

*Дж.Эллиот, П.Добер*  
**СИММЕТРИЯ В ФИЗИКЕ. Т.2**

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 ко второму тому                                                    | 5          |
| <b>Глава 13. Электронные состояния в молекулах</b>                             | <b>7</b>   |
| § 1. Линейные комбинации атомных орбиталей (метод ЛКАО)                        | 8          |
| § 2. Примеры                                                                   | 11         |
| § 3. Правила отбора для электронных возбуждений в молекулах                    | 15         |
| Литература                                                                     | 16         |
| Задача                                                                         | 16         |
| <b>Глава 14. Симметрия в кристаллических твердых телах</b>                     | <b>17</b>  |
| § 1. Трансляционная симметрия в кристаллах                                     | 17         |
| § 2. Группа трансляций $\mathcal{T}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ | 19         |
| § 3. Зона Брютлюэна и некоторые примеры                                        | 21         |
| § 4. Электронные состояния в периодическом потенциале                          | 23         |
| § 5. Колебания решетки                                                         | 39         |
| § 6. Спиновые волны в ферромагнетиках                                          | 46         |
| § 7. Экситоны в диэлектриках (экситоны Френкеля)                               | 49         |
| § 8. Правила отбора при рассеянии                                              | 50         |
| § 9. Пространственные группы                                                   | 51         |
| Литература                                                                     | 62         |
| Задачи                                                                         | 63         |
| <b>Глава 15. Пространство и время</b>                                          | <b>64</b>  |
| § 1. Евклидова группа $\mathcal{E}_3$                                          | 65         |
| § 2. Группа Лоренца $\mathcal{L}$                                              | 78         |
| § 3. Группа Лоренца с пространственными отражениями — группа $\mathcal{L}_s$   | 94         |
| § 4. Трансляции и группа Пуанкаре $\mathcal{P}$                                | 98         |
| § 5. Группа Пуанкаре с пространственной инверсией $\mathcal{P}_s$              | 115        |
| § 6. Группа Пуанкаре с отражением времени $\mathcal{P}_t$                      | 118        |
| § 7. Интерпретация неприводимых представлений группы Пуанкаре                  | 119        |
| § 8. Одночастичные волновые функции и волновые уравнения                       | 139        |
| Литература                                                                     | 161        |
| Задачи                                                                         | 162        |
| <b>Глава 16. Частицы, поля и античастицы</b>                                   | <b>164</b> |

|                                                                                                                                  |            |
|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| § 1. Классическая механика частиц                                                                                                | 165        |
| § 2. Классическая механика полей                                                                                                 | 170        |
| § 3. Квантованные поля                                                                                                           | 175        |
| Литература                                                                                                                       | 205        |
| Задачи                                                                                                                           | 206        |
| <b>Глава 17. Группа перестановок <math>\mathfrak{S}_n</math></b>                                                                 | <b>208</b> |
| § 1. Циклы                                                                                                                       | 209        |
| § 2. Четность перестановки                                                                                                       | 211        |
| § 3. Классы сопряженных элементов                                                                                                | 212        |
| § 4. Тривиальное и антисимметричное представления, симметричные и антисимметричные функции                                       | 214        |
| § 5. Таблица характеров неприводимых представлений                                                                               | 216        |
| § 6. Схемы Юнга                                                                                                                  | 220        |
| § 7. Ограничение группы $\mathfrak{S}_n$ на подгруппу $\mathfrak{S}_{n-1}$                                                       | 221        |
| § 8. Базисные векторы неприводимых представлений                                                                                 | 222        |
| § 9. Примеры базисных векторов и матриц представления                                                                            | 225        |
| § 10. Прямое произведение двух представлений                                                                                     | 227        |
| § 11. Внешнее произведение двух неприводимых представлений                                                                       | 229        |
| § 12. Ограничение на подгруппу и внешнее произведение                                                                            | 233        |
| § 13. Канонический вид матриц неприводимых представлений                                                                         | 236        |
| § 14. Оператор $\sum_{i < j} T(P_{ij})$ класса сопряженных элементов                                                             | 242        |
| Литература                                                                                                                       | 243        |
| Задачи                                                                                                                           | 243        |
| <b>Глава 18. Унитарная группа <math>U_N</math></b>                                                                               | <b>245</b> |
| § 1. Неприводимые представления группы $U_N$                                                                                     | 246        |
| § 2. Некоторые примеры                                                                                                           | 260        |
| § 3. Последовательность подгрупп $U_N \rightarrow U_{N-1} \rightarrow U_{N-2} \rightarrow \dots \rightarrow U_2 \rightarrow U_1$ | 252        |
| § 4. Система нумерации базисных векторов                                                                                         | 255        |
| § 5. Прямое произведение представлений группы $U_N$                                                                              | 256        |
| § 6. Ограничение представлений с группы $U_N$ на ее подгруппу $SU_N$                                                             | 258        |
| § 7. Частные случаи: группы $SU_2$ , $SU_3$ и $SU_4$                                                                             | 262        |
| § 8. Инфинитезимальные операторы группы $U_N$                                                                                    | 264        |
| § 9. Комплексно-сопряженные представления групп $U_N$ и $SU_N$                                                                   | 266        |
| § 10. Применение группы $U_N$ к классификации многочастичных волновых функций                                                    | 268        |
| § 11. Характеры                                                                                                                  | 277        |
| § 12. Интегрирование по группе и ортогональность                                                                                 | 279        |
| § 13. Группы $SU_2$ $\mathcal{R}_3$                                                                                              | 281        |
| Литература                                                                                                                       | 288        |
| Задачи                                                                                                                           | 289        |
| <b>Глава 19. Потенциал гармонического осциллятора и кулоновски и</b>                                                             | <b>290</b> |

|                                                                               |            |
|-------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>потенциал— два примера «случайного» вырождения</b>                         |            |
| § 1. Трехмерный гармонический осциллятор, одно-частичный случай               | 291        |
| § 2. Трехмерный гармонический осциллятор, многочастичный случай               | 298        |
| § 3. Гармонический осциллятор в $n$ измерениях                                | 300        |
| § 4. Группа симметрии кулоновского потенциала                                 | 301        |
| Литература                                                                    | 306        |
| Задачи                                                                        | 307        |
| <b>Глава 20. Дополнительные сведения (отдельные вопросы)</b>                  | <b>308</b> |
| § 1. Неинвариантные группы                                                    | 308        |
| § 2. Эффект Яна — Теллера и спонтанное нарушение симметрии                    | 313        |
| § 3. Нормальные подгруппы, полупрямые произведения и малые группы             | 320        |
| § 4. Классификация групп Ли                                                   | 325        |
| § 5. Матрицы вращений                                                         | 339        |
| Литература                                                                    | 343        |
| Задачи                                                                        | 344        |
| Приложение 1. Таблицы характеров неприводимых представлений<br>точечных групп | 345        |
| Приложение 2. Решения задач тома 1                                            | 354        |
| Приложение 3. Дополнительные сведения по теории представлений                 | 360        |
| § 1. Симметризованные произведения представлений                              | 360        |
| § 2. Разложение произведения представлений с помощью подгруппы                | 364        |
| § 3. Умножение классов сопряженных элементов                                  | 366        |
| Приложение 4. Некоторые формулы, относящиеся к группе $\mathcal{R}_3$         | 368        |
| § 1. Интеграл от произведения трех сферических гармоник                       | 368        |
| § 2. Теорема сложения сферических гармоник                                    | 369        |
| § 3. Интегрирование на группе                                                 | 370        |
| Приложение 5. Методы расчета атомной структуры                                | 377        |
| § 1. Энергии термов для конфигураций $p^2$ и $p^3$                            | 377        |
| § 2. Коэффициенты связи (6j- и 9j- символы)                                   | 382        |
| § 3. Интенсивности переходов                                                  | 387        |
| § 4. Потенциал кристаллического поля                                          | 390        |
| § 5. Вычисление относительных расщеплений                                     | 392        |
| Задачи к приложениям 4 и 5                                                    | 395        |
| Приложение 6. Решения задач к тому 2                                          | 397        |
| Предметный указатель                                                          | 402        |

#### Предметный указатель <sup>1)</sup>

Первая цифра — номер тома, а следующие — номер страницы

|                                   |                           |
|-----------------------------------|---------------------------|
| Абелева группа 1—22               | Сопряженное представление |
| Адиабатическое приближение 2—313  | Атомная орбиталь 2—8      |
| Адрон 1—302                       | Барионный заряд 1—314     |
| Алгебра $Li$ 2—326                | Бесконечная группа 1—22   |
| Античастица 1—309, 2—186          | Елоховское состояние 2—24 |
| Аромат 1—359                      | Бозон 1—44                |
| Ассоциированное представление см. | Боровский радиус 2—301    |

- Буст 2—82
- Валентный электрон 1—235
- Вектор *Рунге* — *Ленца* 2—301
  - старшего веса 1—188
- Векторный потенциал 2—168
- Вес базисного вектора 2—265
- Весовая функция 1—173
- Внешнее произведение
  - представлений 2—230
- Внутреннее произведение см.
  - Скалярное произведение
- Внутренний угловой момент см.
  - Спив
- Внутренняя четность частицы 2—127, 189
- Времениподобный вектор,
  - отрицательный 2—84
  - — положительный 2—84
- Выбор калибровки 2—170
- Галилеева инвариантность 2—89
- Гамильтониан 2—166
- Гейзенберговская картина 2—180
- Гиперзаряд 1—309, 313
- Глюон 1—359
- Гомоморфные группы 1—31
- Группа 1—21
  - вращений  $\mathcal{R}_2$  1—28
  - —  $\mathcal{R}_3$  1—28
  - диэдра  $D_n$  1—253, 254
  - икосаэдра  $Y$  1—257
  - *Лоренца*  $\mathcal{L}$  2—81
  - — расширенная  $\mathcal{L}_s$  2—81
  - —  $\mathcal{L}_t$  2—81
  - —  $\mathcal{L}_{st}$  2—81
  - *Ли* 1—173
  - октаэдра  $O$  1—256
  - — полная  $O_h$  1—259, 260
  - ортогональная полная  $O_3$  1—33, 185
  - перестановок  $\mathcal{S}_n$  2—208
  - *Пуанкаре*  $\mathcal{P}$  2—101
  - — расширенная  $\mathcal{P}_s$  2—115
  - — —  $\mathcal{P}_t$  2—118
  - — —  $\mathcal{P}_{st}$  2—138
  - *Пьера Кюри* см. Предельная группа
  - симплектическая  $Sp_{2j+1}$  2—274
  - тетраэдра  $T$  1—255, 256
  - — полная  $T_d$  1—259
  - трансляций 2—66
  - — пространственная 2—18, 19
  - унитарная  $U_N$  2—246
  - — специальная  $SU_N$  2—258
  - $C_2$  1—25
  - $C_3$  1—25
  - $C_n$  1—253
  - $C_{2h}$  1—32
  - $C_{nh}$  1—258
  - $C_{nv}$  1—258
  - $D$  1—25
  - $D_{3h}$  1—27
  - $D_{nd}$  1—259
  - $D_{nh}$  1—258
  - $S_2$  1—25
  - $S_{2n}$  1—258
  - $SU_2$  1—291
  - $SU_3$  1—315
  - $T_h$  1—259
  - $U_2$  1—291
  - $U_3$  1—315
  - $Y_h$  1—260
- Детерминант *Слэтера* 1—233
- Диаграмма *Дынкина* 2—331
  - *Минковского* 2—85
- Динамическая группа см.
  - Неинвариантная группа
- Диофантово неравенство 2—335
- Евклидова группа 2—65
- Закон ветвления 2—254
  - сохранения заряда 2—188
- Запрещенные переходы 1—128
- Зарядовая независимость 1—293



- Зарядовое сопряжение 2—189
- Звезда вектора 2—54
- Зеркальный поворот 1—250
- Зона *Бриллюэна* 2—22
- Изобарический спин см. Изоспин
- Изоморфные группы 1—30
- Изоспин 1—289, 290
- Изоспиновый мультиплет 1—308
- Изотопический спин см. Изоспин
- Изотропный вектор, отрицательный 2—84
- — положительный 2—84
- Инвариантная подгруппа см. Нормальная подгруппа
- Инвариантное подпространство 1—71, 72
- Индекс нормальной подгруппы 2—321
- Индукированное преобразование функций 1—56
- Инфинитезимальный оператор представления 1—175
- Калибровка излучения см. Кулоновская калибровка
- Квадрупольное взаимодействие 2—300
- Квант поля 2—175
- Кварки 1—351
- Класс сопряженных элементов 1—34
- Комбинационный уровень 1—163
- Компактная группа 1—173
- Комплексно-сопряженное представление 1—208, 2—266
- Конечная группа 1—22
- Корневой вектор 2—327
- Коэффициенты *Клебша—Гордана* 1—103
- Кристаллографическая точечная группа 1—265
- Критерий *Кармана* 2—326
- Кулоновская калибровка 2—205
- Лагранжиан 2—165
- Легко приводимая группа 1—103
- Леммы *Шура* 1—81
- Лептонный заряд 1—315
- Линейное векторное пространство 1—41
- Линейный оператор 1—48
- Лоренцева инвариантность 2—89
- Магнетон *Бора* 1—219
- Магнитная пространственная группа 2—53
- Магنون 2—48
- Малая группа 2—55, 323
- Матричное представление группы 1—66
- Микроскопическая причинность 2—184
- Многозначное представление 1—205
- Модель почти свободных электронов 2—25
- Молекулярная орбиталь 2—8
- — ЛКАО 2—8
- Мультипликативность терма 1—240
- Неинвариантная группа 2—2
- Неполупростая группа 2—3
- Непрерывная группа 1—23
- Неприводимое представление группы 1—75
- Неравенство *Шварца* 2—330
- Несимметричная группа 2—52
- Неэквивалентные представления группы 1—80
- Нормальная мода 1—152
- подгруппа 2—321
- Нормальные координаты 1—152
- Нормированный вектор 1—43
- Нуклон 1—290
- Нуклонное число 1—290
- Нулевой вектор 2—84
- Обертонный уровень 1—163
- Обобщенный импульс 2—166
- Обозначения *Маликена* 2—345
- *Шёнфлиса* 1—249
- Обратный оператор 1—02
- Оператор:
  - гиперзаряда 2—187
  - Казимира* 1—204

- квадрата массы 2—121
- класса сопряженных элементов 2—366
- магнитного момента 1—219
- магнона 2—49
- обращения времени 1—145, 273; 2—129
- поля 2—178
- рождения 2—177
- уничтожения 2—177
- электрического заряда 2—187
- Орбита 2—324
- Орбитальный угловой момент 1—214
- Ортогонализация *Шмидта* 1—44
- Ортогональная матрица 1—54
- Ортогональное дополнение 1—44
- Ортонормированный набор векторов 1—43
- Отражение времени 2—118
- Очарование 1—358
- Параметры *Кэли—Клейна* 2—287
- Партон 1—359
- Перестановочные соотношения 1—176
- Плотность:
  - гамильтониана 2—173
  - импульса 2—173
  - лагранжиана 2—172
- Повышающий оператор 1—187
- Подгруппа 1—31
- Подпространство 1—44
- Полная ортогональная группа см. Группа ортогональная полная
- Полупростая группа 2—326
- Полупрямое произведение групп 2—321
- Понижающий оператор 1—187
- Порядок группы 1—22
- Постоянная *Ридберга* 2—301
- Правила отбора 1—128
- Правило:
  - интенсивностей *Хёня—Кронига* 2—388
  - интервалов *Ланде* 1—238, 239
- Хунда* 1—247
- Предельная группа 1—268
- Представление группы 1—65
- Преобразование:
  - инверсии 1—185, 2—95
  - Лоренца* 2—78
- Приближение *Борна—Оппенгеймера* 2—314
- слабой связи см. Модель почти свободных электронов
- Приводимое представление группы 1—75
- Принцип *Паули* 1—144, 234
- Проекционный оператор 1—107
- Простая группа 2—326
- перестановка 2—210
- Просто приводимая группа см. Легко приводимая группа
- Пространственная группа 2—51
- Пространственно-подобный вектор 2—84
- Прямое произведение групп 1—32
- — представлений 1—101
- Размерность:
  - группы 1—172
  - представления 1—65
  - пространства 1—42
- Ранг группы 2—327
- Регулярное представление группы 1—93
- Самосопряженная подгруппа см. Нормальная подгруппа
- Самосопряженное представление 2—228
- Самосопряженный оператор см. Эрмитов оператор
- Сила *Лоренца* 2—169
- Символ *Яманучи* 2—225
- Симметрическая группа 1—29 См. также Группа перестановок  $\mathfrak{S}_n$
- Симметрия 1—11
- Симморфная группа 2—52
- Симплектическая группа см. Группа

симплектическая  $Sp_{2j+1}$   
 Система неприводимых  
   представлений группы  $U_N$  2—  
   266  
 — нумерации базисных векторов  
   представлений группы  $U_N$  2—  
   255  
 Скалярное поле 2—170  
 — произведение 1—42  
 Смежная перестановка 2—210  
 Собственное значение 1—55  
 Собственный вектор 1—55  
 Соотношение ортогональности  
   характеров 1—90, 97  
 Сопряженное представление 2—228  
 Сопряженные элементы группы 1—  
   34  
 Сопряженный оператор 1—53  
 Сохраняющийся ток 2—188  
 Специальная унитарная группа см.  
   Группа унитарная специальная  
    $SU_N$   
 Спин 1—218  
 Спиральность 2—126  
 Спонтанное нарушение симметрии  
   2—313  
 Статистика:  
   Бозе—Эйнштейна 1—144  
   Ферми—Дирака 1—144  
 Странность 1—314  
 Структурные константы 1—176  
 Супермультиплет 1—344  
 Сферическая функция 1—198  
 Схема Дынкина см. Диаграмма  
   Дынкина  
 — Юнга 2—220  
 Таблица Юнга 2—224  
 Тахион 2—89  
 Тензорное поле 2—171  
 Теорема:  
   Блоха 2—24  
   Вигнера—Эккарта 1—114  
   Крамерса 2—136

Лагранжа 1—39  
 Машке 1—79  
   о перечислении 1—39  
   о спине и статистике 2—186  
 РСТ 2—189  
   сложения для сферических  
   гармоник 2—370  
 Терм 1—237  
 Тожественное представление  
   группы 1—66  
 Тожество Якоби 2—327  
 Точечная группа 1—249  
 Тривиальное представление группы  
   см. Тожественное  
   представление группы  
 Углы Эйлера 2—340  
 Удвоенная группа 1—206  
 Универсальная накрывающая группа  
   1—206  
 Унимодулярная группа см. Группа  
   унитарная специальная  $SU_N$   
 Унитарная группа см. Группа  
   унитарная  $U_N$   
 Унитарное представление 1—79  
 Унитарный оператор 1—54  
 Уравнение:  
   Вейля 2—157  
   Дирака 2—150  
   Клейна—Гордона 2—145  
   поля 2—172  
   Шредингера 1—121  
 Уравнения:  
   Гамильтона 2—166  
   Лагранжа 2—165  
   Максвелла 2—161, 174  
 Условие Лондона—Шортли 1—192  
 Усреднение по группе 1—84  
 Фактор Ланде 1—239  
 Фермион 1—144  
 Фонон 2—45  
 Формулы расщепления масс 1—334  
 Характер представления 1—88  
 Хромодинамика 1—359

Цветная группа 1—273, 274  
Цветовые состояния кварка 1—356  
Цикл 2—209  
Циклические группы 1—23  
Четность перестановки 2—21  
Чисто лоренцевское преобразование  
    см. Буст  
Шредингеровская картина 2—18  
Шубниковская группа 1—273, 274  
Эквивалентные представления  
    группы 1—78  
Эквивалентный оператор 1—202  
Экситон 2—50  
Электромагнитное поле 2—169

Эрмитов оператор 1—54  
Эффект:  
    *Зеемана* 1—219  
    *Яна—Теллера* 2—313, 315  
 $g$ -фактор см. Фактор Ланде  
 $SU_3$ -мультиплет 1—330, 331  
 $SU_6$ -мультиплет 1—348  
 $T$ -спин 1—319  
 $U$ -спин 1—319  
 $V$ -спин 1—319  
 $6j$ -символ 2—386  
 $9j$ -символ 2—384

# ПРЕДИСЛОВИЕ КО ВТОРОМУ ТОМУ

В первом томе была показана фундаментальная роль симметрии и были продемонстрированы применения теории симметрии к широкому кругу проблем классической и квантовой физики. В данном (втором) томе будут рассмотрены более сложные проблемы, и мы в более общем плане исследуем симметрическую и унитарную группы, с отдельными приложениями которых мы уже встречались в первом томе. Все это вопросы, с которыми вплотную сталкиваются, по-видимому, лишь аспиранты, но они могут быть интересны и для наиболее вдумчивых студентов.

Второй том начинается (гл. 13) с дальнейших приложений точечных групп — на этот раз к движению электронов в молекуле. Затем, в гл. 14 мы переходим от симметрии с фиксированной точкой к изучению дискретных трансляций и их применению в теории кристаллической структуры. Мы знаем, сколь важную роль играет релятивистская теория в философских вопросах физики; но с приближением скоростей к скорости света она приобретает и практическое значение. Для всех систем, рассмотренных в первом томе, можно было игнорировать выводы специальной теории относительности, поскольку скорости частиц были достаточно малы. Теперь же, в гл. 15, дается анализ симметрии в четырехмерном пространстве-времени, лежащей в основе релятивистской теории, и рассматриваются ее следствия, прежде всего по отношению к классификации элементарных частиц. Понятия импульса, энергии, массы и спина интерпретируются с точки зрения симметрии на основе групп Лоренца и Пуанкаре, причем показывается естественное место, занимаемое в теории частицами, обладающими нулевой массой покоя (такими, как фотон).

Гл. 16, в отличие от предыдущих глав, где речь шла лишь о частицах [или системах частиц, посвящена полям. Сначала рассматриваются классические поля (такие, как электромагнитное) с использованием четырехмерного пространства-времени. Затем кратко излагается теория релятивистских квантовых полей, в рамках которой возможно рождение и уничтожение частиц и существование античастиц. В гл. 17 и 18 приводятся подробные сведения о двух весьма общих группах: «симметрической» группе всех перестановок  $n$  объектов и «унитарной» группе в  $N$  измерениях; указано на наличие тесной взаимосвязи между ними (ряд частных приложений обеих групп уже встречался ранее). В гл. 19 рассматриваются некоторые неожиданные симметрии у двух хорошо известных потенциалов: кулоновского и потенциала гармонического осциллятора. В последней главе (гл. 20) собран ряд небольших и разрозненных, но интересных задач.

В текст включены проработанные примеры и подобранные задачи с решениями. В конце каждой главы приводится дополнительная литература для читателей, которые хотели бы углубить свое понимание физических приложений или математических оснований.

Как и в первом томе, прямыми латинскими буквами обозначаются операторы, а курсивными —  $c$ -числа. Векторы обозначаются жирным шрифтом, четырехвекторы снабжены «шляпкой».

Дж. П. Э.  
П. Г. Д.

Брайтон, Сассекс, 1979

## ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В МОЛЕКУЛАХ

При изучении строения молекул, строго говоря, мы должны рассматривать одновременно и движение ядер, и движение электронов, из которых состоят атомы, входящие в молекулу. Но поскольку масса ядер намного больше массы электрона, можно приближенно рассматривать движение этих двух типов частиц отдельно. Такое приближение, называемое приближением Борна—Оппенгеймера, кратко излагается в гл. 20, § 2. В данной главе речь пойдет о движении электронов относительно ядер, которые мы будем считать неподвижными. Основным интерес будут представлять те молекулы, для которых расположение закрепленных ядер инвариантно относительно некоторой точечной группы операций симметрии. Это та самая группа симметрии, которую мы уже использовали при анализе молекулярных колебаний в гл. 6. Принципиальное различие между вопросами, которые мы рассматривали в гл. 6, и вопросами, рассматриваемыми здесь, состоит в том, что при анализе колебаний молекул в гл. 6 мы вообще пренебрегали электронами (учитывая лишь, что они создают потенциал, в котором движутся ядра). С экспериментальной же точки зрения различие таково: для молекулярных колебаний характерны энергии порядка  $10^{-2}$  эВ, а для электронных возбуждений, которые мы собираемся рассматривать, — порядка 1 эВ.

Несмотря на упрощающее предположение о фиксированном расположении ядер, вычисление электронной волновой функции остается чрезвычайно трудной задачей [1—3], более трудной, чем в случае одного атома (гл. 8). Поэтому мы ограничимся простой моделью, в которой каждый электрон движется независимо от других в фикс-

сированном поле, создаваемом ядрами и остальными электронами. Она вполне аналогична приближению центрального поля в случае атомов, с тем лишь различием, что теперь поле считается имеющим не сферическую симметрию, а симметрию одной из точечных групп. Вычислив одноэлектронные волновые функции, мы можем построить затем детерминант Слэтера для многоэлектронной волновой функции (гл. 8, § 6, п. Б). Одночастичную волновую функцию в молекуле называют молекулярной орбиталью, чтобы отличать ее от атомных орбиталей, относящихся к одному атому.

## § 1. ЛИНЕЙНЫЕ КОМБИНАЦИИ АТОМНЫХ ОРБИТАЛЕЙ (МЕТОД ЛКАО)

На электрон, движущийся вблизи одного из ядер в молекуле, действует поле, весьма сходное с полем изолированного атома. Поэтому в данной области пространства волновая функция электрона должна быть подобна волновой функции свободного атома  $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_t)$  с центром в ядре  $\mathbf{r}_t$ . Следовательно, можно строить полные волновые функции в виде линейных комбинаций наименее связанных атомных орбиталей  $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_t)$  с центрами на разных ядрах  $\mathbf{r}_t$ . Такую волновую функцию называют молекулярной орбиталью ЛКАО. При проведении простых вычислений допустимо считать, что в создании этих орбиталей участвуют лишь атомные орбитали валентных электронов, а электроны внутренних заполненных оболочек атомов остаются в своих невозмущенных атомных состояниях. При более же полных вычислениях следовало бы включить также некоторые из состояний с более низкими энергиями и некоторые из незанятых возбужденных состояний.

Набор атомных орбиталей  $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_t)$  с фиксированными значениями  $n$  и  $l$  и вектором  $\mathbf{r}_t$ , пробегающим положения эквивалентных ядер, образует базис представления  $\Gamma$  группы симметрии. В подтверждение этого мы покажем, что при действии операции  $\Gamma(G_a)$  на атомную орбиталь  $\varphi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{r}_t)$  последняя переводится в другую атомную орбиталь с центром в одном из ядер  $\mathbf{r}_t$ . Учи-



тая общая формула (3.37), имеем

$$\begin{aligned} T(G_a) \varphi_{nlm}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t) &= \varphi_{nlm}(G_a^{-1} \mathbf{r} - \mathbf{r}_t) = \\ &= \varphi_{nlm}\{G_a^{-1}(\mathbf{r} - G_a \mathbf{r}_t)\} = \\ &= \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(G_a) \varphi_{nlm'}(\mathbf{r} - G_a \mathbf{r}_t) = \\ &= \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(G_a) \varphi_{nlm'}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{t'}), \end{aligned} \quad (13.1)$$

где  $\mathbf{r}_{t'} = G_a \mathbf{r}_t$ , причем  $D^{(l)}$  — уже знакомое нам  $(2l+1)$ -мерное неприводимое представление группы  $\mathcal{R}_3$ . Представление  $T$  будет обладать размерностью  $(2l+1)N_t$ , где  $N_t$  — число ядер, эквивалентных ядру в положении  $\mathbf{r}_t$ .

Согласно общей теории, собственное состояние, принадлежащее данному уровню энергии, должно преобразовываться неприводимо под действием операций группы симметрии  $\mathcal{G}$ , так что молекулярные орбитали можно снабжать индексом, соответствующим неприводимому представлению группы  $\mathcal{G}$ . Для нахождения этих индексов необходимо разложить представление  $T$ , для чего следует знать характеры последнего. Их можно найти, пользуясь формулой (13.1) по аналогии с тем, как это делалось в гл. 6, § 5. Как явствует из формулы (13.1), диагональные матричные элементы отличны от нуля только тогда, когда  $\mathbf{r}_t = \mathbf{r}_{t'}$ , т. е. когда ядро в  $\mathbf{r}_t$  не затрагивается операцией  $G_a$ . Вклад такого ядра в характер представления  $T$  равен тогда просто характеру представления  $D^{(l)}$ , который, согласно формуле (7.42), дается выражениями

$$\begin{aligned} \chi^{(l)}(R(\varphi)) &= \sin(l + 1/2)\varphi / \sin 1/2\varphi, \\ \chi^{(l)}(S(\varphi)) &= \cos(l + 1/2)\varphi / \cos 1/2\varphi, \end{aligned} \quad (13.2)$$

где  $R(\varphi)$  — собственное вращение, а  $S(\varphi) = \sigma_h R(\varphi) = IR(\varphi + \pi)$  — зеркальное вращение (в обозначениях гл. 9, § 1). Характеры  $(2l+1)N_t$ -мерного представления  $T$  находятся затем умножением выражений (13.2) на число ядер, остающихся неподвижными при действии операций группы  $R(\varphi)$  или  $S(\varphi)$ . После того как найдены характеры представления  $T$ , разложение последнего строится на основании известной таблицы неприводимых характеров в общем методе, изложенном в гл. 4, § 11.

Для построения молекулярной орбитали  $\psi_{nl}^{(\alpha)}(\mathbf{r})$ , преобразующейся по одному из представлений  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{G}$

(из числа входящих в описанное выше разложение), можно использовать проекционный метод (гл. 4, § 19). На основании формулы (4.51) можно построить ненормированную молекулярную орбиталь

$$\psi_{nl}^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = \sum_a \chi^{(\alpha)*}(\mathbf{G}_a) T(\mathbf{G}_a) \varphi_{nlm}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_t), \quad (13.3)$$

где индекс суммирования  $\alpha$  пробегает по всем элементам  $\mathbf{G}_a$ , причем возможны любые допустимые значения  $m$  и  $\mathbf{r}_t$ .

Если представление  $T^{(\alpha)}$  встречается более одного раза или если мы хотим рассмотреть смешивание различных атомных орбиталей (с разными значениями  $n$  и  $l$ ), то нужно взять пробную волновую функцию

$$\psi^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = \sum_{i, n, l} c_{nl}^{(\alpha)i} \psi_{nl}^{(\alpha)i}(\mathbf{r}) \quad (13.4)$$

и затем определить ее коэффициенты  $c_{nl}^{(\alpha)i}$  вариационным методом. В сумме (13.4) индекс  $i$  соответствует различным молекулярным орбиталям в том случае, если представление  $T^{(\alpha)}$  встречается более одного раза в разложении представления  $T$ . Для проведения вариационного расчета и, возможно, даже для оценки относительных энергий отдельных молекулярных орбиталей (13.3) при разных  $\alpha$  необходимо сделать предположение о виде одноэлектронного гамильтониана  $H(\mathbf{r})$ . Поскольку функции  $\psi_{nl}^{(\alpha)i}(\mathbf{r})$  не взаимно-ортогональны, в матричной форме эта задача решается методом, изложенным в гл. 5, § 7. Волновые функции и энергии молекулярных орбиталей с симметрией  $\alpha$  даются тогда корнями матричного уравнения (5.23), которое в обозначениях данной главы имеет вид

$$(H^{(\alpha)} - ES^{(\alpha)}) \mathbf{c}^{(\alpha)} = 0, \quad (13.5)$$

где  $\mathbf{c}^{(\alpha)}$  — вектор-столбец из коэффициентов  $c_{nl}^{(\alpha)i}$  в формуле (13.4). Матричные элементы операторов  $H^{(\alpha)}$  и  $S^{(\alpha)}$  даются выражениями

$$H_{inl, jn'l'}^{(\alpha)} = \int \psi_{nl}^{(\alpha)i*}(\mathbf{r}) H \psi_{n'l'}^{(\alpha)j}(\mathbf{r}) d\mathbf{r},$$

$$S_{inl, jn'l'}^{(\alpha)} = \int \psi_{nl}^{(\alpha)i*}(\mathbf{r}) \psi_{n'l'}^{(\alpha)j}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Поскольку функции  $\psi_{nl}^{(\alpha)i}(\mathbf{r})$  являются известными линейными комбинациями атомных орбиталей, все эти матричные элементы могут быть выражены через матричные

элементы между атомными орбиталями. Обычно принимается, что матричные элементы гамильтониана  $H(r)$  между атомными орбиталями обращаются в нуль, если только два узла  $t$  и  $t'$  не совпадают или не являются ближайшими соседями друг друга в молекуле. Часто делается дополнительное предположение о том, что диагональные элементы в точности совпадают с одночастичными энергиями свободного атома, так как атомные орбитали хорошо локализованы вокруг одного ядра, а гамильтониан  $H(r)$  должен аппроксимировать сумму атомных потенциалов. При таких вычислениях энергии нужно быть осторожным, поскольку атомные орбитали на разных узлах не ортогональны друг другу. В простейшем приближении можно считать их взаимно-ортогональными, что соответствует единичной матрице  $S^{(\alpha)}$ .

## § 2. ПРИМЕРЫ

Для пояснения метода расчета, изложенного в предыдущем параграфе, приведем два примера. Первый из них — гипотетическая молекула  $H_3$  с тремя атомами водорода в вершинах равностороннего треугольника, а второй — молекула воды, которая служила примером и в гл. 6.

### Молекула $H_3$

Молекула  $H_3$  изображена на рис. 13.1, где три ее атома обозначены буквами  $a$ ,  $b$  и  $c$ . Группой симметрии такой молекулы является группа  $D_{3h}$ , но, поскольку мы используем при расчете лишь атомные  $s$ -состояния, имеющие симметрию по отношению к отражению в плоскости, можно исключить операцию отражения в горизонтальной плоскости и рассматривать просто группу  $D_3$ . Соответствующие характеры, а также характеры для трех  $1s$ -орбиталей, вычисленные по изложенным выше правилам, приведены в табл. 13.1.

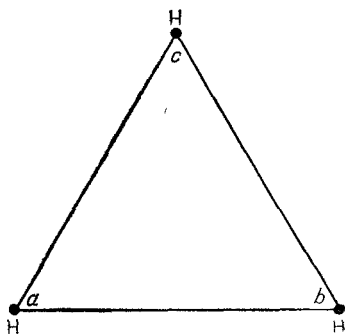


Рис. 13.1.

