построены операторы, повышающие и понижающие собственные значения m оператора J_z . В конце концов было показано, что если $j =$

максимальное значение величины m в данном представлении, то имеется $(2j+1)$ базисных векторов со значениями $m=j, j-1, \dots, -j$. Величина j для различных представлений может принимать только значения $j=0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Таким образом, неприводимое представление можно было характеризовать числом j и обозначать символом $\mathbf{D}^{(j)}$. Базисные векторы можно было изобразить

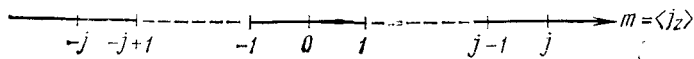


Рис. 11.1.

как ряд из $(2j+1)$ точек на оси m , расположенных симметрично относительно начала координат с интервалами, равными единице. На рис. 11.1 представлен случай целого j . Так мы будем поступать и в случае группы SU_3 , но с соответствующими усложнениями. В этом случае можно диагонализировать уже два из восьми операторов. Следовательно, для изображения базисных векторов представления SU_3 вместо одномерного понадобится двумерное пространство. Для классификации неприводимых представлений также необходимо теперь два числа вместо одного j .

Обозначим на время неприводимое представление группы SU_3 символом $\mathbf{D}$. (Позже мы будем пользоваться более детальным обозначением $\mathbf{D}^{(\lambda\mu)}$, когда определим индексы λ и μ .) Мы выберем для представления базис, в котором операторы T_z и Y диагональны. Это возможно в силу их коммутативности. Более двух из восьми матриц (11.2) диагонализировать одновременно невозможно, так как это привело бы к существованию более чем двух линейно независимых диагональных 3×3 -матриц с нулевым следом. Поскольку T_z , U_z и V_z — это обычные SU_2 -операторы, их собственные значения, как нам известно, равны $0, \pm 1/2, \pm 1, \pm 3/2$ и т. д. Из определений операторов U_z и V_z следует, что $Y = 2/3(U_z - V_z)$; стало быть, собственные значения оператора Y должны быть равны $0, \pm 1/3, \pm 2/3, \pm 1, \pm 4/3$ и т. д. Тогда, если мы обозначим собственные значения операторов T_z и Y через M_T и Y , каждому базисному вектору пространства представления можно поставить в соответствие точку (M_T, Y) , расположенную в узле прямоугольной решетки с шагом $1/2$ в направлении M_T и с шагом $1/3$ в направлении Y (рис. 11.2).

После диагонализации двух из восьми инфинитезимальных операторов действие оставшихся шести операторов $T_{\pm}$, $U_{\pm}$ и $V_{\pm}$ легко изобразить на (M_T, Y) -плоскости

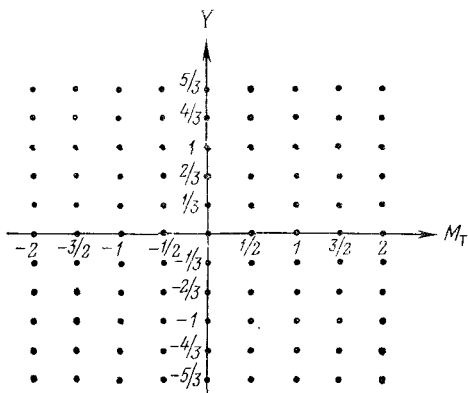


Рис. 11.2.

сти. Так как $T_{\pm}$ — это обычные повышающий и понижающий величину M_T операторы (гл. 7, § 4, п. Б), коммутирующие с Y , результат действия операторов $T_{\pm}$ на ба-

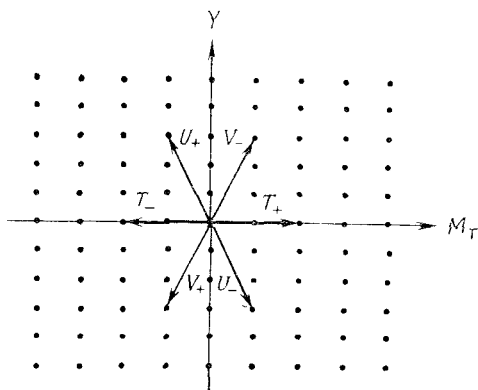


Рис. 11.3.

зисный вектор, изображенный точкой (M_T, Y) , изображается точками $(M_T \pm 1, Y)$. Таким образом, операторы $T_{\pm}$ соответствуют сдвигам на ± 1 в направлении оси

M_T . Точно так же из перестановочных соотношений (11.3в) следует, что операторы $U_{\pm}$ соответствуют сдвигам в (M_T, Y) -плоскости на векторы $(\mp^{1/2}, \pm 1)$, а операторы $V_{\pm}$ — на векторы $(\mp^{1/2}, \mp 1)$ (рис. 11.3).

Неприводимые представления характеризуются тем, что при помощи инфинитезимальных операторов из любого вектора пространства представления можно получить ба-

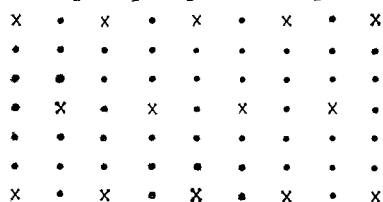


Рис. 11.4.

зис этого пространства. Из рис. 11.3 явствует, что величина Y может меняться только на целое число. Кроме того, если величина Y изменяется на нечетное число, то соответствующее изменение величины M_T является полуцелым.

Таким образом, мы видим, что точки, соответствующие базисным векторам неприводимого представления, расположены в узлах гексагональной решетки, помеченных на рис. 11.4 крестиками. Такая конфигурация может быть реализована на сетке, показанной на рис. 11.2, тремя разными способами:

- 1) с узлом гексагональной решетки в точке $(0, 0)$;
- 2) с узлом в точке $(0, \frac{2}{3})$;
- 3) с узлом в точке $(0, -\frac{2}{3})$.

(11.4)

Соответственно этому неприводимые представления распадаются на три типа. [Случай, когда узел гексагональной решетки расположен в точках $(0, \pm \frac{1}{3})$, должны быть исключены, так как тогда мы имели бы $U_z = \pm \frac{1}{4}$.]

Теперь нам необходимо выбрать такие точки на решетке, чтобы соответствующие базисные векторы порождали пространство неприводимого представления. Для этого рассмотрим в пространстве неприводимого представления D базисный вектор с наибольшим «весом», или «старший вектор». Под этим мы подразумеваем, что этому вектору $|\psi\rangle$ соответствует максимальное значение Y и максимальное при этом Y значение M_T . (Можно было бы также определить старший вес, поменяв местами Y и M_T .) Из определения $|\psi\rangle$ следует, что

$$T_+ |\psi\rangle = U_+ |\psi\rangle = V_- |\psi\rangle = 0, \quad (11.5)$$

так как операторы U_+ и V_- повышают величину Y , а оператор T_+ повышает величину M_T , оставляя величину Y неизменной. Таким образом, из соотношений (11.5), а также из определения операторов U_z и V_z , приведенного сразу после формул (11.3а), следует, что вектор $|\psi\rangle$ имеет определенные T -, U - и V -спины, равные

$$T = M_T, \quad U = M_U = \frac{3}{4} Y - \frac{1}{2} M_T,$$

$$V = -M_V = \frac{3}{4} Y + \frac{1}{2} M_T.$$

Этот вектор принято обозначать парой целых чисел $\lambda = 2T$ и $\mu = 2U$, так что $V = \frac{1}{2}(\lambda + \mu)$, а координаты соответствующей точки решетки равны

$$M_T = \frac{1}{2} \lambda, \quad Y = \left(\frac{1}{3} \lambda + 2\mu \right). \quad (11.6)$$

Теперь мы можем показать, что всем базисным векторам представления D соответствуют точки решетки, рас-

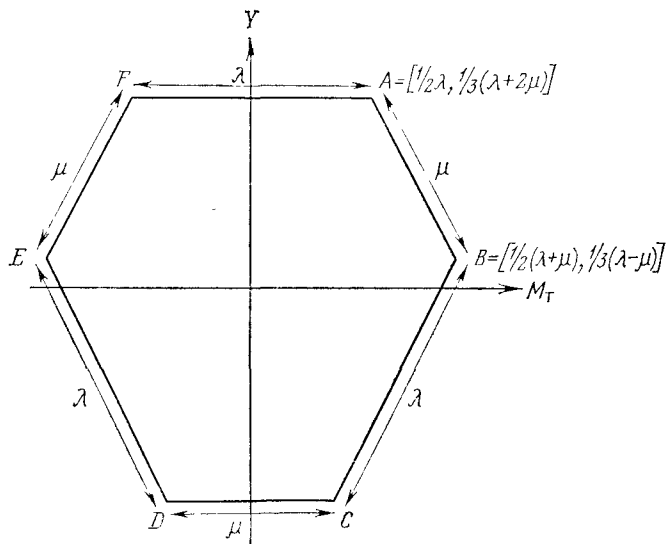


Рис. 11.5.

положенные на сторонах или внутри шестиугольника, изображенного на рис. 11.5. Стороны этого шестиугольника параллельны векторам, изображенным на рис. 11.3.

Длины сторон λ и μ равны числу промежутков между узлами решетки. (Чтобы перейти к реальным длинам, нужно уменьшить масштаб по оси Y в $1/\sqrt{3}$ раз.) Начав с точки A , соответствующей старшему вектору $|\psi\rangle$, мы можем при помощи оператора T_- последовательно уменьшить M_T на λ единиц. Так мы достигнем точки F . Из определения старшего вектора следует, что ни одна точка решетки, соответствующая базисному вектору пространства представления D , не может лежать выше линии AF . Аналогично, последовательное применение к вектору $|\psi\rangle$ оператора U_- даст U -спиновый мультиплет, состоящий из $\mu+1$ точек решетки, лежащих на линии AB . Базисные векторы, соответствующие точкам на линии AB , имеют вид $U_-^n |\psi\rangle$. Из равенств (11.3г) следует, что $T_+ U_-^n |\psi\rangle = U_-^n T_+ |\psi\rangle = 0$ и $V_- U_-^n |\psi\rangle = 0$. Поэтому справа от линии AB нет точек решетки, соответствующих базисным векторам представления D . Легко видеть, что координаты точки B таковы:

$$M_T = \frac{1}{2}(\lambda + \mu), \quad Y = \frac{1}{3}(\lambda + 2\mu) - \mu = \frac{1}{3}(\lambda - \mu).$$

Теперь можно достроить весь шестиугольник $ABCDEF$, руководствуясь соображениями симметрии. Во-первых, имеется симметрия относительно оси Y , связанная с симметрией значений M_T в T -спиновой подгруппе SU_2 . Такая же симметрия относительно U -спина и V -спина приводит к зеркальной симметрии относительно двух диагоналей, изображенных на рис. 11.5. Мы получили такой шестиугольник, что все базисные векторы пространства неприводимого представления соответствуют точкам, лежащим внутри него или на его сторонах. (Отметим, что упомянутая «зеркальная» симметрия имеет место по отношению к узлам решетки. Чтобы превратить ее в настоящую зеркальную симметрию, нужно уменьшить масштаб Y в $1/\sqrt{3}$ раз.)

Каждому узлу решетки на линии ABC соответствует T -спиновый мультиплет, пересекающий шестиугольник в горизонтальном направлении до линии FED . Точки этого мультиплета получаются последовательным применением оператора T_- . Аналогично каждый узел решетки, лежащий на линии AFE , порождает U -спиновый мультиплет, пересекающий шестиугольник до линии BCD , а V -спино-

вые мультиплеты соединяют линии BAF и CDE . Таким образом, начав с точки A , заданной двумя целыми числами λ и μ , мы можем получить неприводимое представление, базисные векторы которого соответствуют точкам, лежащим на сторонах и внутри шестиугольника $ABCDEF$ (рис. 11.5). Мы будем обозначать это неприводимое представление через $D^{(\lambda, \mu)}$ или просто через (λ, μ) . Из нашего построения видно, что каждому узлу решетки внутри шестиугольника соответствует базисный вектор. Но, вообще говоря, одной точке могут соответствовать несколько линейно независимых базисных векторов. Можно показать (задача 11.6), что каждому узлу решетки на стороне шестиугольника соответствует один и только один базисный вектор. Если мы соединим между собой ближайшие к сторонам шестиугольника внутренние узлы решетки, то получим меньший шестиугольник, вписанный в исходный. Можно показать, что каждой точке этого шестиугольника соответствует по два независимых базисных вектора. Такое построение можно продолжать и далее, увеличивая на каждом шаге число линейно независимых базисных векторов, соответствующих узлам решетки, до тех пор, пока на очередном шаге вместо шестиугольника не получится треугольник. Начиная с этого момента, число независимых векторов, соответствующих узлу решетки, остается постоянным. Путем такого построения можно показать (задача 11.7), что число линейно независимых базисных векторов пространства представления, т. е. размерность представления $d(\lambda, \mu)$, дается выражением

$$d(\lambda, \mu) = \frac{1}{2} (\lambda + 1) (\mu + 1) (\lambda + \mu + 2). \quad (11.7)$$

Некоторые примеры приведены на рис. 11.6. Заметим, что если $\mu=0$ или $\lambda=0$, то мы с самого начала имеем треугольник и, следовательно, каждой точке решетки соответствует один-единственный базисный вектор.

Остановимся более подробно на представлении $D^{(11)}$. Дело в том, что, во-первых, $D^{(11)}$ — простейшее представление с двумя базисными векторами, соответствующими одной точке решетки, и, во-вторых, это представление имеет наибольшее значение в физических приложениях. Представление $D^{(11)}$ содержит два мультиплета с $T=1/2$ при $Y=\pm 1$ и мультиплет с $T=1$ при $Y=0$. Оставшийся

вектор, соответствующий точке $(0, 0)$, должен иметь $T=0$, так как в противном случае мы могли бы получить новые независимые векторы. Точки $O=(0, 0)$ можно достичь из начальной точки $A=(1/2, 1)$ многими путями, включая три

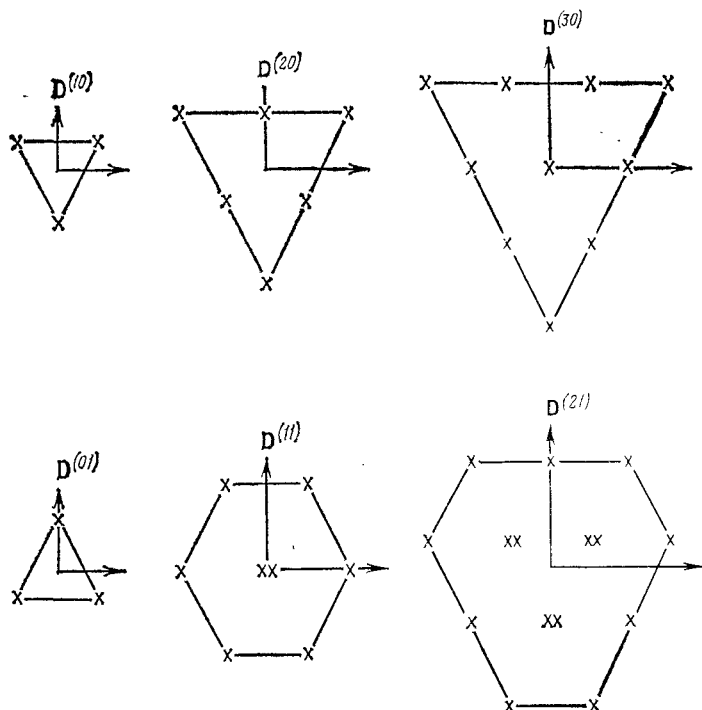


Рис. 11.6.

изображенных на рис. 11.7. Эти пути соответствуют следующим преобразованиям:

$$\begin{aligned}
 AO & \quad \mathbf{V}_+ |\psi\rangle = \sqrt{2} |V=1\rangle, \\
 ABO & \quad \mathbf{T}_- \mathbf{U}_- |\psi\rangle = \sqrt{2} |T=1\rangle, \\
 AFO & \quad \mathbf{U}_- \mathbf{T}_- |\psi\rangle = \sqrt{2} |U=1\rangle.
 \end{aligned} \tag{11.8}$$

Так как состояние $|\psi\rangle$ имеет $M_V = -1$ и, следовательно, $V=1$, то путь AO должен привести к состоянию с $V=1$ и $M_V=0$. Множитель $\sqrt{2}$ в соотношениях (11.8) возникает

из-за определения (7.40) повышающего оператора V_+ . Точно так же $U_-|\psi\rangle$ есть состояние с $M_T=1$ и, следовательно, $T=1$. Таким образом, $T_-U_-|\psi\rangle$ имеет $T=1$ и $M_T=0$. Аналогично путь AFO приводит к состоянию с $U=1$. Мы построили три на первый взгляд различных вектора, соответствующих точке $(0, 0)$. Однако эти векторы не являются линейно независимыми. В самом деле, соотношение $[U_-, T_-]=V_+$ [формула (11.3г)] непосредственно приводит к линейной зависимости $|U=1\rangle - |T=1\rangle = |V=1\rangle$. В качестве базисных векторов необходимо выбрать две ортогональные друг другу комбинации этих трех векторов. По разным причинам удобно выбрать векторы $|T=1\rangle$ и $|T=0\rangle$, которые должны быть взаимно ортогональными. Воспользовавшись еще раз перестановочными соотношениями (11.3г), можно показать, что $|T=0\rangle = (1/\sqrt{3})\{|U=1\rangle + |V=1\rangle\}$. Для этого достаточно показать, что $T_+\{|U=1\rangle + |V=1\rangle\} = 0$. Множитель $1/\sqrt{3}$ возникает из-за того, что состояния $|U=1\rangle$ и $|V=1\rangle$ не ортогональны:

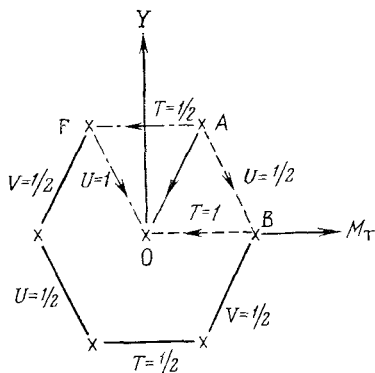


Рис. 11.7.

$\langle V=1 | U=1 \rangle = \frac{1}{2} \langle \psi | V_- U_- T_- | \psi \rangle =$
 $= \frac{1}{2} \langle \psi | U_- V_- T_- | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | T_+ T_- | \psi \rangle =$
 $= \frac{1}{2} \langle \psi | U_- T_- V_- | \psi \rangle - \frac{1}{2} \langle \psi | U_- U_+ | \psi \rangle + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}.$

Переходя к базисным векторам $|T=1\rangle$ и $|T=0\rangle$, получаем

$$|U=1\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{3} |T=0\rangle + \frac{1}{2} |T=1\rangle,$$

$$|V=1\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{3} |T=0\rangle - \frac{1}{2} |T=1\rangle,$$

а из ортогональности следует, что

$$\begin{aligned} |U=0\rangle &= \frac{1}{2} |T=0\rangle - \frac{1}{2} \sqrt{3} |T=1\rangle, \\ |V=0\rangle &= \frac{1}{2} |T=0\rangle + \frac{1}{2} \sqrt{3} |T=1\rangle. \end{aligned} \quad (11.9)$$

А. Комплексно-сопряженные представления

Матрицы, комплексно-сопряженные матрицам представления D некоторой группы, также образуют представление этой группы, обозначаемое символом D^* . Для исследования представления D^* проще всего рассмотреть соответствующие инфинитезимальные операторы. Из определений (11.1) и (11.2) следует, что комплексное сопряжение инфинитезимальных операторов X_i группы SU_3 приводит к изменению знаков T_z и Y и к тому, что остальные шесть повышающих и понижающих операторов меняются ролями. На (M_T, Y) -плоскости это приводит к отражению диаграммы относительно обеих осей, что эквивалентно (рис. 11.5) замене μ на λ и наоборот. Таким образом, представление $D^{(01)}$, например, эквивалентно представлению, комплексно-сопряженному представлению $D^{(10)}$. В то же время представление $D^{(11)}$ с $\lambda=\mu$ действительно, т. е. эквивалентно своему комплексно сопряженному. (В случае группы $\mathcal{R}_3$ или SU_2 комплексное сопряжение меняет m на $-m$, так что $D^{(j)}$ и $D^{(j)*}$ эквивалентны; гл. 7, § 7.)

Б. Произведение представлений

Разложение произведения двух неприводимых представлений группы $\mathcal{R}_3$ определено формулой (7.44). Соответствующее соотношение

$$D^{(\lambda_1 \mu_1)} \otimes D^{(\lambda_2 \mu_2)} = \sum_{\lambda \mu} C(\lambda \mu) D^{(\lambda \mu)} \quad (11.10)$$

можно написать и для группы SU_3 , хотя в этом случае правило, которым по данным $(\lambda_1 \mu_1)$ и $(\lambda_2 \mu_2)$ определяются коэффициенты $C(\lambda \mu)$, выглядит весьма сложно. Но при малых значениях λ и μ , зная как разлагаются на неприводимые представления произведения неприводимых пред-

ставлений группы $SU_2 \times U_1$, являющейся подгруппой группы SU_3 , эти коэффициенты вычислить довольно просто. Неприводимые представления группы $SU_2 \times U_1$ определяются величинами T и Y . Произведение представлений T_1, Y_1 и T_2, Y_2 разлагается на сумму представлений с $T=(T_1+T_2), (T_1+T_2-1), \dots, |T_1-T_2|$ и $Y=Y_1+Y_2$. Мы использовали здесь обычное правило сложения моментов для группы SU_2 (или $\mathcal{R}_3$) и аддитивный закон для Y (гл. 11, § 5). Приведем для иллюстрации несколько примеров.

Рассмотрим произведение $D^{(10)} \otimes D^{(10)}$. Так как пространство каждого сомножителя содержит базисные векторы с $T=1/2, Y=1/3$ и $T=0, Y=-2/3$, то пространство произведения содержит базисные векторы, соответствующие комбинациям T и Y , данным в первой строке табл. 11.2, а.

Таблица 11.2, а

	$Y=2/3$	$-1/3$	$-4/3$
$D^{(10)} \otimes D^{(10)}$	$T=1, 0$	$1/2, 1/2$	0
$D^{(20)}$	$T=1$	$1/2$	0
$D^{(01)}$	$T=0$	$1/2$	—

Таблица 11.2, б

	$Y=1$	0	-1
$D^{(10)} \otimes D^{(01)}$	$T=1/2$	1, 0, 0	$1/2$
$D^{(11)}$	$1/2$	1, 0	$1/2$
$D^{(00)}$	—	0	—

(Конечно, подразумевается, что данному значению T соответствует мультиплет $2T+1$ базисных векторов с $M_T = T, T-1, \dots, -T$.) Обозначение $1/2, 1/2$ указывает на то, что имеются два мультиплета с $T=1/2$, соответствующих значениям $T=1/2$ и $T=0$ для первого и второго сомножителя, и наоборот. Наибольший вес, представленный в первой строке таблицы, есть $M_T=1, Y=2/3$. Отсюда мы заключаем, что наше произведение должно содержать

представление $D^{(20)}$. [Мы воспользовались формулой (11.6), связывающей значения λ и μ со значениями M_T и Y старшего вектора.] Комбинации величин T и Y , соответствующие представлению $D^{(20)}$, приведены во второй строке таблицы. Можно убедиться, что оставшиеся базисные векторы в точности соответствуют представлению $D^{(01)}$. Таким образом, мы приходим к заключению, что

$$D^{(10)} \otimes D^{(10)} = D^{(20)} \oplus D^{(01)}.$$

Аналогично табл. 11.2, б иллюстрирует разложение

$$D^{(10)} \otimes D^{(01)} = D^{(11)} \oplus D^{(00)}.$$

Точно так же, как и в первом случае, можно показать, что

$$D^{(11)} \otimes D^{(11)} = D^{(22)} \oplus D^{(03)} \oplus D^{(30)} \oplus 2D^{(11)} \oplus D^{(00)}. \quad (11.11)$$

Формула (11.11) пригодится нам в дальнейшем. Здесь же она показывает, что группа SU_3 не является «просто приводимой» (см. определение в гл. 4, § 17): в разложение (11.11) представление $D^{(11)}$ входит дважды. В заключение отметим, что все вышеперечисленные результаты можно получить из общего правила для разложения произведения представлений группы U_N на неприводимые (т. 2, гл. 18, § 5).

§ 7. КЛАССИФИКАЦИЯ АДРОНОВ ПО SU_3 -МУЛЬТИПЛЕТАМ

Кратко ознакомившись с неприводимыми представлениями группы SU_3 , обратимся снова к элементарным частицам (табл. 11.1) и покажем, что адроны можно сгруппировать в SU_3 -мультиплеты. Мы отождествим T -спиновую подгруппу группы SU_3 с группой изоспиновой симметрии SU_2 , а инфинитезимальный оператор Y с оператором гиперзаряда. Таким образом, SU_3 есть расширение изоспиновой группы, включающее группу U_1 , соответствующую гиперзаряду.