Таблица 13.1

| $D_s$         | $E$ | $2C_s$ | $3C_2$ |                  |
|---------------|-----|--------|--------|------------------|
| $A_1$         | 1   | 1      | 1      |                  |
| $A_2$         | 1   | 1      | -1     |                  |
| $E$           | 2   | -1     | 0      |                  |
| $\chi^{(1s)}$ | 3   | 0      | 1      | $= A_1 \oplus E$ |

Рассматриваемое приводимое представление состоит из синглета  $A_1$  и дублета  $E$ . Таким образом, вместо трех волновых функций  $\varphi_{1s}(a)$ ,  $\varphi_{1s}(b)$  и  $\varphi_{1s}(c)$  можно построить одну линейную комбинацию  $\psi^{(A_1)}$ , преобразующуюся по представлению  $A_1$ , и пару функций  $\psi_1^{(E)}$  и  $\psi_2^{(E)}$ , преобразующихся по представлению  $E$ . Используя проекцию (13.3), находим

$$\begin{aligned}\psi^{(A_1)} &\propto \{\varphi_{1s}(a) + \varphi_{1s}(b) + \varphi_{1s}(c)\}, \\ \psi_1^{(E)} &\propto \{2\varphi_{1s}(a) - \varphi_{1s}(b) - \varphi_{1s}(c)\}, \\ \psi_2^{(E)} &\propto \{\varphi_{1s}(b) - \varphi_{1s}(c)\}.\end{aligned}\quad (13.6)$$

В этом простом примере неприводимые представления возникают только по одному разу, так что нет необходимости в вариационном вычислении, и состояния (13.6) являются наилучшими одноэлектронными молекулярными орбиталями. Энергии этих состояний в простейшем приближении даются выражениями

$$E^{(A_1)} = \frac{1}{3} (3\varepsilon_{1s} + 6\lambda) = \varepsilon_{1s} + 2\lambda,$$

$$E_1^{(E)} = E_2^{(E)} = \frac{1}{2} (2\varepsilon_{1s} - 2\lambda) = \varepsilon_{1s} - \lambda,$$

где  $\varepsilon_{1s}$  — энергия  $1s$ -орбитали свободного атома водорода, а  $\lambda$  — интеграл перекрытия:

$$\lambda = \int \varphi_{1s}^*(a) \mathbf{H}(r) \varphi_{1s}(b) dr.$$

Основной вклад в этот интеграл дает часть взаимодействия между электроном в состоянии  $\varphi_{1s}(a)$  и ядром  $b$  и наоборот (с заменой  $a \rightleftharpoons b$ ). Поскольку это взаимодействие обусловлено силами притяжения, величина  $\lambda$  должна

быть отрицательной, и, следовательно, полностью симметричное состояние  $\psi^{(A_1)}$  будет наинизшим по энергии. Поэтому если поместить три электрона в состояние (13.6) в соответствии с принципом запрета Паули, то в основном состоянии молекулы  $\text{H}_3$  будут два электрона с противоположными спинами на наинизшей по энергии орбитали  $\psi^{(A_1)}$  и один электрон — в одном из двух вырожденных состояний  $\psi^{(E)}$ . Полная волновая функция основного состояния будет представляться детерминантом Слэтера, построенным из указанных трех функций. Поскольку при этом каждое из слагаемых в разложении детерминанта представляется в виде произведения с симметрией  $A_1 \otimes A_1 \otimes E = E$ , вся волновая функция является  $E$ -орбитальным дублетом, причем вырождение возникает благодаря двум возможным состояниям третьего электрона.

### Молекула $\text{H}_2\text{O}$

Молекула воды, изображенная на рис. 13.2, обладает группой симметрии  $C_{2v}$ . Оба атома водорода имеют по одному электрону, а атом кислорода — восемь электронов

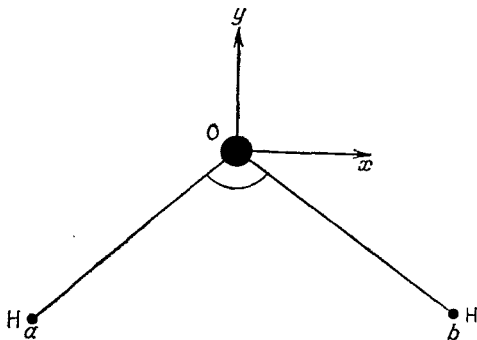


Рис. 13.2.

в основном состоянии с конфигурацией  $1s^2 2s^2 2p^4$ . Мы будем использовать в качестве атомных орбиталей  $1s$ -орбитали на ядрах водорода, обозначаемые через  $\varphi_{1s}(a)$  и  $\varphi_{1s}(b)$ , и  $2p$ -орбитали на ядре кислорода, обозначаемые через  $\varphi_{2px}$ ,  $\varphi_{2py}$ ,  $\varphi_{2pz}$ . Атомные  $1s$ - и  $2s$ -орбитали кислорода соот-

ветствуют более сильно связанным состояниям; поэтому мы отбрасываем их в простейшем приближении. Степень связи  $2p$ -орбитали кислорода и  $1s$ -орбитали водорода примерно одинакова, поэтому следует учитывать обе эти функции. Характеры группы  $C_{2v}$  даны в табл. 13.2; там

Таблица 13.2

| $C_{2v}$      | E | $C_2$ | $\sigma_v$ | $\sigma'_v$ |                               |
|---------------|---|-------|------------|-------------|-------------------------------|
| $A_1$         | 1 | 1     | 1          | 1           |                               |
| $A_2$         | 1 | 1     | -1         | -1          |                               |
| $B_1$         | 1 | -1    | 1          | -1          |                               |
| $B_2$         | 1 | -1    | -1         | 1           |                               |
| $\chi^{(1s)}$ | 2 | 0     | 2          | 0           | $= A_1 \oplus B$              |
| $\chi^{(2p)}$ | 3 | -1    | 1          | 1           | $= A_1 \oplus B_1 \oplus B_2$ |

же приведены характеры для пространств, порождаемых атомными орбиталями ( $\sigma_v$ —отражение в плоскости молекулы, а  $\sigma'_v$ —отражение в перпендикулярной плоскости, содержащей ось  $y$ ).

Так как все неприводимые представления являются одномерными, нетрудно записать симметризованные орбитали в следующем виде:

$$\varphi_{1s}^{(A_1)} \propto \{\varphi_{1s}(a) + \varphi_{1s}(b)\},$$

$$\varphi_{1s}^{(B_1)} \propto \{\varphi_{1s}(a) - \varphi_{1s}(b)\},$$

$$\varphi_{2p}^{(A_1)} = \varphi_{2py}, \quad \varphi_{2p}^{(B_1)} = \varphi_{2px}, \quad \varphi_{2p}^{(B_2)} = \varphi_{2pz}.$$

Поскольку имеются две орбитали типа  $A_1$ , следует допустить возможность их смешивания. Если обозначить энергии свободного атома, соответствующие состояниям  $\varphi_{1s}$  и  $\varphi_{2p}$ , через  $\varepsilon_{1s}$  и  $\varepsilon_{2p}$ , то в результате смешивания возникнут два энергетических уровня типа  $A_1$  (рис. 13.3). Аналогично произойдет смешивание двух орбиталей типа  $B_1$ , результат которого тоже показан на рис. 13.3. Можно утверждать качественно, что, поскольку угол химической связи превышает  $90^\circ$ , перекрытие функций  $\varphi_{1s}^{(B_1)}$  и  $\varphi_{2p}^{(B_1)}$  будет больше соответствующего перекрытия функций  $\varphi_{1s}^{(A_1)}$

и  $\varphi_{2p}^{(A_1)}$ . Поэтому два уровня  $B_1$ -типа расщепятся сильнее, чем два уровня  $A_1$ -типа (как и показано на рис. 13.3). В простейшем приближении уровню  $B_2$  соответствует энергия  $\varepsilon_{2p}$  свободного атома. Схема одночастичных энергетических уровней, представленная на рис. 13.3, согласуется с экспериментом.

Чтобы построить волновую функцию молекулы воды, нужно теперь поместить электроны на полученные молекулярные орбитали и образовать из них детерминант Слэтера. Разместить нужно шесть электронов, два из которых принадлежали  $1s$ -орбиталям атомов водорода, а четыре —  $2p$ -орбиталям кислорода (напомним, что электронная конфигурация атома кислорода такова:  $1s^2 2s^2 2p^4$ ). Таким образом, для описания основного состояния молекулы следует поместить по два электрона (со спинами вверх и вниз) на каждый из трех нижних уровней  $B_1$ ,  $A_1$  и  $A_2$  (рис. 13.3).

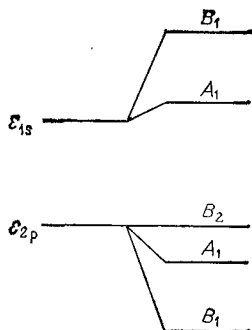


Рис. 13.3.

### § 3. ПРАВИЛА ОТБОРА ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ ВОЗБУЖДЕНИЙ В МОЛЕКУЛАХ

Оптическое поглощение может произойти при переходе молекулы из основного в возбужденное состояние. В качестве простейших возбужденных состояний можно рассматривать одночастичные возбуждения из занятой молекулярной орбитали на более высокую по энергии незанятую орбиталь. Порядок величины соответствующих энергий тот же, что и в случае атомных переходов, поэтому поглощение возможно в видимой, инфракрасной и ультрафиолетовой областях электромагнитного спектра. Правила отбора, определяющие возможные переходы, могут быть получены тем же путем, что и для уровней атома в кристаллическом поле (гл. 9, § 9, п. Б). В случае молекулы воды ввиду наличия двух электронов на каждой орбитали основное состояние обладает симметрией  $A_1$ , подобной симметрии заполненной оболочки. Возбужденные состоя-

ния можно построить, переводя электрон с наименее связанной орбитали  $B_2$  на любую из незанятых орбиталей  $A_1$  и  $B_2$ ; при этом образуются состояния, имеющие в первом случае симметрию  $B_2$ , а во втором — симметрию  $A_2$  (табл. 13.2). За счет электрических дипольных переходов может возбуждаться только первое из этих состояний, поскольку, согласно табл. 13.1, векторное представление не содержит  $A_2$ .

## ЛИТЕРАТУРА

1. *Eyring H., Walter J., Kimball G. E.*, Quantum Chemistry, Wiley, New York, 1944.

Более специализированные книги:

2. *Murrell J. N., Kettle S. F., Tedder J. M.*, Valence Theory. Wiley, New York, 1970.

3. *Murrell J. N., Harget A. J.*, Semi-empirical Self-consistent Field Molecular-orbital Theory of Molecules, Wiley, New York, 1972.

## ЗАДАЧА

**13.1.** Молекула метана состоит из четырех атомов водорода, расположенных в вершинах правильного тетраэдра, и атома углерода — в его центре (группа симметрии  $T_d$ ). Показать, что четыре атомные  $1s$ -орбитали атомов водорода дают синглетную и триплетную молекулярные орбитали. Заметим, что атомные  $2s$ - и  $2p$ -орбитали атома углерода также дают синглет и триплет с теми же симметриями и, следовательно, эти состояния могут смешиваться, образуя связывающие состояния.



## СИММЕТРИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ ТВЕРДЫХ ТЕЛАХ

В данной главе мы остановимся на следствиях, к которым приводит наличие трансляционной и вращательной симметрий в кристаллах. В § 1—3 речь пойдет о трансляционной симметрии, а в § 4 мы покажем, каким образом результаты теории групп используются для определения волновых функций электронов в кристалле. В следующих трех параграфах (§ 5—7) будет кратко сказано о том, как эти результаты можно обобщить для различных типов элементарных возбуждений в кристаллах (колебаний решетки, спиновых волн и экситонов). В § 8 рассматриваются правила отбора при процессах рассеяния с участием этих возбуждений, а в § 9—следствия, вызванные наличием симметрий точечных групп. При этом мы не пытаемся осветить все стороны теории пространственных групп, но лишь кратко характеризуем элементы группы и неприводимых представлений более простых пространственных групп и приводим примеры их применения к электронным состояниям.

### § 1. ТРАНСЛЯЦИОННАЯ СИММЕТРИЯ В КРИСТАЛЛАХ

Кристалл состоит из атомов или ионов, упорядоченно расположенных в некой пространственной решетке, которая определяется вектором

$$\mathbf{r} = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (14.1)$$

где все  $n_i$  — целые числа. Векторы  $\mathbf{a}_i$  называются векторами основных трансляций; они должны быть некопланарными. Параллелепипед, построенный на векторах  $\mathbf{a}_1$ ,  $\mathbf{a}_2$ ,  $\mathbf{a}_3$ , называется элементарной ячейкой. В простейших кристаллах имеется в точности по одному атому в каждом узле решетки, но в более общем случае с каждым

узлом связана некоторая совокупность атомов с определенным **относительным** расположением. На рис. 14.1 изображен двумерный кристалл с двумя атомами в элементарной ячейке.

Согласно формуле (14.1), пространственная решетка (а следовательно, и твердое тело) простирается до бесконечности. В действительности же кристалл конечен, но содержит очень большое число атомов: около  $10^{20}$  в  $1 \text{ см}^3$ .

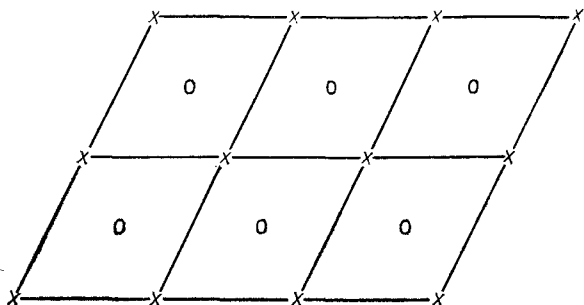


Рис. 14.1. Крестики — атомы типа *A*, кружки — атомы типа *B*.

Здесь мы рассмотрим лишь модель бесконечного кристалла, которая, по-видимому, позволяет вычислять так называемые объемные свойства образца (например, проводимость и удельную теплоемкость). Эти свойства хорошо характеризуют образцы с малым отношением поверхности к объему; точнее, число атомов, на которые оказывает влияние поверхность кристалла, должно быть мало по сравнению с полным их числом.

Бесконечный кристалл, вообще говоря, будет обладать симметриями, включающими вращение, но пока мы ограничимся лишь чисто трансляционной симметрией, описываемой группой операторов трансляций  $\mathbf{P}(\mathbf{n}) \equiv \mathbf{P}(n_1 n_2 n_3)$ , смещающих произвольную точку  $\mathbf{r}$  в точку  $\mathbf{r} + \mathbf{n}$ :

$$\mathbf{P}(\mathbf{n}) \mathbf{r} = \mathbf{r} + \mathbf{n} = \mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3. \quad (14.2)$$

Здесь векторы основных трансляций  $\mathbf{a}_i$  фиксированы, а коэффициенты  $n_i$  — целые числа. Эту группу мы будем обозначать в дальнейшем через  $\mathcal{T}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$ . Заметим, что число ее элементов бесконечно велико.

§ 2. ГРУППА ТРАНСЛЯЦИЙ  $\mathcal{T}(a_1, a_2, a_3)$ 

Закон умножения для трансляций нетрудно вывести из определяющего уравнения (14.2), а именно:

$$\begin{aligned} P(m)P(n)r &= P(m)(r+n) = r+n+m = \\ &= r+(n+m) = P(n+m)r. \end{aligned} \quad (14.3)$$

Отсюда ясно, что группа трансляций является абелевой и, в частности, трансляции в направлениях всех трех основных векторов  $a_i$  коммутируют друг с другом. Таким образом, группу трансляций можно рассматривать как прямое произведение трех подгрупп трансляций вдоль основных направлений. Рассмотрим одну из таких подгрупп  $\mathcal{T}(a_1, 0, 0)$ . Она абелева, и потому ее неприводимые представления одномерны. Из выражения (14.3) следует, что матричные элементы  $T(n_1, 0, 0)$ , соответствующие элементам группы  $P(n_1, 0, 0)$ , удовлетворяют равенству

$$T(n_1, 0, 0)T(m_1, 0, 0) = T(n_1 + m_1, 0, 0). \quad (14.4)$$

Мы говорим здесь «матричный элемент», хотя все эти матрицы одномерны и у них имеется лишь по одному матричному элементу. Для представления группы трансляций мы примем обозначение  $T(n) \equiv T(n_1, n_2, n_3)$  вместо более громоздкого  $T(P(n))$ . Приняв, что единичному элементу  $P(0, 0, 0)$  соответствует единичный матричный элемент, т. е.  $T(0, 0, 0) = 1$ , и определив постоянную  $\alpha$  равенством  $\alpha = T(1, 0, 0)$ , мы сразу получаем из равенства (14.4), что  $T(n_1, 0, 0) = \alpha^{n_1}$ . Для того чтобы представление  $T$  было унитарным, величина  $\alpha$  должна быть комплексным числом с модулем, равным единице. Поэтому принято записывать  $\alpha = \exp(-2\pi i k_1)$ , где  $k_1$  — действительное число, используемое в качестве индекса представления:

$$T^{(k_1, 0, 0)}(n_1, 0, 0) = \exp(-2\pi i k_1 n_1). \quad (14.5)$$

Поскольку  $n_1$  — всегда целое число, из (14.5) следует, что два представления с индексами  $k_1$  и  $k'_1 = k_1 + p$  тождественны, если  $p$  — целое число. Поэтому для описания всех унитарных неприводимых представлений необходимо, чтобы индекс  $k_1$  принимал любые значения в пределах интервала единичной длины. Как будет видно из дальнейшего, очевидный интервал  $0 \leq k_1 < 1$  не всегда наиболее удобен в трехмерных задачах.

Неприводимые представления полной группы трансляций  $\mathcal{T}(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3)$  получаются как прямые произведения представлений вида (14.5) и потому являются одномерными; они индицируются тремя параметрами  $k_1, k_2, k_3$  и имеют вид

$$\begin{aligned} T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}) &= T^{(k_1, 0, 0)}(n_1, 0, 0) \otimes T^{(0, k_2, 0)}(0, n_2, 0) \otimes T^{(0, 0, k_3)}(0, 0, n_3) = \\ &= \exp[-2\pi i (k_1 n_1 + k_2 n_2 + k_3 n_3)]. \end{aligned} \quad (14.6)$$

Показатель экспоненты в формуле (14.6) имеет вид скалярного произведения, но, поскольку векторы  $\mathbf{a}_i$  основных трансляций не являются ни взаимно ортогональными, ни нормированными, необходимо ввести базис в пространстве так называемой обратной решетки. Векторы этого базиса определяются равенством

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]}{\mathbf{a}_1 \cdot [\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3]} \quad (14.7)$$

и обладают свойством

$$\mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad (14.8)$$

которое можно было бы также принять в качестве их определения. Только после этого можно будет записать показатель экспоненты в формуле (14.6) в виде скалярного произведения. Для этого введем вектор  $\mathbf{k}$ , имеющий компоненты  $k_i$  в базисе  $\mathbf{b}_i$ :

$$\mathbf{k} = k_1 \mathbf{b}_1 + k_2 \mathbf{b}_2 + k_3 \mathbf{b}_3. \quad (14.9)$$

Тогда

$$\mathbf{k} \cdot \mathbf{n} = \sum_{ij} k_i n_j \mathbf{b}_i \cdot \mathbf{a}_j = 2\pi \sum_i k_i n_i, \quad (14.10)$$

и матричный элемент неприводимого представления можно записать в виде

$$T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}), \quad (14.11)$$

где  $\mathbf{n}$  обозначает элемент группы, а  $\mathbf{k}$  — индекс неприводимого представления.

Как было отмечено выше, в одномерном случае все представления с индексом  $k_1 + p$ , где  $p$  — любое целое число, тождественны представлению с индексом  $k_1$ ; в трехмерном случае то же будет справедливо для представлений, полученных добавлением целых чисел к любому из  $k_i$ . Этот

результат удобнее сформулировать, если ввести обратную решетку как совокупность точек, определяемых векторами

$$\mathbf{K}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3, \quad (14.12)$$

где  $m_i$  — целые числа. Отсюда видно, что представления, соответствующие индексам  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k} + \mathbf{K}_m$ , эквивалентны:

$$\tilde{T}^{(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m)}(\mathbf{n}) = \exp[-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_m) \cdot \mathbf{n}] = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) = T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}). \quad (14.13)$$

В заключение выведем простое правило для построения произведения представлений групп трансляций. Поскольку неприводимые представления группы  $\mathcal{T}$  одномерны, это правило тривиально. Прямое произведение представлений с индексами  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$  — это представление с индексом  $\mathbf{k} + \mathbf{k}'$ , так как

$$\begin{aligned} T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}) \otimes T^{(\mathbf{k}')}(\mathbf{n}) &= \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \exp(-i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{n}) = \\ &= \exp[-i(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \cdot \mathbf{n}] = T^{(\mathbf{k} + \mathbf{k}')}(\mathbf{n}). \end{aligned} \quad (14.14)$$

Однако ввиду отмеченной выше эквивалентности к индексу получающегося представления можно, не изменяя результата, добавить вектор обратной решетки:

$$T^{(\mathbf{k})} \otimes T^{(\mathbf{k}')} = T^{(\mathbf{k} + \mathbf{k}' + \mathbf{K}_m)}. \quad (14.15)$$

### § 3. ЗОНА БРИЛЛЮЭНА И НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ

Как было показано, различные представления можно строить, заставляя параметры  $k_1$ ,  $k_2$  и  $k_3$  пробегать интервал единичной длины. Этим условием определяется область пространства, в которой должен находиться вектор  $\mathbf{k}$ ; данную область можно наглядно себе представить, используя базис в пространстве обратной решетки и равенство (14.9). Если выбрать интервалы  $0 \leq k_i < 1$ , то областью вектора  $\mathbf{k}$  будет параллелепипед, построенный на базисных векторах  $\mathbf{b}_1$ ,  $\mathbf{b}_2$  и  $\mathbf{b}_3$ . Но обычно удобнее выбирать область, максимально симметричную относительно начала координат, допуская тем самым отрицательные значения величин  $k_i$ . Полученная таким способом область изменения вектора  $\mathbf{k}$  называется зоной Бриллюэна; ее границы можно определить с помощью векторов обратной

решетки (14.12). Зона Бриллюэна определяется как область, ограниченная плоскостями, которые делят пополам векторы, соединяющие начало координат со всеми ближайшими узлами обратной решетки, и при этом ортогональны этим векторам.

На рис. 14.2 приведены некоторые примеры двумерных решеток совместно с их обратными решетками и зонами Бриллюэна. В этих двумерных примерах проще получить

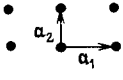
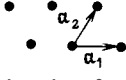
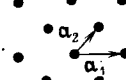
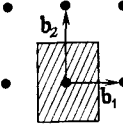
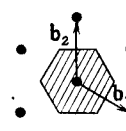
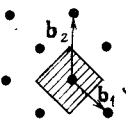
|                                                                     | Простая<br>прямоугольная                                                                                    | Гексагональная                                                                                                       | Центрированная<br>квадратная                                                                                        |
|---------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|
| Пространственная<br>решетка                                         |                            |                                     |                                    |
| Обратная<br>решетка и<br>первая зона<br>Бриллюэна<br>(заштрихована) | <br>$ b_1  = 2\pi /  a_1 $ | <br>$ b_1  = 4\pi / \sqrt{3}  a_1 $ | <br>$ b_1  = 2\sqrt{2}\pi /  a_1 $ |

Рис. 14.2.

векторы  $b_i$ , пользуясь соотношением (14.8), а не исходным определением (14.7).

Одна из причин выбора именно зон Бриллюэна среди других возможных элементарных ячеек состоит в том, что с их помощью проще всего иллюстрируется точечная симметрия обратной решетки. Эта симметрия совпадает с симметрией исходной пространственной решетки (которая, однако, может и не совпадать с обратной решеткой). В самом деле, векторы  $K_m$  обратной решетки, определенные равенством (14.12), удовлетворяют условию

$$\exp(iK_m \cdot n) = 1 \quad (14.16)$$

для всех узлов решетки  $n_j$ , и нетрудно показать, что, наоборот, любой вектор, удовлетворяющий условию (14.16)

для всех  $\mathbf{n}$ , должен быть вектором обратной решетки. Если теперь выбрать вращение  $\mathbf{R}_i$ , принадлежащее точечной группе, которая оставляет неизменной пространственную решетку, то точка  $\mathbf{R}_i^{-1}\mathbf{n}$  тоже будет узлом решетки, так что  $\exp(i\mathbf{K}_m \cdot \mathbf{R}_i^{-1}\mathbf{n}) = 1$ . Поскольку же показатель экспоненты есть скалярное произведение, отсюда следует, что  $\exp(i\mathbf{R}_i \cdot \mathbf{K}_m \cdot \mathbf{n}) = 1$  и, значит, точка  $\mathbf{R}_i \mathbf{K}_m$  также является узлом обратной решетки. Таким образом, любой элемент  $\mathbf{R}_i$  данной группы переводит все векторы обратной решетки в такие же векторы; следовательно, обратная решетка обладает той же симметрией точечной группы, что и пространственная решетка.

#### 4. ЭЛЕКТРОННЫЕ СОСТОЯНИЯ В ПЕРИОДИЧЕСКОМ ПОТЕНЦИАЛЕ

Простейшая модель для описания электронов, движущихся в кристалле, — это модель независимых электронов. В ней принимается, что каждый электрон движется независимо от других в фиксированном потенциале  $V(\mathbf{r})$ , который отражает его взаимодействие с ядрами, а также (в среднем) и взаимодействие с другими электронами твердого тела. Предполагается, что потенциал  $V(\mathbf{r})$  обладает трансляционной симметрией кристалла, т. е.  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{n})$ . Этот периодический потенциал следует рассматривать так же, как и центральное поле в случае электронов в атоме (гл. 8, § 6, п. А).

Теперь можно использовать полученные выше результаты, чтобы найти характеристические свойства электронов, движущихся в таком потенциале. Прежде всего установим действие трансляций на волновую функцию электрона, основываясь на общем определении (4.8):

$$\mathbf{T}(\mathbf{n}) \varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{P}^{-1}(\mathbf{n}) \mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{n}). \quad (14.17)$$

Для этого преобразования  $\mathbf{T}(\mathbf{n})$  выполняется групповой закон умножения

$$\mathbf{T}(\mathbf{m}) \mathbf{T}(\mathbf{n}) \varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\mathbf{r} - \mathbf{m} - \mathbf{n}) = \mathbf{T}(\mathbf{m} + \mathbf{n}) \varphi(\mathbf{r}), \quad (14.18)$$

что и требуется в общем случае от любого представления группы.

На основе общих результатов относительно индизирования представлений и вырождения (гл. 5, § 3) можно

предсказать, что если в кристалле отсутствует какая-либо симметрия, кроме трансляционной (т. е. отсутствуют какие-либо специальные соотношения между  $a_i$ ), то собственные состояния электрона будут преобразовываться согласно неприводимым представлениям группы трансляций. Это означает, что такие состояния будут индексироваться вектором  $\mathbf{k}$  и обладать трансформационными свойствами

$$T(\mathbf{n}) \varphi^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}) = T^{(\mathbf{k})}(\mathbf{n}) \varphi^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \varphi^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}). \quad (14.19)$$

Отсюда в силу формулы (14.17) получаем

$$\varphi^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r} - \mathbf{n}) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \varphi^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}). \quad (14.20)$$

Ввиду того что представление  $\mathbf{k}$  одномерно, мы заключаем также, что собственное состояние  $\varphi^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r})$  должно быть невырожденным. Важный результат (14.20) есть знаменитая теорема Блоха для состояний в кристаллах. Если известно, как изменяется собственная функция в одной ячейке кристалла, то характер ее изменения во всех остальных ячейках будет определяться индексом  $\mathbf{k}$  и сводиться к простому изменению фазы. Теорему Блоха часто формулируют в несколько другой форме — записывая собственную функцию (блоховское состояние) в виде

$$\varphi^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}). \quad (14.21)$$

Подставив это выражение в формулу (14.20), мы убедимся, что определенная равенством (14.21) функция  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  инвариантна относительно группы трансляций  $\mathcal{T}$ :

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{n}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \quad (14.22)$$

Чтобы найти функцию  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , нужно написать уравнение Шредингера для электрона, движущегося в периодическом потенциале. Гамильтониан для данного случая имеет вид

$$H = \frac{p^2}{2M} + V(\mathbf{r}), \quad (14.23)$$

где  $V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} - \mathbf{n})$ . С учетом формулы (14.21) для собственных функций  $\varphi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  получаем уравнение Шредингера

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) = \varepsilon(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}), \quad (14.24)$$



которое можно также переписать в виде

$$\left[ \frac{\hbar^2}{2M} (\nabla + i\mathbf{k})^2 + \varepsilon(\mathbf{k}) - V(\mathbf{r}) \right] u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = 0. \quad (14.25)$$

Поскольку  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  — периодическая функция, дифференциальное уравнение (14.25) можно решать лишь в пределах одной элементарной ячейки, задав периодические граничные условия на ее краях. Таким образом, теория групп позволила нам свести задачу для всего кристалла к задаче для одной элементарной ячейки. При каждом значении  $\mathbf{k}$  уравнение (14.25) будет иметь набор решений  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$ . Как явствует из самого уравнения (14.25), если величина  $\mathbf{k}$  медленно меняется, то решения этого дифференциального уравнения будут изменяться непрерывно, что указывает на непрерывную зависимость  $\varepsilon_n$  от  $\mathbf{k}$ . При каждом значении  $n$  энергии  $\varepsilon_n(\mathbf{k})$  образуют так называемую зону, поскольку они изменяются в ограниченных пределах, что будет проиллюстрировано ниже.

## А. Модель почти свободных электронов

Рассмотрим теперь общие свойства функции  $\varepsilon(\mathbf{k})$ , выбрав очень простую модель кристалла. В этой модели электроны считаются почти свободными, а периодический потенциал  $V(\mathbf{r})$  — малым возмущением состояний свободных электронов. Очевидно, что такое приближение может быть приемлемым только для самых внешних атомных электронов (валентных электронов), которые — особенно в металлах — могут почти свободно двигаться по кристаллу. В следующем параграфе мы покажем, что на основе такой модели удастся объяснить, почему элементы из различных частей периодической таблицы элементов оказываются металлами и диэлектриками.

Если положить  $V(\mathbf{r}) = 0$ , то, как нетрудно убедиться, уравнение (14.25) будет иметь решения вида

$$\begin{aligned} u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= v_c^{-1/4} \exp(i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}), \\ \varepsilon_n^0(\mathbf{k}) &= \frac{\hbar^2}{2M} (\mathbf{K}_n + \mathbf{k})^2, \end{aligned} \quad (14.26)$$

которые в силу равенства (14.16) удовлетворяют периодическим граничным условиям только тогда, когда  $\mathbf{K}_n$  является вектором обратной решетки [формула (14.12)].

Поэтому при любом фиксированном  $\mathbf{k}$  имеется одно решение, соответствующее каждому  $\mathbf{n}$  (т. е. трем целым числам  $n_1$ ,  $n_2$  и  $n_3$ ). Тогда «энергетические зоны» будут индексироваться числами  $\mathbf{n}$ , хотя на практике иногда проще просто нумеровать зоны в порядке возрастания энергии (1, 2, 3...), начиная с зоны низшей энергии. Постоянный множитель  $v_c^{-1/2}$  обеспечивает нормировку волновой функции  $u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  в пределах элементарной ячейки с объемом  $v_c = |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{a}_3|$ . Такая нормировка наиболее удобна, поскольку в силу периодичности большинство интегралов можно свести к интегралам по элементарной ячейке. Заметим, что полная волновая функция имеет вид

$$\psi_n^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = v_c^{-1/2} \exp[i(\mathbf{K}_n + \mathbf{k}) \cdot \mathbf{r}], \quad (14.27)$$

а формула (14.26)—это обычное выражение для энергии плоской волны (14.27), характеризующей состояние свободного электрона. Несколько необычная форма волнового вектора объясняется просто тем, что мы взяли в качестве области определения вектора  $\mathbf{k}$  зону Бриллюэна.

На рис. 14.3, а представлен график функции  $\varepsilon_n^0(k)$ , даваемой формулой (14.26), в частном случае одномерного кристалла, т. е. системы атомов, расположенных вдоль прямой линии на расстоянии  $a$  друг от друга. В этом случае единственный вектор базиса обратной решетки имеет длину  $b = 2\pi/a$ , а границы зоны Бриллюэна находятся при значениях  $\pm\pi/a$ . На графике видно, как части кривой  $\varepsilon(k) = \hbar^2 k^2 / 2M$ , описывающей одноэлектронную энергию, переносятся в зону Бриллюэна векторами обратной решетки.

Оставим теперь модель свободных электронов с  $V(\mathbf{r}) = 0$  и рассмотрим влияние периодического потенциала  $V(\mathbf{r})$  как возмущения, действующего на состояния свободных электронов. Поскольку потенциал  $V(\mathbf{r})$  инвариантен относительно группы трансляций, он будет связывать лишь состояния, принадлежащие одному и тому же неприводимому представлению этой группы, т. е. состояния с одинаковым вектором  $\mathbf{k}$  в зоне Бриллюэна. Тогда ряд

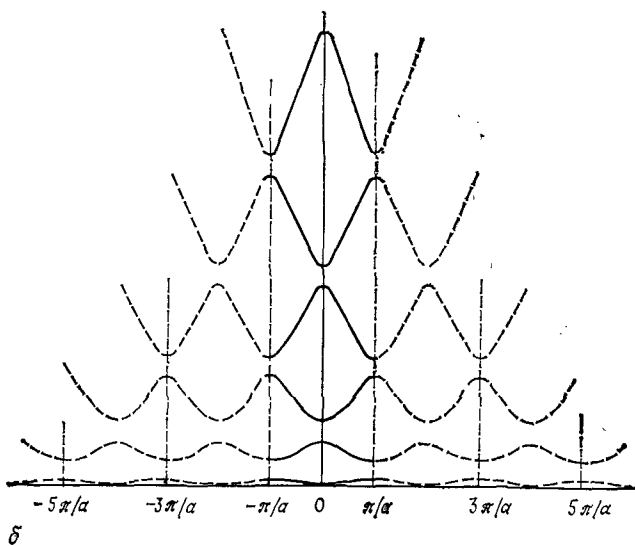
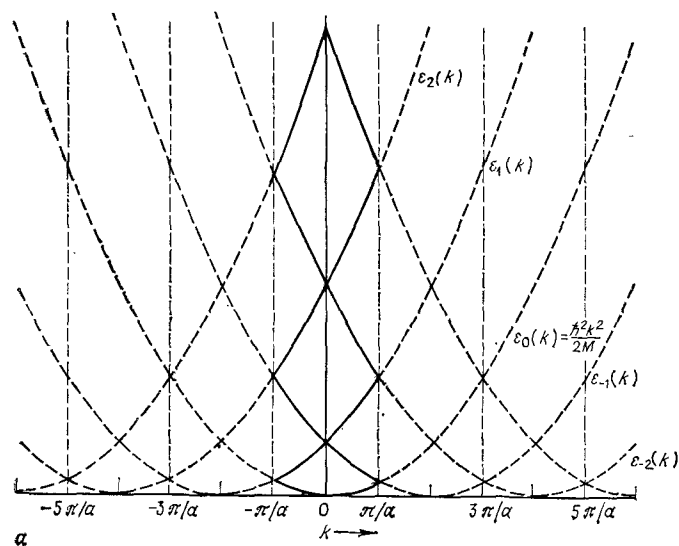


Рис. 14.3.