Первые восемь барионов из табл. 11.1 имеют спин $1/2$. Именно по этой причине мы поместили Ξ перед Δ , хотя масса Ξ -частиц немного больше.) Если мы теперь посмотрим внимательнее на значения T и Y этих восьми частиц, то убедимся, что они в точности такие же, как и значения соответствующих операторов на базисных векторах пространства представления $D^{(11)}$ группы SU_3 (рис. 11.6 и

11.7). Кроме того, остальные десять барионов из табл. 11.1 со спином $3/2$ обладают набором величин T и Y , соответствующим представлению $D^{(30)}$, изображенному на диаграмме рис. 11.6. Точно так же мезоны из табл. 11.1 группируются в представление $D^{(11)}$ группы SU_3 . На рис. 11.8

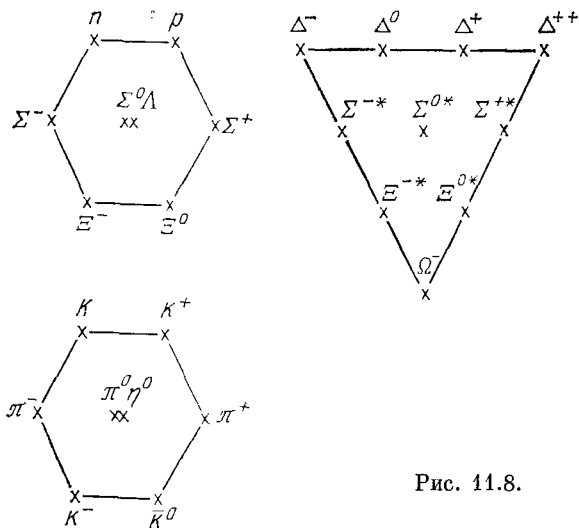


Рис. 11.8.

показано положение частиц на соответствующих весовых диаграммах. Представления $D^{(11)}$ и $D^{(30)}$ обычно называют октетом и декуплетом, так как их размерность равна восьми и десяти.

То, как адроны группируются в SU_3 -мультиплеты, показывает, что группа SU_3 , по-видимому, имеет некий физический смысл. Мы уже видели в предыдущей главе, что сильное взаимодействие инвариантно по отношению к изоспиновой группе SU_2 — подгруппе группы SU_3 . Далее, так как сильное взаимодействие сохраняет гиперзаряд Y , группой симметрии является большая подгруппа SU_3 , а именно $SU_2 \times U_1$ (гл. 11, § 5). (Здесь Y — инфинитезимальный оператор группы U_1 .) Неприводимые представления этой подгруппы задаются парами величин T и Y , соответствующих группам SU_2 и U_1 . Принимая во внимание то, насколько хорошо адроны группируются в SU_3 -мультиплеты, попытаемся сделать еще один шаг и

будем считать всю группу SU_3 -группой симметрии сильного взаимодействия. Правда, на этом пути мы наталкиваемся на одну трудность. Небольшие различия в массах между членами одного изоспинового мультиплетта объяснялись наличием SU_2 -неинвариантного электромагнитного взаимодействия. Расширяя симметрию сильного взаимодействия до группы SU_3 , мы вправе ожидать, что разность масс в SU_3 -мультиплеттах будет того же порядка, т. е. порядка нескольких мегаэлектронвольт. Однако из табл. 11.1 видно, что эта разница масс достигает сотен мегаэлектронвольт. Таким образом, мы приходим к заключению, что сильное взаимодействие не является полностью SU_3 -инвариантным, а содержит «умеренно сильное» взаимодействие, нарушающее SU_3 -симметрию. Анализ относительных вероятностей различных процессов, аналогичный тому, который был проведен в гл. 10, § 2, п. А, подтверждает это предположение.

В оставшейся части этой главы мы продолжим проверку SU_3 -симметрии, анализируя различные свойства частиц. Вопрос о том, почему не найдены частицы, принадлежащие более простым, чем $D^{(11)}$ или $D^{(30)}$, представлениям, таким, как фундаментальное представление $D^{(10)}$, будет рассмотрен в следующей главе. Отметим, что в начале 60-х годов, когда на SU_3 -симметрию было впервые обращено серьезное внимание, частица Ω^- еще не была обнаружена, хотя остальные девять членов декуплета $D^{(30)}$ уже были известны. Первое наблюдение в 1964 г. Ω^- -частицы, обладающей всеми свойствами, необходимыми для занятия вакансии в представлении $D^{(30)}$, явилось впечатляющим подтверждением SU_3 -симметрии сильного взаимодействия.

§ 8. ФОРМУЛА РАСЩЕПЛЕНИЯ МАСС

В гл. 10, § 1, п. Б мы описали расщепление масс в изоспиновом мультиплетте, рассматривая трансформационные свойства электромагнитного взаимодействия, вызывающего это расщепление, по отношению к изоспиновым преобразованиям. При этом мы опирались на аналогию с зеемановским расщеплением уровня с фиксированным угловым моментом. Теперь мы применим тот же общий метод для описания расщепления масс между различными изо-

спиновыми мультиплетам, входящими в SU_3 -мультиплет. При этом мы не будем принимать во внимание небольшую разницу масс внутри изоспиновых мультиплетов и будем брать для каждого T соответствующее среднее значение массы. Наша цель — объяснить разницу масс порядка сотен мегаэлектронвольт между, например, нуклоном и Σ -частицами. Эта разница масс обязана своим возникновением «умеренно-сильному» взаимодействию, инвариантному по отношению к изоспиновой группе SU_2 и группе U_1 , соответствующей гиперзаряду. В отличие от кулоновского, явный вид этого взаимодействия нам не известен. Следовательно, нам необходимо сделать какие-то предположения о его трансформационных свойствах по отношению к группе SU_3 . Ограничиваясь простейшими представлениями (рис. 11.6), мы видим, что единственный базисный вектор, соответствующий значениям $T=Y=0$, принадлежит представлению $D^{(11)}$. На диаграмме ему соответствует одна из точек, расположенных в начале координат. По этой, а также по ряду других причин мы полагаем, что трансформационные свойства нарушающего SU_3 -симметрию взаимодействия совпадают с трансформационными свойствами базисного вектора с $T=Y=0$ пространства представления $D^{(11)}$. (Этому вектору соответствует Λ -частица.)

Такое предположение приводит к тому, что в первом порядке теории возмущений добавка к массе для состояний, имеющих в представлении $(\lambda\mu)$ значения изоспина и гиперзаряда T и Y , дается выражением

$$\Delta M(T, Y) = \langle (\lambda\mu) TY | H[(11) T=Y=0] | (\lambda\mu) TY \rangle, \quad (11.12)$$

где H — возмущение, обусловленное умеренно-сильным взаимодействием¹⁾. Теперь для вычисления расщепления масс можно применить теорему Вигнера — Экарта (4.62).

Отметим, что, так как группа SU_3 не является просто приводимой, сумма по t в формуле (4.62) содержит, вообще говоря, более одного слагаемого, в отличие от случая группы $\mathcal{R}_3$, когда индекс t вообще не был нужен. Следовательно, в общем случае в формулу (11.12) будут входить

¹⁾ Обозначение $H[(\lambda\mu)T=Y=0]$ указывает на то, что величина H преобразуется как базисный вектор с $T=Y=0$ представления $D^{(\lambda\mu)}$. — Прим. перев.

несколько приведенных матричных элементов величина которых неизвестна. Можно показать, что в нашем случае, когда оператор $\mathbf{H}$ преобразуется по представлению $\mathbf{D}^{(11)}$, в нее входит самое большее два приведенных матричных элемента. В особенности нас будут интересовать матричные элементы между состояниями, принадлежащими представлениям $\mathbf{D}^{(11)}$ и $\mathbf{D}^{(30)}$, соответствующим мультиплетам частиц, как это изображено на рис. 11.8. Число значений, которые принимает l , в этом случае можно определить из разложения следующих произведений представлений на неприводимые:

$$\mathbf{D}^{(11)} \otimes \mathbf{D}^{(30)} = \mathbf{D}^{(41)} \oplus \mathbf{D}^{(22)} \oplus \mathbf{D}^{(30)} \oplus \mathbf{D}^{(11)}, \quad (11.13)$$

$$\mathbf{D}^{(11)} \otimes \mathbf{D}^{(11)} = \mathbf{D}^{(22)} \oplus \mathbf{D}^{(03)} \oplus \mathbf{D}^{(30)} \oplus 2\mathbf{D}^{(11)} \oplus \mathbf{D}^{(00)}.$$

Эти формулы можно вывести так, как показано в § 6. Поскольку $\mathbf{D}^{(30)}$ встречается в первом разложении один раз, а $\mathbf{D}^{(11)}$ во втором разложении — дважды, в формулу (11.12) при $(\lambda\mu)=(30)$ входит один приведенный матричный элемент, а при $(\lambda\mu)=(11)$ — два. Воспользовавшись известными явными выражениями для коэффициентов Клебша — Гордана, получаем знаменитые формулы расщепления масс

$$\begin{aligned} \langle (30) TY | \mathbf{H} [(11) T=Y=0] | (30) TY \rangle &= aY, \\ \langle (11) TY | \mathbf{H} [(11) T=Y=0] | (11) TY \rangle &= \\ &= bY + c \left[T(T+1) - \frac{1}{4}Y^2 - 1 \right], \end{aligned} \quad (11.14)$$

где a , b и c — неизвестные коэффициенты, возникающие из приведенных матричных элементов оператора возмущения $\mathbf{H} [(11) T=Y=0]$ и постоянных множителей в выражениях для коэффициентов Клебша — Гордана. Зависимость массы частиц от T и Y , выражаемую формулами (11.14), можно проверить по значениям масс частиц, приведенным в табл. 11.1. При выводе формул (11.14) мы не учитывали электромагнитного взаимодействия. Поэтому мы пренебрежем электромагнитной разницей масс в изомультиплетах и возьмем средние значения масс мультиплетов, приведенные ниже:

$$Y=1, 1232; \quad Y=0, 1385;$$

Декуплет (30 :

$$Y=-1, 1533; \quad Y=-2, 16'2.$$

$$Y=1, \quad T=1/2, \quad 939; Y=0, \quad T=1, \quad 1193;$$

Октет (11):

$$Y=0, \quad T=0, \quad 1116; Y=-1, \quad T=1/2, \quad 1318$$

(массы даны в мегаэлектронвольтах). Для декуплета сразу же видна линейная зависимость массы от Y . Величина a равна примерно -150 МэВ. В случае октета мы имеем три разности масс и две неизвестные постоянные b и c . Полагая $Y=\pm 1$, получаем $b \approx -190$ МэВ. Из значения массы мультиплета с $Y=0, T=1$ получаем $c \approx 43$ МэВ. Теперь формула (11.14) предсказывает значение 86 МэВ для разницы масс между мультиплетами $Y=0, T=1$ и $Y=0, T=0$. Оно удовлетворительно согласуется с экспериментальным значением 80 МэВ. Таким образом, предположение о том, что оператор, нарушающий SU_3 -симметрию, имеет тип $[(11)T=Y=0]$, приводит к значениям масс частиц, согласующимся с экспериментальными с точностью порядка 10 МэВ.

Формулу (11.14) можно вывести методом эквивалентного оператора (гл. 7, § 4, п. Ж). Для этого нам необходимо построить два независимых оператора с трансформационными свойствами базисного вектора с $T=Y=0$ представления $D^{(11)}$, матричные элементы которых были бы нам известны. Необходимость в двух операторах вызвана тем, что группа SU_3 не является просто приводимой. Как и в случае группы $\mathcal{R}_3$, попытаемся построить искомые операторы из инфинитезимальных операторов. В нашем случае это восемь инфинитезимальных операторов (11.2) группы SU_3 . Заметим сначала, что из коммутационных свойств (11.3) этих операторов следует, что они отвечают следующим значениям T и Y :

$$\begin{aligned} U_+, V_-: \quad Y=1, \quad T=\frac{1}{2}, \\ T_\pm, T_z: \quad Y=0, \quad T=1, \\ Y: \quad Y=0, \quad T=0, \\ V_+, U_-: \quad Y=-1, \quad T=\frac{1}{2}. \end{aligned} \tag{11.15}$$

Сравнение формул (11.15) со структурой представления $D^{(11)}$ позволяет предположить, что восемь инфинитезимальных операторов группы SU_3 преобразуются по этому представлению. Дальнейший анализ их трансформацион-

ных свойств подтверждает это предположение. (Аналогичный результат для группы $\mathcal{K}_3$ — три оператора J_q преобразуются по векторному представлению $D^{(1)}$.) В частности, оператор Y обладает требуемым свойством, т. е. имеет тип (11) $T=Y=0$ и отвечает за члены aY и bY в формулах (11.14). Таким образом, для декуплета проблема решена. В случае же октета нам необходим еще один оператор. Можно попытаться построить его из квадратичных комбинаций инфинитезимальных операторов. Очевидно, что операторы T^2 и Y^2 обладают необходимым нам свойством, т. е. коммутируют с операторами T_q и Y . Однако каждый из них преобразуется по сумме представлений (22), (11) и (00), что видно из второго равенства (11.13). Более детальные вычисления показывают, что по представлению (11) преобразуется комбинация

$$T^2 - \frac{1}{4} Y^2 - \frac{1}{6} C_2, \quad (11.16)$$

где C_2 — оператор Казимира, который будет определен в § 10. Подставляя вместо T^2 величину $T(T+1)$, а вместо C_2 выражение (11.21) с $\lambda=\mu=1$, получаем формулы (11.14). Оператор (11.16) можно также построить, используя декартовы обозначения (§ 10). Для этого достаточно заметить, что операторы

$$\sum_k A_k^j A_k^k - \frac{1}{3} \delta_{ij} C_2$$

преобразуются как A_i^j .

§ 9. ЭЛЕКТРОМАГНИТНЫЕ ЭФФЕКТЫ

В § 1 было приведено эмпирическое выражение для заряда частицы $Q = M_T + 1/2 Y$. Из перестановочных соотношений (11.3) следует, что

$$\left[T_z + \frac{1}{2} Y, U_{\pm} \right] = \left[T_z + \frac{1}{2} Y, U_z \right] = 0. \quad (11.17)$$

Таким образом, оператор заряда коммутирует с операторами U -спина, и, следовательно, заряд Q играет по отношению к U -спину ту же роль, что и гиперзаряд Y по отношению к T -спину. В частности, если частицы, расположенные на рис. 11.8 на одной горизонтали, имеют одно и то же значение Y , то частицы, расположенные на линии U -спи-

нового мультиплета (т. е. на линии $U_{\pm}$ на рис. 11.3), имеют одинаковый заряд. Рис. 11.8 иллюстрирует эту ситуацию. Таким образом, можно предположить, что электромагнитное взаимодействие инвариантно относительно U -спиновой подгруппы SU_2 . Это предположение можно проверить путем сравнения электромагнитных свойств различных частиц в SU_3 -мультиплете.

Одной из электромагнитных характеристик частицы является ее магнитный момент μ . Поскольку оператор M магнитного момента линеен по заряду, под действием группы SU_3 он должен преобразовываться как заряд, а именно как M [(11) $U=Q=0$]. Таким образом, структура оператора M аналогична структуре оператора H , ответственного за расщепление масс в SU_3 -мультиплете. Разница заключается лишь в замене T и Y на U и Q , что эквивалентно повороту весовой диаграммы на 120° . Следовательно, должна выполняться формула, аналогичная формуле (11.14):

$$\begin{aligned} \mu &= \langle (11) TY | M [(11) U = Q = 0] | (11) TY \rangle = \\ &= dQ + e \left\{ U(U+1) - \frac{1}{4} Q^2 - 1 \right\}. \end{aligned} \quad (11.18)$$

Из этой формулы следует, что магнитные моменты октета барионов (рис. 11.8) определяются двумя постоянными. К сожалению, измерены лишь немногие из этих магнитных моментов, однако некоторая проверка соотношения (11.18) все-таки возможна. Например, из (11.18) следует, что $\mu(p) = \mu(\Sigma^+)$ и что $\mu(n) = 2\mu(\Lambda)$. Экспериментальные же значения этих величин в единицах ядерного магнетона $e\hbar/2M_p c$ таковы:

$$\begin{aligned} \mu(p) &= 2,79; & \mu(\Sigma^+) &= 2,5 \pm 0,07; \\ \mu(n) &= -0,95; & \mu(\Lambda) &= -0,73 \pm 0,16. \end{aligned}$$

Небольшое расщепление масс внутри изоспиновых мультиплетов приписывается электромагнитному взаимодействию. Предположение об U -спиновой инвариантности этого взаимодействия приводит к некоторым соотношениям между электромагнитными добавками к массам частиц. Более детальные предположения относительно структуры (по отношению к группе SU_3) электромагнитного взаимодействия адронов приводят к дальнейшим следствиям.

Соответствующие вычисления в принципе не отличаются от выполненных нами в гл. 10, § 1, п. Б, и мы не будем более углубляться в эти вопросы.

§ 10. ОПЕРАТОРЫ КАЗИМИРА

В гл. 7, § 5 мы построили для случая группы $\mathcal{R}_3$ оператор Казимира $\mathbf{J}^2$, коммутирующий со всеми групповыми операторами. Следовательно, по лемме Шура в неприводимом представлении $\mathbf{D}^{(j)}$ этот оператор кратен единичному. Соответствующий множитель равен $j(j+1)$, и индекс представления j можно также рассматривать как индекс, нумерующий собственные значения оператора $\mathbf{J}^2$. В случае группы SU_3 , неприводимые представления которой нумеруются двумя индексами λ и μ , имеется два независимых оператора Казимира — квадратичный и кубический по инфинитезимальным операторам.

Простейший способ построения этих операторов — использовать декартовы обозначения для операторов (11.2), подчеркивающие равноправие трех измерений. Обозначим через $\mathbf{A}_i^j$ матрицу 3×3 вида

$$(\mathbf{A}_i^j)_{kl} = \delta_{ik}\delta_{jl} - \frac{1}{3}\delta_{ij}\delta_{kl}. \quad (11.19)$$

При $i \neq j$ все элементы матрицы $\mathbf{A}_i^j$, кроме $(\mathbf{A}_i^i)_{ij}=1$, равны нулю. При $i=j$ отличие состоит в том, что добавляется матрица $-\frac{1}{3}\delta_{ij}$. Этим обеспечивается равенство нулю следа матрицы $\mathbf{A}_i^j$ при любых i и j . Три диагональные матрицы связаны между собой соотношением $\mathbf{A}_1^1 + \mathbf{A}_2^2 + \mathbf{A}_3^3 = 0$. Таким образом, остается восемь независимых матриц. Соотношение между ними и матрицами (11.2) таково:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_1^2 &= \mathbf{T}_+, & \mathbf{A}_2^1 &= \mathbf{T}_-, & \mathbf{A}_3^3 &= \mathbf{U}_+, \\ \mathbf{A}_3^1 &= \mathbf{U}_-, & \mathbf{A}_3^2 &= \mathbf{V}_+, & \mathbf{A}_1^3 &= \mathbf{V}_-, \\ \mathbf{A}_3^3 &= -\mathbf{Y}, & \mathbf{A}_1^1 - \mathbf{A}_2^2 &= 2\mathbf{T}_z. \end{aligned}$$

Из определения (11.19) следуют перестановочные соотношения

$$[\mathbf{A}_i^j, \mathbf{A}_k^l] = \delta_{jk}\mathbf{A}_i^l - \delta_{il}\mathbf{A}_k^j. \quad (11.20)$$

Исходя из формулы (11.20), нетрудно показать, что оператор $\mathbf{C}_2 = \sum_{i,j} \mathbf{A}_i^j \mathbf{A}_j^i$ коммутирует со всеми $\mathbf{A}_k^l$ и, следова-

тельно, является оператором Казимира. Точно так же оператор $C_3 = \sum_{i,j,k} A_j^k A_i^j A_k^i$ коммутирует со всеми инфинитезимальными операторами, т. е. является вторым оператором Казимира. Такие рассуждения можно было бы продолжить, но все операторы более высокого порядка выражаются через C_2 и C_3 .

Собственные значения операторов C_2 и C_3 в представлении $D^{(\lambda, \mu)}$ можно определить по их действию на старший вектор. К такому же результату привело бы и использование любого другого базисного вектора; выбор старшего вектора диктуется соображениями удобства. С учетом перестановочных соотношений (11.20) мы можем записать C_2 в виде

$$C_2 = \sum_i (A_i^i)^2 + \sum_{i < j} (A_i^i A_j^j + A_j^j A_i^i) = \\ = \sum_i (A_i^i)^2 + \sum_{i < j} (2A_j^i A_i^j + A_i^i - A_j^j).$$

Но для старшего вектора $|\psi\rangle$ выполняется равенство $A_i^j |\psi\rangle = 0$ при $i < j$. Кроме того,

$$A_3^3 |\psi\rangle = -Y |\psi\rangle = -\frac{1}{3}(\lambda + 2\mu) |\psi\rangle, \\ (A_1^1 - A_2^2) |\psi\rangle = 2M_T |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle, \quad A_1^1 + A_2^2 + A_3^3 = 0.$$

Таким образом, окончательно получаем

$$C_2 |\psi\rangle = \left\{ \frac{2}{3}(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu) + 2(\lambda + \mu) \right\} |\psi\rangle. \quad (11.21)$$

Аналогично можно вычислить оператор C_3 . Но удобнее ввести оператор

$$C'_3 = \frac{1}{2} \sum_{ijk} (A_j^k A_i^j A_k^i + A_i^j A_j^k A_k^i) = C_3 + \frac{3}{2} C_2.$$

Его собственное значение в представлении $D^{(\lambda, \mu)}$ дается выражением

$$C'_3 |\psi\rangle = \frac{1}{9}(\lambda - \mu)(2\lambda + \mu + 3)(2\mu + \lambda + 3) |\psi\rangle. \quad (11.22)$$

Собственные значения операторов C_2 и C_3 могут быть использованы для параметризации неприводимых представлений группы SU_3 точно так же, как собственное значение оператора J^2 в случае группы $\mathcal{R}_3$.

ЛИТЕРАТУРА ¹⁾

Таблицы свойств элементарных частиц можно найти в работе
1. Particle data group, Phys. Lett., 50B, 1 (1974).

В качестве введения в физику элементарных частиц рекомендуем книгу

2. Perkins D. H., Introduction to High Energy Physics, Addison Wesley, Reading, Mass., 1972. [Имеется перевод: Перкинс Д. Введение в физику высоких энергий.— М.: Мир, 1975.]

Подробнее о SU_3 -симметрии применительно к физике элементарных частиц см. в книгах

3. Kokedee J. J. J., The Quark Model, Benjamin, New York, 1969. [Имеется перевод: Коккеде Я., Теория кварков.— М.: Мир, 1971.]

4*. Румер Ю. Б., Фет А. И. Теория унитарной симметрии.— М.: Наука, 1970.

Более свежие данные о свойствах элементарных частиц можно найти в работе

5*. Particle Data Group, Rev. Mod. Phys., 52, No. 2, Part II, 1980.

ЗАДАЧИ

11.1. Покажите, что инфинитезимальные операторы группы SU_3 имеют нулевой след.

11.2. Дана произвольная антиэрмитова 3×3 -матрица с элементами X_{ij} . Определите первые три коэффициента a_q в разложении

$$X = \sum_i a_q X_q$$

матрицы X по восьми матрицам (11.1). Покажите, что все a_q действительны.

11.3. Дайте прямое доказательство того, что неприводимые представления группы U_1 параметризуются целыми числами.

11.4. Покажите, что операторы X_6, X_7 и $\frac{1}{2}(-X_3 + \frac{1}{2}X_8)$ порождают подгруппу SU_2 группы SU_3 (U -спиновую подгруппу) и что эрмитов оператор $Q = i(X_3 + \frac{1}{6}X_8)$ коммутирует с ними.

11.5. Постройте весовую диаграмму представления (22) группы SU_3 . Покажите, что его размерность равна 27. Определите значения T и Y для различных базисных векторов этого представления.

11.6. Докажите приведенное в § 6 правило для кратности базисных векторов, соответствующих точкам весовой диаграммы неприводимого представления SU_3 .

Указание: а) верхний ряд диаграммы порождается векторами $(T_-)^n |\psi\rangle$, где $|\psi\rangle$ — старший вектор представления; б) покажите, что следующий ряд может быть образован лишь T -мультиплетом, построенным из векторов $U_- |\psi\rangle$ и $V_+ |\psi\rangle$; в) покажите, что эти векторы независимы только если $\lambda \neq 0$ и $\mu \neq 0$, т. е. диаграмма не треугольная.

¹⁾ Литература, помеченная звездочкой, добавлена при переводе.— Прим. ред.

11.7. Выведите формулу (11.7) для размерности неприводимого представления группы SU_3 . Воспользуйтесь тем, что число точек диаграммы, лежащих на внешнем шестиугольнике, равно $3(\lambda + \mu)$, а также известными кратностями точек на внутренних шестиугольниках и треугольниках диаграммы. [Покажите сначала, что кратность точек треугольников равна $(\mu + 1)$, а число точек на сторонах наибольшего треугольника равно $(\lambda - \mu + 1)$, считая, что $\lambda \geq \mu$.

11.8. Покажите методом, изложенным в § 6, п. Е, что

$$D^{(11)} \otimes D^{(10)} = D^{(21)} \oplus D^{(02)} \oplus D^{(10)},$$

$$D^{(11)} \otimes D^{(30)} = D^{(41)} \oplus D^{(22)} \oplus D^{(30)} \oplus D^{(11)}.$$

Выведите также разложение (11.11.).

11.9. Какими квантовыми числами T , Y и Q обладали бы барионы из мультиплета (22)? Воспользуйтесь результатами задачи 11.5.