теории возмущений для энергии примет вид

$$\varepsilon_n(k) = \varepsilon_n^0(k) + v_c^{-1} \int \exp[-i(k + K_n) \cdot r] \cdot V(r) \exp[i(k + K_n) \cdot r] dr + v_c^{-2} \sum_m \frac{\left| \int \exp(-iK_m \cdot r) V(r) \exp(iK_n \cdot r) dr \right|^2}{\varepsilon_n^0 - \varepsilon_m^0} + \dots, \quad (14.28)$$

По ячейке

где  $\varepsilon_n^0(k)$  — невозмущенные энергии, даваемые формулой (14.26). Поскольку интегралы обладают периодичностью, достаточно ограничить область интегрирования одной элементарной ячейкой, т. е. той областью, в которой нормированы волновые функции. Член первого порядка ряда теории возмущений есть константа  $V_0$ , равная среднему значению потенциала  $V(r)$ . Матричные элементы в члене второго порядка имеют вид

$$\int \exp[-i(K_m - K_n) \cdot r] V(r) dr = \int \exp(-iK_{m-n} \cdot r) V(r) dr.$$

Очевидно, что они в точности равны коэффициентам Фурье  $V_{m-n}$ , входящим в разложение периодической функции  $V(r)$ :

$$V(r) = \sum_p \exp(iK_p \cdot r) V_p, \quad (14.29)$$

$$V_p = v_c^{-1} \int \exp(-iK_p \cdot r) V(r) dr.$$

По ячейке

Таким образом, ряд теории возмущений (14.28) можно записать в простом виде

$$\varepsilon_n(k) = \varepsilon_n^0(k) + V_0 + \sum_p \frac{|V_p|^2}{\varepsilon_n^0 - \varepsilon_{n+p}^0} + \dots, \quad (14.30)$$

где введено обозначение  $p = m - n$ . Член второго порядка описывает обычный эффект взаимного «отталкивания» между состояниями; из-за энергетического знаменателя он максимален, когда состояния  $n$  и  $n + p$  имеют почти одинаковую энергию.

Если принять простую одномерную модель (рис. 14.3, а), то «отталкивание» должно приводить к спектру типа изображенного на рис. 14.3, б. Заметим, что невозмущенные энергетические зоны касаются друг друга на границах

зоны Бриллюэна и при  $k=0$ , а потому в этих точках разложение обычной теории возмущений теряет применимость и необходимо использовать теорию возмущений для вырожденного уровня. Вычислим расщепление между двумя низшими уровнями энергии вблизи точки вырождения на границе зоны  $k=-\pi/a$ , пренебрегая связью с другими (высшими) зонами. Запишем искомые решения в виде линейных комбинаций двух невозмущенных состояний

$$u_k(x) = c_0 u_{0k}(x) + c_1 u_{1k}(x). \quad (14.31)$$

Тогда уравнение Шредингера (14.25) приводит к матричному уравнению

$$\begin{pmatrix} \varepsilon_0^0(k) + V_0 - \varepsilon(k) & V_1 \\ V_1 & \varepsilon_1^0(k) + V_0 - \varepsilon(k) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \end{pmatrix} = 0, \quad (14.32)$$

где  $\varepsilon(k)$  — новое значение энергии, а  $V_1$  — первый коэффициент Фурье в одномерном фурье-разложении, соответствующем (14.29):

$$V_m = \frac{1}{a} \int_0^a \exp(-2\pi i m x/a) V(x) dx. \quad (14.33)$$

Решения уравнения (14.32) имеют вид

$$\varepsilon^\pm(k) = V_0 + \frac{1}{2} [\varepsilon_0^0(k) + \varepsilon_1^0(k)] \pm \frac{1}{2} \{ [\varepsilon_0^0(k) - \varepsilon_1^0(k)]^2 + 4V_1^2 \}^{1/2}. \quad (14.34)$$

Вдали от границы зоны Бриллюэна, где величина  $V_1$  мала по сравнению с разностью энергий  $\varepsilon_0^0(k) - \varepsilon_1^0(k)$ , эти решения стремятся к невозмущенным значениям. На самой границе зоны Бриллюэна  $\varepsilon_0^0(k) = \varepsilon_1^0(k)$  и корни уравнения (14.32) таковы:

$$\varepsilon^\pm\left(-\frac{\pi}{a}\right) = \varepsilon_0^0\left(-\frac{\pi}{a}\right) + V_0 \pm |V_1|. \quad (14.35)$$

Отсюда видно, что на границе зоны Бриллюэна возникает запрещенная зона (междузонная щель) шириной  $2|V_1|$ . Аналогичное вычисление для точки контакта между энергетическими зонами с индексами  $n$  и  $m$  приведет к расщеплению, равному  $2|V_{n-m}|$ ; эти результаты иллюстрируются графиком рис. 14.3, б.

Расщепление непрерывной последовательности разрешенных энергий невозмущенной системы на зоны разрешенных энергий, разделенные запрещенными зонами (щелями), вообще не содержащими электронных состояний, есть основной результат теории электронных состояний в кристаллах. Ниже будет показано, каким образом это приводит к различию между металлами и диэлектриками. Но сначала рассмотрим вид волновых функций на границе зоны Бриллюэна. Будем считать величину  $V_1$  отрицательной, что соответствует ионному потенциалу притяжения на узлах решетки. Тогда решения уравнения (14.32), соответствующие энергиям (14.35), имеют вид  $c_0^\pm = \mp c_1^\pm$ , откуда на основании формул (14.31) и (14.27) получим

$$\begin{aligned}\Psi_+^{-\pi/a}(x) &= \frac{1}{(2a)^{1/2}} \exp(-i\pi x/a) \{1 - \exp(2\pi i x/a)\} = \\ &= -\left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} i \sin\left(\frac{\pi x}{a}\right),\end{aligned}\quad (14.36)$$

$$\Psi_-^{-\pi/a}(x) = \left(\frac{2}{a}\right)^{1/2} \cos\left(\frac{\pi x}{a}\right). \quad (14.37)$$

Волновая функция  $\Psi_+^{-\pi/a}(x)$  дает высокую электронную плотность вблизи точек  $x = \pm a/2$  (т. е. на половине расстояния между соседними узлами), а волновая функция  $\Psi_-^{-\pi/a}(x)$  — на самих узлах решетки. Следовательно, функция  $\Psi_-^{-\pi/a}(x)$  должна соответствовать более низкой энергии, что согласуется с выражением (14.35).

## Б. Металлы и диэлектрики

В п. А мы исследовали общий ход кривой зависимости  $\epsilon(\mathbf{k})$  для валентного электрона в кристалле. Рассмотрим теперь многоэлектронное основное состояние, которое получается при размещении электронов по найденным одноэлектронным состояниям с учетом принципа запрета Паули. Для удобства возьмем очень большой, но конечный кристалл, в котором можно пересчитать все электроны и все состояния. Граничными условиями, которые мы наложим на поверхностях кристалла, будут ограничены значения  $\mathbf{k}$ , приемлемые для блоховских состояний (14.21). Фактический выбор граничных условий не может повлиять на объемные свойства кристалла; принято выби-

рать циклические граничные условия. Возьмем кристалл, ребра которого параллельны векторам основных трансляций  $\mathbf{a}_i$ , причем вдоль каждого из таких ребер имеется  $N_i$  элементарных ячеек, так что их полное число равно  $N = N_1 N_2 N_3$ . Циклические граничные условия требуют, чтобы волновые функции принимали одинаковые значения на противоположных гранях кристалла; так, например,

$$\psi(000) = \psi(N_1 00) = \psi(0 N_2 0) = \psi(00 N_3). \quad (14.38)$$

Согласно теореме Блоха [формула (14.21)], это означает, что

$$\exp(2\pi i k_1 N_1) = \exp(2\pi i k_2 N_2) = \exp(2\pi i k_3 N_3) = 1,$$

т. е. возможные значения  $k_{ip}$  величин  $k_i$  даются выражением  $k_{ip} = p/N_i$ , где  $p$  — любое целое число. Таким образом, разрешенные значения вектора  $\mathbf{k}$  образуют решетку точек внутри обратной решетки, причем на базисном векторе  $\mathbf{b}_i$  укладывается  $N_i$  точек, так что в каждой элементарной ячейке таких точек имеется  $N$ . Следует, однако, ограничить значения  $\mathbf{k}$  первой зоной Бриллюэна, имеющей тот же объем, что и элементарная ячейка. Тогда полученный выше результат можно выразить и так: если в кристалле  $N$  элементарных ячеек, то имеется в точности  $N$  разрешенных значений вектора  $\mathbf{k}$ , равномерно распределенных по зоне Бриллюэна. Поскольку  $N_i$  — очень большие числа, при анализе объемных свойств не будет практически никакого различия между непрерывными и дискретными значениями вектора  $\mathbf{k}$ ; требуется лишь, чтобы они позволяли различать состояния.

Вернемся теперь к одномерному кристаллу (рис. 14.3, б), но будем считать его конечным и содержащим  $N$  элементарных ячеек, так что у него имеется в точности  $N$  блоховских состояний, соответствующих  $N$  значениям  $k$  в каждой зоне  $n$ . В каждое из таких состояний можно поместить по два электрона с противоположно направленными спинами; тогда в каждой зоне будет  $2N$  электронов. Если у атомов твердого тела имеется лишь один валентный электрон (таков, например, натрий), то кристалл с  $N$  атомами будет иметь  $N$  валентных электронов, которые в основном состоянии займут низшие  $N$  одночастичных состояний и, таким образом, лишь наполовину заполнят первую зону. Если же у атома два валентных

электрона, то в основном состоянии все одночастичные состояния первой зоны будут заняты. При наложении электрического поля ток пойдет лишь тогда, когда некоторые электроны могут быть ускорены, т. е. переведены в более высокие состояния, бесконечно мало отличающиеся по энергии от исходных состояний. В случае атомов с одним валентным электроном (например, атомов натрия) это возможно, поскольку непосредственно над высшим занятым состоянием имеются и незаполненные электронные состояния. В этом случае мы имеем металл (проводник). В случае же атомов с двумя валентными электронами (например, магния) нижняя зона полностью заполнена и ближайшие незанятые состояния находятся на дне следующей (более высокой) зоны, так что минимальная энергия, которую можно передать электронам, равна ширине запрещенной зоны  $2V_1$ . Поэтому магний должен быть диэлектриком. К сожалению, такой вывод не согласуется с данными эксперимента, но причина здесь в том, что мы взяли одномерную модель.

При трехмерном подходе мы получим запрещенные зоны во всех точках границы трехмерной зоны Бриллюэна, но они будут возникать при разных значениях энергии. Поэтому, если только запрещенные зоны не будут очень широки, может вообще отсутствовать какая-либо область энергий, которая всегда целиком приходилась бы на запрещенную зону. Потому-то кристаллы, состоящие из атомов с двумя валентными электронами, не всегда оказываются в действительности диэлектриками (как должно быть в одномерной модели). Поясним примером в двумерном случае. Изобразим зоны энергии почти свободных электронов, даваемые формулой (14.26) для прямоугольной решетки, выбрав вектор  $\mathbf{k}$  сначала вдоль оси  $x$ , а затем вдоль оси  $y$  (рис. 14.4, где принято  $a_1 = \frac{3}{2}a_2$ ). [Очевидно, что для такой системы не будет существовать энергетической щели между первой и второй зонами, поскольку щели на  $x$ - и  $y$ -границах зоны Бриллюэна возникают при энергиях  $\hbar^2\pi^2/2Ma_1^2$  и  $\hbar^2\pi^2/2Ma_2^2$  (задача 14.3) и, как явствует из рис. 14.4, разница между этими значениями, вообще говоря, велика по сравнению с шириной щелей. На рисунке показано также, каким образом могут в этом случае возникать максимумы и минимумы энергии в точках, не совпадающих с центром или границами зоны



и соответствующих пересечениям кривых для свободных электронов. Такие экстремумы играют важную роль при анализе возбуждений электронов из одной зоны в другую (междузонных переходов), но здесь мы не будем останавливаться на этом вопросе (см., например, книгу [2]).

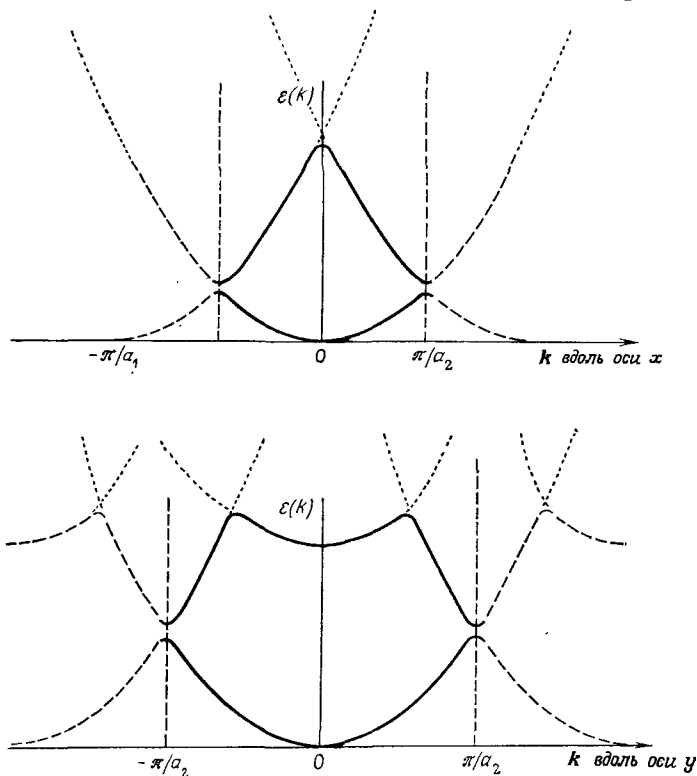


Рис. 14.4. Энергетические зоны для прямоугольной кристаллической решетки с  $a_1 = \frac{3}{2}a_2$  в приближении почти свободных электронов. Пунктиром показаны параболы для свободных электронов.

Более полное представление о зависимости  $\varepsilon(k)$  можно получить, изображая, как обычно делают, сечения поверхностей равной энергии в виде семейства двумерных кривых в первой зоне Бриллюэна для каждой энергетической зоны. Первые две энергетические зоны для сис-

темы, изображенной на рис. 14.4, показаны на рис. 14.5; изоэнергетические кривые ясно указывают на то, что максимумы на рис. 14.4 расположены при значениях  $k_y = \pm 5/9\pi/a_2$ ,  $k_x = 0$ .

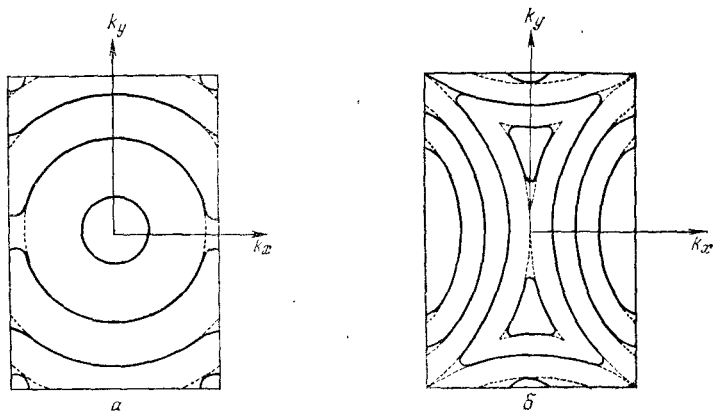


Рис. 14.5. Контуры постоянной энергии для прямоугольной кристаллической решетки. а—первая зона; б—вторая зона. Пунктиром показаны окружности для свободных электронов.

## В. Приближение сильной связи

Модель почти свободных электронов (соответствующая приближению слабой связи), рассмотренная в п. А, была пригодна для валентных электронов в кристалле. Но если нас интересуют волновые функции электронов внутренних оболочек, т. е. «остовные» состояния атомов, то волновые функции свободных электронов будут, очевидно, плохим исходным приближением. Для внутренних электронов волновые функции должны выглядеть во многом подобно орбиталям свободного атома; на них лишь незначительно повлияет взаимодействие с соседними атомами. Отсюда следует, что мы могли бы использовать подход теории возмущений, рассматривая в качестве исходных функций состояния свободного атома, а межатомное взаимодействие — в качестве возмущения. Разумеется, в этом случае понадобится теория возмущений для вырожденного уровня, поскольку каждому атомному состоянию  $\varphi_{nlm}(\mathbf{r})$  и каждому узлу  $\mathbf{n}$  будут соответствовать вырожденные атомные орбитали

$\varphi_{nlm}(\mathbf{r}-\mathbf{n})$ . Влияние взаимодействия проявится в том, что оно смешает вырожденные состояния и образует энергетическую зону таких состояний, причем разброс энергий будет зависеть от интенсивности взаимодействия. Это явление иллюстрируется на рис. 14.6, где показана зона очень малой ширины для глубоко лежащих «остовных» состояний, сильно экранированных внешними оболочками от влияния соседних атомов. На том же рисунке показано значительно большее расщепление состояний, лежащих выше по энергии; в конечном счете соответствующие энергетические зоны могут перекрываться.

Рассмотрим прежде всего так называемую  $s$ -зону, образованную электронами, находящимися в атомных  $s$ -состояниях с  $l=m=0$ . В низшем порядке теории возмущений эти состояния, перемешиваясь, образуют зону, в которой каждое из состояний является линейной комбинацией всех  $s$ -орбиталей. Новые состояния должны преобразовываться по неприводимым представлениям группы трансляций кристалла  $\mathcal{T}$ . Это означает, что они должны быть блоховскими состояниями, индицируемыми вектором  $\mathbf{k}$ , и могут быть найдены путем проектирования (гл. 4, § 19) с орбитали при  $n=0$ :

$$\begin{aligned} \varphi_s^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r}) &\propto \mathbf{P}^{(\mathbf{k})} \varphi_s(\mathbf{r}) \propto \\ &\propto \sum_{\mathbf{n}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \varphi_s(\mathbf{r}-\mathbf{n}). \end{aligned} \quad (14.39)$$

Заметим, что проектирование с орбитали с центром на другом узле изменяет лишь полную фазу функции  $\varphi_s^{(\mathbf{k})}(\mathbf{r})$ , т. е. не изменяет полученного состояния.

Если исходный атомный уровень не является  $s$ -состоянием, то будет дополнительное вырождение, соответствующее разрешенным значениям  $m$ . В этом случае сле-

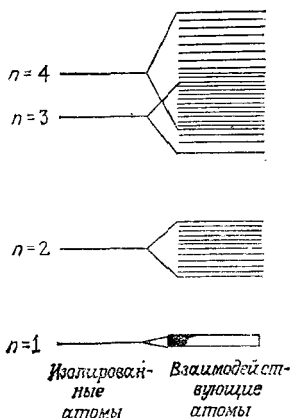


Рис. 14.6.

дует строить линейные комбинации блоховских состояний, полученных из каждой орбитали  $n l m$ . Напишем

$$\varphi_{nl}^{(k)}(\mathbf{r}) = \sum_m c_m^{\mathbf{k}} \varphi_{nlm}^{(k)}(\mathbf{r}), \quad (14.40)$$

где

$$\varphi_{nlm}^{(k)}(\mathbf{r}) = \sum_n \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) \varphi_{nlm}(\mathbf{r} - \mathbf{n})$$

есть блоховское состояние для орбитали  $m$ . Коэффициенты  $c_m^{\mathbf{k}}$  вычисляют обычно вариационным методом (гл. 5, § 7). В § 2 мы покажем, как их можно найти, руководствуясь лишь соображениями симметрии, если кристалл обладает кроме группы трансляций еще и точечной симметрией, а вектор  $\mathbf{k}$  направлен вдоль оси симметрии.

Нетрудно видеть, что описываемый метод аналогичен методу ЛКАО для молекулярных орбиталей (гл. 13). Различие состоит лишь в том, что индекс неприводимого представления точечной группы  $\alpha$  заменяется индексом  $\mathbf{k}$  для группы трансляций. Вычисление носит менее общий характер, нежели в гл. 13, в том смысле, что мы ограничились суммой в (14.40) атомными орбиталями с определенными значениями  $n$  и  $l$ . Метод можно обобщить, если учесть большее число атомных орбиталей, соответствующих атомным состояниям близкой энергии, а именно состояниям с данным значением главного квантового числа  $n$  и разными значениями  $l$ . В этом случае вариационный метод дает матричное уравнение, эквивалентное уравнению (13.5).

Для простых блоховских состояний (14.39) энергию можно получить, вычислив диагональный матричный элемент одноэлектронного гамильтониана  $H(\mathbf{r})$  в этом состоянии, а именно величину

$$\varepsilon_s(\mathbf{k}) = \frac{H_{\mathbf{k}\mathbf{k}}}{I_{\mathbf{k}\mathbf{k}}}, \quad (14.41)$$

где  $H_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = \int \varphi_s^{(k)*}(\mathbf{r}) H(\mathbf{r}) \varphi_s^{(k)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}$ ,

$$I_{\mathbf{k}\mathbf{k}} = \int \varphi_s^{(k)*}(\mathbf{r}) \varphi_s^{(k)}(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Используя конкретный вид блоховских состояний (14.39),

можно упростить эти выражения:

$$\begin{aligned} H_{kk} &= \sum_{n, n'} \exp [ik \cdot (n - n')] \int \varphi_s^* (r - n') H(r) \varphi_s (r - n) dr = \\ &= \sum_{n, n'} \exp [ik \cdot (n - n')] \int \varphi_s^* (r' - n' + n) H(r') \varphi_s (r') dr'; \end{aligned}$$

здесь  $r' = r - n$ , и мы воспользовались тем, что  $H(r) = H(r')$ . Вводя вместо  $n'$  переменную  $p = n' - n$ , находим

$$\begin{aligned} H_{kk} &= \sum_{n, p} \exp (-ik \cdot p) \int \varphi_s^* (r - p) H(r) \varphi_s (r) dr = \\ &= \sum_{n, p} \exp (-ik \cdot p) H_p, \end{aligned} \quad (14.42)$$

где  $H_p = \int \varphi_s^* (r - p) H(r) \varphi_s (r) dr$ .

Аналогично можно написать

$$I_{kk} = \sum_{n, p} \exp (-ik \cdot p) I_p,$$

где

$$I_p = \int \varphi_s^* (r - p) \varphi_s (r) dr. \quad (14.43)$$

Тогда энергию, даваемую формулой (14.41), можно записать в виде

$$\varepsilon_s(k) = \frac{\sum_p \exp (-ik \cdot p) H_p}{\sum_p \exp (-ik \cdot p) I_p}. \quad (14.44)$$

Для вычисления интегралов  $H_p$  и  $I_p$  возьмем гамильтониан

$$H(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V(r), \quad (14.45)$$

где  $V(r)$  — периодический потенциал, и перепишем его в виде

$$H(r) = -\frac{\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_{\text{ат}}(r) + [V(r) - V_{\text{ат}}(r)], \quad (14.46)$$

где  $V_{\text{ат}}(r)$  — потенциал центрального поля свободного атома. Тогда первые два слагаемых составляют гамильтониан свободного атома, находящегося в начале координат, и волновая функция  $s$ -состояния является собст-

венным состоянием этого гамильтониана с энергией  $\varepsilon_s$ :

$$\left( \frac{-\hbar^2}{2M} \nabla^2 + V_{\text{ат}}(r) \right) \varphi_s(r) = \varepsilon_s \varphi_s(r). \quad (14.47)$$

Используя это уравнение, мы можем теперь записать матричный элемент  $H_p$  в виде

$$H_p = \int \varphi_s^*(r-p) [\varepsilon_s + V(r) - V_{\text{ат}}(r)] \varphi_s(r) dr. \quad (14.48)$$

Тогда выражение (14.44) принимает вид

$$\varepsilon_s(k) = \varepsilon_s + \frac{\sum_p \exp(-ik \cdot p) V_p}{\sum_p \exp(-ik \cdot p) I_p}, \quad (14.49)$$

где

$$V_p = \int \varphi_s^*(r-p) [V(r) - V_{\text{ат}}(r)] \varphi_s(r) dr. \quad (14.50)$$

Первое слагаемое в выражении (14.49) дает энергетический уровень свободного атома, а второе слагаемое описывает зависимость от  $k$ , которая и приводит к расщеплению одного уровня в зону. Путем качественных рассуждений можно установить, каким образом это расщепление зависит от свойств невозмущенного состояния. Если  $\varphi_s(r)$  — глубокое «остовное» состояние (например,  $1s$ -состояние), то его волновая функция сильно локализована; тогда  $I_p$  и  $V_p$  практически равны нулю при значениях  $p$ , отличных от нуля, вследствие малого перекрытия волновых функций. Это означает, что второе слагаемое в выражении (14.49) сводится к величине  $V_0/I_0$ , не зависящей от  $k$ , так что ширина зоны равна нулю. Для функций не столь глубоких состояний можно принять грубое приближение, в котором пренебрегают перекрытием в  $I_p$ , но сохраняют слагаемое в  $V_p$ , соответствующее вектору  $p$  ближайших соседей. В случае простого кубического кристалла, в котором в каждом узле решетки находится один атом, а все три основных вектора трансляций  $a_i$  взаимно перпендикулярны и по модулю равны  $a$ , имеется шесть ближайших соседних узлов  $p$ . В этом случае энергия (14.49) дается выражением

$$\varepsilon_s(k) = \varepsilon_s + V_0 + 2V_1 (\cos ak_x + \cos ak_y + \cos ak_z), \quad (14.51)$$

где  $V_1$  — значение величины  $V_p$  для ближайшего соседнего узла (в кубическом кристалле для всех шести соседних узлов величина  $V_p$  будет одинаковой). Для валентного электрона следует удержать еще несколько слагаемых как в  $V_p$ , так и в  $I_p$ . Интервал значений, в котором изменяется  $\epsilon_s(k)$  при изменении  $k$ , называется шириной зоны; в примере, к которому относится формула (14.51), эта величина равна  $12|V_1|$ . Чтобы вычислить ширину зоны, мы должны, конечно, выбрать некую модель для периодического потенциала  $V(\mathbf{r})$ . Например, в качестве простого приближения для  $V(\mathbf{r})$  можно выбрать сумму атомных потенциалов  $V_{ат}(\mathbf{r})$ :

$$V(\mathbf{r}) = \sum_n V_{ат}(\mathbf{r} - \mathbf{n}). \quad (14.52)$$

При таком выборе сдвиг  $V_0$  мал по величине и отрицателен, поскольку входящее в выражение (14.50) возмущение очень мало в центральной ячейке, где волновые функции  $\phi_s(\mathbf{r})$  велики, и, кроме того, всюду отрицательно. По той же причине величина  $V_1$  всюду отрицательна.

В более точных вычислениях зонной структуры [3, 4] необходимо выбирать  $V(\mathbf{r})$  более тщательно, поскольку при выборе (14.52) дальнедействующий характер атомного потенциала приведет к тому, что ряды (14.49) будут сходиться лишь очень медленно. Удобнее выбрать  $V(\mathbf{r})$  в виде суммы локализованных потенциалов, подобных потенциалам свободного атома или иона в малой области атомного размера и равных нулю всюду вне этой области. Тогда энергии  $\epsilon_{nl}$  следует вычислять для этих потенциалов.

## § 5. КОЛЕБАНИЯ РЕШЕТКИ

Колебания решетки можно исследовать методами, изложенными в гл. 6 для молекул. Мы начнем с одномерной модели одноатомного кристалла, т. е. совокупности тождественных атомов, расположенных вдоль прямой линии на равных расстояниях  $a$  один от другого. В дальнейшем мы обобщим результаты на случай трех измерений с несколькими атомами в элементарной ячейке.

## А. Одномерная одноатомная решетка

Как было показано в гл. 6, нормальные колебания (моды) должны преобразовываться согласно неприводимым представлениям группы симметрии. В данной задаче это означает, что нормальные моды должны классифицироваться по индексу  $k$ , причем они могут быть получены путем проектирования. Хотя в рассматриваемой здесь простой задаче с равными массами принцип «взвешивания» величин можно не применять, мы все же сохраним его и используем непосредственно формулы из гл. 6. Общий вид смещения задается вектором  $\mathbf{q}$  в векторном пространстве, размерность которого равна числу атомов. Обозначим через  $\mathbf{e}(n)$  смещение  $n$ -го атома на величину  $M^{-1/2}$  и введем обозначение  $\mathbf{q} = \sum_n q_n M^{1/2} \mathbf{e}(n)$ , где  $q_n$  — смещение  $n$ -го атома, имеющего массу  $M$ .

Тогда смещение  $\mathbf{u}^{(k)}$ , обладающее симметрией  $k$ , можно получить путем проектирования с  $\mathbf{e}(0)$  [аналогично тому, как это сделано в формуле (14.39)]:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}^{(k)} &= \sum_n \exp(ikna) T(n) \mathbf{e}(0) = \\ &= \sum_n \exp(ikna) \mathbf{e}(n). \end{aligned} \quad (14.53)$$

В этом одномерном случае  $k = \pm |k| = 2\pi k_1/a$  [в тех же обозначениях, что и в формуле (14.9)]. Это равенство аналогично равенству (6.34) в задаче о молекулярных колебаниях.

Смещение  $\mathbf{u}^{(k)}$ , полученное таким способом, является единственным, так как проектирование со смещения на другом узле дало бы точно такое же смещение (хотя, может быть, и с другим фазовым множителем). Отсюда следует, что  $\mathbf{u}^{(k)}$  должно быть нормальным смещением и что при каждом  $k$  имеется всего лишь одна нормальная мода.

Частота этой нормальной моды дается формулой (6.35) и получается сразу, если известен вид потенциальной энергии кристалла при любых смещениях его атомов. Если принять для нее выражение (6.1), допуская комплексные значения величин  $q_n$ ,

$$V = \frac{1}{2} \sum_{n, m} B_{nm} q_n^* q_m, \quad (14.54)$$



где в данном случае  $q_n$  — смещение  $n$ -го атома, то формула (6.35) примет вид

$$\omega_k^2 = \frac{\sum_{n,m} M^{-1} B_{nm} \exp(-ikna) \exp(ikma)}{\sum_{n,m} \exp(-ikna) \exp(ikma) \delta_{nm}}. \quad (14.55)$$

[При этом, поскольку смещение  $u^{(k)}$  комплексное, следует использовать комплексную форму (3.7) для скалярных произведений в формуле (6.35).] В силу трансляционной инвариантности постоянные  $B_{mn}$  могут зависеть лишь от разности  $n-m$ ; поэтому, вводя переменную  $p=n-m$  и записывая  $B_p$  вместо  $B_{nm}$ , получаем

$$\begin{aligned} \omega_k^2 &= M^{-1} \sum_n \left[ \sum_p B_p \exp(-ikpa) \right] / \sum_n 1 = \\ &= M^{-1} \sum_p B_p \exp(-ikpa). \end{aligned} \quad (14.56)$$

Системой описанного типа является, в частности, одномерная цепочка атомов равной массы  $M$ , каждый из которых связан со своими ближайшими соседями законом Гука с модулем упругости  $\lambda$ . Потенциальную энергию можно записать в виде

$$V = \sum_n \frac{1}{2} \lambda (q_n - q_{n-1})^2 = \frac{1}{2} \lambda \sum_n (q_n^2 - 2q_n q_{n-1} + q_{n-1}^2),$$

или (после замены «немного» индекса суммирования в некоторых слагаемых)

$$\bar{V} = \frac{1}{2} \lambda \sum_n (2q_n^2 - q_n q_{n-1} - q_n q_{n+1}).$$

Таким образом, потенциальная энергия  $V$  имеет вид (14.54), где  $B_{nn} = 2\lambda$ ,  $B_{np} = -\lambda$  для ближайших соседних узлов и  $B_{np} = 0$  для всех остальных пар атомов. Из формулы (14.56) получаем

$$\begin{aligned} \omega_k^2 &= \frac{1}{M} [2\lambda - \lambda \exp(-ika) - \lambda \exp(ika)] = \\ &= \frac{2\lambda}{M} (1 - \cos ka). \end{aligned}$$

График зависимости  $\omega_k^2$  от  $k$  представлен на рис. 14.7. Границы зоны Бриллюэна находятся при значениях  $\pm \pi/a$ ,

а полученная кривая имеет большое сходство с соответствующей кривой для нижней зоны состояний электронов в модели свободных электронов. Вырождение состояний с противоположными значениями  $k$  обусловлено тем, что рассматриваемый кристалл обладает точечной группой с инверсионной симметрией (§ 9).

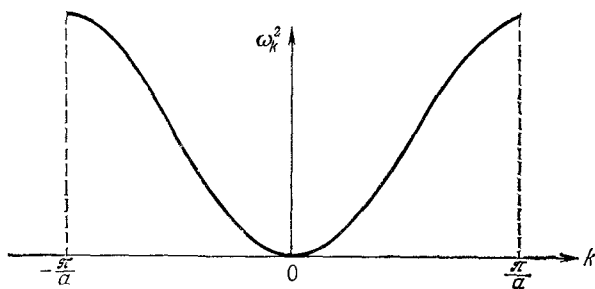


Рис. 14.7.

Существенное различие между результатами, полученными здесь и в гл. 6, состоит в том, что в гл. 6 спектр частот нормальных колебаний был дискретным, а в данном случае он оказался непрерывным. Это объясняется тем, что мы взяли бесконечную цепочку. Если ограничиться цепочкой конечной длины (с  $N$  атомами), то непрерывная кривая рис. 14.7 распадется на  $N$  отдельных точек, соответствующих  $N$  эквидистантным значениям  $k$ . Но в реальных кристаллах число  $N$  столь велико, что различие между дискретным и непрерывным спектрами практически стирается.

## Б. Трехмерные кристаллы с несколькими атомами в элементарной ячейке

Обобщим изложенное в п. А на случай трехмерного кристалла с  $s$  атомами в одной элементарной ячейке, построив  $3s$  ортонормированных базисных векторов, преобразующихся согласно представлению  $k$  трансляционной группы  $\mathcal{T}$ , путем проектирования на каждое из  $3s$  линейно-независимых атомных смещений в одной ячейке. Как и

в выражении (14.53), такие смещения будут иметь вид

$$u_{ti}^{(k)} = \sum_n \exp(ik \cdot n) e_{ti}(n), \quad (14.57)$$

где  $e_{ti}(n)$  — единичное смещение (во «взвешенном» смысле)  $i$ -го атома в ячейке  $n$ ; индекс  $i = x, y, z$  указывает направление смещения. Нормальные моды будут представлять собой линейные комбинации этих  $3s$  векторов:

$$u^{(k)} = \sum_{ti} c_{ti}^k u_{ti}^{(k)}. \quad (14.58)$$

Чтобы найти нормальные частоты и коэффициенты  $c_{ti}^k$ , последуем методу гл. 6 и диагонализировав  $3s \times 3s$ -матрицу потенциальной энергии при смещениях (14.58) в базисе (14.57). В качестве очевидного обобщения выражения (14.54) выразим прежде всего  $V$  через обычные координаты:

$$V = \frac{1}{2} \sum_{t, t', i, j, n, m} B_{tin, t'jm} q_{ti}^*(n) q_{t'j}(m), \quad (14.59)$$

где  $q_{ti}(n)$  — декартовы компоненты (в  $i$ -м направлении) смещения атома  $t$  в ячейке  $n$ . Тогда из формул (14.57) и (14.58) видно, что моды, отмеченные индексом  $k$ , имеют компоненты вида

$$q_{ti}^k(n) = c_{ti}^k \exp(ik \cdot n) / M_t^{1/2}.$$

Подставляя данное выражение в формулу (14.59), получаем величину  $V$  в моде  $k$  в следующем виде:

$$V^k = \frac{1}{2} \sum_{t, t', i, j} E_{ti, t'j}^k c_{ti}^{k*} c_{t'j}^k \left( \sum_n 1 \right),$$

где

$$E_{ti, t'j}^k = \frac{1}{(M_t M_{t'})^{1/2}} \sum_p B_{tio, t'jp} \exp(-ik \cdot p). \quad (14.60)$$

Здесь введено обозначение  $p = n - m$ ; индекс  $o$  обозначает любую фиксированную ячейку. Тогда в качестве простого обобщения формулы (6.35) мы получаем, что величины  $\omega_k^2$  являются собственными значениями матрицы (14.60).