11.10. Таким же методом, как в задаче 7.8, вычислите коэффициенты Клебша—Гордана для состояния $|(30) Y=1, T=M_T=3/2\rangle$, которое возникает при разложении произведения $D^{(30)} \otimes D^{(11)}$.

11.11. Покажите, что операторы Казимира C_2 и C_3 из § 10 коммутируют с инфинитезимальными операторами A_i^j .

СУПЕРМУЛЬТИПЛЕТЫ В ЯДРАХ II СУПЕРМУЛЬТИПЛЕТЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ — ГРУППЫ SU_4 И SU_6 . КВАРКОВЫЕ МОДЕЛИ

В гл. 8, где речь шла о строении атома, мы видели, что независимость взаимодействия от спина приводит к группе симметрии $\mathcal{R}_3^S$ и квантовому числу S . Аналогичная ситуация имеет место в ядрах (гл. 10): зарядовая независимость взаимодействия проявляется в наличии изоспиновой SU_2 -симметрии и квантового числа T . В данной главе мы сначала рассмотрим следствия, вытекающие из предположения о том, что ядерные силы не только зарядово-, но и спиново-независимы. Это приведет к объединению групп $\mathcal{R}_3^S$ и SU_2 в группе SU_4 . Перейдя к элементарным частицам, мы аналогичным образом объединим группы SU_3 и $\mathcal{R}_3^S$ в рамках группы SU_6 . После этого мы познакомимся с новейшими гипотезами о составной природе мезонов и барионов как частиц, состоящих из еще более элементарных объектов, названных кварками.

§ 1. ЯДЕРНЫЕ СУПЕРМУЛЬТИПЛЕТЫ

Ядро состоит из A нуклонов, каждый из которых описывается обычными пространственными координатами и, кроме того, имеет четыре независимых внутренних состояния. Это два спиновых состояния с проекциями спинового момента на выделенную ось, равными $\pm 1/2$, и два зарядовых состояния — протон и нейтрон. Эти состояния удобно обозначать символами $p^\uparrow, n^\uparrow, p^\downarrow, n^\downarrow$, где стрелки соответствуют двум спиновым состояниям $\pm 1/2$. В полной аналогии с тем, как в гл. 10, § 1 вводилась группа SU_2 , действующая в линейном пространстве, натянутом на векторы состояния p и n , можно ввести группу унитарных преобразований SU_4 , действующую в пространстве, порожденном состояниями $p^\uparrow, n^\uparrow, p^\downarrow, n^\downarrow$. Если взаимодействие между нуклонами в дополнение к зарядовой независимости не

зависит также и от спина, то полной группой симметрии можно считать группу SU_4 [1]. На самом деле ядерное взаимодействие обнаруживает довольно сильную зависимость от спина, так что SU_4 является лишь группой приближенной симметрии. Тем не менее мы вкратце рассмотрим группу SU_4 и следствия SU_4 -инвариантности. Отчасти это будет подготовкой к изучению SU_6 -симметрии. Как SU_6 , так и SU_4 — это частные случаи группы SU_N , которой посвящена гл. 18 (т. 2).

Группа SU_3 имеет $3^2 - 1 = 8$ параметров, а в группе SU_4 их $4^2 - 1 = 15$. Пятнадцать инфинитезимальных операторов в однонуклонном пространстве имеют вид s_q , t_q и $s_q t_{q'}$, где s и t — обычные одночастичные операторы спина и изоспина, а $q, q' = x, y, z$. Для системы из A нуклонов соответствующие операторы таковы:

$$S_q = \sum_{i=1}^A s_q(i), \quad T_q = \sum_{i=1}^A t_q(i), \quad Y_{qq'} = 2 \sum_{i=1}^A s_q(i) t_{q'}(i).$$

(Заметим, что $Y_{qq'} \neq 2S_q T_{q'}$.) Шесть операторов S_q, T_q порождают подгруппу вида $\mathcal{R}_3^S \times SU_2$ (или, вследствие гомоморфизма между $\mathcal{R}_3$ и SU_2 , подгруппу $SU_2^S \times SU_2^T$). Верхними индексами S и T различаются спиновая и изоспиновая группы SU_2 . (Заметим, что оператор $Y_{qq'}$ не имеет отношения к оператору гиперзаряда Y .)

Свойства неприводимых представлений группы SU_4 можно установить, прямо обобщив все сказанное в гл. 11, § 6 относительно группы SU_3 . Три из пятнадцати инфинитезимальных операторов можно одновременно диагонализировать; обычно для этого выбирают операторы S_z, T_z и Y_{zz} . (Подчеркнем, что в обозначении S_z индекс z относится к направлению в обычном пространстве, а в обозначении T_z — к направлению в абстрактном пространстве, связанном с зарядовой степенью свободы.) Таким образом, в случае группы SU_4 диаграммы, аналогичные изображенным на рис. 11.6, трехмерны, а неприводимые представления обозначаются обычно символом $D^{(P P' P')}$. Здесь P, P' и P'' — собственные значения операторов S_z, T_z и Y_{zz} для базисного вектора с наибольшим весом. Другими словами, P — это максимальное собственное значение M_S оператора S_z , P' — максимальное собственное значение M_T оператора T_z на подпространстве с $M_S = P$, а P'' —

максимальное собственное значение оператора Y_{zz} на подпространстве с $M_S=P$, $M_T=P'$.

Мы не будем пытаться исследовать свойства произвольных неприводимых представлений группы SU_4 , как мы проделали это для группы SU_3 , поскольку это связано со сложными выкладками. (Относительно общего случая группы SU_N см. т. 2, гл. 18.) Вместо этого мы подробно остановимся на простейших представлениях, появляющихся при исследовании систем из двух или трех нуклонов. При этом мы будем пользоваться понятием симметрии вектора состояния относительно перестановок аргументов, а также наличием в группе SU_4 подгруппы $SU_2^S \times SU_2^T$. Последнее означает, что, как говорилось в гл. 4, § 18, любое представление группы SU_4 есть сумма неприводимых представлений $D^{(S)} \otimes D^{(T)}$ группы $SU_2^S \times SU_2^T$. Следовательно, любое представление $D^{(PP'P'')}$ группы SU_4 характеризуется некоторым набором значений S и T и образует «супермультиплет»:

$$D^{(PP'P'')} = \sum_{ST} m_{ST} D^{(S)} \otimes D^{(T)}, \quad (12.1)$$

где m_{ST} — неотрицательные целые числа.

Четыре состояния нуклона порождают пространство, на котором определено действие группы SU_4 , образуя базис ее четырехмерного неприводимого представления $D^{(1/2 \ 1/2 \ 1/2)}$. Так как все четыре состояния имеют $S=T=1/2$, это представление остается неприводимым при сужении на подгруппу $SU_2^S \times SU_2^T$. Таким образом, $D^{(1/2 \ 1/2 \ 1/2)} = D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)}$.

Пространство L внутренних состояний двух нуклонов имеет размерность $4^2=16$. В этом пространстве действует представление группы SU_4 . Однако это представление приводимо, в чем можно убедиться, разложив L на два подпространства L_s и L_a . Эти подпространства состоят из состояний, симметричных и антисимметричных по отношению к перестановкам внутренних координат. Инфинитезимальные операторы группы SU_4 инвариантны по отношению к таким перестановкам и, значит, не смешивают состояний из L_s и L_a . Таким образом, в каждом из подпространств L_s и L_a действует представление группы SU_4 . Чтобы определить структуру этих представлений по отношению к подгруппе $SU_2^S \times SU_2^T$, воспользуемся тем,

что, как показано в гл. 8, § 6, п. Г, состояние с $S=1$ симметрично, а с $S=0$ антисимметрично по отношению к перестановкам спиновых переменных. С учетом аналогичного утверждения для изоспина системы из двух частиц получаем, что при одновременных перестановках спиновых и изоспиновых переменных состояния группируются следующим образом:

$$L_s: \begin{cases} S=1, T=1; \\ S=0, T=0. \end{cases} \quad L_a: \begin{cases} S=1, T=0; \\ S=0, T=1. \end{cases} \quad (12.2)$$

Здесь мы воспользовались тем, что произведение двух нечетных функций есть, очевидно, четная функция и т. д. (т. е. фактически разложением произведения двух неприводимых представлений группы $\mathcal{S}_2$). Учитывая, что размерность представления $D^{(s)}$ равна $(2S+1)$, получаем, что подпространства L_s и L_a имеют размерности 10 и 6. (Как и должно быть, в сумме это дает 16.) На основании общих соображений можно показать, что представления, действующие в пространствах L_s и L_a , неприводимы и имеют тип $D^{(111)}$ и $D^{(100)}$. Таким образом, формула (12.1) принимает вид

$$\begin{aligned} D^{(111)} &= D^{(1)} \otimes D^{(1)} \oplus D^{(0)} \otimes D^{(0)}, \\ D^{(100)} &= D^{(1)} \otimes D^{(0)} \oplus D^{(0)} \otimes D^{(1)}. \end{aligned} \quad (12.3)$$

В качестве примера можно привести состояния

$$\begin{aligned} |T=S=1, M_T=M_S=1\rangle &= p^\uparrow(1) p^\uparrow(2), \\ |T=1, S=0, M_T=1, M_S=0\rangle &= \\ &= \{p^\uparrow(1) p^\downarrow(2) - p^\uparrow(2) p^\downarrow(1)\} / \sqrt{2}, \\ |T=1, S=0, M_T=M_S=0\rangle &= \{p^\uparrow(1) n^\downarrow(2) - p^\uparrow(2) n^\downarrow(1) - \\ &- p^\downarrow(1) n^\uparrow(2) + p^\downarrow(2) n^\uparrow(1)\} / \sqrt{2}. \end{aligned} \quad (12.4)$$

В случае трех частиц мы выполним такую же процедуру, используя теперь, как в гл. 8, § 6, п. Г, некоторые простейшие свойства группы $\mathcal{S}_3$. Всего мы имеем теперь $4^3=64$ состояния, которые порождают векторное пространство L , разлагающееся в сумму $L=L_s+L_{m_1}+L_{m_2}+L_a$ соответственно трем неприводимым представлениям $T^{(s)}$,

$\Gamma^{(m)}$ и $\Gamma^{(a)}$ группы $\mathcal{S}_3$. Поскольку представление $\Gamma^{(m)}$ двумерно, имеются два подпространства L_{m_1} и L_{m_2} , преобразующиеся по отношению к перестановкам как первая и вторая строка матрицы $\Gamma^{(m)}$. Такое разбиение пространства L служит примером применения формулы (4.52), в которую входят проекционные операторы. Перестановочная симметрия операторов группы SU_4 снова предотвращает смешивание четырех вышеуказанных подпространств пространства L при действии на нем этой группы. Таким образом, в каждом из этих подпространств определено представление группы SU_4 . Эти представления также являются неприводимыми. Однако представления, действующие в L_{m_1} и L_{m_2} , эквивалентны, так как операторы перестановки, коммутирующие с действием группы SU_4 , переводят эти подпространства друг в друга. Чтобы описать сужение этих представлений на подгруппу $SU_2^S \times SU_2^T$, мы начнем с утверждения (гл. 8, § 6, п. Г) о том, что состояния трех частиц со спином $1/2$, имеющие полный спин $S=3/2$, полностью симметричны, а состояния с $S=1/2$ имеют смешанный тип симметрии $\Gamma^{(m)}$. Воспользовавшись аналогичным утверждением для изоспина, а также известным разложением на неприводимые представления произведения представлений группы $\mathcal{S}_3$ (гл. 8, § 6, п. Г)

$$\begin{aligned}\Gamma^{(s)} \otimes \Gamma^{(s)} &= \Gamma^{(s)}, \quad \Gamma^{(s)} \otimes \Gamma^{(m)} = \Gamma^{(m)}, \\ \Gamma^{(m)} \otimes \Gamma^{(m)} &= \Gamma^{(s)} \oplus \Gamma^{(m)} \oplus \Gamma^{(a)},\end{aligned}$$

получаем, что по отношению к одновременным перестановкам спиновых и изоспиновых переменных состояния группируются так:

$$\begin{aligned}L_s: & \begin{cases} S = \frac{3}{2}, & T = \frac{3}{2}, \\ S = \frac{1}{2}, & T = \frac{1}{2}, \end{cases} \\ L_m: & \begin{cases} S = \frac{3}{2}, & T = \frac{1}{2}, \\ S = \frac{1}{2}, & T = \frac{3}{2}, \\ S = \frac{1}{2}, & T = \frac{1}{2}, \end{cases} \\ L_a: & S = \frac{1}{2}, \quad T = \frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (12.5)$$

Размерность этих трех представлений равна 20, 20 и 4. Учитывая удвоение представления, действующего в пространстве L_m , имеем $20 + 2 \times 20 + 4 = 64$ — размерность пространства L . Описанные нами представления — это $D^{(3/2 \ 3/2 \ 3/2)}$, $D^{(3/2 \ 1/2 \ 1/2)}$ и $D^{(1/2 \ 1/2 \ -1/2)}$. Формула (12.1) принимает в данном случае вид

$$\begin{aligned} D^{(3/2 \ 3/2 \ 3/2)} &= D^{(3/2)} \otimes D^{(1/2)} \oplus D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)}, \\ D^{(3/2 \ 1/2 \ 1/2)} &= D^{(3/2)} \otimes D^{(1/2)} \oplus D^{(1/2)} \otimes D^{(3/2)} \oplus D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)}, \\ D^{(1/2 \ 1/2 \ -1/2)} &= D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)}. \end{aligned} \quad (12.6)$$

Вернемся теперь к атомному ядру. Если бы сильное взаимодействие было спинowo- и изоспинowo-инвариантным, то группа SU_4 была бы группой симметрии. В этой ситуации мы должны ожидать наличия сильного вырождения, соответствующего размерности d неприводимого представления $D^{(PP'P'')}$ группы SU_4 . Экспериментально такое вырождение не наблюдается; это не так уж неожиданно, если учесть, что ядерные силы, как известно, существенно зависят от спина. Тем не менее SU_4 -симметрия нарушается не полностью. Ярче всего она проявляется при β -распаде самых легких ядер. Оператор, ответственный за этот распад, пропорционален $Y_{qq'}$. Систематика ядерных энергий связи также согласуется с SU_4 -симметрией [2].