Чтобы показать, к чему приводит наличие более чем одного атома в элементарной ячейке, рассмотрим одно-

мерную цепочку с двумя атомами в элементарной ячейке и законом Гука для взаимодействия ближайших соседей (рис. 14.8). В этом случае потенциальная энергия имеет вид

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{2} \sum_n \lambda \{ [q_2(n) - q_1(n)]^2 + [q_1(n) - q_2(n-1)]^2 \} = \\ &= \frac{1}{2} \lambda \sum [2q_1^2(n) + 2q_2^2(n) - q_2(n)q_1(n) - q_1(n)q_2(n) - \\ &\quad - q_1(n)q_2(n-1) - q_2(n)q_1(n+1)] \end{aligned}$$

(в последнем равенстве мы произвели замену «немного» индекса суммирования  $n$ ). Тогда коэффициенты  $B_{l_0, l'p}$

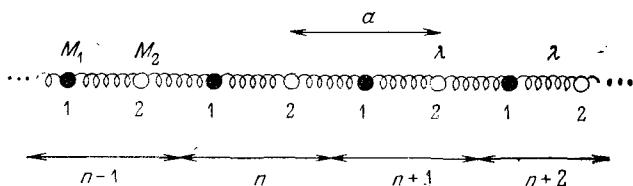


Рис. 14.8.

в одномерном аналоге выражения (14.59) примут вид

$$B_{10, 10} = B_{20, 20} = 2\lambda,$$

$$B_{20, 10} = B_{10, 20} = B_{10, 2-1} = B_{20, 11} = -\lambda,$$

а корни  $\omega_k^2$  матрицы  $\mathbf{E}$  будут найдены как решение уравнения

$$\begin{vmatrix} \frac{2\lambda}{M_1} - \omega_k^2 & -\frac{\lambda}{(M_1 M_2)^{1/2}} [1 + \exp(ika)] \\ -\frac{\lambda}{(M_1 M_2)^{1/2}} [1 + \exp(-ika)] & \frac{2\lambda}{M_2} - \omega_k^2 \end{vmatrix} = 0,$$

т. е.

$$\omega_k^2 = \lambda \left[ \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right) \pm \left\{ \left( \frac{1}{M_1} + \frac{1}{M_2} \right)^2 - \frac{2}{M_1 M_2} (1 - \cos ka) \right\}^{1/2} \right].$$

На рис. 14.9 графически представлена зависимость  $\omega_k^2$  от  $k$  в первой зоне Бриллюэна. Эта зависимость вновь

обнаруживает большое сходство с кривыми дисперсии для модели свободных электронов в двух низших зонах. Если добавить в элементарную ячейку еще несколько атомов, то соответственно возрастет и число зон, так что всегда каждому атому в элементарной ячейке будет соответствовать одна энергетическая зона. При  $k \rightarrow 0$  величина  $\omega_k^2$  также стремится к нулю, и если мы проквантуем колебания, как это было сделано в гл. 6, то получим кванты возбуждений, называемые фононами.

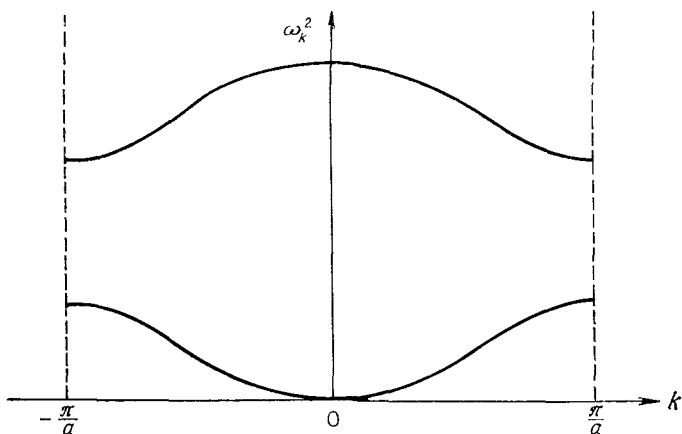


Рис. 14.9.

В случае трех измерений матрица  $E$ , элементы которой даются формулой (14.60), будет иметь размерность  $3s \times 3s$ , так что при каждом значении  $k$  будет существовать  $3s$  корней. Это означает, что каждой зоне на рис. 14.9 будут соответствовать три зоны в трехмерном случае. Три нижние зоны касаются в точке  $k=0$ ; при  $k=0$  они соответствуют трем трансляционным степеням свободы, которые сами по себе не являются колебательными.

В кристаллах с точечной симметрией могут возникать вырождения в особых точках зоны Бриллюэна, как, например, вдоль направления с вращательной симметрией. При таких значениях  $k$  матрица  $E$  может быть частично диагонализирована на основании соображений симметрии (подробнее см. § 9).

## § 6. СПИНОВЫЕ ВОЛНЫ В ФЕРРОМАГНЕТИКАХ

В простой модели ферромагнетика каждый атом, находящийся в узле  $n$ , обладает магнитным моментом  $\mu_n$  и при достаточно низких температурах (ниже точки Кюри) эти моменты выстраиваются почти в одном направлении. Таким образом, кристалл приобретает конечный магнитный момент в отсутствие какого-либо внешнего поля. Эксперимент показывает, что  $g$ -фактор для этого момента весьма близок к 2; поэтому можно считать, что магнитный момент возникает благодаря спинам неспаренных атомных электронов, причем орбитальный вклад «заморожен» кристаллическим полем, как показано в гл. 9, § 3. Несмотря на то что энергия взаимодействия имеет электростатическую природу и обусловлена обменными взаимодействиями между электронами, явление в целом можно рассматривать, взяв эффективный гамильтониан, который содержит в качестве слагаемого гейзенберговское взаимодействие

$$V = - \sum_{n, m} J_{nm} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m, \quad (14.61)$$

где  $\mathbf{S}_n$  — оператор спина атома в узле  $n$ . Обычно принимается, что  $J_{nn} = 0$ , а величины  $J_{nm}$  положительны, так что в основном состоянии спины всех атомов, а следовательно, и все магнитные моменты параллельны. При этом каждое слагаемое  $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m$  принимает свое максимальное значение  $S^2$ , где  $S$  — спин атома, так что энергия основного состояния дается простым выражением

$$E_0 = S^2 \sum_{n, m} J_{nm}. \quad (14.62)$$

Чтобы обосновать сказанное, обозначим состояние, в котором все спины выстроены в одном направлении (назовем его осью  $z$ ), через  $|0\rangle$ , а оператор  $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m$ , следуя (7.35), запишем в виде  $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m = \frac{1}{2}(\mathbf{S}_{n+} \mathbf{S}_{m-} + \mathbf{S}_{n-} \mathbf{S}_{m+}) + \mathbf{S}_{nz} \mathbf{S}_{mz}$ . Тогда получим

$$\mathbf{S}_{nz} |0\rangle = S |0\rangle$$

и  $\mathbf{S}_{n+} |0\rangle = 0$  при всех  $n$ , так что

$$\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m |0\rangle = S^2 |0\rangle. \quad (14.63)$$

Дальнейшая задача состоит в том, чтобы определить физическую природу и энергии низколежащих возбужденных состояний системы, которые заселяются за счет теплового движения при низких температурах. Естественно предположить, что взаимодействие (14.61) обладает свойством трансляционной инвариантности, так что постоянные величины  $J_{nm}$  зависят только от разностей векторов  $\mathbf{m} - \mathbf{n} = \mathbf{q}$ ; в дальнейшем мы будем пользоваться обозначением  $J_{nm} = J_{\mathbf{q}}$ . Поэтому собственные функции оператора  $\mathbf{V}$  должны нести индекс  $\mathbf{k}$ , причем очевидно, что волновое состояние  $|0\rangle$  также трансляционно-инвариантно и соответствует значению  $\mathbf{k} = 0$ . Взяв в качестве исходного основное состояние, в котором все спины параллельны, можно построить большое число разных волновых функций с данными  $\mathbf{k}$ . Наша цель состоит в построении собственных функций, соответствующих именно низколежащим состояниям. Имея в виду упорядоченный характер основного состояния, можно искать возбужденное состояние, «повернув» спин в одном узле  $\mathbf{p}$  с помощью понижающего оператора  $S_p^-$  и затем произведя проектирование для получения состояния с определенным  $\mathbf{k}$ . Полученную пробную функцию можно записать в виде

$$|\mathbf{k}\rangle = \sum_{\mathbf{p}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}) S_p^- |0\rangle. \quad (14.64)$$

Покажем, что она действительно является собственной функцией оператора  $\mathbf{V}$  при всех  $\mathbf{k}$ . Оператор  $S_n \cdot S_m$  коммутирует с  $S_p^-$ , если только индекс  $\mathbf{p}$  не равен  $\mathbf{n}$  или  $\mathbf{m}$ , поскольку спиновые операторы на разных узлах коммутируют друг с другом. Тогда с учетом равенства (14.63) имеем

$$\begin{aligned} S_n \cdot S_m |\mathbf{k}\rangle &= S^2 |\mathbf{k}\rangle + \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) [(S_n \cdot S_m), S_n^-] |0\rangle + \\ &+ \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{m}) [(S_n \cdot S_m), S_m^-] |0\rangle. \end{aligned}$$

Выражения для коммутаторов следуют из известных перестановочных соотношений (7.28) и (7.30) для спиновых операторов; получаем

$$[(S_n \cdot S_m), S_n^-] = S_{mz} - S_{nz} - S_n^- S_{mz}$$

при всех  $\mathbf{m} \neq \mathbf{n}$ . (Случай  $\mathbf{m} = \mathbf{n}$  можно не рассматривать ввиду того, что  $J_{nn} = 0$ .) Объединяя полученные два вы-

ражения с (14.61), находим

$$\begin{aligned}
 \mathbf{V} |k\rangle &= -S^2 \sum_{n, m} J_{nm} |k\rangle - S \sum_{n, m} J_{nm} \{ \exp(ik \cdot n) (S_{m-} - S_{n-}) + \\
 &+ \exp(ik \cdot m) (S_{n-} - S_{m-}) \} |0\rangle = \\
 &= E_0 |k\rangle + S \sum_{n, m} J_q \{ [1 - \exp(ik \cdot q)] \exp(ik \cdot n) S_{n-} + \\
 &+ [1 - \exp(-ik \cdot q)] \exp(ik \cdot m) S_{m-} \} |0\rangle, \text{ где } q = m - n, \\
 \mathbf{V} |k\rangle &= E_0 |k\rangle + S \sum_q J_q [1 - \exp(ik \cdot q)] |k\rangle + \\
 &+ S \sum_q J_q [1 - \exp(-ik \cdot q)] |k\rangle = \\
 &= E_0 |k\rangle + 2S \sum_q J_q (1 - \cos k \cdot q) |k\rangle. \quad (14.65)
 \end{aligned}$$

Полученный результат доказывает, что состояние  $|k\rangle$  является собственным состоянием с энергией возбуждения  $2S \sum_q J_q (1 - \cos k \cdot q)$ , где вектор  $q$  пробегает по всем узлам, исходя из выбранного фиксированного узла. При каждом  $k$  мы получаем возбуждение подобного типа, называемое магноном. Данная задача, очевидно, аналогична задаче о колебаниях решетки, рассмотренной в § 5, причем поворот спина в узле соответствует смещению атома в этом узле. Заметим, что при  $k \rightarrow 0$  энергия возбуждения тоже стремится к нулю как  $k^2$ , так что возбуждения можно создать при сколь угодно малой энергии. В отличие от этого среднее значение оператора  $\mathbf{V}$  по состоянию  $S_{p-} |0\rangle$  с одним перевернутым спином в узле  $p$  будет конечным. Состояние  $|k\rangle$ , соответствующее значению  $k=0$ , хотя и обладает нулевой энергией возбуждения, не тождественно основному состоянию, поскольку оно дается выражением  $\sum_p S_{p-} |0\rangle$ . Однако оператор  $\sum_p S_{p-}$  является оператором полного спина системы; его действие на состояние  $|0\rangle$  выражается в бесконечно малом повороте направления упорядочения спинов и не соответствует какому-либо внутреннему возбуждению в системе. Описанное вырождение между состояниями с различными направлениями намагниченности внутренне присуще взаимодействию  $\mathbf{V}$ , которое обладает вращательной инвариантностью. В реальном кристалле анизотропия снимает это вырождение; она проявляется в добавлении к  $\mathbf{V}$  слагаемых, нарушающих вращательную инвариантность.



Оператор в формуле (14.64) называется оператором рождения магнона и обозначается через  $a_k^\dagger$ :

$$a_k^\dagger = \mathcal{N} \sum_p \exp(ik \cdot p) S_{p-},$$

где  $\mathcal{N}$  — нормировочный множитель. С помощью такого оператора можно получить и двухмагнонное состояние

$$\psi = a_k^\dagger a_k^\dagger |0\rangle.$$

Это не совсем точное собственное состояние, но ошибка имеет порядок  $1/N$ , где  $N$  — число (обычно большое) атомов в кристалле. С такой же точностью операторы рождения и уничтожения магновов подчиняются перестановочным соотношениям Бозе — Эйнштейна (гл. 19, § 1; гл. 6, § 3, п. А), так что можно говорить о состоянии, в котором имеется  $n_k$  магновов с волновым вектором  $k$ . Каждый магнон несет энергию возбуждения, даваемую формулой (14.65).

## § 7. ЭКСИТОНЫ В ДИЭЛЕКТРИКАХ (ЭКСИТОНЫ ФРЕНКЕЛЯ)

В простых диэлектриках, например в твердой фазе инертных газов, где отсутствуют валентные электроны, перекрытие атомных волновых функций действительно очень мало. Поэтому в очень хорошем приближении можно считать, что в основном состоянии имеются отдельные электроны, занимающие атомные орбитали отдельных атомов. Как и в случае спиновых волн, можно попытаться построить возбужденные состояния, переводя электрон данного атома в более высокое незанятое орбитальное состояние. Однако и здесь мы вновь вынуждены производить операцию проектирования при построении состояния с определенным  $k$ .

Пусть  $\phi$  — многоэлектронное основное состояние атома, а  $\phi'$  — возбужденное состояние, полученное из  $\phi$  путем перевода электрона на более высокую орбиталь; далее, пусть  $\phi_p$  и  $\phi'_p$  — соответствующие волновые функции для данного узла  $p$ . Для всего кристалла в целом соответствующее основное состояние будет иметь вид

$$\Psi^0 = \prod_p \phi_p,$$

а состояние с возбуждением на узле  $\mathbf{p}$  — вид

$$\Psi_{\mathbf{p}} = \varphi_{\mathbf{p}}' \prod_{\mathbf{q} \neq \mathbf{p}} \varphi_{\mathbf{q}}. \quad (14.66)$$

Тогда полученное в результате проектирования состояние с правильной трансляционной симметрией  $\mathbf{k}$ , называемое *экситоном*, дается выражением

$$\Psi_{\text{экс}}^{(\mathbf{k})} = \sum_{\mathbf{p}} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{p}) \Psi_{\mathbf{p}}. \quad (14.67)$$

Отметим отличие от модели сильной связи, где состояния, которые мы строили, были одноэлектронными. Таким образом, экситон с волновым вектором  $\mathbf{k}$  — это возбуждение, распространяющееся по кристаллу (но, разумеется, не переносящее заряда). Энергия этого возбуждения зависит от вектора  $\mathbf{k}$ , но лишь в небольшой степени; она примерно равна энергии атомного возбуждения.

## § 8. ПРАВИЛА ОТБОРА ПРИ РАССЕЯНИИ

Правила отбора для процессов рассеяния в кристаллах можно вывести непосредственно из простого выражения (14.15) для произведения представлений. Например, если мы рассматриваем рассеяние электрона в кристалле (электрон-фоонное рассеяние), то вероятность рассеяния из состояния с волновым вектором  $\mathbf{k}$  в состояние с волновым вектором  $\mathbf{k}'$  вследствие поглощения фонона с волновым вектором  $\mathbf{q}$  будет зависеть от матричного элемента, который равен нулю, если только произведение представлений  $\Gamma^{(\mathbf{q})} \otimes \Gamma^{(\mathbf{k})}$  не содержит представления  $\Gamma^{(\mathbf{k}')}.$  Согласно формуле (14.15), это означает, что

$$\mathbf{k}' = \mathbf{q} + \mathbf{k} + \mathbf{K}_m. \quad (14.68)$$

Рассеяние с  $\mathbf{K}_m = 0$  обычно называется прямым, а с  $\mathbf{K}_m \neq 0$  — рассеянием с перебросом. Равенство (14.68) часто называют законом сохранения квазиимпульса в кристалле. В процессе рассеяния должна сохраняться и энергия, так что выполняется еще и соотношение

$$\hbar\omega_{\mathbf{q}} + \varepsilon(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}'). \quad (14.69)$$

Аналогичные соотношения справедливы и для других процессов рассеяния: электрон-магнонного, магнон-фоонного, электрон-фоонного, фоон-фоонного, магнон-экситонного.

## § 9. ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ

В предшествующих параграфах данной главы были рассмотрены следствия трансляционной симметрии в кристаллах. Однако бесконечный кристалл может быть также инвариантным относительно одной из конечных точечных групп поворотов, собственных или несобственных, причем в качестве неподвижной точки может быть выбран любой узел кристалла (гл.9). Например, такая инвариантность может иметь место, когда базисные векторы решетки  $\mathbf{a}_i$  расположены симметрично относительно друг друга. Рассмотрим далее группу  $\mathcal{G}$ , полученную объединением элементов  $P(n)$  группы трансляций  $\mathcal{T}$  с элементами  $R_i$  точечной группы поворотов вокруг одного из узлов решетки, который мы возьмем за начало координат.

Общий элемент группы записывается в виде  $\{R_i, n\}$  и определяется своим действием на произвольный вектор:

$$\{R_i, n\} \mathbf{r} = P(n) R_i \mathbf{r} = R_i \mathbf{r} + n. \quad (14.70)$$

Чтобы убедиться в том, что все такие элементы удовлетворяют групповым постулатам, нужно из равенства (14.70) вывести закон умножения:

$$\begin{aligned} \{R_j, m\} \{R_i, n\} \mathbf{r} &= \{R_j, m\} (R_i \mathbf{r} + n) = R_j (R_i \mathbf{r} + n) + m = \\ &= R_j R_i \mathbf{r} + R_j n + m = \{R_j R_i, R_j n + m\} \mathbf{r}, \end{aligned}$$

так что

$$\{R_j, m\} \{R_i, n\} = \{R_j R_i, R_j n + m\}. \quad (14.71)$$

Поскольку решетка инвариантна относительно действия точечной группы, вектор  $R_j n + m$  попадает в узел решетки, если  $n$  и  $m$  — тоже узлы решетки; таким образом, произведение (14.71) содержится в наборе (14.70).

Рассмотрим частный случай закона умножения (14.71): произведение чистого поворота на трансляцию; очевидно, что эти операции не коммутируют друг с другом. Действительно, полагая  $m=0$  и  $R_i=E$  (единица группы), имеем

$$R_j P(n) = \{R_j, 0\} \{E, n\} = \{R_j, R_j n\} = P(R_j n) R_j, \quad (14.72)$$

что можно записать также в виде

$$P(n) R_j = R_j P(R_j^{-1} n), \quad (14.73)$$

Таким образом, группа  $\mathcal{G}$  не является прямым произведением группы  $\mathcal{T}$  на точечную группу. В качестве другого частного случая соотношения (14.71) выведем выражение для обратного элемента

$$\{R_i, n\}^{-1} = \{R_i^{-1}, -R_i^{-1}n\}, \quad (14.74)$$

определив, при каком выборе  $R_i$  и  $n$  мы получим единичный элемент  $\{E, 0\}$  в правой части равенства (14.71).

Хотя  $R_i$  относится к поворотам вокруг узла решетки, расположенного в начале координат, в группу  $\mathcal{G}$  входят также повороты вокруг других узлов, поскольку произведение  $P(n)R_iP(-n)$  соответствует повороту  $R_i$  вокруг узла решетки  $n$  (задача 14.6), а не вокруг начала координат. Более того, для некоторых решеток в группу  $\mathcal{G}$  входят повороты вокруг точек, не совпадающих с узлами решетки. Например, в двумерной квадратной решетке для поворотов в плоскости  $xy$  можно доказать, что операция  $\{R_z(\pi/2), -a_1\}$  представляет собой поворот  $R_z(\pi/2)$  вокруг точки  $(1/2, 1/2, 0)$  в центре ячейки. Аналогичным образом можно построить отражения в плоскостях, проведенных через биссектрисы ячеек решетки.

В некоторых кристаллах могут существовать дополнительные операции симметрии, не имеющие вида (14.70). К их числу относятся так называемые винтовые перемещения и скользящие отражения; они представляют собой такие комбинации трансляций и поворотов, в которых отдельные преобразования не являются операциями симметрии кристалла. Мы не будем далее останавливаться на тех более широких группах, которые получаются в результате включения подобных операций, а отошлем читателя к работам [5, 6]. Это не уменьшит значения полученных нами результатов; нужно лишь иметь в виду, что в некоторых кристаллах могут встретиться добавочные вырождения, которые не объясняются нашей теорией. Рассматриваемую нами группу  $\mathcal{G}$  принято называть симморфной, а более общую пространственную группу, содержащую винтовые оси или плоскости скольжения, — несимморфной.

Включение операции обращения времени также расширит пространственные группы во многом аналогично тому, как это имело место для точечных групп (гл. 9, § 8). В частности, для магнитных кристаллов мы получим так

называемые магнитные пространственные группы, в которых обращение времени возникает в комбинации с поворотом или трансляцией и само по себе не является элементом симметрии.

Например, во многих антиферромагнетиках трансляция на вектор решетки должна сопровождаться обращением времени для обращения направления спинов. Мы также не будем здесь рассматривать эти магнитные пространственные группы; их полное описание можно найти в книге Брэдли и Крэкнелла (см. литературу к гл. 9).

### А. Неприводимые представления пространственных групп

Если  $T$  — некое представление пространственной группы  $\mathcal{G}$ , то оператор, соответствующий элементу группы  $\{R_i, n\}$ , обозначается через  $T(R_i, n)$ . Эти операторы должны удовлетворять тем же самым соотношениям, что и сами элементы, так что, согласно определению (14.70), можно написать

$$T(R_i, n) = T(n) T(R_i) \quad (14.75)$$

и, в частности, согласно (14.73),

$$T(n) T(R_i) = T(R_i) T(R_i^{-1}n). \quad (14.76)$$

В пространстве функций операторы представления определяются обычным образом; они должны удовлетворять соотношению

$$T(R_i, n) \varphi(r) = \varphi(\{R_i, n\}^{-1} r) = \varphi(R_i^{-1}r - R_i^{-1}n), \quad (14.77)$$

которое выводится с учетом равенства (14.74). Мы будем, в частности, рассматривать действие преобразований группы на базисные векторы  $e_k$ , которые выбираются так, чтобы они преобразовывались неприводимо относительно подгруппы трансляций  $\mathcal{T}$ , и потому снабжены индексом  $k$ . Приведем несколько важных результатов. Прежде всего действием простой трансляции из выражения (14.11) получаем, учитывая определение вектора  $e_k$ ,

$$T(E, n) e_k = T(n) e_k = T^{(k)}(n) e_k = \exp(-ik \cdot n) e_k. \quad (14.78)$$

Действием более общего преобразования  $\{R_i, n\}$  мы, ис-

пользуя формулу (14.76), получаем новый вектор

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_k &= T(\mathbf{R}_i, \mathbf{n}) \mathbf{e}_k = T(\mathbf{n}) T(\mathbf{R}_i) \mathbf{e}_k = T(\mathbf{R}_i) T(\mathbf{R}_i^{-1} \mathbf{n}) \mathbf{e}_k, \\ \text{откуда } \mathbf{e}'_k &= T(\mathbf{R}_i, \mathbf{n}) \mathbf{e}_k = \exp(-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i^{-1} \mathbf{n}) T(\mathbf{R}_i) \mathbf{e}_k = \\ &= \exp(-i \mathbf{R}_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}) T(\mathbf{R}_i) \mathbf{e}_k. \end{aligned} \quad (14.79)$$

Рассмотрим теперь действие чистой трансляции на этот новый вектор:

$$\begin{aligned} T(\mathbf{E}, \mathbf{m}) \mathbf{e}'_k &= T(\mathbf{E}, \mathbf{m}) [T(\mathbf{R}_i, \mathbf{n}) \mathbf{e}_k] = T(\mathbf{R}_i, \mathbf{m} + \mathbf{n}) \mathbf{e}_k = \\ &= \exp[-i \mathbf{R}_i \mathbf{k} \cdot (\mathbf{n} + \mathbf{m})] T(\mathbf{R}_i) \mathbf{e}_k = \exp(-i \mathbf{R}_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}) \times \\ &\quad \times [T(\mathbf{R}_i, \mathbf{n}) \mathbf{e}_k] = \\ &= \exp(-i \mathbf{R}_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{m}) \mathbf{e}'_k. \end{aligned} \quad (14.80)$$

Последнее выражение показывает, что вектор  $\mathbf{e}'_k$  преобразуется неприводимо под действием подгруппы трансляций и принадлежит представлению  $T^{(\mathbf{R}_i \mathbf{k})}$ . (Мы пользуемся здесь общим методом, излагаемым в гл. 20, § 3.)

Эти общие результаты мы используем теперь при построении и классификации (индицировании) неприводимых представлений пространственной группы  $\mathcal{G}$ . Обозначим через  $L$  векторное пространство неприводимого представления. Поскольку трансляции образуют подгруппу  $\mathcal{T}$  группы  $\mathcal{G}$ , можно произвольно выбрать базисные векторы, принадлежащие неприводимым представлениям  $T^{(\mathbf{k})}$  группы  $\mathcal{T}$ . Пусть  $\mathbf{e}_k$  — один из таких базисных векторов. Тогда мы можем построить набор векторов, действуя на  $\mathbf{e}_k$  всеми элементами группы  $T(\mathbf{R}_i, \mathbf{n})$ . Прежде чем идти далее, необходимо уточнить, что здесь имеются векторы двух разных типов: векторы  $\mathbf{k}$  в обычном трехмерном пространстве и векторы  $\mathbf{e}_k$  в векторном пространстве  $L$  представления. Мы будем называть оба типа просто векторами, но из контекста и из обозначений будет ясно, какой из типов векторов мы имеем в виду. Для удобства рассмотрим сначала случай, когда вектор  $\mathbf{k}$  не обладает какой-либо особой симметрией, т. е. ни один из поворотов  $\mathbf{R}_i$  не оставляет  $\mathbf{k}$  без изменения. В этом случае все векторы, входящие в набор  $\mathbf{k}_i = \mathbf{R}_i \mathbf{k}$ , разные, так как в противном случае из равенства  $\mathbf{k}_i = \mathbf{R}_i \mathbf{k}$  следовало бы, что  $\mathbf{R}_i^{-1} \mathbf{R}_i \mathbf{k} = \mathbf{k}$ , т. е. что  $\mathbf{k}$  обладает особой симметрией. Набор векторов  $\mathbf{k}_i$  называется звездой вектора  $\mathbf{k}$ . Следовательно, согласно формуле (14.80), все векторы, входящие в набор

$e_{k_i} = T(R_i) e_k$  в пространстве  $L$ , принадлежат разным неприводимым представлениям  $T^{(k)}$  группы  $\mathcal{G}$  и потому линейно-независимы. Далее, покажем, что они образуют инвариантное пространство и тем самым дают представление  $\mathcal{G}$ . Другими словами, набор векторов  $e_{k_i}$ , полученный из  $e_k$  действием *только* группы *вращений*  $T(R_i)$ , образует базис представления  $\Gamma$  полной группы  $\mathcal{G}$ . Чтобы показать это, вычислим действие общего преобразования  $\{R_j, m\}$  на векторы  $e_{k_i}$ :

$$T(R_j, m) e_{k_i} = T(R_j, m) T(R_i) e_k = T(R_j R_i, m) e_k$$

в силу равенства (14.71). Если ввести обозначение элемента группы  $R_j R_i = R_l$ , то на основании формулы (14.79) можно написать

$$T(R_j, m) e_{k_i} = \exp(-i R_l k \cdot m) T(R_l) e_k = \exp(-i k_l \cdot m) e_{k_l}, \quad (14.81)$$

где  $k_l = R_l k = R_j k_i$ . Это выражение дает общий матричный элемент для общего элемента  $\{R_j, m\}$  группы  $\mathcal{G}$ . Заметим, что размерность представления  $\Gamma$  равна числу  $g$  элементов в точечной группе. Как и в гл. 7, § 4, п. Б, теперь можно утверждать, что набор  $e_{k_i}$  образует базис для пространства  $L$  неприводимого представления; действительно, в противном случае пространство  $L$  можно было бы разложить. Таким образом, структура неприводимых представлений группы  $\mathcal{G}$  описывается базисными векторами  $e_{k_i}$  с матричными элементами (14.81). Представление индицируется произвольным вектором  $k$  и обозначается через  $\Gamma^{(k)}$ . Очевидно, что представление  $\Gamma^{(k)}$  эквивалентно представлению  $\Gamma^{(k_i)}$  при любом  $k_i$ , входящем в звезду вектора  $k$ , и, подобно группе трансляций, существует инвариантность представления  $\Gamma^{(k)}$  относительно замены индекса  $k$  на  $k + K_n$ , где  $K_n$  — любой вектор обратной решетки.

Если вектор  $k$  обладает некой особой симметрией (например, лежит на оси вращения порядка  $n$  или на плоскости зеркального отражения), то он будет инвариантным относительно некоторых элементов  $R_i$ . Эти элементы должны образовать подгруппу точечной группы, которую обычно называют «малой группой» для вектора  $k$ . Если обозначить через  $g_l$  порядок малой группы для  $k$ , а че-

рез  $g$  — порядок точечной группы, то можно показать (задача 14.7), что звезда вектора  $k$  содержит теперь лишь  $g/g_i$  векторов, которые мы обозначим через  $k_p$ . Вообще говоря, имеется более одного вращения  $R$ , обладающего свойством  $Rk = k_p$  при фиксированных  $k$  и  $k_p$ , но для каждого  $k_p$  мы выберем только одно из них и обозначим его через  $H_p$ . Нетрудно показать, что любое вращение можно записать в виде  $R_i = H_p G_a$ , где  $G_a$  принадлежит малой группе.

Неприводимые представления группы  $\mathcal{G}$  будут обладать теперь более сложной структурой, поскольку векторы  $e_{k_i}$  теперь уже не обязательно линейно-независимы. Подмножество векторов  $e_{k_i}$  с  $k_i = k$ , соответствующих элементам малой группы, образует подпространство  $L'$  пространства  $L$ , инвариантное относительно малой группы. Поскольку сама малая группа есть одна из точечных групп, ее неприводимые представления хорошо известны; они обозначаются символом  $T^{(\alpha)}$ . Можно показать, что если на пространстве  $L$  должно осуществляться неприводимое представление пространственной группы, то представление малой группы, действующее на подпространстве  $L'$ , должно быть неприводимым по отношению к малой группе. Таким образом, если  $s_\alpha$  — размерность представления  $T^{(\alpha)}$ , то должен существовать набор  $s_\alpha$  линейно-независимых базисных векторов  $e_{k\mu}^{(\alpha)}$ , где  $\mu = 1, 2, \dots, s_\alpha$ , которые дают представление  $T^{(\alpha)}$  малой группы и все преобразуются как  $T^{(k)}$  при трансляциях. Взяв элементы  $H_p$ , не входящие в малую группу, можно далее построить соответствующий набор  $s_\alpha$  новых базисных векторов  $e_{k_p\mu}^{(\alpha)}$  для каждого из  $g/g_i$  векторов  $k_p$ , образующих звезду. Поэтому представление группы  $\mathcal{G}$  имеет размерность  $s_\alpha g/g_i$  и обозначается символом  $\Gamma^{(\alpha k)}$ .

Чтобы построить матричные элементы представления, соответствующие выражению (14.81) в случае особой симметрии, необходимо прежде всего записать общее вращение в виде  $R_i = H_p G_a$ , где  $G_a$  — один из элементов малой группы, а  $H_p$  — один из элементов набора вращений (один для каждого вектора звезды), удовлетворяющий равенству  $H_p k = k_p$ . Взяв в качестве исходного вектор  $e_{k\mu}$ , определим общий базисный вектор в виде

$$e_{k_p\mu}^{(\alpha)} = T(H_p) e_{k\mu}^{(\alpha)}.$$



Тогда матричный элемент дается выражением

$$\begin{aligned} T(R_j, n) e_{k_{p\mu}}^{(\alpha)} &= T(n) T(R_j) T(H_p) e_{k_{\mu}}^{(\alpha)} = T(n) T(H_q) T(G_b) e_{k_{\mu}}^{(\alpha)} = \\ &= T(n) \sum_{\mu'} T_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(G_b) T(H_q) e_{k_{\mu'}}^{(\alpha)} = \\ &= T(n) \sum_{\mu'} T_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(G_b) e_{k_{q\mu'}}^{(\alpha)} = \\ &= \exp(-ik_q \cdot n) \sum_{\mu'} T_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(G_b) e_{k_{q\mu'}}^{(\alpha)}. \end{aligned}$$

При выводе последнего результата мы рассматривали  $H_q$  и  $G_b$  как множители в разложении вращения  $R_j H_p = H_q G_b$  (подобным образом можно разложить любое вращение). Вектор  $k_q$  дается равенством  $k_q = H_q k$  и совпадает с  $R_j k_p$ .

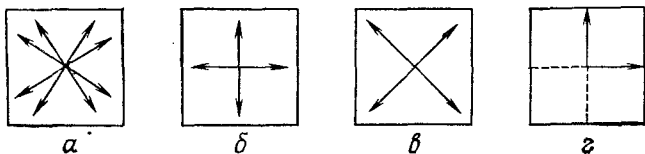


Рис. 14.10. Звезды вектора  $k$  для двумерной квадратной кристаллической решетки с группой симметрии  $C_{4v}$ . а—общий случай; б—вектор  $k$  вдоль оси  $x$ ; в—вектор  $k$  вдоль диагонали квадрата; г—вектор  $k$  на границе зоны вдоль оси  $x$ .

поскольку  $k$  не меняется под действием оператора  $G_b$ . Коэффициенты  $T_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(G_b)$ —обычные матрицы неприводимых представлений для малых групп.

Некоторые примеры звезд для двумерных решеток приведены на рис. 14.10; в качестве трехмерного примера выберем простую кубическую решетку, для которой зона Бриллюэна также представляет собой куб с ребром  $2\pi/a$ . Здесь мы имеем дело с точечной группой  $O_h$ , и в звезде произвольного вектора  $k$  насчитывается 48 векторов  $k_i$ . На рис. 14.11 показаны особые значения  $k$ , обладающие симметрией, и их обозначения, принятые в физике твердого тела. Для произвольной точки  $\Delta$  вдоль оси  $k_x$  малая группа—это группа  $C_{4v}$ , содержащая 8 элементов; ее звезда насчитывает 6 векторов (точек). Для некой точки  $X$  на одной из граней зоны (где  $k_x = \pi/a$ ) имеет место дополнительная симметрия, поскольку она эквивалентна вектору  $k$  с  $k_x = -\pi/a$ . Поэтому малая группа для точки  $X$  имеет плоскость отражения, перпендикулярную

оси  $x$ ; она является группой  $D_{4h}$  и содержит 16 элементов. Звезда для  $X$  насчитывает лишь 3 вектора (точки). В центре куба  $\Gamma$  малая группа становится полной группой куба  $O_h$ . Аналогично можно показать, переходя от точки  $\Gamma$  к  $M$  вдоль линии  $\Gamma M$ , что для произвольной точки  $\Sigma$  малая группа—это группа  $C_{2v}$  с 4 элементами и звездой из 10 векторов. Однако в самой точке  $M$  все четыре верши-

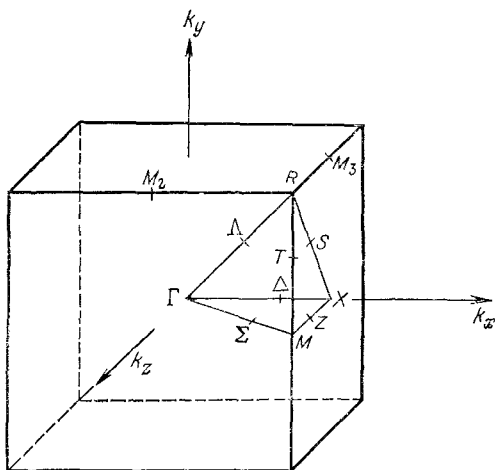


Рис. 14.11.

ны куба в плоскости  $k_x k_z$  эквивалентны, и возникающая при этом группа симметрии есть группа  $D_{4h}$  с 16 элементами; в этом случае звезда  $M$  имеет лишь три точки:  $M_1$ ,  $M_2$ ,  $M_3$  (рис. 14.11).

## Б. Применения к электронным состояниям

В § 4 было показано, каким образом трансляционная симметрия приводит к индцированию собственных функций вектором  $\mathbf{k}$ , соответствующим неприводимым представлениям  $\Gamma^{(\mathbf{k})}$  группы трансляций  $\mathcal{T}$ . При этом, однако, отсутствовало вырождение, поскольку все эти представления были одномерными. Включение симметрии точечной группы приводит к представлениям  $\Gamma^{(\mathbf{k})}$  пространственной группы  $\mathcal{G}$ , которые тоже индцируются векто-

Таблица 14.1

Характеры неприводимых представлений групп  $C_{4v}$ ,  $O_h$  и  $D_{4h}$  (для общих элементов, т. е. для элементов, входящих в  $C_{4v}$ ). Чтобы различить представления разных групп, мы не пользуемся здесь обычными обозначениями (приложение 1), но обозначаем их символами  $\Delta_i$ ,  $\Gamma_i$  и  $X_i$ . Группы  $O_h$  и  $D_{4h}$  — это произведения групп с множителем  $S_2$ , а поэтому их представления несут индекс «+» или «-». Мы даем только представления с отрицательной четностью, так как нас интересуют в основном  $p$ -состояния. Единственные имеющиеся состояния с положительной четностью принадлежат тривиальным тождественным представлениям  $\Gamma_1^+$  и  $X_1^+$ .

|             | $C_{4v}$   |            |            |            |            | $O_h$        |              |              |              |              | $D_{4h}$ |         |         |         |         |                      |
|-------------|------------|------------|------------|------------|------------|--------------|--------------|--------------|--------------|--------------|----------|---------|---------|---------|---------|----------------------|
|             | $\Delta_1$ | $\Delta_2$ | $\Delta_3$ | $\Delta_4$ | $\Delta_5$ | $\Gamma_1^-$ | $\Gamma_2^-$ | $\Gamma_3^-$ | $\Gamma_4^-$ | $\Gamma_5^-$ | $X_1^-$  | $X_2^-$ | $X_3^-$ | $X_4^-$ | $X_5^-$ | $\chi_{\text{вект}}$ |
| E           | 1          | 1          | 1          | 1          | 2          | 1            | 1            | 2            | 3            | 3            | 1        | 1       | 1       | 1       | 2       | 3                    |
| $C_2$       | 1          | 1          | 1          | 1          | -2         | 1            | 1            | 2            | -1           | -1           | 1        | 1       | 1       | 1       | -2      | -1                   |
| $2C_4$      | 1          | 1          | -1         | -1         | 0          | 1            | -1           | 0            | 1            | -1           | 1        | 1       | -1      | -1      | 0       | 1                    |
| $2\sigma_v$ | 1          | -1         | 1          | -1         | 0          | -1           | -1           | -2           | 1            | 1            | -1       | 1       | -1      | 1       | 0       | 1                    |
| $2\sigma_d$ | 1          | -1         | -1         | 1          | 0          | -1           | 1            | 0            | 1            | -1           | -1       | 1       | 1       | -1      | 0       | 1                    |

ром  $k$ , но имеют размерность  $g$  (порядок точечной группы) при любом  $k$ . Отсюда следует, что значение энергии  $\varepsilon(k)$  для некоторого  $k$  будет повторяться при всех значениях  $k_i$ , принадлежащих звезде вектора  $k$ ; другими словами, изоэнергетические поверхности, построенные в функции вектора  $k$ , будут обладать полной симметрией точечной группы.

Для вектора  $k$  с особой симметрией неприводимое представление  $\Gamma^{(\alpha k)}$  имеет размерность  $s_\alpha g/g_l$ , т. е. возникает некоторое вырождение. Это соответствует вырождению порядка  $g/g_l$ , обусловленному числом точек (векторов) звезды, а также вырождению порядка  $s_\alpha$  в каждой из точек, обусловленному неприводимым представлением малой группы.

Посмотрим теперь, как можно использовать эти результаты для расчета зонной структуры, рассматривая движение электронов в кристалле в приближении сильной связи (§ 4, п. В). Проиллюстрируем метод таких вычислений на примере расчета зависимости  $\varepsilon(k)$  для зон, построенных на основе атомных  $p$ -функций, когда  $k$  лежит на оси  $x$  кубического кристалла, а в точке  $\Delta$  (рис. 14.11) имеется малая группа  $C_{4v}$ . Характеристики этой группы даны

в табл. 14.1, где ее неприводимые представления обозначены через  $\Delta_1, \dots, \Delta_5$ . Три атомные  $p$ -функции преобразуются по векторному представлению (гл. 5, § 4), характер которого указан в последней строке таблицы. Очевидно, что он сводится к сумме соответствующих характеров представлений  $\Delta_1$  и  $\Delta_5$  малой группы; заметим, что из трех  $p$ -функций  $p_x$  принадлежит представлению  $\Delta_1$ , а пара  $p_y$  и  $p_z$  — представлению  $\Delta_5$  (напомним, что ось  $x$  является осью четвертого порядка). Как и в формуле (14.39), можно построить три блоховских состояния

$$\varphi_q^{(k)} = \sum_n \exp(ik \cdot n) \varphi_q(r - n), \quad (14.82)$$

где  $q = x, y, z$ ; в рассматриваемом случае, когда вектор  $k$  лежит на оси  $x$ , эти состояния преобразуются так же, как и  $p$ -функции, под действием малой группы. Если эти состояния использовать далее в вариационном расчете (§ 4, п. В), то можно прийти к выводу, что состояния  $\varphi_y^{(k)}$  и  $\varphi_z^{(k)}$  будут вырожденными и принадлежащими представлению  $\Gamma(\Delta_5 k)$ , а состояние  $\varphi_x^{(k)}$  принадлежит представлению  $\Gamma(\Delta_1 k)$ . Эти состояния не будут перемешиваться, поскольку они принадлежат неэквивалентным представлениям.

Если при вариационном расчете использовать дополнительно блоховское состояние  $\varphi_s^{(k)}$ , образованное из атомного  $s$ -состояния и имеющее, очевидно, симметрию  $\Delta_1$ , то оно, разумеется, будет смешиваться с состоянием  $\varphi_s^{(k)}$ . Тогда матричные элементы гамильтониана  $H$  в том же приближении ближайших соседей, что и в формуле (14.51), будут иметь вид

$$\begin{aligned} H_{ss}^k &= \varepsilon_s + V_{ss}(0) + 2V_{ss}(0 \ 0 \ a)(2 + \cos k_x a), \\ H_{sx}^k &= 2iV_{sx}(a \ 0 \ 0) \sin k_x a, \\ H_{xx}^k &= \varepsilon_p + V_{xx}(0) + 2[2V_{xx}(0 \ 0 \ a) + V_{xx}(a \ 0 \ 0) \cos k_x a], \\ H_{yy}^k &= H_{zz}^k = \varepsilon_p + V_{xx}(0) + 2[V_{xx}(0 \ 0 \ a) + \\ &\quad + V_{xx}(a \ 0 \ 0) + V_{xx}(0 \ 0 \ a) \cos k_x a]. \end{aligned}$$

Обозначения, имевшиеся в формуле (14.51), здесь дополнены обозначениями вида

$$V_{sx}(p) = \int \varphi_s^*(r - p) - [V(r) - V_{ат}(r)] \varphi_x(r) dr$$

и учтены соотношения

$$\begin{aligned} V_{xx}(0\ 0\ a) &= V_{xx}(0\ a\ 0) = V_{yy}(a\ 0\ 0) = V_{yy}(0\ 0\ a), \\ V_{xx}(a\ 0\ 0) &= V_{yy}(0\ a\ 0), \\ V_{xx}(0) &= V_{yy}(0), \quad V_{sx}(0\ a\ 0) = V_{sx}(0\ 0\ a) = 0. \end{aligned}$$

Матрица размерности  $2 \times 2$ , соответствующая смеси  $s$ - и  $p$ -состояний, может быть теперь диагонализирована. Мы не будем приводить здесь детальные выражения для энергий, а представим результаты графически (рис. 14.12). Как видно из рисунка, при  $k \rightarrow 0$  энергии для  $\Delta_5$  и  $\Delta_1$  сходятся в одну точку, а волновые  $s$ - и  $p$ -функции перестают смешиваться. Такого добавочного вырождения, разумеется, и следовало ожидать, поскольку в точке  $\Gamma$  малая группа становится полной группой  $O_h$  и все три блоховские функции из формулы (14.82) преобразуются

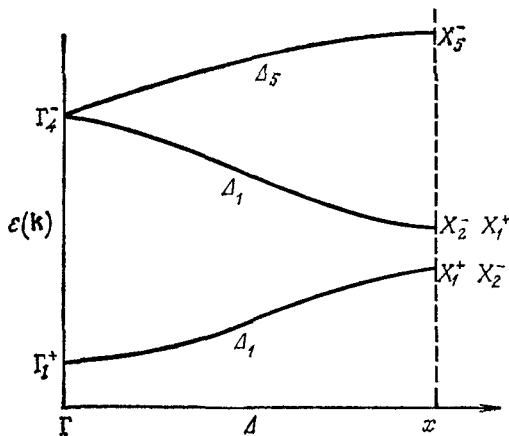


Рис. 14.12. Энергетические зоны (в приближении сильной связи) для  $s$ - и  $p$ -подобных атомных состояний с вектором  $k$  вдоль оси  $x$ .

согласно неприводимому представлению  $\Gamma_4^-$  группы  $O_h$ . Представления  $\Delta_1$  и  $\Delta_5$  группы  $C_{4v}$ , которым соответствуют кривые, соединяющиеся в точке  $\Gamma$ , могут быть получены из представления  $\Gamma_4^-$  путем разложения  $\Gamma_4^-$  при ограничении полной группы  $O_h$  подгруппой  $C_{4v}$  (гл. 4, § 18). Указанная связь между  $\Delta_1$  и  $\Delta_5$ , с одной стороны,

и  $\Gamma_4^-$  — с другой, носит название соотношения совместности. Таким же способом можно классифицировать неприводимое представление в точке  $X$  по неприводимым представлениям малой группы в  $X$  (она совпадает с  $D_{4h}$ ); используя таблицу характеров, мы получаем индексы, показанные на рис. 14.12.

## В. ДРУГИЕ ВОЗБУЖДЕНИЯ

Все свойства симметрии функции  $\varepsilon(\mathbf{k})$ , установленные в п. Б для энергетических зон электронов в кристаллах, относятся и к другим возбуждениям, о которых шла речь в § 5—7. Например, при вычислении частот колебаний решетки три взаимно-ортогональных смещения атома в узле преобразуются точно так же, как и  $p$ -функции. Поэтому все сказанное о зонах, построенных из  $p$ -функций в приближении сильной связи, можно перенести на вычисление колебательного спектра простой кубической решетки.

## ЛИТЕРАТУРА

В качестве основной литературы по физическим вопросам, затронутым в данной главе, можно предложить одно из следующих руководств:

1. Kittel C., Introduction to Solid State Physics, Wiley, New York, 1971.

[Имеется перевод: Куммель Ч. Введение в физику твердого тела: — М.: Наука, 1978.]

2. Elliott R. J., Gibson A. F., An Introduction to Solid State Physics and its Applications, Macmillan, London, 1974.

3. Harrison W. A., Solid State Theory, McGraw-Hill, New York, 1970.

[Имеется перевод: Харрисон У. Теория твердого тела. — М.: Мир, 1972.]

Более серьезное изложение можно найти в книге:

4. Ziman J. M., Principles of the Theory of Solids, Cambridge University Press, 1972.

[Имеется перевод: Займан Дж. Принципы твердого тела. — М.: Мир, 1978.]

Специальный обзор по связи между симметрией и электронными состояниями в металлах:

5. Nussbaum A., Solid. St. Phys., 18, 165 (1966).

Для дальнейшего изучения пространственных групп рекомендуем книгу:

6. Birman J. L., Theory of space groups and infra-red and Raman lattice processes in insulating crystals. — in: Handbuch der Physik, Bd. 25 (2b), 1974; Light and matter. — in: Handbuch der Physik, Bd. 25 (1b), 1974.

## ЗАДАЧИ

- 14.1. Покажите, что объем зоны Бриллюэна равен  $(2\pi)^3/v_c$ , где  $v_c$  — объем элементарной ячейки.
- 14.2. Покажите, что любой вектор  $\mathbf{k}_m$ , удовлетворяющий уравнению (14.16), является вектором обратной решетки.
- 14.3. Покажите, что уравнение парабол, изображенных на рис. 14.4 и соответствующих приближению свободных электронов, таково:

$$\varepsilon_{n_1 n_2}^0(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2M} \left\{ \left( \frac{2\pi n_1}{a_1} + k_x \right)^2 + \left( \frac{2\pi n_2}{a_2} + k_y \right)^2 \right\},$$

где  $n_1$  и  $n_2$  — целые числа.

- 14.4. Изобразите зону Бриллюэна для плоской квадратной решетки в двух измерениях, имеющей группу симметрии  $C_{4v}$ . Отметьте на ней шесть видов особых точек, в которых малая группа вектора  $\mathbf{k}$  нетривиальна. Какова малая группа в каждой из этих точек? Постройте таблицу соотношений совместности для неприводимых представлений вектора  $\mathbf{k}$ , лежащего на оси  $x$  на рис. 14.10, в предельных случаях  $k \rightarrow 0$  и  $k \rightarrow \pi/a$ .
- 14.5. В § 4, п. А была использована теория возмущений для вырожденного уровня при построении волновых функций, а следовательно, и энергий на границе зоны в модели почти свободных электронов. Примером состояний, преобразующихся неприводимо под действием малой группы в этой точке, служат четные и нечетные волновые функции. Рассмотрите двумерную квадратную решетку из предыдущей задачи и проведите аналогичное вычисление, используя четыре вырожденные плоские волны, соответствующие вектору  $\mathbf{k} = (\pm \pi/a, \pm \pi/a)$ . Все эти функции имеют одинаковый приведенный вектор  $\mathbf{k}$ , соответствующий одной из особых точек зоны. Малая группа в каждой такой точке — это полная группа симметрии  $C_{4v}$ . Вычислив характер представления, порождаемого четырьмя эквивалентными плоскими волнами, покажите, что вырожденное состояние может расщепиться на дублет и два синглета. Используйте при этом проекционные операторы для построения собственных состояний. Вычислите для этих состояний энергии почти свободных электронов в первом порядке по  $V(\mathbf{r})$ .
- 14.6. Покажите, что произведение  $P(\mathbf{n}) R_i P(-\mathbf{n})$  соответствует повороту на тот же угол, что и при операции  $R_i$ , но вокруг точки  $\mathbf{n}$ .
- 14.7. Покажите, что если  $g_l$  — порядок малой группы вектора  $\mathbf{k}$ , а  $g$  — порядок полной точечной группы, звезда вектора  $\mathbf{k}$  содержит  $g/g_l$  векторов.
- 14.8. Покажите, что при операциях, входящих в малую группу, три блоховские функции  $\varphi_q^{(\mathbf{k})}$  [формула (14.82)] преобразуются так же, как и атомные  $p$ -функции с центром в начале координат.

---

## ПРОСТРАНСТВО И ВРЕМЯ

Значительная часть нашей книги посвящена пространственным симметриям. Насколько известно, пространство является однородным в том смысле, что эксперимент в одной лаборатории дает такой же результат, как и в другой, и что результат эксперимента не зависит от пространственной ориентации экспериментальной установки. Это означает, что законы природы инвариантны по отношению к сдвигам и вращениям, а отсюда следуют законы сохранения импульса, углового момента и все другие связанные с этой инвариантностью эффекты, о которых говорилось в предыдущих главах. (Система атомов в кристалле создает потенциал, который не имеет таких непрерывных симметрий и инвариантен лишь по отношению к конечным сдвигам и вращениям, как говорилось в гл. 14.) Время тоже считается однородным в том смысле, что эксперимент, проведенный сегодня, даст тот же результат, если его повторить, скажем, завтра. Из инвариантности относительно сдвигов во времени следует закон сохранения энергии. В уравнении Шредингера, из которого мы до сих пор исходили, учитывается такая инвариантность. Теория относительности Эйнштейна возникла на основе представления о том, что пространству и времени присуща более глубокая однородность, что законы природы инвариантны по отношению к преобразованиям Лоренца, которые действуют в четырехмерном «пространстве» пространства-времени. Преобразования Лоренца включают в себя как частные случаи пространственные вращения, пространственные и временные сдвиги. В новой теории естественным образом возникает понятие массы покоя частицы, и оказывается, что уравнение Шредингера не инвариантно относительно преобразований Лоренца. Для того чтобы эта инвариантность имела место, необхо-



димом внести существенные изменения как в классическую, так и в квантовую механику. Правда, эти изменения существенны лишь при скоростях, близких к скорости света (т. е. порядка  $3 \cdot 10^8$  м/с). Таким образом, для большинства классических и квантовых эффектов, касающихся структуры атомов, молекул и ядер, релятивистские поправки малы. В данной главе мы рассмотрим группы, связанные с преобразованиями Лоренца, и выясним, каким образом представления этих групп связаны с физическими величинами. Несобственные вращения, появляющиеся при учете пространственных отражений, также могут быть включены в четырехмерную теорию наряду с операцией обращения времени.

Понятие четырехмерного пространства вводится в § 2, где мы определяем группу Лоренца. Сдвигам в четырехмерном пространстве и группе Пуанкаре посвящен § 4. Несобственные преобразования, включающие отражения пространства и обращения времени, рассматриваются в § 3, 5 и 6. О физическом смысле преобразований кратко говорится в § 2, а физическую интерпретацию неприводимых представлений мы откладываем до двух заключительных параграфов. Первый параграф данной главы посвящен евклидовой группе, объединяющей повороты и сдвиги. Эта группа, будучи группой движений трехмерного пространства, строго говоря, не относится к теме данной главы, и с точки зрения физики она также представляет незначительный интерес. Мы начинаем именно с нее по следующим причинам. Во-первых, эта группа во многом подобна группе Пуанкаре, но в некоторых отношениях проще ее. Во-вторых, при изучении группы Пуанкаре нам встретится группа, изоморфная двумерной евклидовой группе, и результаты § 1 пригодятся нам. Читатель, интересующийся прежде всего четырьмя измерениями, может перейти сразу к § 4.

## § 1. ЕВКЛИДОВА ГРУППА $\mathcal{E}_3$

В предыдущих главах мы довольно подробно исследовали некоторые вопросы, связанные с вращениями и отражениями, а в гл. 14 описывали симметрию кристаллов при помощи конечных сдвигов и поворотов — «пространственных групп». Теперь мы переходим к изучению непре-

рывной группы сдвигов и вращений, следуя методу, использовавшемуся в § 9 для пространственных групп. Еще раз напомним, что данный параграф целиком посвящен трем измерениям.

## А. Трансляции

Рассмотрим сначала группу трансляций в одном измерении. Эта группа имеет бесконечное число элементов  $P(\xi)$ , соответствующих сдвигам вдоль оси  $x$ :  $P(\xi)x = x + \xi$ , где  $-\infty < \xi < \infty$ . Группа трансляций — это абелева группа с групповым законом умножения  $P(\xi_1)P(\xi_2) = P(\xi_1 + \xi_2)$ . Этот закон умножения совпадает с законом умножения группы  $\mathcal{R}_2$  (гл. 7, § 3). Следовательно, неприводимые представления группы трансляций одномерны и имеют вид

$$T^{(k)}(\xi) = \exp(-ik\xi) \quad (15.1)$$

для произвольного  $k$ . Из-за отсутствия периодичности по переменной  $\xi$  величина  $k$  не обязана быть целым числом. Но для того, чтобы представление  $T^{(k)}$  было унитарным, величина  $k$  должна быть действительной. Преобразование функций определяется [формула (3.7)] как

$$\psi'(x) = T(\xi)\psi(x) = \psi(P(-\xi)x) = \psi(x - \xi),$$

так что функция  $\psi(x) = \exp(ikx)$  преобразуется по неприводимому представлению  $T^{(k)}$ . В силу сказанного в гл. 7, § 3 инфинитезимальный оператор имеет вид  $P_x = -\partial/\partial x$ .

Обобщение на трехмерный случай тривиально ввиду коммутативности всех сдвигов. Таким образом, трехмерная группа трансляций есть прямое произведение трех одномерных групп трансляций по осям  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Общий элемент группы обозначается через  $P(\rho)$  и определяется следующим образом:

$$P(\rho)g = g + \rho, \quad (15.2)$$

где  $g$  — радиус-вектор точки в трехмерном пространстве. Записав вектор  $\rho$  в виде  $\rho = (\xi, \eta, \zeta)$ , мы убеждаемся, что группа трехмерных трансляций имеет три параметра, и, следовательно, имеются три инфинитезимальных оператора  $P_x$ ,  $P_y$  и  $P_z$ , которые на пространстве функций  $\psi(g)$  даются

выражениями  $-\partial/\partial x$ ,  $-\partial/\partial y$  и  $-\partial/\partial z$ . Неприводимые представления являются очевидным обобщением неприводимых представлений, определенных равенством (15.1); они задаются тремя числами  $k_x$ ,  $k_y$  и  $k_z$ , образующими вектор  $\mathbf{k}$ :

$$T^{(k)}(\rho) = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \rho). \quad (15.3)$$

Если гамильтониан квантовой системы трансляционно инвариантен, то инфинитезимальные операторы  $P_x$ ,  $P_y$  и  $P_z$  представляют собой сохраняющиеся величины, а именно три компоненты полного импульса системы. В том виде, в каком они записаны здесь, эти операторы, будучи инфинитезимальными операторами унитарного преобразования, являются антиэрмитовыми. Но их можно сделать эрмитовыми, умножив на  $i$ . Размерность этих операторов также не совпадает с размерностью импульса, что можно исправить добавлением множителя  $\hbar$ . В действительности физические операторы импульса  $\mathbf{p}_q$  определяются как  $\mathbf{p}_q = i\hbar \mathbf{P}_q$ . Причина, по которой эти операторы связываются с импульсом, состоит в том, что трансляционная инвариантность системы приводит к сохранению полного импульса (гл. 16, § 1).

Так как неприводимые представления группы трансляций одномерны, трансляционная инвариантность не приводит к вырождению, а проявляется в том, что собственные функции гамильтониана нумеруются индексом  $\mathbf{k}$  неприводимого представления  $T^{(k)}$ . Из выражения (15.3) для  $T^{(k)}(\rho)$  следует, что собственное значение инфинитезимального оператора  $P_q$  в состоянии с данным  $\mathbf{k}$  есть  $-ik_q$ . Таким образом, импульс дается выражением  $\hbar \mathbf{k}$ . Наличие любого потенциала  $V(\mathbf{r})$ , зависящего от координаты  $\mathbf{r}$  (кроме тривиального случая  $V = \text{const}$ ), нарушает трансляционную инвариантность. Следовательно, в случае одной частицы трансляционная инвариантность имеет место только при условии, что частица движется свободно. Системы из более чем одной частицы с потенциалом взаимодействия вида  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$  очевидным образом трансляционно инвариантны, и, следовательно, полный импульс таких систем сохраняется.

## Б. Групповые операторы

Евклидова группа  $\mathcal{E}_3$  в трех измерениях порождается произведениями собственных вращений  $R(a)$  и трансляций  $P(\rho)$ . Здесь  $a = (a_x, a_y, a_z)$  — параметры вращения  $R(a)$  в обозначениях гл. 7, § 4. Следовательно, общий элемент группы можно записать в виде  $P(\rho)R(a)$ , а его действие на вектор  $r$  дается выражением

$$P(\rho)R(a)r = R(a)r + \rho \quad (15.4)$$

с учетом формулы (15.2). Отметим, что сдвиги и вращения не коммутируют (геометрически это очевидно). В самом деле, обращая порядок операторов в произведении (15.4), получаем  $R(a)P(\rho)r = R(a)r + R(a)\rho$ .

Отсюда следует, что

$$P(\rho)R(a) = R(a)P(R^{-1}(a)\rho). \quad (15.5)$$

Последний результат показывает, что без ограничения общности можно рассматривать лишь элементы группы вида  $P(\rho)R(a)$ , поскольку равенство (15.5) позволяет менять порядок сомножителей.

Следуя общему определению преобразования функции [формула (3.37)], определим в пространстве функций оператор  $T(\rho, a)$ :

$$\begin{aligned} T(\rho, a)\psi(r) &= \psi\{[P(\rho)R(a)]^{-1}r\} = \psi\{R^{-1}(a)P^{-1}(\rho)r\} = \\ &= \psi\{R^{-1}(a)(r - \rho)\} \end{aligned} \quad (15.6)$$

в соответствии с обозначениями гл. 14, § 9.

## В. Неприводимые представления

Поскольку вращения и сдвиги не коммутируют, группа  $\mathcal{E}_3$  не есть прямое произведение двух групп. Таким образом, задача перечисления неприводимых представлений не тривиальна. Но то обстоятельство, что группа  $\mathcal{E}_3$  содержит абелеву подгруппу трансляций, позволяет применить для решения этой задачи метод, аналогичный тому, который применялся в гл. 14, § 9 для пространственных групп.

Оператор представления, соответствующий элементу группы  $P(\rho)R(a)$ , мы обозначим через  $T(\rho, a)$ . По определению операторы  $T(\rho, a)$  должны удовлетворять тому же закону умножения, что и соответствующие элементы

группы. Таким образом, из равенства (15.5) следует, что

$$T(\rho, a) = T(\rho, 0) T(0, a) = T(0, a) T(R^{-1}(a)\rho, 0). \quad (15.7)$$

Для построения представлений группы  $\mathcal{G}_3$  нам понадобится следующее свойство вращений: произвольное вращение  $R$  может быть представлено в виде  $R = R_{xy} R_z$ , где  $R_z$  — вращение вокруг оси  $z$ , а  $R_{xy}$  — вращение относительно оси, лежащей в плоскости  $xy$ . Для доказательства указанной факторизации рассмотрим вектор  $k = Rk_0$ , где  $k_0$  — вектор, направленный вдоль оси  $z$ . Определим теперь  $R_{xy}$  как (единственное) вращение относительно оси, лежащей в плоскости  $xy$ , которое переводит  $k_0$  в  $k$ , т. е.  $R_{xy}k_0 = k$ . Из этого определения получаем:

$$R_{xy}^{-1} R k_0 = R_{xy}^{-1} k = k_0.$$

Таким образом, вращение  $R_{xy}^{-1}$  оставляет вектор  $k_0$  на месте и, следовательно, является вращением вокруг оси  $z$ :  $R_{xy}^{-1} R = R_z$ . Отсюда следует желаемый результат:

$$R = R_{xy} R_z. \quad (15.8)$$

Теперь мы можем получить представления группы  $\mathcal{G}_3$ , сделав следующие шаги (см. также гл. 20, § 3).

*Шаг 1.* Выберем базисный вектор  $|k\rangle$ , преобразующийся по неприводимому представлению  $T^{(k)}$  подгруппы трансляций:

$$T(\rho, 0) |k\rangle = \exp(-ik \cdot \rho) |k\rangle. \quad (15.9)$$

(В данной главе базисный вектор удобнее обозначать через  $|k\rangle$  в отличие от обозначения  $e_k$ , применявшегося в гл. 14, § 9.)

*Шаг 2.* Покажем, что вектор  $T(0, a) |k\rangle$  преобразуется по представлению  $T^{(R(a)k)}$  подгруппы трансляций. Действительно, с учетом соотношений (15.7) и (15.9) получаем

$$\begin{aligned} T(\rho, 0) (T(0, a) |k\rangle) &= T(\rho, a) |k\rangle = \\ &= T(0, a) T(R^{-1}(a)\rho, 0) |k\rangle = \\ &= T(0, a) \exp[-ik \cdot R^{-1}(a)\rho] |k\rangle = \\ &= \exp[-iR(a)k \cdot \rho] (T(0, a) |k\rangle). \end{aligned} \quad (15.10)$$

Отсюда следует, что если базисный вектор  $|k\rangle$  принадлежит пространству представления  $E$ , то тому же простран-

ству принадлежат все векторы  $|k'\rangle$ , такие, что  $|k'\rangle = |R(a)k\rangle$ , т. е. все векторы  $|k'\rangle$  с  $|k'| = |k|$ .

*Шаг 3.* Фиксируем теперь некоторое направление (скажем, направление вдоль оси  $z$ ) и обозначим вектор, определяющий это направление, через  $k_0$ , вектор, преобразующийся по представлению подгруппы трансляций  $T(k_0)$ , через  $|k_0\rangle$  и вращение относительно вектора  $k_0$  через  $R(a_0)$ . Из формулы (15.10) следует, что вектор  $T(0, a_0)|k_0\rangle$  преобразуется по отношению к трансляциям как  $|k_0\rangle$ , поскольку  $R(a_0)k_0 = k_0$ . Таким образом, множество базисных векторов пространства представления  $E$ , обозначенных нами через  $|k_0\rangle$ , инвариантно по отношению к вращениям вокруг оси  $z$  и, следовательно, векторы этого множества могут быть классифицированы по неприводимым представлениям группы  $\mathcal{R}_2$  вращений вокруг фиксированной оси. Это значит, что можно ввести более детализированное обозначение  $|k_0 m\rangle$  вместо  $|k_0\rangle$  для базисных векторов пространства представления. Здесь индекс  $m$  нумерует представления группы  $\mathcal{R}_2$  (гл. 7, § 3), т. е.

$$T(0, a_0)|k_0 m\rangle = \exp(-i n a_0)|k_0 m\rangle. \quad (15.11)$$

*Шаг 4.* Теперь мы можем построить представление  $E$ . Оно будет определяться двумя величинами:  $|k| = |k_0|$  и  $m$ . Начав с одного базисного вектора  $|k_0 m\rangle$ , образуем множество векторов вида

$$|km\rangle = T(0, \tilde{a}(k))|k_0 m\rangle, \quad (15.12)$$

где  $k$  — произвольный вектор длиной  $|k|$ , а  $R(\tilde{a}(k))$  — однозначно определенное вращение вокруг оси  $\tilde{a}(k)$ , лежащей в плоскости  $xy$ , которое переводит  $k_0$  в  $k$ :  $R(\tilde{a}(k))k_0 = k$ . Тильда над вектором  $\tilde{a}$  указывает, что этот вектор перпендикулярен вектору  $k_0$ , т. е. лежит в плоскости  $xy$ . Таким образом, пространство представления содержит бесконечное множество базисных векторов, характеризующихся одними и теми же значениями  $m$  и длины вектора  $k$  и различающихся направлением этого вектора. Чтобы показать, что это множество инвариантно относительно действия группы  $\mathcal{G}_3$ , рассмотрим результат применения оператора

представления к произвольному базисному вектору  $|km\rangle$ :

$$\begin{aligned} T(\rho, a)|km\rangle &= T(\rho, 0) T(0, a) T(0, \tilde{a}(k)) |k_0 m\rangle = \\ &= T(\rho, 0) T(0, \tilde{a}(k')) T(0, c) |k_0 m\rangle = \\ &= T(\rho, 0) T(0, \tilde{a}(k')) \exp(-imc) |k_0 m\rangle = \\ &= \exp(-imc) T(\rho, 0) |k' m\rangle = \\ &= \exp(-imc) \exp(-ik' \cdot \rho) |k' m\rangle. \end{aligned} \quad (15.13)$$

При выводе соотношений (15.13) мы применили формулу (15.8) к вращению  $R(a) R(\tilde{a}(k))$ :

$$R(a) R(\tilde{a}(k)) = R(\tilde{a}(k')) R_z(c). \quad (15.14)$$

Соотношениями (15.14) определяются вращения  $R(\tilde{a}(k'))$  и  $R_z(c)$ . Вектор  $k'$  определяется из соотношения  $k' = R(\tilde{a}(k')) k_0$ , что с учетом равенства (15.14) эквивалентно определению  $k' = R(a) k$ . Таким образом, по данным  $a$  и  $k$  можно определить  $k'$  и  $c$ , так что выражением (15.13) фактически определяются матричные элементы представления  $E$ .

Путем таких же рассуждений, как и в гл. 7, § 4, п. Б, где шла речь о группе  $\mathcal{R}_3$ , можно показать, что для неприводимости представления  $E$  необходимо, чтобы пространство представления  $E$  содержало единственный базисный вектор с параметрами  $k_0, m$ . Таким образом, неприводимые представления группы  $\mathcal{E}_3$  даются формулой (15.13). При построении неприводимого представления мы использовали вектор  $k_0$ , направленный вдоль оси  $z$ . Но, как нетрудно показать, представления, определяемые разными векторами  $k_0$ , эквивалентны, если длина этих векторов одинакова. Следовательно, направление вектора  $k_0$  несущественно с точки зрения параметризации неэквивалентных неприводимых представлений группы  $\mathcal{E}_3$ , и мы будем пользоваться обозначением  $E(|k|, m)$  для неприводимого представления, определяемого векторами длиной  $|k|$ .

В качестве примера рассмотрим представление  $E(|k|, 0)$ . По формуле (15.12) это представление можно построить из функции  $\exp(i|k|z)$ , зависящей от координаты одной частицы. Базисные векторы представления даются выражением  $|k_0\rangle = \exp(ik \cdot r)$ , где  $k$  пробегает множество векторов длиной  $|k|$ . Чтобы получить представления  $E(|k|, m)$ , необходимы по меньшей мере две частицы. В этом

случае в качестве базисного вектора  $|k_0 m\rangle$  можно взять функцию  $\exp[i|\mathbf{k}|(z_1 + z_2)]\{(x_1 - x_2) + i(y_1 - y_2)\}^m$ .