Заметим, наконец, что состояния (12.5) с различной перестановочной симметрией должны таким образом комбинироваться с волновыми функциями пространственных координат, чтобы в соответствии с принципом Паули полные волновые функции были антисимметричны. Так, представление $D^{(1/2 \ 1/2 \ -1/2)}$ должно соответствовать симметричным волновым функциям пространственных координат. Это приводит к правилу Хунда для ядер, согласно которому низшим энергиям соответствуют супермультиплеты с меньшими значениями $(PP'P'')$. Доказательство проводится так же, как в гл. 8, § 6, п. Д (для атомов) и в гл. 10, § 1, п. А (для изоспина).

§ 2. СУПЕРМУЛЬТИПЛЕТЫ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЧАСТИЦ

В § 1 мы показали, как различные комбинации значений S и T объединяются в рамках неприводимого представления группы SU_4 . Напомним также (гл. 11, § 7), что октет барионов имеет спин $S=1/2$, а декуплет — спин $S=3/2$. Естественно было бы попытаться расширить произведение групп симметрии $SU_2^S \times SU_3$ до группы SU_6 с тем, чтобы получить вышеупомянутую связь между спином S бариона и SU_3 -мультиплетом ($\lambda\mu$), членом которого он является, в рамках неприводимого представления группы SU_6 . Нам нет нужды подробно останавливаться здесь на свойствах группы SU_6 , так как все необходимое для наших целей мы можем получить, используя метод § 1. (Напомним, что общий случай группы SU_N рассматривается в гл. 18.)

Определим шестимерное пространство, в котором действует группа SU_6 , как тензорное произведение трехмерного пространства представления $D^{(10)}$ группы SU_3 на пространство представления $D^{(1/2)}$ спиновой группы. Ясно, что в этом пространстве определено представление $D^{(1/2)} \times D^{(10)}$ прямого произведения групп $SU_2^S \times SU_3$. То, что спин барионов из табл. 11.1 достигает значения $S=3/2$, означает, что нам необходимо построить произведение по меньшей мере трех фундаментальных представлений группы SU_6 . Такое тройное произведение можно исследовать тем методом, который привел нас к результатам (12.5). Как и ранее, состояния с $S=3/2$ полностью симметричны, а состояния с $S=1/2$ обладают смешанной симметрией $T^{(m)}$. Что же касается группы SU_3 , то на основании сказанного о произведении представлений в гл. 11, § 6, п. Б нетрудно показать, что

$$D^{(10)} \otimes D^{(10)} \otimes D^{(10)} = D^{(30)} \oplus 2D^{(11)} \oplus D^{(00)},$$

причем (задача 12.6) представление $D^{(30)}$ симметрично $D^{(11)}$ обладает смешанной симметрией, а $D^{(00)}$ полностью антисимметрично по отношению к перестановкам SU_3 -перемешанных. Таким образом, комбинируя представления группы SU_3 со спином S , мы получаем результат, анало-

гичный результату (12.5):

$$\begin{aligned}
 L_s: & \begin{cases} S = \frac{3}{2}, & D^{(30)}, \\ S = \frac{1}{2}, & D^{(11)}; \end{cases} \\
 L_m: & \begin{cases} S = \frac{3}{2}, & D^{(11)}, \\ S = \frac{1}{2}, & D^{(30)}, \\ S = \frac{1}{2}, & D^{(11)}, \\ S = \frac{1}{2}, & D^{(00)}; \end{cases} \\
 L_a: & \begin{cases} S = \frac{3}{2}, & D^{(00)}, \\ S = \frac{1}{2}, & D^{(11)}. \end{cases}
 \end{aligned} \tag{12.7}$$

Множеством состояний с одинаковыми свойствами относительно перестановок и в случае группы SU_6 порождается пространство неприводимого представления. Мы видим, что для симметричных состояний, образующих L_s , комбинации спина S с представлениями $(\lambda\mu)$ точно такие же, как и экспериментально наблюдающиеся у барионов. Соответствующее пространству L_s неприводимое представление группы SU_6 имеет размерность $d=6 \times 7 \times 8/1 \times 2 \times 3=56$, что совпадает с суммарной размерностью его $SU_2^S \times SU_3$ -компонент: $(4 \times 10) + (2 \times 8) = 56$. Имеются указания на то, что более тяжелые барионы и резонансы с отрицательной четностью образуют 70-мерное представление группы SU_6 , определенное в пространстве L_m [формула (12.7)]. Не вдаваясь в детали, отметим, что мезоны группируются в 35-plet, соответствующий неприводимому представлению, которое фигурирует в разложении произведения фундаментального шестимерного представления группы SU_6 на его комплексно-сопряженное (см. также § 3).

Группа SU_6 позволяет не только объяснить связь между спином S и мультиплетом $(\lambda\mu)$, но и вывести формулы расщепления масс и соотношения между электромагнитными характеристиками частиц при условии, что сделаны

предположения о трансформационных свойствах соответствующих операторов. Эти соотношения не могут противоречить результатам, полученным на основе SU_3 -симметрии (гл. 11, § 8 и 9), так как SU_3 входит в группу SU_6 в качестве подгруппы. Роль SU_6 -симметрии состоит в том, что она даст новые соотношения в дополнение к полученным ранее на основе SU_3 -симметрии. Мы проиллюстрируем это на примере магнитных моментов барионов. Результаты гл. 11, § 9 говорят о том, что магнитные моменты октета могут быть выражены через две постоянные d и e [формула (11.18)]. Магнитные же моменты декуплета по аналогии с первым равенством формулы (11.14) даются выражением fQ , где f — еще одна постоянная. В случае группы SU_6 простейшее предположение относительно трансформационных свойств оператора магнитного момента состоит в том, что он преобразуется подобно мезонам по 35-мерному представлению и по отношению к подгруппе $SU_2 \times SU_3$ имеет тип $S = 1$, (11) $U = Q = 0$. Теперь мы можем воспользоваться теоремой Вигнера — Экарта применительно к группе SU_6 . Анализ соответствующих произведений представлений, аналогичный разложениям (11.13), показывает, что в выражения для матричных элементов оператора магнитного момента между состояниями из 56-плета входит всего один приведенный матричный элемент. Это значит, что группа SU_6 позволяет выразить магнитные моменты октета и декуплета барионов через одну постоянную вместо трех! В частности, такой подход приводит к значению $\mu_p/\mu_n = -3/2$, что прекрасно согласуется с экспериментальным значением $\mu_p/\mu_n = -1,46$. Мы получим этот результат в § 3, исходя из определенной модели, хотя, конечно, это прямое следствие SU_6 -подхода.

§ 3. ТРЕХКВАРКОВАЯ МОДЕЛЬ

Группы SU_3 и SU_6 были привлечены к описанию элементарных частиц чисто эмпирически, в значительной мере потому, что по своим характеристикам — заряду, гиперзаряду, спину и изоспину — элементарные частицы объединяются в мультиплеты, отвечающие неприводимым представлениям групп SU_3 и SU_6 . При этом барионам соответствуют представления, которые проще всего получают при разложении на неприводимые компоненты

произведения трех простейших нетривиальных представлений $D^{(10)}$ группы SU_3 . Такая же структура обнаруживается и в случае группы SU_6 . Существенные для физики представления содержатся в произведении трех представлений группы SU_6 , отвечающих спину $S=1/2$ и представлению (10) группы SU_3 . До этих пор мысль о построении представления для барионов в виде произведения трех представлений была чисто математической. Но ее логичность позволяет предположить, что и на самом деле барионы состоят из трех фундаментальных объектов со спином $1/2$ и с другими квантовыми числами, соответствующими представлению $D^{(10)}$ группы SU_3 . Такие объекты Гелл-Манн назвал «кварками», взяв (без серьезных оснований) слово «кварк» из поэмы Дж. Джойса «Поминки по Финнегану». Сразу же добавим, что, несмотря на десятилетние поиски, экспериментальных подтверждений существования кварков пока нет. Но это может объясняться тем, что даже самые мощные из использовавшихся до настоящего времени ускорителей, не обеспечивают энергий, необходимых для рождения кварков [3]. Тем не менее вопрос о свойствах кварков в рамках SU_6 -модели, а также о следствиях кварковой модели барионов представляет значительный интерес. Данный параграф посвящен именно этому вопросу.

Из соотношения $Q = M_T + 1/2 Y$, а также из рис. 11.6 следует, что три кварка (их обозначают символами u , d и s), соответствующие представлению $D^{(10)}$, имеют следующие значения T , M_T , Y и Q :

$$\begin{aligned} u: \quad T &= \frac{1}{2}, \quad M_T = \frac{1}{2}, \quad Y = \frac{1}{3}, \quad Q = \frac{2}{3}, \\ d: \quad T &= \frac{1}{2}, \quad M_T = -\frac{1}{2}, \quad Y = \frac{1}{3}, \quad Q = -\frac{1}{3}, \\ s: \quad T &= 0, \quad M_T = 0, \quad Y = -\frac{2}{3}, \quad Q = -\frac{1}{3}. \end{aligned} \quad (12.8)$$

(Вместо u , d и s иногда используются обозначения p , n и λ .) Так как барионы состоят из трех кварков, все кварки должны иметь барионный заряд $B=1/3$. С учетом спина имеется шесть возможных кварковых состояний $u^\uparrow$, $u^\downarrow$, $d^\uparrow$, $d^\downarrow$, $s^\uparrow$, $s^\downarrow$, где стрелки обозначают, как и в § 1, спиновые состояния кварков. Мы сразу же видим, что кварки должны обладать довольно неожиданными свойствами: не только

барионный заряд и гиперзаряд кварка, но и его электрический заряд не являются целыми. Однако это, по-видимому, не может служить возражением против существования кварков, и решающее слово в данном вопросе принадлежит эксперименту. (В § 4 мы познакомимся с более сложной моделью, в которой заряды кварков могут быть целочисленными.) Основываясь на соотношениях (12.8), мы можем приступить к построению волновых функций барионов. В случае группы SU_4 аналогичные волновые функции имели вид (12.4).

Из формулы (12.8) и рис. 11.8 ясно, что волновая функция частицы Δ^{++} с $M_S = 3/2$ есть просто произведение $|\Delta^{++}, M_S = 3/2\rangle = u^\uparrow(1)u^\uparrow(2)u^\uparrow(3)$. (Символ Δ^{++} означает, что у этой частицы $T = 3/2$ и $Y = 1$.) Волновые функции остальных частиц, составляющих декуплет, можно получить при помощи понижающих операторов T_- и U_- . Для построения волновых функций состояний с проекцией M_S , отличной от $3/2$, нужно воспользоваться понижающим оператором S_- . Волновые функции частиц Δ^- и Ω^- , расположенных в двух других вершинах треугольной диаграммы на рис. 11.8, также будут (при $M_S = 3/2$) равны произведениям трех одночастичных кварковых состояний — в первом случае $d^\uparrow$, а во втором — $s^\uparrow$. В случае октета ситуация несколько сложнее. Все же, если обозначить нормированное симметризованное состояние кварков $d^\uparrow, u^\uparrow$ и $u^\uparrow$, через $|d^\uparrow u^\uparrow u^\uparrow\rangle$, то, учитывая значения квантовых чисел M_S, M_T и Y для протона, получаем,

$$|p, M_S = \frac{1}{2}\rangle = \alpha |d^\uparrow u^\uparrow u^\uparrow\rangle + \beta |d^\uparrow u^\uparrow u^\downarrow\rangle. \quad (12.9)$$

Но состояние (12.9) должно обладать свойством $T_+ |p, M_S = 1/2\rangle = 0$, отличающим протон от Δ^+ (рис. 11.8). Используя равенство $T_+ = \sum_{i=1}^3 t_+(i)$ и соотношения $t_+ |u\rangle = 0$ и $t_+ |d\rangle = |u\rangle$, получаем $\alpha = \sqrt{2/3}$, $\beta = -\sqrt{1/3}$. Точно так же для нейтрона имеем

$$|n, M_S = \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}} |u^\downarrow d^\uparrow d^\uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}} |u^\uparrow d^\uparrow d^\downarrow\rangle. \quad (12.10)$$

Теперь, исходя из формул (12.9) и (12.10), можно получить значение $-3/2$ для отношения магнитных моментов протона и нейтрона. Для этого достаточно предположить, что

оператор магнитного момента имеет вид

$$\mu_z = \mu_0 \sum_{i=1}^3 Q(i) s_z(i), \quad (12.11)$$

где индекс i нумерует кварки. Выраженные в единицах ядерного магнетона μ_0 магнитные моменты кварков u , d и s равны $1/3$, $-1/6$ и $-1/6$. Магнитные моменты состояний $|d^\dagger u^\dagger u^\dagger\rangle$ и $|d^\dagger u^\dagger u^\dagger\rangle$ равны $1/6 + 1/3 + 1/3 = 5/6$ и $-1/6 + 1/3 - 1/3 = -1/6$. Таким образом, $\mu_p/\mu_0 = 2/3 \times 5/6 + 1/3 \times (-1/6) = 1/2$ и $\mu_n/\mu_0 = 2/3 \times (-2/3) + 1/3 \times 1/3 = -1/3$. Окончательно получаем $\mu_p/\mu_n = -3/2$. Хотя мы исходили из некоего конкретного выражения для магнитного момента [формула (12.11)], отношения моментов, полученные в результате, такие же и в более общем случае. Их можно вычислить на основе только групповых соображений и предположения о трансформационных свойствах оператора магнитного момента по отношению к группе SU_6 , дополняющего предположение о том, что по отношению к группе SU_3 этот оператор имеет тип $(11)T=Y=0$. (В обозначениях т. 2, гл. 18 соответствующее представление группы SU_6 есть представление $[2\ 1\ 1\ 1\ 1]$, которое получается из фундаментального представления $[1]$ и ему комплексно-сопряженного представления $[1]^* = [1\ 1\ 1\ 1\ 1]$.) Выраженный в единицах μ_0 магнитный момент резонанса Δ^{++} равен $+1$, а постоянные d , e и f [см. формулу (11.18) и конец § 2] таковы: $d = 1/3\mu_0$, $e = -1/3\mu_0$, $f = 1/2\mu_0$.

Если ввести антикварки, отвечающие представлению $D^{(01)} = (D^{(10)})^*$, то 35-мерное представление группы SU_6 будет соответствовать мезонам, составленным из кварка и антикварка. В подгруппе $SU_2 \times SU_3$ такие пары порождают следующие состояния:

$$(D^{(1/2)} \otimes D^{(10)}) \otimes (D^{(1/2)} \otimes D^{(01)}) = D^{(1)} \otimes (D^{(11)} \oplus D^{(00)}) \oplus \oplus D^{(0)} \otimes (D^{(11)} \oplus D^{(00)}).$$

Этот результат получен с использованием равенства, предшествующего формуле (11.11), и обычной формулы для произведения представлений группы SU_2 . Можно показать, что состояние $D^{(0)} \otimes D^{(00)}$ есть SU_6 -скаляр, а оставшиеся 35 состояний образуют неприводимое представление (в обозначениях гл. 18 представление $[2\ 1\ 1\ 1\ 1]$) группы SU_6 . Эти последние состояния обладают требуемыми кван-

товыми числами. А именно, они образуют октет и синглет с $S=1$ и октет с $S=0$. Скалярный октет рассматривался в гл. 11, § 7. Октет с $S=1$ содержит φ -, ρ - и K^* -мезоны, а синглет соответствует ω -мезону.

Познакомившись с положительной стороной кварковой модели, обратимся теперь к связанным с ней трудностям. В столкновениях элементарных частиц при энергиях, достигнутых на современных ускорителях, кварки до сих пор не наблюдались. Это говорит о том, что масса кварка должна быть больше 5000 МэВ. Так как массы барионов — порядка всего лишь 1000 МэВ, энергия связи кварков должна быть колоссальной: более 14 000 МэВ. Учитывая, что ядерные энергии связи имеют порядок 10 МэВ, следует считать, что между кварками действуют силы притяжения, во много раз превышающие силы между нуклонами. Взаимодействие, ответственное за такие силы, называют сверхсильным. Возможно, однако, что по какой-то пока не известной причине кварки не могут рождаться как физические частицы, и в этом случае их массы не обязаны быть столь велики ¹⁾. Такое предположение подтверждается некоторыми данными, но мы здесь не будем подробно останавливаться на этом (см., например, [3]).

Если взаимодействие между кварками является сверхсильным, то волновая функция трех кварков в барионе должна быть симметричной относительно пространственных координат аналогично волновой функции трех нуклонов в ядре ${}^3\text{He}$ или четырех нуклонов в α -частице. Но если мы примем это предположение, то с учетом симметричности волновой функции по отношению к SU_6 -переменным [формула (12.7)] получим, что полная волновая функция симметрична. Однако, так как спин кварков равен $1/2$, они должны подчиняться статистике Ферми — Дирака и, следовательно, полная волновая функция должна быть антисимметричной. В рамках трехкварковой модели единственный выход из этой ситуации заключается в предположении, что кварки подчиняются статистике, промежуточной между статистикой Ферми — Дирака и статистикой Бозе — Эйнштейна. Такая статистика получила название «парастатистики». Возможность парастатистики

¹⁾ В настоящее время господствующей является именно такая точка зрения.— *Прим. ред.*

не исключается теоремой о связи спина со статистикой (т. 2, гл. 16, § 3, п. Г). В нашей ситуации необходимо предположить, что кварки являются «парафермионами третьего ранга». Это значит, что их волновые функции могут быть симметричными по отношению не более чем к трем частицам. (При такой терминологии обычные фермионы — это парафермионы первого ранга.) ¹⁾

Если к кваркам, составляющим барион, применить нерелятивистскую квантовую механику, то можно предположить, что они ведут себя подобно нуклонам в ядре. Относительно последних известно, что они хорошо описываются моделью движения частиц в потенциальной яме с центром, совпадающим с центром масс нуклона. Простейшим приближением для потенциала в такой модели является потенциал гармонического осциллятора. Такое приближение в рамках кварковой модели привело в ряде случаев к весьма хорошим результатам. Проиллюстрируем это на следующем примере. Основное состояние бариона должно соответствовать конфигурации $(1s)^3$ — все три кварка находятся в состоянии $(1s)$. Такая ситуация должна иметь место для всех частиц, отвечающих 56-плету. Возбужденные состояния проще всего построить, помещая один из кварков на уровень $(1p)$. В результате получается конфигурация $(1s)^2(1p)$ с угловым моментом $L=1$ и отрицательной четностью. Такой конфигурации могут соответствовать состояния, имеющие по отношению к перестановкам пространственных координат частиц тип $T^{(s)}$ или $T^{(m)}$. [Ясно, что состояние с двумя кварками на орбите $(1s)$ не может иметь тип $T^{(a)}$.] Но оказывается, что состояние типа $T^{(s)}$ неприемлемо, так как оно отличается от основного состояния $(1s)^3$ только движением центра масс бариона и не соответствует новому внутреннему состоянию. (Такой неоднозначностью приходится расплачиваться за простоту нашей «оболочечной модели».) Таким образом, орбитальные волновые функции первого возбужденного состояния имеют тип $T^{(m)}$. Если теперь предположить, что полная волновая функция возбужденного состояния бариона снова полностью симметрична, то по отношению к SU_6 -переменным она должна иметь тип $T^{(m)}$. Из формулы (12.7)

¹⁾ Сейчас считается, что кварки обладают «цветом» (§ 4). В этом случае нет необходимости в парастатистике. — *Прим. ред.*

явствует, что таким типом симметрии обладает 70-мерное представление группы SU_6 . Таким образом, должен существовать набор возбужденных состояний с отрицательной четностью и орбитальным моментом $L=1$, который в комбинации со значениями спина S , приведенными для представления $\Gamma^{(m)}$ в формуле (12.7), должен, как обычно, давать $J=(L+S)$, $\dots$, $|L-S|$. Другими словами, мы должны обнаружить: 1) декуплет с $J=1/2$ и $3/2$; 2) октет с $J=1/2$, $3/2$ и $5/2$; 3) октет с $J=1/2$ и $3/2$; 4) синглет с $J=1/2$ и $3/2$. Экспериментальные данные в области масс от 1405 до 1710 МэВ действительно имеют такую структуру. Мы не привели эти данные в табл. 11.1, не желая усложнять ее.

§ 4. ДЕВЯТИКВАРКОВАЯ МОДЕЛЬ

Многие из трудностей трехкварковой модели могут быть устранены, если сделать дополнительные предположения о свойствах кварков. Наиболее перспективная модель такого типа заключается в следующем. Принимается, что в дополнение к спиновой степени свободы и трем состояниям u , d и s кварк имеет новые степени свободы, описываемые тремя состояниями a , b и c , соответствующими еще одной группе SU_3 , которую мы обозначим через SU'_3 . (Состояния a , b и c часто называют «цветовыми» состояниями кварка.) Таким образом, не считая спиновых, имеется девять внутренних состояний кварка: $u_a, u_b, u_c, d_a, d_b, d_c, \dots$ и т. д. Теперь при построении полной волновой функции бариона, составленного из трех кварков, мы должны учитывать наличие степеней свободы, связанных с группой SU'_3 . Проще всего предположить, что по отношению к цветовым переменным состояния полностью антисимметричны. В этом случае использование симметричных SU_6 -состояний, описанных в § 3, приводит к антисимметричной полной волновой функции, что согласуется со статистикой Ферми — Дирака для кварков. Единственным полностью антисимметричным SU'_3 -состоянием является синглет $D^{(00)}$ (§ 2), так что классификация (12.7) барионов по представлениям группы SU_6 сохраняется. Допустив наличие неоднородных представлений группы SU'_3 , мы пришли бы к противоречию, так как в этом случае теория предсказывала бы множество ненаблюдаемых барионов. Чтобы объяснить, почему наблюдаемым барионам

соответствуют лишь синглетные представления группы SU'_3 , нужно потребовать, чтобы гамильтониан сильного взаимодействия содержал член, зависящий от цветных переменных и обеспечивающий минимальность энергии синглетных состояний. Построить оператор с требуемыми свойствами нетрудно. В качестве него можно взять оператор Казимира S_2 [формула (11.21)]. В этом случае другим возможным представлениям группы SU'_3 , таким, как $D^{(11)}$, должны соответствовать гораздо большие энергии. Ввиду того, что мы имеем дело со сверхсильным взаимодействием, неудивительно, что эти возбужденные SU'_3 -состояния до сих пор не наблюдались.

Второе преимущество девятикварковой модели состоит в том, что она объясняет существование трехкварковых систем (барионов), кварк-антикварковых систем (мезонов) и отсутствие в то же время связанных систем, состоящих из двух кварков или из четырех кварков и одного антикварка. В рамках же трехкварковой модели это было загадкой. Разница здесь заключается в наличии в девятикварковой модели большего числа возможных состояний. Это позволяет выбрать вид взаимодействия таким образом, чтобы в одних случаях между кварками действовали силы притяжения, а в других — силы отталкивания, обеспечивая возможность образования связанных состояний только в исключительных случаях, в синглетных по цвету состояниях.

Еще одно преимущество девятикварковой модели — то, что заряд и гиперзаряд кварков можно теперь сделать целым. Это достигается тем, что вместо формулы $Q = M_T + +1/2 Y$ (гл. 11, § 1) мы можем написать $Q = M_T + +1/2 Y + X$, где X — собственное значение одного из инфинитезимальных операторов группы SU'_3 , аналогичного операторам Y и Q для группы SU_3 . В синглетном представлении группы SU'_3 мы имеем $X = 0$. Следовательно, для наблюдаемых состояний $Q = M_T + +1/2 Y$. Однако для других представлений группы SU'_3 величина $X \neq 0$. В частности, мы можем выбрать оператор X таким образом, чтобы для кварков величина X в u -, d - и s -состояниях была равна $1/3$, $1/3$ и $-2/3$. Из соотношения (12.8) получаем теперь следующие значения зарядов девяти кварков: 1, 1, 0, 0, 0, -1 , 0, 0, -1 .