Метод, примененный здесь для анализа неприводимых представлений группы  $\mathcal{G}_3$ , — это еще один пример общего метода «малой группы» (гл. 14, § 9, п. А). В нашем случае малой группой является группа  $\mathcal{R}_2$ , оставляющая на месте вектор  $\mathbf{k}_0$ , а «звезда» состоит из бесконечного множества точек. Этот же метод мы применим позже при изучении группы Пуанкаре, чем в основном и объясняется то, что мы столь подробно рассматриваем здесь группу  $\mathcal{G}_3$ .

В случае  $\mathbf{k}_0 = 0$  схема, изложенная выше, неприменима, так как на четвертом шаге нашего построения мы не получим ненулевых векторов  $\mathbf{k}$ . Однако в этом случае пространство представления трансляционно инвариантно и неприводимые представления группы  $\mathcal{G}_3$  совпадают с неприводимыми представлениями группы  $\mathcal{R}_3$  (гл. 7). Мы обозначаем эти представления через  $\mathbf{E}^{(0, j)} \equiv \mathbf{D}^{(j)}$ . Таким образом, неприводимые представления группы  $\mathcal{G}_3$  конечномерны лишь при  $\mathbf{k} = 0$ .

Так как группа  $\mathcal{R}_3$  является подгруппой группы  $\mathcal{G}_3$ , в принципе можно различать неприводимые представления группы  $\mathcal{G}_3$  по индексу  $j$ , параметризующему неприводимые представления группы  $\mathcal{R}_3$ . Но это гораздо сложнее, нежели метод, изложенный выше, основанный на подгруппе трансляций. Отметим, что, так как вращения и сдвиги не коммутируют, невозможно одновременно использовать индексы  $\mathbf{k}$  и  $j$ . В квантовой механике это эквивалентно тому, что если система обладает  $\mathcal{G}_3$ -инвариантностью, то в ней сохраняются импульс и угловой момент, но в силу некоммутативности соответствующих операторов эти величины не могут быть измерены одновременно. Наш выбор базиса в пространстве представления  $\mathbf{E}^{(\mathbf{k} |, m)}$  соответствует одновременной диагонализации импульса и проекции на него углового момента. Такой базис называют иногда спиральным.

## Г. Группа $\mathcal{G}_2$

Здесь мы скажем несколько слов о двумерной евклидовой группе  $\mathcal{G}_2$ . Сама по себе эта группа не представляет особого интереса, но она будет использована нами ниже (§ 4) при построении неприводимых представлений группы Пуанкаре. Как и в случае группы  $\mathcal{G}_3$ , выберем



базисные функции, удовлетворяющие двумерному аналогу равенства (15.9). Теперь уже ни один элемент группы, кроме единичного, не оставляет двумерный вектор  $\mathbf{k}$  на месте. Следовательно, неприводимые представления группы  $\mathcal{E}_2$  определяются величиной  $|\mathbf{k}|$  и обозначаются через  $E^{(|\mathbf{k}|)}$ . Исключение составляет случай  $\mathbf{k} = 0$ , так как при этом все векторы пространства представления  $E$  трансляционно инвариантны и, следовательно, группа  $\mathcal{E}_2$  эффективно сводится к группе  $\mathcal{R}_2$ . Таким образом, при  $\mathbf{k} = 0$  все неприводимые представления группы  $\mathcal{E}_2$  сводятся к представлениям  $T^{(m)}$  группы  $\mathcal{R}_2$  (гл. 7, § 3, п. А). Мы будем обозначать эти представления через  $E^{(0, m)}$ , отмечая тем самым, что  $\mathbf{k} = 0$ .

#### Д. Евклидова группа $\mathcal{E}_3$ в физике

Если гамильтониан физической системы инвариантен относительно полной евклидовой группы, то обычные рассуждения показывают, что собственные состояния гамильтониана можно классифицировать по неприводимым представлениям  $E^{(|\mathbf{k}|, m)}$  и  $E^{(0, j)}$ . Кроме того, в системе возможно вырождение. Чтобы физическая система обладала  $\mathcal{E}_3$ -инвариантностью, требуется инвариантность гамильтониана по отношению не только к трансляциям, но и к вращениям. Отсюда следует, что в случае одной частицы  $\mathcal{E}_3$ -инвариантность может иметь место только тогда, когда частица движется свободно. В этом случае ее энергия дается выражением  $\hbar^2 k^2 / 2M$ , а волновая функция равна  $\exp(i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})$ . Далее, как было отмечено выше, эта функция должна соответствовать представлению  $E^{(|\mathbf{k}|, 0)}$ . Бесконечная размерность этого представления соответствует бесконечному множеству направлений вектора  $\mathbf{k}$  с фиксированным модулем  $|\mathbf{k}|$ . Физический смысл этого в том, что импульс свободной частицы с фиксированной энергией может иметь любое направление.

Если рассматривать только одну классическую частицу, то другие представления, такие, как  $E^{(|\mathbf{k}|, m)}$  с  $m \neq 0$  и  $E^{(0, j)}$ , не возникают. Представление  $E^{(0, j)}$ , например, соответствовало бы покоящейся частице с угловым моментом  $j$ . В случае же системы частиц представление  $E^{(0, j)}$  приобретает очевидный смысл: центр масс системы покоится, но ее угловой момент равен  $j$ . Такие

представления с целыми  $j$  могут появляться при описании системы двух частиц, потенциал взаимодействия которых имеет вид  $V(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$ .

Чтобы вполне оценить значение представлений  $E^{(1/2, m)}$  с  $m \neq 0$ , полезно рассмотреть инфинитезимальные операторы группы  $\mathcal{E}_3$  и построить операторы Казимира (гл. 7, § 5). Шесть инфинитезимальных операторов группы  $\mathcal{E}_3$  — это просто операторы  $P_x, P_y$  и  $P_z$ , соответствующие сдвигам, и операторы  $X_x, X_y, X_z$ , соответствующие вращениям. Операторы  $P_q$  коммутируют друг с другом. Перестановочные соотношения для операторов  $X_q$  даются формулами (7.25), а коммутаторы  $P_q$  с  $X_q$  таковы [закон умножения (15.5), задача 15.1]:

$$[P_q, X_q] = 0, \quad [P_x, X_y] = P_z, \quad [P_y, X_x] = -P_z, \quad (15.15)$$

причем остальные коммутаторы получаются циклической перестановкой индексов. Оператор  $\mathbf{P}^2 = P_x^2 + P_y^2 + P_z^2$  является, очевидно, инвариантом, т. е. оператором Казимира. Из соотношений (15.15) следует, что оператор  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  также коммутирует с операторами  $X_q$  и  $P_q$  и является вторым оператором Казимира. (Оператор  $\mathbf{X} \cdot \mathbf{X}$  не инвариантен относительно сдвигов.) В неприводимом представлении любой оператор Казимира должен быть кратным единичному. В представлении  $E^{(1/2, m)}$  мы имеем  $\mathbf{P}^2 = -k^2$  и  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X} = -km$ . Последний результат легко получить, применяя операторы  $\mathbf{P}^2$  и  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  к базисному вектору  $|k_0 m\rangle$  и используя формулу (15.11) при малых  $a_0$ . Физический смысл этих двух операторов таков: первый из них определяет величину импульса, а второй — проекцию углового момента на направление движения. Если воспользоваться дифференциальными выражениями  $P_x = -\partial/\partial x$ , ... и соотношением  $\mathbf{X} = \mathbf{r} \times \mathbf{P}$  [формула (7.21)], справедливыми в случае одной частицы, то сразу же видно, что  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X} = 0$ , т. е.  $m = 0$ . В случае двух классических частиц  $P_x = P_{x_1} + P_{x_2} = -\partial/\partial x_1 - \partial/\partial x_2$ , ...,  $\mathbf{X} = \mathbf{r}_1 \times \mathbf{P}_1 + \mathbf{r}_2 \times \mathbf{P}_2 = = 1/2(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2) + 1/2(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2)$ . В последнем равенстве величина  $\mathbf{X}$  представлена в виде суммы внутренней и внешней частей. В произведении  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  остается лишь внутренняя часть:  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X} = 1/2(\mathbf{P}_1 + \mathbf{P}_2) \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \times (\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2)$ .

Таким образом, оператор Казимира  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  есть оператор проекции относительного углового момента двух частиц на направление движения их центра масс. В случае представления  $E^{(l, k, m)}$  все состояния  $|k, m\rangle$  отвечают одному и тому же значению  $|k|$  абсолютной величины полного импульса пары частиц; направление же этого импульса меняется от состояния к состоянию. Проекция относительного углового момента на направление  $k$  для состояния  $|km\rangle$  всегда равна  $m$  независимо от  $k$ . Для того чтобы энергия системы зависела от  $m$ , гамильтониан должен содержать члены типа  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  — типа скалярного произведения полного импульса на внутренний угловой момент системы. Заметим, что величина внутреннего углового момента в отличие от его проекции на направление  $k$  не входит в число параметров, определяющих представление  $E^{(l, k, m)}$ . Если  $\mathcal{G}_3$ -инвариантная система находится в состоянии с внутренним угловым моментом  $l$ , то состояния с  $m=l, l-1, \dots, -l$  принадлежат разным представлениям и могут иметь разные энергии. Т. е. инвариантность внутреннего движения системы относительно вращений вокруг ее центра масс не следует из  $\mathcal{G}_3$ -инвариантности. (Для того чтобы понятие внутреннего углового момента можно было осмыслить с точки зрения симметрии, необходимо перейти к группе Лоренца, включающей в себя преобразования, которыми связываются системы, движущиеся относительно друг друга с постоянной скоростью.)

Мы рассматривали только одну и две классические частицы. Обобщение на случай произвольного числа частиц в принципе не представляет трудностей. Можно, конечно, ввести спин частицы  $s$  так, как это было сделано в гл. 8, § 4. Для этого нет необходимости вводить новые внутренние координаты. Спиновая степень свободы описывается  $(2s+1)$ -мерным пространством представления  $D^{(s)}$  группы внутренних вращений. В покое такая частица будет тривиально описываться представлением  $E^{(0, s)}$ . Но в случае движущейся частицы, как и в случае относительного углового момента двух частиц, для преобразований группы  $\mathcal{G}_3$  существенна лишь проекция спина на направление движения. Инфинитезимальный оператор  $\mathbf{X}$  для частицы со спином  $s$  равен сумме орбитальной части  $\mathbf{r} \times \mathbf{P}$  и спиновой части  $\mathbf{X}_s$ , которая опре-

деляется как оператор в  $(2s+1)$ -мерном пространстве, описывающем спин частицы (гл. 8, § 4).

### Е. Скалярное произведение и нормировка базисных векторов

Этот небольшой раздел можно пропустить, так как его результаты в дальнейшем использоваться не будут. Но нам кажется, что наличие континуума базисных векторов в пространствах неприводимых представлений группы  $\mathcal{G}$ , требует дополнительных комментариев. При изложении в гл. 4 общей теории, а также во всех встречающихся нам ранее физических приложениях мы рассматривали лишь конечномерные неприводимые представления и соответствующие операторы определялись конечными матрицами. Теперь мы впервые познакомились с неприводимыми представлениями  $E^{(k, l, m)}$ , имеющими бесконечную размерность. Пространства этих представлений порождены континуумом базисных векторов  $|km\rangle$ , соответствующих различным направлениям вектора  $k$ . С аналогичной ситуацией мы встретимся в § 4 при изучении группы Пуанкаре.

Рассмотрим векторы  $|\psi\rangle$ , принадлежащие пространству некоторого фиксированного неприводимого представления. В случае конечномерного представления мы можем написать

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \psi_i |i\rangle, \quad (15.16)$$

где  $|i\rangle$  — базис в пространстве представления, а  $\psi_i$  — безразмерные величины. Мы определяем скалярное произведение векторов  $|\varphi\rangle$  и  $|\psi\rangle$  соотношением

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_{i=1}^N \varphi_i^* \psi_i, \quad (15.17)$$

из которого следует, что

$$\langle i | j \rangle = \delta_{ij}. \quad (15.18)$$

Линейное преобразование  $T$  является унитарным относительно такого скалярного произведения, если  $\langle T\varphi | T\psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle$  для всех  $|\varphi\rangle$  и  $|\psi\rangle$ . Для представлений, по-

добных представлению  $E(|\mathbf{k}|, m)$ , пространство которых имеет непрерывный базис  $|k m\rangle$ , вместо (15.16) положим

$$|\psi\rangle = \int \psi(\mathbf{k}) |k m\rangle d\Omega_{\mathbf{k}}, \quad (15.19)$$

где интегрирование ведется по множеству направлений вектора  $\mathbf{k}$ , а  $\psi(\mathbf{k})$  — функция, зависящая от направления вектора  $\mathbf{k}$ . В этом случае мы определим скалярное произведение следующим образом:

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int \varphi^*(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) d\Omega_{\mathbf{k}}. \quad (15.20)$$

Теперь мы можем убедиться в том, что представление  $E(|\mathbf{k}|, m)$ , заданное соотношением (15.13), унитарно по отношению к скалярному произведению (15.20). На основании формул (15.13) и (15.19) имеем

$$\begin{aligned} |T\psi\rangle &= \int \psi(\mathbf{k}) \exp(-imc - i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}) |k' m\rangle d\Omega_{\mathbf{k}} = \\ &= \int \psi(R^{-1}\mathbf{k}') \exp(-imc - i\mathbf{k}' \cdot \boldsymbol{\rho}) |k' m\rangle d\Omega_{\mathbf{k}'} \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались тем, что, так как  $\mathbf{k}' = R(\mathbf{a})\mathbf{k}$  и вектор  $\mathbf{a}$  фиксирован, интеграл по  $d\Omega_{\mathbf{k}}$  можно заменить интегралом по  $d\Omega_{\mathbf{k}'}$ , т. е. якобиан перехода равен 1. Изменив обозначение переменной интегрирования, можно написать

$$|T\psi\rangle = \int \psi(R^{-1}\mathbf{k}) \exp(-imc - i\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\rho}) |k m\rangle d\Omega_{\mathbf{k}}.$$

Сравнивая это выражение с (15.19) и учитывая определение (15.20), получаем

$$\begin{aligned} \langle T\varphi | T\psi \rangle &= \int \varphi^*(R^{-1}\mathbf{k}) \psi(R^{-1}\mathbf{k}) d\Omega_{\mathbf{k}} = \\ &= \int \varphi^*(\mathbf{k}) \psi(\mathbf{k}) d\Omega_{\mathbf{k}} = \langle \varphi | \psi \rangle. \end{aligned}$$

Аналог равенства (15.18) можно написать только с использованием  $\delta$ -функции Дирака угловых переменных  $\mathbf{k}$  и  $\mathbf{k}'$ . Отметим, что в определение скалярного произведения (15.20) входит интеграл не по всему импульсному пространству, так как величина  $|\mathbf{k}|$  остается постоянной.

## § 2. ГРУППА ЛОРЕНЦА $\mathcal{L}$

Показав, каким образом трансляции и вращения объединяются в рамках евклидовой группы, мы теперь на время забудем о трансляциях и займемся обобщением группы вращений  $\mathcal{R}_3$  на четырехмерное пространство-время. Мы определяем это четырехмерное пространство, ставя в соответствие каждому событию точку с четырьмя координатами  $(x, y, z, ct)$ . Здесь  $(x, y, z)$  — пространственные координаты события, а  $t$  — момент времени, связанный с этим событием;  $c$  — скорость света. Таким образом, все четыре координаты имеют размерность длины. Мы будем характеризовать точку с координатами  $(x, y, z, ct)$  вектором  $\hat{\mathbf{e}} = (x, y, z, ct)$ , [соединяющим начало координат  $(0, 0, 0, 0)$  с этой точкой. Напомним, что событие, соответствующее началу координат четырехмерного пространства, — это событие в точке  $(0, 0, 0)$ , произошедшее в момент времени  $t = 0$ .

### А. Преобразования Лоренца

В случае группы вращений мы имели дело с трехмерными векторами  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  и преобразованиями  $\mathbf{r}' = \mathbf{R}(\mathbf{a})\mathbf{r}$ , сохраняющими расстояния и углы, т. е. сохраняющими скалярное произведение  $\mathbf{r}_1 \cdot \mathbf{r}_2 = x_1x_2 + y_1y_2 + z_1z_2$  любых двух векторов  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ . В случае группы Лоренца объектом исследования будут линейные действительные преобразования  $\hat{\mathbf{e}}' = \mathbf{L}\hat{\mathbf{e}}$  четырехмерных векторов  $\hat{\mathbf{e}} = (x, y, z, ct)$ , сохраняющие скалярное произведение

$$\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_2 = -x_1x_2 - y_1y_2 - z_1z_2 + c^2t_1t_2. \quad (15.21)$$

Такие преобразования называются преобразованиями Лоренца. По определению они удовлетворяют условию

$$\hat{\mathbf{e}}'_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}'_2 = \mathbf{L}\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \mathbf{L}\hat{\mathbf{e}}_2 = \hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_2 \quad (15.22)$$

при любых  $\hat{\mathbf{e}}_1$  и  $\hat{\mathbf{e}}_2$ . Для четырехмерных векторов мы примем обозначение  $\hat{\mathbf{e}}$ , чтобы отличать их от векторов в обычном пространстве, для которых сохраним обозначение  $\mathbf{e}$ . Скалярное произведение (15.21) обозначается просто как  $\hat{\mathbf{e}}_1 \cdot \hat{\mathbf{e}}_2$ . Преобразования Лоренца нас интере-

суют потому, что, как следует из эксперимента, физические законы инвариантны относительно этих преобразований. Общий знак в определении (15.21) несуществен, но разница в знаках пространственных и временного слагаемых в выражении (15.21) играет решающую роль. Если бы эти знаки были одинаковы, то соответствующей группой была бы группа  $\mathcal{R}_4$ , не являющаяся группой инвариантности для законов природы.

Скалярный квадрат вектора  $\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} = -x^2 - y^2 - z^2 + c^2 t^2$  есть мера его «длины», т. е. «интервала» между событиями, соответствующими его концам. Интервал определяется как  $(\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}})^{1/2}$ . Из определения (15.21) видно, что скалярный квадрат вектора может иметь любой знак. Следовательно, интервал может быть как действительным, так и мнимым. По очевидным причинам действительный интервал называют времениподобным, а мнимый — пространственноподобным. Интервал между событиями, соответствующими векторам  $\hat{\mathbf{e}}_1$  и  $\hat{\mathbf{e}}_2$ , определяется как  $((\hat{\mathbf{e}}_1 - \hat{\mathbf{e}}_2) \cdot (\hat{\mathbf{e}}_1 - \hat{\mathbf{e}}_2))^{1/2}$ . Из равенства (15.22) следует, что преобразования Лоренца не меняют интервала.

Обозначим через  $\hat{\mathbf{e}}_x, \hat{\mathbf{e}}_y, \hat{\mathbf{e}}_z, \hat{\mathbf{e}}_t$  векторы  $(1, 0, 0, 0)$  и т. д. Тогда из определения (15.21) следует, что  $\hat{\mathbf{e}}_x \cdot \hat{\mathbf{e}}_x = \hat{\mathbf{e}}_y \cdot \hat{\mathbf{e}}_y = \hat{\mathbf{e}}_z \cdot \hat{\mathbf{e}}_z = -1$ , а  $\hat{\mathbf{e}}_t \cdot \hat{\mathbf{e}}_t = 1$ . Введем матрицу  $g$  с матричными элементами  $g_{ij} = \hat{\mathbf{e}}_i \cdot \hat{\mathbf{e}}_j$ , где  $i = x, y, z, t$ :

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

Матричные элементы  $L_{ji}$  оператора  $L$  определяются соотношением  $L\hat{\mathbf{e}}_i = \sum_j L_{ji} \hat{\mathbf{e}}_j$ , так что  $\mathbf{e}_j \cdot L\hat{\mathbf{e}}_i = g_{jj} L_{ji}$ .

Произвольный вектор  $\hat{\mathbf{e}} = \sum_i e_i \hat{\mathbf{e}}_i$  с компонентами  $e_i$  оператор  $L$  переводит в вектор  $\hat{\mathbf{e}}' = L\hat{\mathbf{e}} = \sum_{i,j} e_i L_{ji} \hat{\mathbf{e}}_j$  с компонентами  $e'_j = \sum_i e_i L_{ji}$ . Пусть в базисе  $\hat{\mathbf{e}}_i$  вектор  $\hat{\mathbf{e}}$  имеет компоненты  $e_i$ . Тогда его компоненты в базисе  $\hat{\mathbf{e}}'_j = L\hat{\mathbf{e}}_j$

таковы:

$$\bar{\epsilon}_j = \sum_i (L^{-1})_{ji} \epsilon_i = \sum_i g_{ii} L_{ij} g_{jj} \epsilon_i.$$

Из определяющего свойства преобразований Лоренца [формула (15.22)] следует соотношение

$$g_{ij} = \sum_{k,l} L_{ki} L_{lj} g_{kl}.$$

В матричной форме оно принимает вид

$$\mathbf{g} = \mathbf{L}^\dagger \mathbf{g} \mathbf{L}, \quad (15.23)$$

где  $\mathbf{L}^\dagger$  — транспонированная матрица  $\mathbf{L}$ . Так как  $\mathbf{g}^2 = 1$ , из (15.23) следует, что  $\mathbf{g} \mathbf{L}^\dagger \mathbf{g} = \mathbf{L}^{-1}$ . Последнее соотношение отличается от определения ортогональной матрицы (гл. 3, § 5) наличием матрицы  $\mathbf{g}$ . Нетрудно показать, что  $\mathbf{L}^{-1}$  тоже является преобразованием Лоренца и что множество преобразований Лоренца образует группу (задача 15.2).

Из-за необычной формы (15.21) скалярного произведения, приводящей к тому, что „метрика“ задается не единичной матрицей, вышеприведенные формулы отличаются от соответствующих формул гл. 3, § 7 наличием множителей  $g_{ii}$ . Если для вектора  $\hat{\mathbf{e}}$  ввести так называемые ковариантные компоненты  $e^i = g_{ii} e_i$ , то можно обойтись без множителей  $g_{ii}$  (компоненты  $e_i$  называются контравариантными). Тогда все множители  $g_{ii}$  будут включены в определение компонент  $e^i$ . Например, формула для скалярного произведения принимает вид

$$\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{f}} = \sum_i g_{ii} e_i f_i = \sum_i e^i f_i = \sum_i e_i f^i,$$

причем в последнее выражение входят как ковариантные, так и контравариантные компоненты векторов. Мы предпочитаем не вводить дополнительных усложнений и будем всегда пользоваться контравариантными компонентами с нижними индексами, преобразующимися по приведенным выше формулам.

### Собственные и несобственные преобразования

В гл. 7, § 4 мы, основываясь на знаке определителя матрицы преобразования, разделили вращения на собственные и несобственные. Для преобразований Лоренца



также имеет место подобное разделение, но имеются уже не два, а четыре типа преобразований. Эти типы преобразований различны в том смысле, что от одного к другому нельзя перейти непрерывным образом. Из равенства (15.23) следует, что

$$(\det L)^2 = 1.$$

Это приводит к разделению преобразований Лоренца в соответствии со значением  $\det L = \pm 1$ . Далее, если написать явное выражение для матричного элемента в формуле (15.23), стоящего на пересечении четвертой строки с четвертым столбцом, то получим  $-L_{xt}^2 - L_{yt}^2 - L_{zt}^2 + L_{tt}^2 = 1$ , так что  $L_{tt}^2 = 1 + L_{xt}^2 + L_{yt}^2 + L_{zt}^2$ .

Поскольку величины  $L_{ij}$  действительны, из последнего равенства следует, что  $L_{tt}^2 \geq 1$ . Таким образом,  $L_{tt}$  может принимать лишь значения, лежащие в двух отдельных друг от друга областях:  $L_{tt} \geq 1$  и  $L_{tt} \leq -1$ . Стало быть, имеются четыре типа преобразований Лоренца, определенных следующим образом:

1)  $\det L = 1$ ,  $L_{tt} \geq 1$ ; содержит тождественное преобразование,

2)  $\det L = -1$ ,  $L_{tt} \geq 1$ ; содержит пространственную инверсию  $I$ ,

3)  $\det L = -1$ ,  $L_{tt} \leq -1$ ; содержит обращение времени  $I_t$ ,

4)  $\det L = 1$ ,  $L_{tt} \leq -1$ ; содержит инверсию пространства-времени  $\Pi_t$ .

Преобразования типа 1 непрерывно связаны с единицей и называются собственными. Они образуют группу, которую мы назовем группой Лоренца  $\mathcal{L}$ . Расширенные группы Лоренца получаются добавлением к преобразованиям типа 1 преобразований типа 2 или 3. Мы будем обозначать эти группы через  $\mathcal{L}_s$  и  $\mathcal{L}_t$ . Объединение всех четырех типов дает еще большую группу, которую мы обозначим через  $\mathcal{L}_{st}$ . Преобразования с  $L_{tt} \geq 1$  иногда называют ортохронными, а чтобы отличать их от преобразований, включающих сдвиги, их называют „однородными“ преобразованиями Лоренца. Мы не будем пользоваться такой терминологией. В данном пункте параграфа мы ограничимся рассмотрением группы  $\mathcal{L}$ .

### Чисто лоренцевские преобразования

Прежде чем рассматривать общее преобразование Лоренца, обратимся к двум частным случаям:

$$R(a) = \left[ \begin{array}{ccc|c} & & & 0 \\ & R(a) & & 0 \\ & & & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right], \quad (15.24)$$

$$Q_z(b) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \operatorname{ch} b & -\operatorname{sh} b \\ 0 & 0 & -\operatorname{sh} b & \operatorname{ch} b \end{pmatrix}.$$

Первое из этих двух преобразований, записанное в блочном виде, является обычным вращением, так как из (15.23) следует, что  $R^\dagger R = I$ , а временная компонента остается неизменной. Преобразование (15.24) оставляет на месте точки, лежащие в плоскости  $xy$ , и называется чисто лоренцевским преобразованием (или «бустом») в направлении  $z$ . Такие преобразования зависят от одного действительного параметра  $b$ , принимающего значения в области  $-\infty < b < \infty$ . Разным значениям параметра  $b$  соответствуют разные преобразования  $Q_z(b)$ . Преобразованный вектор дается в этом случае выражением  $\hat{e}' = Q_z(b)\hat{e} = (x, y, z \operatorname{ch} b - ct \operatorname{sh} b, ct \operatorname{ch} b - z \operatorname{sh} b)$ .

Это преобразование принимает более привычный вид, если перейти от параметра  $b$  к параметру  $\beta = \operatorname{th} b$ :

$$\begin{aligned} z' &= \frac{z - \beta ct}{(1 - \beta^2)^{1/2}}, \quad y' = y, \quad x' = x, \\ ct' &= \frac{ct - \beta z}{(1 - \beta^2)^{1/2}}. \end{aligned} \quad (15.25)$$

(Позже мы увидим, что  $\beta$  имеет смысл скорости, измеренной в единицах скорости света:  $\beta = v/c$ .) Ясно, что можно определить буст и в произвольном направлении, заданном единичным трехмерным вектором  $u$ . Такие бусты мы будем обозначать через  $Q(b)$ , где  $b = bu$ , а  $b$  — величина буста, как

и в формуле (15.24). Выражение для преобразованного вектора  $\hat{\mathbf{e}}' = \mathbf{Q}(\mathbf{b})\hat{\mathbf{e}}$  можно получить как обобщение результата для  $\mathbf{Q}_z(b)$ . Проще всего вектор  $\hat{\mathbf{e}}'$  определяется выражением для его пространственных ( $\mathbf{e}'$ ) и временной ( $ct'$ ) компонент:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}' &= \mathbf{e} + \{(\operatorname{ch} b - 1)(\mathbf{e} \cdot \mathbf{u}) - ct \operatorname{sh} b\} \mathbf{u}, \\ ct' &= ct \operatorname{ch} b - (\mathbf{e} \cdot \mathbf{u}) \operatorname{sh} b. \end{aligned} \quad (15.26)$$

Отсюда можно получить матричные элементы  $4 \times 4$ -матрицы  $\mathbf{Q}(\mathbf{b})$ . В частности,  $Q_{xx}(\mathbf{b}) = 1 + (\operatorname{ch} b - 1) u_x^2$ ,  $Q_{yx}(b) = (\operatorname{ch} b - 1) u_x u_y$ ,  $Q_{tx}(\mathbf{b}) = -u_x \operatorname{sh} b$ ,  $Q_{tt}(\mathbf{b}) = \operatorname{ch} b$ . Соотношения (15.26) аналогичны соответствующим соотношениям для вращений (гл. 7, § 4).

Так как  $\mathbf{Q}(\mathbf{b})$  и  $\mathbf{R}(\mathbf{a})$  — преобразования Лоренца, их произведение — также преобразование Лоренца при любых  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . Более того, мы покажем сейчас, что *любое* преобразование Лоренца  $\mathbf{L}$  можно представить в виде такого произведения. Этот результат аналогичен факторизации (15.8) для группы вращений. Возьмем вектор  $\hat{\mathbf{e}}_0 = (0, 0, 0, 1)$ . Рассмотрим для произвольного  $\mathbf{L}$  вектор  $\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{L}\hat{\mathbf{e}}_0$ . Из (15.26) следует, что существует единственный буст  $\mathbf{Q}(\mathbf{b})$ , такой, что  $\mathbf{Q}(\mathbf{b})\hat{\mathbf{e}}_0 = \hat{\mathbf{e}}$ . Таким образом, мы имеем  $\hat{\mathbf{e}}_0 = \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{b})\hat{\mathbf{e}} = \mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{b})\mathbf{L}\hat{\mathbf{e}}_0$ , т. е. оператор  $\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{b})\mathbf{L}$  оставляет вектор  $\hat{\mathbf{e}}_0$  на месте и, следовательно, является вращением:  $\mathbf{Q}^{-1}(\mathbf{b})\mathbf{L} = \mathbf{R}(\mathbf{a})$ , так что

$$\mathbf{L} = \mathbf{Q}(\mathbf{b})\mathbf{R}(\mathbf{a}). \quad (15.27)$$

Преобразование  $\mathbf{L}$  удобно задавать шестью параметрами, определяющими два трехмерных вектора  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . Отметим, что, в то время как параметры вращения ограничены условием  $|\mathbf{a}| \leq \pi$ , параметры буста могут быть произвольными. Последнее явствует из выражения (15.24), которое показывает, что оператор  $\mathbf{Q}_z$  подходит под определение преобразования Лоренца при любых значениях  $b$ .

## Б. Области в пространстве-времени

Прежде чем говорить о физическом смысле преобразований Лоренца, остановимся на их геометрическом смысле. Для этого достаточно ограничиться бустами  $\mathbf{Q}_z(b)$ , резуль-

тат действия которых можно изобразить на плоскости  $(z, ct)$  (рис. 15.1). При нашем определении «длины» вектора как величины  $(\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}})^{1/2}$  концы всех векторов постоянной длины лежат в  $(z, ct)$ -плоскости не на окружности, а на гиперболах  $-z^2 + c^2 t^2 = \hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} = A$ , где  $A$  — постоянная.

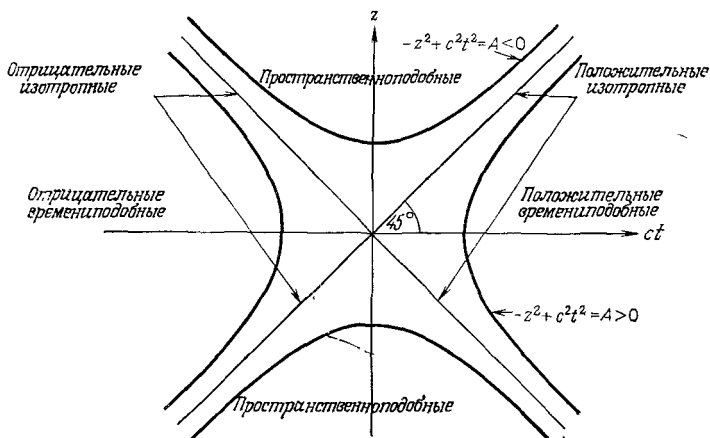


Рис. 15.1.

Поскольку величина  $A$  может иметь любой знак, а также быть равной нулю, векторы удобно разделить на следующие шесть типов:

- 1)  $\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} < 0$ , пространственноподобные,
- 2)  $\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} > 0$ ,  $t > 0$ , положительные времениподобные,
- 3)  $\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} > 0$ ,  $t < 0$ , отрицательные времениподобные,
- 4)  $\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} = 0$ ,  $\hat{\mathbf{e}} \neq 0$ ,  $t > 0$ , положительные изотропные,
- 5)  $\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} = 0$ ,  $\hat{\mathbf{e}} \neq 0$ ,  $t < 0$ , отрицательные изотропные,
- 6)  $\hat{\mathbf{e}} = 0$ , нулевой вектор.

Эта классификация приводит к разделению пространства-времени на области, изображенные на рис. 15.1. Пространственно- и времениподобные области отделены друг от друга линиями  $z = \pm ct$ , образующими множество изотропных

векторов. Заметим, что из равенства  $\hat{\mathbf{e}} \cdot \hat{\mathbf{e}} = 0$  не следует, что все компоненты вектора  $\hat{\mathbf{e}}$  равны 0. Нулевыми компонентами обладает лишь нулевой вектор  $\hat{\mathbf{e}} = 0$ . Хотя на рис. 15.1 изображен случай одного пространственного измерения, наша классификация имеет место и в общем случае, так как она основана на знаке скалярного квадрата и знаке временной компоненты векторов. В общем случае пространственно- и времениподобные области разделены так называемым световым конусом — множеством точек, удовлетворяющих уравнению  $x^2 + y^2 + z^2 - c^2 t^2 = 0$  и образующих трехмерную «поверхность» в четырехмерном пространстве.

Так как преобразование Лоренца сохраняет «длину» вектора, оно переводит точку, соответствующую вектору  $\hat{\mathbf{e}}$ , в точку, соответствующую вектору  $\hat{\mathbf{e}}'$  с тем же значением  $A$ . Это означает, что две указанные точки лежат на одной гиперболе. (Можно говорить о семействе гипербол, соответствующих разным значениям  $A$ .) Таким образом, две пространственноподобные и две времениподобные области, а также область изотропных векторов и нулевой вектор инвариантны относительно преобразований Лоренца. Кроме того, все эти шесть областей инвариантны относительно определенных выше собственных преобразований Лоренца, которые не могут переводить положительные векторы в отрицательные и наоборот (задача 15.4). (Согласно двумерному графику на рис. 15.1, собственные преобразования Лоренца не могут переводить друг в друга векторы с противоположными знаками  $z$ -компонент. Но такое преобразование возможно в четырех измерениях за счет поворота вокруг какой-либо другой пространственной оси.) Графики, подобные представленному на рис. 15.1, часто называют «диаграммами Минковского». Наблюдатель, покоящийся по отношению к системе координат  $x, y, z$ , изображается на такой диаграмме точкой, движущейся параллельно оси  $t$ . Движение со скоростью  $v$  изображается на диаграмме Минковского траекторией, образующей с осью  $t$  угол, равный  $\arctg(v/c)$ . Начав движение из начала координат и двигаясь со скоростью, меньшей скорости света, можно достичь лишь точек в положительной времениподобной области.