Подчеркнем, что большая часть изложенного в данном параграфе носит спекулятивный характер, так как все

известные частицы отвечают синглетному представлению группы SU_3 ¹⁾. Однако косвенным подтверждением истинности девятикварковой модели является то, что идейно она связана со многими направлениями, включая сюда и возможность объединения слабого и электромагнитного взаимодействия [3]. Вышеизложенным хорошо иллюстрируется роль симметрии в физике. Симметрия позволяет построить ряд возможных теорий для описания реального мира. Для того же, чтобы определить, какая из них (если какая-либо вообще) соответствует действительности, мы должны подождать результатов эксперимента.

§ 5. ОЧАРОВАНИЕ

Для объяснения неизвестного ранее правила отбора, выполняющегося в некоторых слабых взаимодействиях, было предложено простое обобщение кварковой модели. Предполагается, что существует четвертый кварк s , являющийся SU_3 -синглетом с $T=Y=0$ и отличающийся от кварков u , d и s наличием нового квантового числа, названного «очарованием». Если обозначить новое квантовое число символом C , то для нового кварка $C=1$, а для кварков u , d и s мы имеем $C=0$. Заряд s -кварка должен совпадать с зарядом u -кварка, т. е. он равен $\frac{2}{3}e$. Таким образом, соотношение, связывающее заряд с проекцией изоспина, принимает вид $Q=M_T+1/2Y+2/3C$. Опять-таки, понятие очарования выглядит как чисто спекулятивное, но если это не так, то должны существовать новые адроны. Они должны классифицироваться по представлениям группы SU_4 , которая вместе с четвертым кварком приходит на смену группе SU_3 . Кроме ранее известных адронов должны быть и очарованные, т. е. адроны с $C \neq 0$. Если новый кварк тяжелее остальных, то очарованные адроны также должны быть тяжелее. Этим объяснилось бы, почему они до сих пор не наблюдались. Заметим, однако, что имеются указания на то, что некоторые новые частицы, обнаруженные в начале 1975 г., можно интерпретировать либо как очарованные, либо как возбужденные состояния цветовых степеней свободы [3]²⁾.

1) Наличие цвета у кварков в настоящее время — общепринятая точка зрения. — *Прим. ред.*

2) В последнее время был обнаружен целый ряд частиц, в состав которых входят очарованные кварки. — *Прим. ред.*

ДОБАВЛЕНИЕ, СДЕЛАННОЕ В СЕРЕДИНЕ 1978 г.

Хотя кварки до сих пор не обнаружены [4], последние эксперименты, а также теоретические работы говорят в пользу кварковой модели адронов, включающей цветовые степени свободы. Возможность приписать кваркам целочисленные заряды, о которой упоминалось в § 4, не получила перевеса над гипотезой дробных зарядов [формула (12.8)]. Но она и не исключается полностью. По аналогии с электродинамикой теория, описывающая взаимодействие между цветными объектами, называется хромодинамикой. Частица, аналогичная фотону в электродинамике, называется глюоном. Все составляющие адрона именуются «партонами». Для описания кварковых состояний u , d , s и c был введен термин «аромат». Таким образом, внутренние состояния кварков описываются векторами прямого произведения пространства ароматов и пространства цветов. В качестве же группы симметрии используется группа $SU_4 \times SU_3$. Однако кварковая картина все еще далека от завершения: открытие U -мезона делает необходимым увеличение числа ароматов до пяти, а, возможно, и до шести. Два новых гипотетических кварка получили названия b - и t -кварков.

ЛИТЕРАТУРА

Относительно ядерных супермультиплетов можно рекомендовать раннюю работу

1. *Wigner E. P., Feenberg E.*, Rep. Prog. Phys., 8, 274 (1944) и анализ более позднего времени

2. *Franzini P., Radicati L. A.*, Phys. Rev. Lett., 6, 322 (1963).

Применение группы SV_6 в физике элементарных частиц рассматривается в работах [2, 3] из литературы к гл. 11. Прекрасный обзор по новым частицам дан в работе

3. *Coldhaber A. S., Smith J.*, Rep. Prog. Phys., 38, 731 (1975).

В этом обзоре затронуты вопросы существования кварков, имеется большая библиография по кварковым моделям, а также рассматриваются вопросы, связанные с цветом и очарованием.

4*. *Jones L. W.*, Rev. Mod. Phys., 49, 717 (1977).

5*. *Nucl. Phys.*, A152, 32 (1970).

ЗАДАЧИ

12.1. Обобщая формулы (11.1), выпишите в базисе $p^\uparrow, n^\uparrow, p^\downarrow, n^\downarrow$ пятнадцать эрмитовых 4×4 -матриц. Представьте их в виде линейных комбинаций операторов s_q, t_q и $Y_{qq} = s_q t_{q'}$.

- 12.2. С учетом свойств спиновых матриц s_q и t_q покажите, что $[S_x, Y_{xq}] = 0$, $[S_x, Y_{yq}] = iY_{zq}$, $[Y_{xy}, Y_{yz}] = 0$, $[Y_{xy}, Y_{xz}] = it_x$.
- 12.3. Выписав соответствующие произведения одночастичных векторов состояния, покажите, что значения $(PP'P'')$ для трех представлений группы SU_4 [формула 12.5)] таковы: $(\frac{3}{2} \frac{3}{2} \frac{3}{2})$, $(\frac{3}{2} \frac{1}{2} \frac{1}{2})$ и $(\frac{1}{2} \frac{1}{2} -\frac{1}{2})$.
- 12.4. Рассуждая так, как в гл. 8, § 6, п. Д; гл. 10, § 1, п. А и гл. 12, § 1, покажите, что в ядре с тремя валентными нуклонами на p -орбитах низшие состояния с $T = \frac{1}{2}$ в случае LS -связи должны иметь $S = \frac{1}{2}$ с $L = 1$ или $L = 3$, тогда как низшие состояния с $T = \frac{3}{2}$ имеют $S = \frac{1}{2}$ с $L = 1$ или $L = 2$.
- 12.5. Методом, изложенным в гл. 11, § 6, докажите, что $D^{(10)} \otimes D^{(20)} = D^{(30)} \oplus D^{(11)}$, и выведите отсюда, что $D^{(10)} \otimes D^{(10)} \otimes D^{(10)} = D^{(30)} \oplus 2D^{(11)} \oplus D^{(00)}$.
- 12.6. Покажите, что в предыдущей задаче представление $D^{(00)}$ полностью антисимметрично, $D^{(30)}$ полностью симметрично, а $D^{(11)}$ обладает смешанной симметрией по отношению к перестановкам сомножителей.
- 12.7. Пользуясь методами, изложенными в § 3, постройте кварковые волновые функции для Σ^+ - и Λ -частиц. Рассматривайте только состояния с $M_S = \frac{1}{2}$.

ОГЛАВЛЕНИЕ

Предисловие редакторов перевода	5
Предисловие к первому тому	7
Глава 1. Введение	11
§ 1. Роль симметрии в физике	11
§ 2. Примеры проявления симметрии	13
§ 3. Заключение	20
Глава 2. Группы и их свойства	21
§ 1. Определение группы	21
§ 2. Примеры групп	23
§ 3. Изоморфизм	30
§ 4. Подгруппы	31
§ 5. Прямое произведение групп	32
§ 6. Сопряженные элементы и классы	33
§ 7. Примеры классов	34
§ 8. Классы произведения групп	37
§ 9. Теорема о перечислении групп	38
Литература	38
Задачи	39
Глава 3. Линейная алгебра и векторные пространства	40
§ 1. Линейные векторные пространства	40
§ 2. Примеры линейных векторных пространств	45
§ 3. Линейные операторы	48
§ 4. Умножение и преобразование операторов, обратный оператор	51
§ 5. Сопряженный оператор, унитарные и эрмитовы операторы	53
§ 6. Определение собственных значений	55
§ 7. Индуцированные преобразования функций	56
§ 8. Примеры линейных операторов	59
Литература	63
Задачи	64
Глава 4. Представления групп	65
§ 1. Определение представления группы	65
§ 2. Матричные представления	66

§ 3. Примеры представлений	67
§ 4. Построение инвариантных подпространств	71
§ 5. Неприводимость	74
§ 6. Эквивалентные представления	77
§ 7. Неэквивалентные неприводимые представления	80
§ 8. Свойства ортогональности неприводимых представлений	81
§ 9. Характеристики представлений	88
§ 10. Соотношение ортогональности для характеристик неприводимых представлений	89
§ 11. Приведение представления с использованием характеристик групп	91
§ 12. Критерий неприводимости	92
§ 13. Число неэквивалентных неприводимых представлений, регулярное представление	93
§ 14. Второе соотношение ортогональности для характеристик групп	96
§ 15. Построение таблицы характеристик	97
§ 16. Ортогональность базисных функций неприводимых представлений	98
§ 17. Прямое произведение двух представлений	100
§ 18. Разложение неприводимого представления при сведении к подгруппе	104
§ 19. Проекционные операторы	106
§ 20. Неприводимые наборы операторов и теорема Вигнера — Экарта	111
§ 21. Представления прямого произведения групп	116
Литература	118
Задачи	118

Глава 5. Симметрия в квантовой механике 120

§ 1. Краткий обзор основных понятий квантовой механики	120
§ 2. Симметрия в квантовой системе	125
§ 3. Вырождение и классификация по симметрии собственных значений и собственных функций	126
§ 4. Правила отбора и матричные элементы операторов	128
§ 5. Законы сохранения	130
§ 6. Примеры	131
§ 7. Теория групп и вариационный метод	136
§ 8. Нарушение симметрии при возмущении	139
§ 9. Неразличимость частиц	143
§ 10. Комплексное сопряжение и обращение времени	145
Литература	146
Задачи	146

Глава 6. Молекулярные колебания 148

§ 1. Гармоническое приближение	149
--	-----

§ 2. Классическое решение	151
§ 3. Квантомеханическое решение	152
§ 4. Роль симметрии в молекулярных колебаниях	153
§ 5. Классификация нормальных мод	156
§ 6. Колебательные энергетические уровни и волновые функции	161
§ 7. Инфракрасные спектры поглощения и спектры комбинационного рассеяния молекул	165
§ 8. Картина смещений и частоты нормальных колебаний	168
Литература	170
Задачи	171

Глава 7. Непрерывные группы и их представления, группы вращений $\mathcal{R}_2$ и $\mathcal{R}_3$ 172

§ 1. Общие замечания	172
§ 2. Инфинитезимальные операторы	174
§ 3. Группа $\mathcal{R}_2$	179
§ 4. Группа $\mathcal{R}_3$	184
§ 5. Оператор Казимира	203
§ 6. Двухзначные представления	205
§ 7. Комплексно-сопряженное представление	208
Литература	209
Задачи	210

Глава 8. Угловой момент и группа $\mathcal{R}_3$, приложение к структуре атома 212

§ 1. Вращательная инвариантность и ее следствия	212
§ 2. Орбитальный угловой момент системы частиц	214
§ 3. Сложение угловых моментов	216
§ 4. Внутренний спин	218
§ 5. Атом водорода	226
§ 6. Строение многоэлектронных атомов	231
Литература	247
Задачи	248

Глава 9. Точечные группы и их применение в теории кристаллического поля 249

§ 1. Операции точечной группы и обозначения	250
§ 2. Стереопроекция	251
§ 3. Перечисление точечных групп	253
§ 4. Структура классов точечных групп	260
§ 5. Кристаллографические точечные группы	265
§ 6. Неприводимые представления точечных групп	267
§ 7. Двухзначные представления точечных групп	270
§ 8. Обращение времени и магнитные точечные группы	273
§ 9. Расщепление атомных уровней в кристаллическом поле	275
Литература	286
Задачи	287

Глава 10. Изоспин и группа SU_2	289
§ 1. Изоспин в ядрах	290
§ 2. Изоспин и элементарные частицы	302
§ 3. Изоспиповая симметрия и зарядовая независи- мость	304
Литература	305
Задачи	305
Глава 11. Группа SU_3 и приложения к элементарным части- цам	307
§ 1. Некоторые сведения об элементарных час- тицах	308
§ 2. Гиперзаряд	313
§ 3. Барнионный заряд	314
§ 4. Группа SU_3	315
§ 5. Подгруппы группы SU_3	316
§ 6. Неприводимые представления группы SU_3	317
§ 7. Классификация адронов по SU_3 -мультипле- там	330
§ 8. Формула расщепления масс	332
§ 9. Электромагнитные эффекты	336
§ 10. Операторы Казимира	338
Литература	340
Задачи	340
Глава 12. Супермультиплеты в ядрах и супермультиплеты элементарных частиц — группы SU_4 и SU_6 . Квар- ковые модели	342
§ 1. Ядерные супермультиплеты	342
§ 2. Супермультиплеты элементарных частиц	348
§ 3. Трехкварковая модель	350
§ 4. Девятикварковая модель	356
§ 5. Очарование	358
Литература	359
Задачи	359