## В. Физический смысл преобразований Лоренца

Физическая интерпретация преобразования  $R(a)$  проста и наглядна — это вращение. Буст же  $Q(b)$  был введен нами просто как некое математическое преобразование в пространстве-времени. Теперь мы выясним, каков физический смысл этого преобразования. Для этого достаточно рассмотреть лишь бусты вдоль оси  $z$ , заданные формулой (15.25). Поэтому мы можем пользоваться диаграммой рис. 15.1.

Рассмотрим эксперимент, связанный с событиями, происходящими в системе, покоящейся относительно некоторой системы отсчета. Точки, в которых происходят события, задаются векторами  $\hat{e} = (x, y, z, ct)$ , где  $x, y, z, ct$  — координаты события в нашей системе отсчета. Предположим теперь, что мы повторили тот же эксперимент, но уже с системой, движущейся относительно системы отсчета со скоростью  $-v$  вдоль оси  $z$ . В этом случае интуиция, основанная на представлениях дорелятивистской физики, подсказывает, что события второго эксперимента должны происходить в те же самые моменты времени  $t$ , а их  $z$ -координаты изменятся на величину  $-vt$ . Чем позже происходит событие, тем на большее расстояние оно сдвигается по оси  $z$  за прошедшее время  $t$ . Другими словами, события во втором эксперименте должны соответствовать векторам  $\hat{e} = (x, y, z', ct')$ , где

$$z' = z - vt, \quad t' = t. \quad (15.28)$$

Но если скорость  $v$  сравнима по величине со скоростью света  $c$ , то такой интуитивный вывод не согласуется с экспериментальными данными [1].

Суть теории относительности, подтверждаемой экспериментальными данными, — в утверждении, что в ситуации, рассмотренной выше, вектор  $\hat{e}'$  получается из вектора  $\hat{e}$  путем преобразования Лоренца (15.25) с  $\beta = v/c$ , а не преобразования (15.28). Заметим, однако, что при условии  $v \ll c$ , которое всегда выполняется в нашем повседневном опыте, поскольку скорость света чрезвычайно велика ( $2,998 \cdot 10^8$  м/с), преобразование Лоренца (15.25) переходит в преобразование (15.28). Поэтому нет ничего удивительного в том, что интуиция в данном случае подвела нас. Теория относительности приводит к ряду удивительных

следствий, с которыми мы познакомимся, рассмотрев три частных случая общей экспериментальной ситуации, описанной выше.

Отметим, что равным образом мы могли бы рассмотреть событие  $\hat{e}'$  как то же событие  $\hat{e}$ , описываемое наблюдателем, движущимся вдоль оси  $z$  со скоростью  $v$ . Две эти точки зрения — движущаяся система и движущийся наблюдатель — равно приемлемы. Мы предпочитаем первую из них (активную), следуя нашему изложению в случае группы вращений. Там мы поворачивали физическую систему, а не систему координат. В большинстве книг по теории относительности принимается другой, пассивный подход. Положив скорость системы равной  $-v$ , а не  $v$ , мы получим все формулы в общепринятом виде.

### 1. Замедление времени и распад мезона

Рассмотрим мезон, родившийся в точке  $x = y = z = t = 0$  и распадающийся через время  $\tau$ , т. е. в точке  $\hat{e} = (0, 0, 0, \tau)$ . Это эксперимент, который состоит из двух событий, произошедших в неподвижной системе. Теперь, следуя вышеизложенной схеме, рассмотрим второй эксперимент, в котором мезон рождается в той же точке, имея скорость  $-v$ . В соответствии с теорией относительности он должен будет распасться в точке  $\hat{e}'$ , определяемой формулой (15.25):

$$\begin{aligned}x' = y' = 0, \quad z' = -v\tau(1 - \beta^2)^{-1/2}, \\ t' = \tau(1 - \beta^2)^{-1/2}.\end{aligned}$$

Другими словами, время жизни мезона, измеренное в той же системе отсчета, увеличивается в  $(1 - \beta^2)^{-1/2}$  раз. Такое явление называется замедлением времени. Оно показывает, что время не является абсолютным, как считалось до появления теории относительности. Не будь эффекта замедления времени, мезоны, рождающиеся при столкновении элементарных частиц в верхних слоях атмосферы, распадались бы задолго до того, как они достигнут поверхности земли. Скорость этих мезонов близка к скорости света, так что множитель  $(1 - \beta^2)^{-1/2}$  велик. Однако «интервал» между рождением и распадом мезона не зависит от скорости.

## 2. Сокращение расстояний

Для удобства исключим переменную  $t$  из первого уравнения (15.25):

$$z' = -\beta ct' + z(1 - \beta^2)^{1/2}. \quad (15.29)$$

Теперь рассмотрим разность между координатами двух событий, происходящих в один момент времени  $t'$ :  $z'_B - z'_A = (z_B - z_A)(1 - \beta^2)^{1/2}$ . С физической точки зрения одно и то же время  $t'$  означает, что мы, например, фотографируем движущуюся систему. Таким образом, если  $A$  и  $B$  — события, соответствующие концам некой линейки, то мы видим на фотографии, что движущаяся линейка сократилась в  $(1 - \beta^2)^{1/2}$  раз. Подчеркнем, что при нашем активном подходе все координаты  $z'$  и времена  $t'$  измеряются в одной и той же фиксированной системе отсчета.

## 3. Относительные скорости и инвариантность скорости света

В качестве третьего примера, иллюстрирующего следствия преобразований Лоренца, рассмотрим объект, движущийся с постоянной скоростью  $-V$ , так что его траектория в пространстве-времени задается вектором  $\hat{e} = (0, 0, -Vt, ct)$ . Повторим этот эксперимент, рассмотрев объект, движущийся со скоростью  $-V$  по отношению к некоторой системе отсчета, которая сама движется со скоростью  $-v$  относительно нашей фиксированной системы отсчета. Из уравнений (15.25) следует, что теперь траектория объекта дается выражениями

$$\begin{aligned} z' &= -(V + v)t(1 - \beta^2)^{-1/2}, \\ ct' &= (c + vV/c)t(1 - \beta^2)^{-1/2} \end{aligned}$$

и, следовательно,  $z'/t' = -(V + v)/(1 + vV/c^2)$ .

Это означает, что объект движется относительно исходной системы отсчета с постоянной скоростью, равной  $V' = (V + v)/(1 + vV/c^2)$ . Таким образом, относительные скорости не аддитивны. Кроме того, если  $V = c$ , то и  $V' = c$ , откуда следует, что скорость света одинакова в любой системе отсчета. Этот замечательный эффект, впервые экспериментально наблюдавшийся Майкельсоном и Морли, был одним из первых экспериментальных обоснований теории относительности и является причиной того, что в преоб-



разования Лоренца входит скорость света. Если в преобразованиях Лоренца взять постоянную  $c$ , отличную от скорости света, то это приведет к противоречию с экспериментом. Из выражения для скорости  $V'$  следует, что если обе скорости  $V$  и  $v$  меньше скорости света  $c$ , то и  $V'$  меньше  $c$ . Другими словами, путем сложения относительных скоростей нельзя превзойти скорость света независимо от того, насколько скорости  $V$  и  $v$  близки к  $c$ . В релятивистской динамике показывается, что для того, чтобы разогнать частицу до скорости света, требуется бесконечно большая энергия. Данные, полученные в экспериментах на мощных ускорителях элементарных частиц, полностью согласуются с этим выводом. Скорость света  $c$  действительно является верхней границей для скорости частицы, а преобразования Лоренца имеют сингулярность при  $v=c$ . Тем не менее теоретически вопрос о том, возможны ли объекты, движущиеся со скоростью  $v > c$  и существующие по другую сторону от указанной сингулярности, имеет смысл. Частицы с такими свойствами получили название «таххионов», и их свойства исследуются теоретически, но пока еще нет никаких данных, указывающих на то, что тахионы существуют (см. работу [3], цитируемую в литературе к гл. 12).

В заключение отметим, что лоренцева инвариантность законов физики означает, что они одинаковы во всех системах отсчета, движущихся с постоянной относительной скоростью. Неожиданным оказался вид преобразования, связывающего описание движения в разных системах отсчета. В том же смысле слова употребляется термин «галилеева инвариантность», но с той разницей, что разные системы отсчета связаны между собой интуитивно очевидными преобразованиями (15.28). Но галилеева инвариантность имеет место лишь при  $v \ll c$ .

## Г. Инфинитезимальные операторы

Группа Лоренца  $\mathcal{L}$  является группой Ли. Из равенства (15.27) следует, что общий элемент группы определяется шестью параметрами. К такому же выводу можно прийти, если учесть, что матричное равенство (15.23) налагает 10 условий на 16 матричных элементов  $4 \times 4$ -матрицы. Чтобы найти матрицы инфинитезимальных операторов, рассмот-

рим формулу (15.27) при малых  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ . Взяв инфинитезимальную форму матрицы вращения  $\mathbf{R}(\mathbf{a})$  из гл. 7, § 4, п. А и сохранив лишь члены первого порядка по  $\mathbf{b}$  в формулах (15.26), получаем равенство  $\mathbf{L} = \mathbf{1} + \Lambda$ , где матрица инфинитезимального оператора  $\Lambda$  имеет вид

$$\Lambda = \begin{pmatrix} 0 & -a_z & a_y & -b_x \\ a_z & 0 & -a_x & -b_y \\ -a_y & a_x & 0 & -b_z \\ -b_x & -b_y & -b_z & 0 \end{pmatrix} = \sum_{q=x,y,z} (a_q X_q + b_q Y_q). \quad (15.30)$$

Здесь  $b_q$ —три компоненты вектора буста  $\mathbf{b}$ ,  $X_q$ —матрицы, определенные соотношениями (7.24), а  $Y_q$ —матрицы вида

$$Y_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad Y_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$Y_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (15.31)$$

Эти матрицы описывают инфинитезимальные бусты в трех пространственных направлениях.

Перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов можно получить, воспользовавшись формулами (15.31):

$$\begin{aligned} [X_x, X_y] &= X_z, [X_y, X_z] = X_x, [X_z, X_x] = X_y, \\ [Y_x, Y_y] &= -X_z, [Y_y, Y_z] = -X_x, [Y_z, Y_x] = -X_y, \\ [X_x, Y_x] &= 0, [X_y, Y_y] = 0, [X_z, Y_z] = 0, \\ [X_x, Y_y] &= Y_z, [X_y, Y_z] = Y_x, [X_z, Y_x] = Y_y, \\ [X_y, Y_x] &= -Y_z, [X_z, Y_y] = -Y_x, [X_x, Y_z] = -Y_y. \end{aligned} \quad (15.32)$$

Заметим, что линейные комбинации

$$A_q = \frac{1}{2} (X_q + iY_q), \quad B_q = \frac{1}{2} (X_q - iY_q) \quad (15.33)$$

удовлетворяют гораздо более простым перестановочным соотношениям:

$$\begin{aligned} [A_x, A_y] &= A_z, [A_y, A_z] = A_x, [A_z, A_x] = A_y, \\ [B_x, B_y] &= B_z, [B_y, B_z] = B_x, [B_z, B_x] = B_y \end{aligned} \quad (15.34)$$

и  $[A_q, B_{q'}] = 0$  при любых  $q$  и  $q'$ . Другими словами, если рассматривать  $A_q$  и  $B_q$  как инфинитезимальные операторы, то они соответствуют прямому произведению двух групп, так как все операторы  $A_q$  коммутируют с операторами  $B_q$ . Кроме того, перестановочные соотношения (15.34) говорят о том, что по отдельности операторы  $A_q$  и  $B_q$  удовлетворяют перестановочным соотношениям (7.25) для группы  $\mathcal{R}_3$ . Таким образом,  $A_q$  и  $B_q$  являются инфинитезимальными операторами группы  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$ . Но это отнюдь не означает, что группы  $\mathcal{L}$  и  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$  изоморфны, так как группе  $\mathcal{L}$  соответствуют операторы  $X_q, Y_q$  с действительными коэффициентами, а группе  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$  — операторы  $A_q$  и  $B_q$  тоже с действительными коэффициентами. Тем не менее мы сможем получить неприводимые представления группы  $\mathcal{L}$  из неприводимых представлений группы  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$ , поскольку при этом мы будем исходить, как и в гл. 7, § 4, лишь из алгебры инфинитезимальных операторов.

## Д. Неприводимые представления

Теперь оставим базисное четырехмерное пространство, в котором задано действие группы Лоренца, и займемся представлениями в более общих векторных пространствах. Но мы сохраним обозначения, принятые для инфинитезимальных операторов, и если в предыдущем пункте символами  $A_q$  и  $B_q$  обозначались  $4 \times 4$ -матрицы, то в дальнейшем ими будут обозначаться операторы, действующие в некотором векторном пространстве, являющемся пространством представления. Из общей теории (гл. 7, § 1) известно, что коммутаторы инфинитезимальных операторов имеют один и тот же вид во всех представлениях и, следовательно, могут быть заданы соотношениями (15.32).

Поскольку структура неприводимых представлений  $D^{(j)}$  группы  $\mathcal{R}_3$  была получена в гл. 7, § 4, п. Б на основе только перестановочных соотношений, а представления прямого произведения двух групп задаются двумя индексами, каждым из которых определяется неприводимое

представление одной из этих групп, конечномерные неприводимые представления группы Лоренца могут быть заданы парой индексов  $j$  и  $j'$ , принимающих, как и в случае группы  $\mathcal{R}_3$ , значения  $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}$  и т. д. Размерность этих представлений, которые мы будем обозначать символом  $L^{(j,j')}$ , равна  $(2j+1)(2j'+1)$ . Можно показать, что те представления, у которых оба индекса  $j$  и  $j'$  целые числа, а также те, у которых оба индекса  $j$  и  $j'$  полуцелые, являются однозначными; представления же с одним целым и одним полуцелым индексом двузначны.

Эти два индекса можно интерпретировать, рассматривая собственные значения двух операторов Казимира (гл. 7, § 5):  $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}_x^2 + \mathbf{A}_y^2 + \mathbf{A}_z^2$ ,  $\mathbf{B}^2 = \mathbf{B}_x^2 + \mathbf{B}_y^2 + \mathbf{B}_z^2$ . Учитывая формулу (7.36) и множитель  $i$ , введенный непосредственно перед формулой (7.26), получаем, что собственные значения операторов  $\mathbf{A}^2$  и  $\mathbf{B}^2$  равны  $-j(j+1)$  и  $-j'(j'+1)$ . Можно также (и в дальнейшем это будет удобнее) использовать следующие комбинации инфинитезимальных операторов:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}^2 - \mathbf{Y}^2 &= 2(\mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2) \text{ с собственным значением} \\ &\quad -2\{j(j+1) + j'(j'+1)\}, \\ \mathbf{X} \cdot \mathbf{Y} &= -i(\mathbf{A}^2 - \mathbf{B}^2) \text{ с собственным значением} \\ &\quad i\{j(j+1) - j'(j'+1)\}. \end{aligned} \quad (15.35)$$

Базисные векторы пространства представления  $L^{(j,j')}$  можно обозначить через  $e_{mm'}^{jj'}$ , где, как и в случае группы  $\mathcal{R}_3$ , нижними индексами  $m = j, (j-1), \dots, -j$  и  $m' = j', (j'-1), \dots, -j'$  обозначены собственные значения операторов  $\mathbf{A}_z$  и  $\mathbf{B}_z$ . А именно, используя формулы из гл. 7, § 3, п. Д, получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_z e_{mm'}^{jj'} &= -i m e_{mm'}^{jj'}, \\ \mathbf{B}_z e_{mm'}^{jj'} &= -i m' e_{mm'}^{jj'}. \end{aligned} \quad (15.36)$$

Сами  $4 \times 4$ -матрицы преобразований Лоренца образуют однозначное четырехмерное представление, которое не может быть ничем иным, как представлением  $L^{(1/2, 1/2)}$ . Для того чтобы проверить это, нужно лишь по формулам

(15.31) и (7.24) вычислить матрицы

$$X^2 - Y^2 = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 3 \end{pmatrix} = -3$$

и  $X \cdot Y = 0$ , что совпадает с формулами (15.35) при  $j = j' = 1/2$ . Можно пойти и дальше и получить матрицы операторов  $X_q$  и  $Y_q$ , исходя из выражений для матриц инфинитезимальных операторов группы  $\mathcal{R}_3$  [формулы (7.40) и (7.39)]. Так, например, матрицы (15.31) можно путем соответствующего изменения базиса получить из матриц инфинитезимальных операторов в представлении  $D^{(1/2)}$  (задача 15.5). В частности, отметим, что  $X_z = A_z + B_z$  и из выражений (15.36) вытекает, что базисный вектор  $e_{mm'}^{jj'}$  пространства представления  $L^{(j, j')}$  является собственным вектором оператора  $X_z$  с собственным значением, равным  $-i(m + m')$ , и преобразуется по представлению  $T^{(m+m')}$  группы  $\mathcal{R}_2$  физических вращений относительно оси  $z$ .

Разложение произведения двух неприводимых представлений группы  $\mathcal{L}$  определяется соответствующим разложением для группы вращений. Результат таков:

$$L^{(j_1, j'_1)} \otimes L^{(j_2, j'_2)} = \sum_{J, J'} L^{(J, J')}, \quad (15.37)$$

где  $|j_1 - j_2| \leq J \leq (j_1 + j_2)$  и  $|j'_1 - j'_2| \leq J' \leq (j'_1 + j'_2)$ .

Физическая группа вращений  $\mathcal{R}_3$  является подгруппой группы Лоренца  $\mathcal{L}$ , и, следовательно, представление  $L^{(j, j')}$  при сужении с  $\mathcal{L}$  на  $\mathcal{R}_3$  должно разлагаться на сумму неприводимых представлений  $D^{(J)}$ . Соответствующее правило выглядит так:

$$L^{(j, j')} = \sum_{|j - j'| \leq J \leq (j + j')} D^{(J)}. \quad (15.38)$$

Формулу (15.38) можно без труда вывести в два этапа. Во-первых, из равенства (15.37) следует, что  $L^{(j, 0)} \otimes L^{(0, j')} = L^{(j, j')}$ . Но в представлении  $L^{(j, 0)}$  операторы  $B_q = 0$  и, следовательно,  $X_q = A_q$ . Таким образом, для вращений  $L^{(j, 0)} \equiv D^{(j)}$ . Точно так же, если ограничиться вращениями, то  $L^{(0, j')} \equiv D^{(j')}$ . Отсюда с учетом формулы

(7.44) получаем соотношение (15.38). Например,  $L^{(1/2, 1/2)} = D^{(1)} \oplus D^{(0)}$ . Так и должно быть, поскольку сами  $4 \times 4$ -матрицы преобразований Лоренца образуют представление  $L^{(1/2, 1/2)}$ , а четырехмерное пространство распадается на трехмерное пространство, являющееся пространством представления  $D^{(1)}$  группы вращений, и время, инвариантное относительно вращений.

Отметим также, что если в случае группы  $\mathcal{R}_3$  представление, комплексно-сопряженное с представлением  $D^{(j)}$ , эквивалентно ему с заменой базиса  $e_m^* = (-1)^{j-m} e_m$  (в тех же обозначениях что и в гл. 7, § 4, п. Б; см. также § 7), то представление, комплексно-сопряженное с представлением  $L^{(j, j')}$ , эквивалентно представлению  $L^{(j', j)}$ . Таким образом, представления  $L^{(j, j')}$  эквивалентны комплексно-сопряженным представлениям лишь при  $j = j'$ . Это утверждение следует непосредственно из формулы (15.33). Однако здесь нужно проявлять осторожность и отличать оператор  $A_q$  в комплексно-сопряженном представлении — мы обозначим его через  $(A_q)^*$  — от оператора  $A_q^*$ , комплексно-сопряженного с оператором  $A_q$ . В комплексно-сопряженном представлении операторы  $X_q$  и  $Y_q$  переходят в  $X_q^*$  и  $Y_q^*$ , так что  $(A_q)^* = X_q^* + iY_q^* = (X_q - iY_q)^* = B_q^*$ . Так как представления  $D^{(j)}$  группы  $\mathcal{R}_3$  действительны, т. е. эквивалентны своим комплексно-сопряженным, последняя формула приводит к замене  $j$  на  $j'$  и наоборот.

Заметим также, что представления  $L^{(j, j')}$  не унитарны. Для унитарности необходимо, чтобы инфинитезимальные операторы были антиэрмитовыми, т. е. имели мнимые собственные значения. Но, как мы видели в гл. 7, § 4 при обсуждении группы  $\mathcal{R}_3$ , операторы  $A_q$  и  $B_q$  антиэрмитовы, и из равенств (15.33) следует, что операторы  $X_q$  антиэрмитовы, тогда как операторы  $Y_q$  эрмитовы. Таким образом, независимо от выбранного базиса наши конечномерные представления группы Лоренца не унитарны. Тривиальное представление  $L^{(0, 0)} = 1$  является, естественно, исключением.

### § 3. ГРУППА ЛОРЕНЦА С ПРОСТРАНСТВЕННЫМИ ОТРАЖЕНИЯМИ — ГРУППА $\mathcal{L}_s$

Добавление к группе  $\mathcal{R}_3$  пространственной инверсии  $I$  было тривиальной процедурой. Инверсия коммутирует

с вращениями, и в результате получается прямое произведение  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{S}_2 = \mathcal{G}_3$  (гл. 7, § 4); неприводимые представления группы  $\mathcal{G}_3$  задаются парой индексов  $j, \pi$ , где  $\pi = \pm$  — четность.

Добавление инверсии  $I$  к группе Лоренца не является столь же простой операцией, поскольку инверсия не коммутирует с преобразованиями Лоренца. Но, учитывая то, что произвольное преобразование  $L$  можно представить в виде произведения вращения  $R(a)$  на буст  $Q(b)$  [формула (15.27)], мы можем ограничиться рассмотрением произведений инверсии  $I$  с бустами. Для буста  $Q_z(b)$  из явного вида матрицы (15.24) и матрицы

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (15.39)$$

имеем  $IQ_z(b) = Q_z(-b)I$ . Ясно, что это соотношение остается в силе, если взять вместо  $z$  любое другое направление. Таким образом,  $IQ(b) = Q(-b)I$ , или, другими словами,  $IQ(b)I = Q(-b)$ , откуда следует, что инверсия  $I$  изменяет направление буста на противоположное — результат, который можно было предвидеть. Если перейти к инфинитезимальным операторам, то это значит, что

$$IX_q = X_q I, \quad IY_q = -Y_q I, \quad (15.40)$$

$$\text{так что } \mathbf{A}_q I = I \mathbf{B}_q, \quad \mathbf{B}_q I = I \mathbf{A}_q, \quad (15.41a)$$

$$\text{откуда следуют соотношения } \mathbf{A}^2 I = I \mathbf{B}^2, \quad \mathbf{B}^2 I = I \mathbf{A}^2. \quad (15.41b)$$

Структуру и индексы неприводимых представлений группы  $\mathcal{L}_s$  можно теперь без труда установить, исходя из соотношений (15.40) и (15.41), справедливых, конечно, для всех представлений, а не только для матриц  $4 \times 4$ . Как и в § 2, мы будем обозначать одинаково (символами  $\mathbf{A}_q$  и т. д.) матрицы  $4 \times 4$  и соответствующие операторы в представлении общего вида. Но в соответствии с обозначениями гл. 4, § 1 оператор инверсии в представлении общего вида мы будем обозначать через  $T(I)$ .

Обозначим базисные векторы пространства неприводимого представления  $L^{(j, j')}$  группы  $\mathcal{L}$  через  $e_{mm'}^{(jj')}$ , где  $m = j, (j-1), \dots, -j$ ;  $m' = j', (j'-1), \dots, -j'$ . Тогда

с учетом соотношений (15.41) получаем

$$\mathbf{A}^2 [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}] = \mathbf{T}(l) \mathbf{B}^2 \mathbf{e}_{mm'}^{jj'} = -j'(j' + 1) [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}],$$

тогда как

$$\mathbf{B}^2 [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}] = -j(j + 1) [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}].$$

Аналогично из формул (15.36) и (15.41a) получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_z [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}] &= -im' [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}], \\ \mathbf{B}_z [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}] &= -im [\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}]. \end{aligned} \quad (15.42)$$

Из формул (15.42) следует, что набор  $(2j+1)(2j'+1)$  векторов  $\mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}$  образует базис пространства представления  $\mathbf{L}_{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}}^{(j', j)}$  группы  $\mathcal{L}$ , и мы введем обозначение

$$\mathbf{f}_{m'm}^{j'j} = \mathbf{T}(l) \mathbf{e}_{mm'}^{jj'}. \quad (15.43)$$

Далее, так как  $\mathbf{l}^2 = \mathbf{E}$  — тождественное преобразование, мы имеем  $\mathbf{e}_{mm'}^{jj'} = \mathbf{T}(l) \mathbf{f}_{m'm}^{j'j}$ . При  $j' \neq j$  векторы  $\mathbf{e}_{mm'}^{jj'}$  и  $\mathbf{f}_{m'm}^{j'j}$  должны быть линейно-независимыми и, как следует из приведенных выше формул, набор  $2(2j+1)(2j'+1)$  векторов  $\mathbf{e}_{mm'}^{jj'}$  и  $\mathbf{f}_{m'm}^{j'j}$  с заданными  $j$  и  $j'$  инвариантен относительно операторов  $\mathbf{A}_q$ ,  $\mathbf{B}_q$  и  $\mathbf{l}$  группы  $\mathcal{L}_s$ . Следовательно, эти векторы порождают пространство неприводимого представления, которое мы обозначим через  $\mathbf{L}_s^{(j, j')}$ , хотя порядок написания индексов  $j$  и  $j'$  в этом случае несуществен. Очевидно, что, ограничившись подгруппой  $\mathcal{L}$ , мы получим разложение

$$\mathbf{L}_s^{(j, j')} = \mathbf{L}^{(j, j')} \oplus \mathbf{L}^{(j', j)}. \quad (15.44)$$

Из равенства (15.43) явствует, что векторы  $\mathbf{e}$  и  $\mathbf{f}$  не обладают определенной четностью. Чтобы получить векторы с определенной четностью, нужно взять комбинации

$$\mathbf{e}_{mm'}^{jj'} \pm \mathbf{f}_{m'm}^{j'j}, \quad (15.45)$$

четность которых определяется знаком «+» или «—». Хотя эти комбинации не являются собственными векторами операторов  $\mathbf{A}^2$  и  $\mathbf{B}^2$ , они являются собственными векторами оператора  $\mathbf{X}^2 - \mathbf{Y}^2$ , определенного формулой (15.35).

На случае  $j = j'$  необходимо специально остановиться, так как при  $j = j'$  векторы  $\mathbf{e}_{mm'}^{jj}$  и  $\mathbf{f}_{m'm}^{jj}$  не обязательно линейно-независимы. Более того, мы покажем, что если они линейно-независимы, то представление, полученное



из векторов  $e_{mm'}^{jj}$ , приводимо. Будем действовать методом доказательства от противного. Допустим, что векторы  $e_{mm'}^{jj}$  и  $f_{mm'}^{jj}$  линейно-независимы. Тогда неприводимое представление, содержащее векторы  $e_{mm'}^{jj}$ , должно также содержать векторы  $f_{mm'}^{jj}$ . Следовательно, размерность его должна быть равна  $2(2j+1)^2$ . Но так как

$$T(l)(e_{mm'}^{jj} + f_{mm'}^{jj}) = f_{m'm}^{jj} + e_{m'm}^{jj}$$

и, согласно формуле (15.42), векторы  $e$  и  $f$  преобразуются под действием операторов  $A_q$  и  $B_q$  одинаково, подпространство, образованное  $(2j+1)^2$  базисными векторами  $(e_{mm'}^{jj} + f_{m'm}^{jj})$ , инвариантно относительно всей группы. Значит, наше представление приводимо, что противоречит исходному предположению. Единственная возможность избежать этого противоречия состоит в том, чтобы положить  $f_{mm'}^{jj} = c e_{mm'}^{jj}$ , для некоторой постоянной  $c$ . Так как  $l^2 = E$ , мы имеем  $c^2 = 1$  и  $c = \pm 1$ . Таким образом, при каждом  $j$  имеются два возможных неприводимых  $(2j+1)^2$ -мерных представления группы  $\mathcal{L}_s$ , которые мы будем обозначать через  $L^{(j+)}$  и  $L^{(j-)}$ . При ограничении подгруппой собственных преобразований Лоренца эти представления совпадают с представлением  $L^{(j)}$  и характеризуются свойствами

$$\begin{aligned} T(l) e_{mm'}^{jj} &= e_{m'm}^{jj} \text{ для } L^{(j+)}, \\ T(l) e_{mm'}^{jj} &= -e_{m'm}^{jj} \text{ для } L^{(j-)}. \end{aligned} \quad (15.46)$$

Заметим, что знаки  $\pm$  в символе  $L^{(j\pm)}$  не означают, что все базисные векторы обладают положительной или отрицательной четностью. Формулы (15.46) показывают, что оператор  $T(l)$  не диагонален в  $mm'$ -базисе. Например, четырехмерное представление, заданное матрицами  $L$ , является представлением  $L^{(1/2-)}$ . В базисе  $\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z, \hat{e}_t$ , в котором заданы матрицы  $L$ , оператор  $T(l)$  диагонален и имеет три собственных вектора с отрицательной четностью и один с положительной. Из формул (15.46) следует, что в  $mm'$ -базисе матрица  $T(l)$  имеет вид

$$T(l) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

#### § 4. ТРАНСЛЯЦИИ И ГРУППА ПУАНКАРЕ $\mathcal{P}$

В § 2 и 3 мы имели дело с однородными преобразованиями Лоренца, оставляющими на месте начало координат. Теперь мы рассмотрим объединение пространственно-временных трансляций с группой Лоренца — группу Пуанкаре  $\mathcal{P}$ , или, как ее иногда называют, неоднородную группу Лоренца. Прежде чем переходить к группе Пуанкаре, мы кратко остановимся на одних трансляциях. Включению несобственных пространственных инверсий и отражения времени, так же как и выяснению физического смысла различных представлений группы Пуанкаре, будут посвящены следующие разделы.

##### А. Трансляции в пространстве-времени

Трансляции в пространстве-времени мы определяем просто путем обобщения трехмерных трансляций (§ 1, п. А) на четвертое измерение. Оператор трансляции записывается в виде  $P(\hat{\epsilon})$ , где  $\hat{\epsilon} = (\epsilon_x, \epsilon_y, \epsilon_z, \epsilon_t)$  — четырехмерный вектор, определяемый равенством

$$P(\hat{\epsilon})\hat{e} = \hat{e} + \hat{\epsilon}. \quad (15.47)$$

Заметим, что сдвиг во времени добавляет величину  $\epsilon_t$  к  $ct$ , а это соответствует изменению  $t$  на величину  $\epsilon_t/c$ . Как обычно, инфинитезимальные операторы  $P_x, P_y, P_z, P_t$  определяются формулой

$$P(\hat{\epsilon}) = 1 + \epsilon_x P_x + \epsilon_y P_y + \epsilon_z P_z - \epsilon_t P_t = 1 - \hat{\epsilon} \cdot \hat{P} \quad (15.48)$$

при малых  $\hat{\epsilon}$ . Выбор знака минус в определении оператора  $P_t$  означает, что он соответствует отрицательным сдвигам во времени, тогда как пространственные компоненты соответствуют, как и в § 1, положительным пространственным трансляциям. Такое явно несимметричное определение принято для того, чтобы операторы  $P_x, P_y, P_z$  и  $P_t$  были компонентами четырехмерного вектора  $\hat{P}$ . Тогда при переходе от одной системы отсчета к другой они преобразуются как компоненты любого другого четырехмерного вектора (задача 15.6) и мы можем использовать в формуле (15.48) скалярное произведение. (Если бы мы не ввели этого знака минус, то нам пришлось бы

различать ковариантные и контравариантные векторы; см. замечание в § 2, п. А.) Четырехмерная группа трансляций является абелевой группой, образованной, как и в случае трех измерений, прямым произведением одномерных групп трансляций. Отсюда следует, что ее неприводимые представления одномерны и задаются четырьмя числами  $k_x, k_y, k_z$  и  $k_t$ . Определив четырехмерный вектор  $\hat{\mathbf{k}} = (k_x, k_y, k_z, k_t)$ , мы можем обозначить неприводимое представление четырехмерной группы трансляций через  $\Gamma(\hat{\mathbf{k}})$ . Если через  $|\hat{\mathbf{k}}\rangle$  обозначен базисный вектор пространства этого представления, то оно задается формулой

$$\Gamma(\hat{\mathbf{e}})|\hat{\mathbf{k}}\rangle = \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}})|\hat{\mathbf{k}}\rangle. \quad (15.49)$$

В случае трехмерных трансляций эта формула согласуется с результатами § 1, п. А и является определением вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ .

Сравнив два последних равенства, мы видим, что в представлении  $\Gamma(\hat{\mathbf{k}})$  инфинитезимальные операторы принимают значения  $\hat{\mathbf{P}} \equiv -i\hat{\mathbf{k}}$ . Если мы рассмотрим действие инфинитезимальных операторов на функцию  $\psi(\hat{\mathbf{e}})$ , зависящую от координат вектора  $\hat{\mathbf{e}}$ , то при малых  $\hat{\mathbf{e}}$  можно написать (гл. 7, § 3, п. Д)

$$\Gamma(\hat{\mathbf{e}})\psi(\hat{\mathbf{e}}) = \psi(\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}}) = \psi(\hat{\mathbf{e}}) - \left( \sum_q \varepsilon_q \frac{\partial}{\partial e_q} + \varepsilon_t \frac{\partial}{\partial(ct)} \right) \psi(\hat{\mathbf{e}}); \quad (15.50)$$

в силу формулы (15.48) получаем

$$\mathbf{P}_x \equiv -\frac{\partial}{\partial x}, \quad \mathbf{P}_y \equiv -\frac{\partial}{\partial y}, \quad \mathbf{P}_z \equiv -\frac{\partial}{\partial z}, \quad \mathbf{P}_t \equiv \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t}. \quad (15.51)$$

В качестве типичного примера функции, преобразующейся по представлению  $\Gamma(\hat{\mathbf{k}})$ , можно взять функцию

$$\psi(\hat{\mathbf{e}}) = \exp(-i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - ik_t ct), \quad (15.52)$$

где  $\mathbf{k}$  — трехмерная часть, а  $k_t$  — временная компонента четырехмерного вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ .

При исследовании физического смысла пространственно-временных трансляций мы можем ограничиться лишь

временными трансляциями, поскольку в § 1, п. А мы уже показали, каким образом инвариантность относительно пространственных трансляций приводит к сохранению импульса. Инвариантность по отношению к сдвигам во времени означает, что инфинитезимальный оператор  $P_t$  также соответствует сохраняющейся величине, которую мы назовем энергией. Опять-таки этот оператор антиэрмитов и имеет неправильную размерность. Настоящий оператор энергии имеет вид  $H = i\hbar c P_t$ . Инвариантность гамильтониана во отношении к временным трансляциям означает, что он не содержит явной зависимости от времени. Если же гамильтониан инвариантен также и относительно пространственных трансляций, то мы должны обнаружить собственные состояния, индицируемые вектором  $\hat{k}$ , которому соответствуют импульс  $\hbar k$  (§ 1, п. А) и энергия  $i\hbar c (-ik_t) = = \hbar c k_t$ , обозначаемая обычно через  $E$ . Для системы, обладающей лишь инвариантностью относительно сдвигов во времени, мы сохраняем только индекс  $k_t$  или  $E$ . На самом деле в обычном выражении (5.3) для волновой функции стационарного состояния находит отражение то обстоятельство, что при временных трансляциях это состояние преобразуется по представлению, характеризующемуся величиной  $k_t = E/\hbar c$ . Отметим, что уравнение Шредингера (5.2) получается путем приравнивания явного выражения  $i\hbar \partial/\partial t$  для оператора энергии, полученного из инфинитезимального оператора  $P_t$ , оператору энергии  $H$  некоторого конкретного вида — например  $T + V$ , описывающего, согласно нашим предположениям, поведение исследуемой системы. Заметим также, что, поскольку оператор  $\hat{P}$  является четырехмерным вектором, операторы энергии и импульса образуют четырехмерный вектор  $(p_x, p_y, p_z, H/c)$  с собственными значениями  $\hbar (k_x, k_y, k_z, k_t)$ . Отсутствие явной зависимости гамильтониана от времени и в классической механике приводит к закону сохранения энергии (гл. 16, § 1, п. Б).

В принципе величина  $k_t$  может принимать как положительные, так и отрицательные значения. Интерпретация состояний с отрицательной энергией наталкивается на трудности; как, например, объяснить, что состояния с положительной энергией не распадаются на состояния с отрицательными энергиями? Ранее предлагался постулат

о том, что все состояния с отрицательными энергиями заполнены, но он не был удовлетворителен. В настоящее время постулируется, что энергии всех физических частиц положительны, и это согласуется с данными эксперимента. Тем не менее представления, соответствующие отрицательным значениям  $k_t$ , играют некоторую роль при построении квантованных полей. Мы кратко остановимся на этом вопросе в гл. 16.

## Б. Группа Пуанкаре и ее представления

Группа Пуанкаре  $\mathcal{P}$  состоит из преобразований Лоренца  $L$ , трансляций  $P(\hat{\epsilon})$  и их произведений. Хотя трансляции и преобразования Лоренца не коммутируют, их закон умножения имеет простую форму. Чтобы показать это, рассмотрим два произведения:  $P(\hat{\epsilon})L\hat{e} = L\hat{e} + \hat{\epsilon}$  и  $LP(\hat{\epsilon})\hat{e} = L(\hat{e} + \hat{\epsilon}) = L\hat{e} + L\hat{\epsilon}$ . Из этих равенств следует, что

$$LP(\hat{\epsilon}) = P(L\hat{\epsilon})L. \quad (15.53)$$

Таким образом, общее преобразование Пуанкаре можно представить в виде

$$\hat{e}' = P(\hat{\epsilon})L\hat{e} = L\hat{e} + \hat{\epsilon}, \quad (15.54)$$

т. е. сначала выполняется преобразование Лоренца, а затем трансляция. Группа  $\mathcal{P}$  весьма похожа на евклидову группу (§ 1) с той лишь разницей, что число измерений равно четырем, а роль вращений играют преобразования Лоренца. Число параметров теперь равно десяти: шесть параметров определяют преобразование  $L$  и четыре —  $P(\hat{\epsilon})$ . Для преобразования, индуцированного в пространстве представления элементом группы Пуанкаре  $P(\hat{\epsilon})L$ , мы примем обозначение  $T(\hat{\epsilon}, L)$ . Как обычно, операторы  $T(\hat{\epsilon}, L)$  подчиняются тем же законам умножения, что и соответствующие операторы группы.

Теперь, повторяя ту же последовательность шагов, что и в случае евклидовой группы (§ 1, п. В), мы построим неприводимые представления группы  $\mathcal{P}$ .

**Шаг 1.** Выберем базисные векторы  $|\hat{k}\rangle$  так, чтобы они принадлежали неприводимым представлениям подгруппы

трансляций и, следовательно, удовлетворяли равенству (15.49).

*Шаг 2.* Покажем, что пространство неприводимого представления, содержащее вектор  $|\hat{k}\rangle$ , должно также содержать все базисные векторы вида  $|\hat{k}'\rangle$ , где  $\hat{k}' = L\hat{k}$  при всех  $L$ . Другими словами, вектор  $\hat{k}'$  имеет ту же «длину», что и  $\hat{k}$ , и расположен в той же области пространства-времени (§ 2, п. А и Б). Действительно, рассмотрим следующую цепочку равенств, полученную с учетом формул (15.53), (15.49) и (15.22):

$$\begin{aligned} T(\hat{\epsilon}) T(L) |\hat{k}\rangle &= T(L) T(L^{-1}\hat{\epsilon}) |\hat{k}\rangle = \\ &= T(L) \exp(i\hat{k} L^{-1}\hat{\epsilon}) |\hat{k}\rangle = \\ &= \exp(iL\hat{k} \cdot \hat{\epsilon}) T(L) |\hat{k}\rangle. \end{aligned} \quad (15.55)$$

Таким образом, если  $|\hat{k}\rangle$  — базисный вектор, то вектор  $T(L)|\hat{k}\rangle$ , который также должен принадлежать пространству данного представления, преобразуется по представлению подгруппы трансляций, заданному величиной  $\hat{k}' = L\hat{k}$ , чем и доказывается наше утверждение.

Следовательно, неприводимые представления группы  $\mathcal{P}$  можно сначала классифицировать в соответствии с областью пространства-времени, в которой лежит вектор  $\hat{k}$ . Как мы видели в § 2, п. Б, таких областей имеется шесть. Неприводимые представления, соответствующие разным областям, имеют совершенно разную структуру, и оставшиеся два шага мы сделаем отдельно для каждой области.

### Область 6, $\hat{k} = 0$

Этот случай не представляет затруднений, так как при  $\hat{k} = 0$  все базисные векторы инвариантны относительно трансляций и группа  $\mathcal{P}$  эффективно сводится к группе  $\mathcal{L}$ . Неприводимые представления в этом случае есть просто представления  $L^{(j,j')}$ , рассмотренные в § 2, п. Д.

Области 2 и 3, времениподобные векторы  $\hat{k}$  (представления  $\rho(k, s)$ )

*Шаг 3.* Для построения неприводимых представлений в этом случае выберем простой времениподобный вектор

$\mathbf{k}_0 = (0, 0, 0, k)$  длиной  $k$ . Для определенности положим  $k > 0$  — это случай положительного времениподобного вектора, область 2. Результаты для отрицательного времениподобного вектора будут в точности такими же. Так как вектор  $\hat{\mathbf{k}}_0$  инвариантен относительно вращений  $\mathcal{R}(\mathbf{a})$ , из формулы (15.55) следует, что вектор  $T(\mathcal{R}(\mathbf{a}))|\hat{\mathbf{k}}_0\rangle$  при трансляциях преобразуется так же, как  $|\hat{\mathbf{k}}_0\rangle$ . Таким образом, множество базисных векторов пространства представления, преобразующихся по отношению к трансляциям как вектор  $|\hat{\mathbf{k}}_0\rangle$ , образует инвариантное по отношению к подгруппе  $\mathcal{R}_3$  подпространство и этим векторам наряду с  $\hat{\mathbf{k}}_0$  можно приписать индекс, соответствующий неприводимому представлению подгруппы  $\mathcal{R}_3$ . Мы будем задавать представление группы  $\mathcal{R}_3$  индексом  $s (= 0, 1/2, 1, 3/2, \dots)$ . Индекс  $m_s = s, s-1, \dots, -s$  будем использовать для того, чтобы различать базисные векторы пространства неприводимого представления группы  $\mathcal{R}_3$  (гл. 7, § 4, п. Б), так что в дальнейшем вместо  $|\hat{\mathbf{k}}_0\rangle$  мы будем писать  $|\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle$ . В обозначениях гл. 7, § 4, п. Б мы получим набор  $(2s+1)$  базисных векторов, обладающих свойством

$$T(\mathcal{R}(\mathbf{a}))|\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle = \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{a})|\hat{\mathbf{k}}_0 s m'_s\rangle \quad (15.56)$$

и удовлетворяющих условию (15.49).

Шаг 4. Исходя из этих  $(2s+1)$  базисных векторов, мы покажем теперь, что пространство неприводимого представления порождается всеми векторами вида

$$|\hat{\mathbf{k}} s m_s\rangle = T(\mathcal{Q}[\mathbf{b}^*(\hat{\mathbf{k}})])|\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle, \quad (15.57)$$

где  $\hat{\mathbf{k}}$  — произвольный четырехмерный вектор, принадлежащий той же области и имеющий такую же «длину», что и четырехмерный вектор  $\hat{\mathbf{k}}_0$ , а  $\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})$  соответствует тому однозначно определенному преобразованию Лоренца, которое переводит  $\hat{\mathbf{k}}_0$  в  $\hat{\mathbf{k}}$ , т. е.

$$\mathcal{Q}[\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})]\hat{\mathbf{k}}_0 = \hat{\mathbf{k}}. \quad (15.58)$$

Из формулы (15.26) видно, что длина трехмерного вектора  $\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})$  равна  $\text{Arch}(k_1/k)$ , а его направление задается

вектором  $-\mathbf{k}$ , причем здесь  $\mathbf{k}$  — пространственная часть, а  $k_t$  — четвертая компонента вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ .

Чтобы показать, что множество (15.57) с заданными  $\hat{\mathbf{k}}_0$  и  $s$  образует базис пространства представления, рассмотрим результат применения к этим векторам произвольного оператора представления. При этом нам понадобится соотношение (15.27), выражающее то обстоятельство, что любое преобразование Лоренца может быть представлено в виде произведения чисто лоренцевского преобразования (буста) на вращение. В результате получаем

$$\begin{aligned}
 T(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) | \hat{\mathbf{k}} s m_s \rangle &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(\mathbf{L}) T(Q[\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})]) | \hat{\mathbf{k}}_0 s m_s \rangle = && \text{В силу (15.57).} \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(\mathbf{L}') | \hat{\mathbf{k}}_0 s m_s \rangle = && \text{Здесь } \mathbf{L}' = \\
 & && = LQ(\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})). \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(Q') T(\mathbf{R}') | \hat{\mathbf{k}}_0 s m_s \rangle = && \text{В силу (15.27).} \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(Q') \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{R}') | \hat{\mathbf{k}}_0 s m'_s \rangle = && \text{В силу (15.56)} \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) \sum_{i \in m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{R}') | \hat{\mathbf{k}}' s m'_s \rangle = && \text{В силу (15.57)} \\
 & && \text{при } \hat{\mathbf{k}}' = Q' \hat{\mathbf{k}}_0. \\
 &= \exp(i \hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}}) \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)}(\mathbf{R}') | \hat{\mathbf{k}}' s m'_s \rangle. && \text{В силу (15.49).}
 \end{aligned}$$

(15.59)

Заметим, что вектор  $\hat{\mathbf{k}}'$  равен просто  $L\hat{\mathbf{k}}$ , так как  $\hat{\mathbf{k}}' = Q' \hat{\mathbf{k}}_0 = L'(\mathbf{R}')^{-1} \hat{\mathbf{k}}_0 = L(Q[\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})] \hat{\mathbf{k}}_0) = L\hat{\mathbf{k}}$ . Этот результат можно было предвидеть, учитывая формулу (15.55). Параметры, определяющие вращение  $\mathbf{R}'$ , при любых данных  $\hat{\mathbf{k}}$  и  $\mathbf{L}$  можно вычислить, исходя из формул, определяющих это вращение:

$$\mathbf{L}' = Q' \mathbf{R}', \quad (15.60)$$

$$\mathbf{L}' = LQ[\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})], \quad (15.61)$$

но мы не будем вдаваться в детали этих вычислений.

Формула (15.59) показывает, что множество базисных векторов (15.57) инвариантно относительно преобразований группы Пуанкаре и, следовательно, образует базис пространства представления, которое мы могли бы обозначить через  $P(\hat{\mathbf{k}}_0, s)$ . Как и в случае евклидовой группы (§ 1, п. В), можно показать, что представления, построенные при помощи любого положительного времениподобного век-



тора  $\hat{k}$  с той же «длиной», что и у вектора  $\hat{k}_0$ , эквивалентны представлению  $P(\hat{k}_0, s)$ . Поэтому неэквивалентные представления обозначаются просто через  $P^{(k, s)}$ , где  $k$  — «длина» четырехмерных векторов  $\hat{k}$ , определяющих базисные векторы  $|\hat{k} sm_s\rangle$ . Доказательство неприводимости представлений  $P^{(k, s)}$  проводится так же, как и в § 1, п. В в случае группы  $\mathcal{G}_3$ . Поскольку имеется бесконечное множество векторов  $\hat{k}$  заданной длины, полученные нами представления бесконечномерны.

**Области 4 и 5, изотропные  $\hat{k}$  (представления  $P^{(0, m)}$ )**

*Шаг 3.* Для удобства мы опять выберем простой вектор  $\hat{k}_0$ , на этот раз лежащий в области положительных изотропных векторов, а именно  $\hat{k}_0 = (0, 0, 1, 1)$ . (Область отрицательных векторов может быть рассмотрена точно так же.) Для построения неприводимых представлений мы будем придерживаться намеченной выше общей схемы. Но теперь подгруппа преобразований, оставляющих на месте вектор  $\hat{k}_0$ , не есть группа  $\mathcal{R}_3$ . Наша первая задача — выяснить, что это за группа. Для этого рассмотрим инфинитезимальные операторы. Если потребовать инвариантности вектора  $\hat{k}_0$ , то  $\Lambda \hat{k}_0 = 0$  [формула (15.30)]. Подставляя в это соотношение вектор  $\hat{k}_0 = (0, 0, 1, 1)$  и матрицы (15.31), получаем  $a_x = -b_y$ ,  $a_y = b_x$ ,  $b_z = 0$ . В качестве трех независимых инфинитезимальных операторов, удовлетворяющих этим условиям, можно взять операторы

$$X_z, X_x - Y_y, X_y + Y_x. \quad (15.62)$$

Из формулы (15.32) следует, что перестановочные соотношения для этих операторов имеют вид

$$\begin{aligned} [X_z, X_x - Y_y] &= X_y + Y_x, \\ [X_z, X_y + Y_x] &= -X_x + Y_y, \\ [X_x - Y_y, X_y + Y_x] &= 0. \end{aligned} \quad (15.63)$$

Оператор  $X_z$  порождает подгруппу  $\mathcal{R}_2$  вращений вокруг оси  $z$ . Мы покажем теперь, что перестановочные соотношения (15.63) совпадают с перестановочными соотношениями для евклидовой группы  $\mathcal{G}_2$ , в которую входят

вращения и трансляции в плоскости. Из формулы (15.15), учитывая, что трансляции коммутируют между собой, мы получаем следующие перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов  $P_x, P_y$  и  $X_z$  группы  $\mathcal{G}_2$ :

$$[X_z, P_x] = P_y, [X_z, P_y] = -P_x, [P_x, P_y] = 0. \quad (15.64)$$

Если мы установим соответствие  $X_z \rightarrow X_z, X_x - Y_y \rightarrow P_x$  и  $X_y + Y_x \rightarrow P_y$ , то эти формулы совпадут с формулами (15.63). Таким образом, если рассматривать инфинитезимальные операторы, то искомая подгруппа инвариантности вектора  $\hat{k}_0$  изоморфна группе  $\mathcal{G}_2$  и, следовательно, имеет те же, что и у группы  $\mathcal{G}_2$ , неприводимые представления. Физически эти две группы совершенно различны, хотя и имеют общий инфинитезимальный оператор  $X_z$ .

В § 1, п. Г было показано, что неприводимые представления группы  $\mathcal{G}_2$  бывают двух типов:  $E^{(|k|)}$  и  $E^{(0, m)}$ . Мы не будем здесь анализировать следствия, проистекающие из выбора представления  $E^{(|k|)}$ , поскольку соответствующие представления группы Пуанкаре пока не находят физических приложений (§ 8, п. В). Эти представления пригодились бы при описании частиц с непрерывным<sup>1)</sup> спином, но такие частицы еще не наблюдались. Поэтому мы сразу перейдем к представлениям  $E^{(0, m)}$ . То обстоятельство, что вектор  $\hat{k}_0$  инвариантен относительно группы  $\mathcal{G}_2$ , означает, что множество базисных векторов, преобразующихся при трансляциях по представлению  $T^{(\hat{k}_0)}$ , тоже инвариантно по отношению к действию этой группы. Следовательно, такие базисные векторы можно характеризовать вектором  $\hat{k}_0$  и представлением  $E^{(0, m)}$  группы  $\mathcal{G}_2$ . Соответственно этому мы вводим обозначение  $|\hat{k}_0 m\rangle$ . Из определения  $E^{(0, m)}$  (§ 1, п. Г) следует, что эти базисные векторы обладают свойствами

$$\begin{aligned} T(R_z(a)) |\hat{k}_0 m\rangle &= \exp(-ima) |\hat{k}_0 m\rangle, \\ (X_x - Y_y) |\hat{k}_0 m\rangle &= 0, \\ (X_y + Y_x) |\hat{k}_0 m\rangle &= 0, \end{aligned} \quad (15.65)$$

<sup>1)</sup> Точнее, бесконечномерным. — Прим. ред.

а также свойством (15.49). В двух последних равенствах (15.65) выражается «трансляционная инвариантность» векторов пространства представления  $E^{(0, m)}$  относительно «трансляций» группы  $\mathcal{G}_2$ .

Для построения представления нам понадобятся еще два свойства группы Лоренца. Первое — это то, что существует единственное преобразование Лоренца вида  $R_{xy} Q_z$ , переводящее вектор  $\hat{k}_0$  в любой наперед заданный положительный изотропный вектор  $\hat{k}$ . Преобразование  $Q_z$  меняет величины пространственных и временной компонент вектора  $\hat{k}_0$ , оставляя неизменным его направление в пространстве. Вращение же  $R_{xy}$  относительно оси, лежащей в плоскости  $xy$ , изменяет это направление. Нетрудно видеть, что при данном  $\hat{k}$  преобразования  $R_{xy}$  и  $Q_z$  определяются однозначно. Второе нужное нам свойство состоит в том, что произвольное преобразование Лоренца можно представить в виде

$$L = R_{xy} Q_z \tilde{L}, \quad (15.66)$$

где  $\tilde{L}$  принадлежит подгруппе  $\mathcal{G}_2$ , оставляющей на месте вектор  $\hat{k}_0 = (0, 0, 1, 1)$ . Чтобы доказать это равенство, аналогичное разложению (15.27), положим  $\hat{k} = L\hat{k}_0$  и определим преобразование  $R_{xy} Q_z$  с помощью условия  $\hat{k} = R_{xy} Q_z \hat{k}_0$ . Тогда  $(R_{xy} Q_z)^{-1} L \hat{k}_0 = (R_{xy} Q_z)^{-1} \hat{k} = \hat{k}_0$ , откуда ясно, что произведение  $(R_{xy} Q_z)^{-1} L$  оставляет вектор  $\hat{k}_0$  на месте и, следовательно, преобразование  $\tilde{L}$  в формуле (15.66) принадлежит подгруппе  $\mathcal{G}_2$ .

*Шаг 4.* Построим теперь представление групп  $\mathcal{P}$ , отвечающее изотропным векторам  $\hat{k}$ , образовав множество базисных векторов вида

$$|\hat{k}m\rangle = T(R_{xy} Q_z) |\hat{k}_0 m\rangle, \quad (15.67)$$

где  $\hat{k}$  — произвольный положительный изотропный вектор. Для доказательства того, что это множество векторов порождает пространство представления, рассмотрим результат действия произвольного преобразования Пуанкаре

на вектор из этого множества:

$$\begin{aligned}
 T(\hat{\mathbf{e}}, L) |\hat{\mathbf{k}} m\rangle &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(L) T(R_{xy} Q_z) |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = && \text{В силу (15.67).} \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(L') |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = && \text{Где } L' = L R_{xy} Q_z. \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(R'_{xy} Q'_z) T(\tilde{L}') |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = && \text{В силу (15.65).} \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) T(R'_{xy} Q'_z) \exp(-ima) |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = && \text{В силу (15.66).} \\
 &= T(\hat{\mathbf{e}}) \exp(-ima) |\hat{\mathbf{k}}' m\rangle = && \text{В силу (15.67) при} \\
 & && \hat{\mathbf{k}}' = R'_{xy} Q'_z \hat{\mathbf{k}}_0. \\
 &= \exp(i\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}} - ima) |\hat{\mathbf{k}}' m\rangle. && \text{В силу (15.49).}
 \end{aligned}$$

(15.68)

Легко показать, что  $\hat{\mathbf{k}}' = L\hat{\mathbf{k}}$ , но угол поворота  $a$  должен быть найден из определяющих его формул. Преобразование  $L'$  определяется по преобразованию  $L$  и вектору  $\mathbf{k}$ , а факторизация (15.66) для преобразования  $L'$  задает преобразование  $\tilde{L}'$ , принадлежащее подгруппе  $\mathcal{E}_2$ . Но элементы группы  $\mathcal{E}_2$  являются произведениями «трансляций» и поворотов из подгруппы  $\mathcal{R}_2$ . «Трансляции» в данном случае несущественны, так как вектор  $|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle$  «трансляционно»-инвариантен [формула (15.65)].

Формула (15.68) показывает, что множество векторов (15.67) порождает пространство некоего представления; обозначим его через  $P^{(0, m)}$ . Как и в предыдущих случаях, можно показать, что это представление неприводимо и что представления, полученные исходя из произвольного положительного изотропного вектора, эквивалентны построенному выше представлению  $P^{(0, m)}$  для  $\mathbf{k}_0 = (0, 0, 1, 1)$ . Напомним, что индекс  $m$ , обязанный своим происхождением подгруппе  $\mathcal{R}_2$ , может принимать свои обычные значения  $m = 0, \pm 1/2, \pm 1$  и т. д.

### Область 1, пространственноподобные $\hat{\mathbf{k}}$

Представления этого типа можно построить тем же методом, но мы не будем заниматься ими, так как физические приложения таких представлений относятся лишь к частицам с мнимой массой (§ 8, п. А).

## В. Операторы Казимира

На примере других непрерывных групп мы видели, насколько ценными оказываются операторы Казимира, введенные в гл. 7, § 5. Они строятся из инфинитезимальных операторов и коммутируют с ними. Поэтому операторы Казимира в любом неприводимом представлении кратны единичному оператору. Два оператора Казимира для группы Лоренца даются выражениями (15.35). Теперь мы построим операторы Казимира для группы Пуанкаре. В нашем распоряжении имеются шесть операторов  $X_q$  и  $Y_a$  группы  $\mathcal{L}$ , а также четыре инфинитезимальных оператора трансляций  $P_q$  и  $P_t$ , где  $q=x, y, z$ , а  $P_t$  соответствует временным трансляциям. Перестановочные соотношения для операторов  $X_q$  и  $Y_q$  даются формулами (15.32). Трансляции коммутируют друг с другом, а перестановочные соотношения между ними и инфинитезимальными операторами группы Лоренца можно вывести из равенства (15.53) (задача 15.7). В результате в дополнение к соотношениям (15.15) имеем

$$[P_t, X_q] = 0, [P_q, Y_{q'}] = -\delta_{q, q'} P_t, [P_t, Y_q] = -P_q. \quad (15.69)$$

Поскольку оператор  $\hat{\mathbf{P}}$  — четырехмерный вектор, оператор  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}} = -P_x^2 - P_y^2 - P_z^2 + P_t^2$  лоренц-инвариантен, а так как он очевидным образом коммутирует с трансляциями, то ясно, что оператор  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  пуанкаре-инвариантен. Чтобы вычислить его значение в некотором неприводимом представлении группы Пуанкаре  $\mathcal{P}$ , заметим, что если  $|\hat{\mathbf{k}}\rangle$  — произвольный базисный вектор, преобразующийся при трансляциях по представлению  $T^{(\hat{\mathbf{k}})}$ , то (§ 4, п. А)

$$\hat{\mathbf{P}} |\hat{\mathbf{k}}\rangle = -i\hat{\mathbf{k}} |\hat{\mathbf{k}}\rangle, \quad (15.70)$$

откуда прямо следует, что

$$\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}} |\hat{\mathbf{k}}\rangle = (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 - k_t^2) |\hat{\mathbf{k}}\rangle = -k^2 |\hat{\mathbf{k}}\rangle, \quad (15.71)$$

где  $k = (\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{k}})^{1/2}$  — «длина» вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ . Следовательно, в неприводимом представлении  $P^{(k, s)}$  группы  $\mathcal{P}$  оператор Казимира  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  есть произведение единичного оператора на величину  $-k^2$ . В представлении  $P^{(0, m)}$  все базисные

векторы преобразуются при трансляциях по представлению  $T(\hat{k})$  с изотропным вектором  $\hat{k}$ , так что  $k=0$  и оператор  $\hat{P} \cdot \hat{P}$  равен нулю, хотя, конечно,  $\hat{k} \neq 0$ .

Построить второй оператор Казимира, используя только квадратичные функции инфинитезимальных операторов, оказывается невозможным. В этом нетрудно убедиться, заметив, что оператор  $\hat{P}$  при преобразованиях Лоренца преобразуется по представлению  $L^{(1/2, 1/2)}$ , тогда как операторы  $(\mathbf{X} \pm i\mathbf{Y})$  преобразуются по представлениям  $L^{(1, 0)}$  и  $L^{(0, 1)}$  (§ 2, п. Д). Правило разложения произведения представлений на неприводимые [формула (15.37)] указывает на то, что единственные квадратичные лоренц-инвариантные комбинации могут быть получены лишь путем умножения упомянутых выше представлений самих на себя. Так получаются операторы  $\hat{P} \cdot \hat{P}$  и  $\mathbf{X}^2 - \mathbf{Y}^2 \pm 2i\mathbf{X} \cdot \mathbf{Y}$ . Первый из них уже известен нам, а никакая комбинация остальных не может быть сделана трансляционно-инвариантной. Новый оператор Казимира можно получить, построив трансляционно-инвариантный четырехмерный вектор  $\hat{W}$  и образовав затем лоренц-инвариантное скалярное произведение  $\hat{W} \cdot \hat{W}$ . Мы видели (§ 1, п. Д), что оператор  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  инвариантен относительно трансляций и вращений, и, следовательно, его можно взять в качестве  $t$ -компоненты оператора  $\hat{W}$ . Для определения других компонент заметим, что оператор  $\hat{W}$  должен быть четырехмерным вектором. Поэтому перестановочные соотношения этого оператора с инфинитезимальными операторами  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Y}$  должны иметь такой же вид, как и для оператора  $\hat{P}$ . Таким образом, полагая  $W_t = \mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$ , на основании формулы (15.69) (задача 15.8) получаем

$$W_a = -[W_t, Y_a] = (\mathbf{P} \times \mathbf{Y})_a + P_t X_a. \quad (15.72)$$

Явный вид оператора  $\hat{W}$  можно также найти, используя коэффициенты векторного сложения группы  $\mathcal{R}_3$ ; для этого нужно выделить из произведения  $L^{(1/2, 1/2)} \otimes L^{(1, 0)}$  представление  $L^{(1/2, 1/2)}$ . На первый взгляд, оператор  $\hat{W} \cdot \hat{P}$  является третьим оператором Казимира, но из определения (15.72) следует, что он тождественно равен нулю:

$$\hat{W} \cdot \hat{P} = 0. \quad (15.73)$$

Поскольку операторы Казимира в произвольном неприводимом представлении кратны единичному оператору, для определения значения оператора  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$  в каждом из неприводимых представлений группы Пуанкаре достаточно рассмотреть произвольный базисный вектор. Так, в случае представления  $\mathbf{P}^{(k, s)}$  мы можем выбрать базисный вектор  $|\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle$ , соответствующий четырехмерному вектору  $\hat{\mathbf{k}}_0 = (0, 0, 0, k)$ . Тогда  $\mathbf{P}_q |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle = 0$  при  $q = x, y, z$ , а  $\mathbf{P}_t |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle = -ik |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle = 0$ . Следовательно, в силу равенства (15.72) имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_t |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle &= 0, \\ \mathbf{W}_q |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle &= -ik \mathbf{X}_q |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle, \\ \text{так что } \hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}} |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle &= k^2 \mathbf{X}^2 |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle = \\ &= -k^2 s(s+1) |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle. \end{aligned} \quad (15.74)$$

Мы воспользовались здесь тем обстоятельством, что оператор  $\mathbf{X}^2$  является оператором Казимира подгруппы  $\mathcal{R}_3$ , неприводимое представление которой определено значением параметра  $s$ . Величина  $s(s+1)$  оператора Казимира для группы  $\mathcal{R}_3$  была получена в гл. 7, § 4, а знак минус появился благодаря множителю  $i$ , введенному там же, когда эрмитовы операторы  $\mathbf{J}_q$  определялись как  $\mathbf{J}_q = i\mathbf{X}_q$ . Формула (15.74) справедлива для всех векторов пространства представления  $\mathbf{P}^{(k, s)}$ .

В случае неприводимых представлений  $\mathbf{P}^{(0, m)}$  оба оператора Казимира  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  и  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$  равны нулю. Действительно, рассмотрим базисный вектор с  $\hat{\mathbf{k}}_0 = (0, 0, 1, 1)$ . Тогда с учетом формулы (15.65) получим

$$\begin{aligned} \mathbf{W}_x |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle &= -i(\mathbf{X}_x - \mathbf{Y}_y) |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = 0, \\ \mathbf{W}_y |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle &= -i(\mathbf{X}_y + \mathbf{Y}_x) |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = 0, \\ \mathbf{W}_z |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle &= -i\mathbf{X}_z |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = -m |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle, \\ \mathbf{W}_t |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle &= -i\mathbf{X}_t |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = -m |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle, \end{aligned} \quad (15.75)$$

и, следовательно,  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}} |\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = 0$ .

Так как оба оператора Казимира в этом случае равны нулю, их нельзя использовать для того, чтобы различать представления  $\mathbf{P}^{(0, m)}$  с разными значениями  $m$ . Однако

в некотором смысле оказывается возможным использовать для этого отношение операторов  $\hat{\mathbf{W}}$  и  $\hat{\mathbf{P}}$ . Из формулы (15.75) следует, что, так как  $\hat{\mathbf{P}}|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = -i\hat{\mathbf{k}}_0|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle$ , для вектора  $|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle$  выполняется равенство  $\hat{\mathbf{W}}|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = -im\hat{\mathbf{P}}|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle$ . Другими словами, можно написать

$$(\hat{\mathbf{W}} + im\hat{\mathbf{P}})|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle = 0. \quad (15.76)$$

Поскольку же все базисные векторы пространства неприводимого представления получаются из вектора  $|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle$  путем преобразования Лоренца (15.67), а операторы  $\hat{\mathbf{W}}$  и  $\hat{\mathbf{P}}$ , будучи четырехмерными векторами, одинаково преобразуются под действием группы Лоренца, равенство (15.76) справедливо не только для вектора специального вида  $|\hat{\mathbf{k}}_0 m\rangle$ , но и для всех векторов пространства представления (задача 15.9). Таким образом, чтобы охарактеризовать представление  $\mathbf{P}^{(0, m)}$ , можно наряду с условием  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}} = 0$  использовать соотношение (15.76). Это соотношение говорит о том, что четырехмерные векторные операторы  $\hat{\mathbf{W}}$  и  $\hat{\mathbf{P}}$  имеют одно и то же «направление», а коэффициент пропорциональности между ними, равный  $(-im)$ , зависит от представления. Заметим, что мы получили равенство (15.76) для *положительного* изотропного вектора  $\hat{\mathbf{k}}_0 = (0, 0, 1, 1)$  и, следовательно, оно применимо лишь в случае представлений, полученных исходя из таких векторов. Для представлений же, отвечающих отрицательным изотропным векторам, мы должны взять четырехмерный вектор  $(0, 0, 1, -1)$  вместо  $(0, 0, 1, 1)$ . В результате равенство (15.76) заменится равенством

$$(\hat{\mathbf{W}} - im\hat{\mathbf{P}})|\hat{\mathbf{k}} m\rangle = 0, \quad (15.77)$$

справедливым для всех отрицательных изотропных векторов  $\hat{\mathbf{k}}$ .

В обнаруженной нами пропорциональности между векторами  $\hat{\mathbf{W}}$  и  $\hat{\mathbf{P}}$  нет ничего неожиданного. Если рассматривать  $\hat{\mathbf{W}}$  и  $\hat{\mathbf{P}}$  как обычные четырехмерные векторы, а не как операторы, то из условий  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}} = \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}} = 0$  и  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{P}} = 0$  следует, что  $(\hat{\mathbf{W}} - \alpha\hat{\mathbf{P}}) \cdot (\hat{\mathbf{W}} - \alpha\hat{\mathbf{P}}) = 0$  при любых  $\alpha$ . Пола-



гая  $\alpha = W_t/P_t$ , получаем  $(W - \alpha P) \cdot (W - \alpha P) = 0$ , откуда следует, что  $W = \alpha P$  и, стало быть,  $\hat{W} = \alpha \hat{P}$  при этом значении величины  $\alpha$ .

### Г. Определение скалярного произведения

Скалярное произведение двух векторов, принадлежащих пространству неприводимого представления группы Пуанкаре, можно определить, обобщив метод, которым мы пользовались (§ 1, п. Е) в случае группы  $\mathcal{G}_3$ . Здесь мы снова сталкиваемся с проблемой наличия континуума базисных векторов, но имеются два небольших усложнения по сравнению со случаем представлений группы  $\mathcal{G}_3$ . По аналогии с формулой (15.19) запишем произвольный вектор пространства представления  $P^{(k, s)}$  в виде

$$|\psi\rangle = \sum_{m_s} \int \psi_{m_s}(\hat{k}) |\hat{k} s m_s\rangle k_i^{-1} dk. \quad (15.78)$$

Интегрирование и суммирование охватывают все множество базисных векторов  $|\hat{k} s m_s\rangle$  пространства представления  $P^{(k, s)}$ , а  $\psi_{m_s}(\hat{k})$  — числа, определяющие вектор  $|\psi\rangle$ . Чтобы охватить все четырехмерные векторы  $\hat{k}$  с заданной «длиной»  $k$ , необходим тройной интеграл; естественно, что в выборе переменных интегрирования имеется некоторая свобода. В качестве этих переменных удобно выбрать пространственные координаты вектора  $k$ . Из соотношения  $k^2 = -|k|^2 + k_t^2$  и из того, что вектор  $\hat{k}$  положительный времениподобный, видно, что четырехмерный вектор  $\hat{k}$  однозначно определяется трехмерным вектором  $k$ , областью изменения которого является все трехмерное пространство. Множитель  $k_i^{-1}$  включен в определение (15.78) по соображениям удобства: как мы покажем ниже, элемент объема  $k_i^{-1} dk$  лоренц-инвариантен. Можно было бы определить вектор (15.78) без множителя  $k_i^{-1}$ , включив последний в определение коэффициентов  $\psi_{m_s}(\hat{k})$ .

Следуя формуле (15.20), определим скалярное произведение как

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \sum_{m_s} \int \varphi_{m_s}^*(\hat{k}) \psi_{m_s}(\hat{k}) k_i^{-1} dk \quad (15.79)$$

с тем же элементом объема, что и выше. Доказательство унитарности представления  $\mathbf{P}^{(k, s)}$ , даваемого формулой (15.59), проводится так же, как и соответствующее доказательство в § 1, п. Е, и мы не приводим его. В том доказательстве мы воспользовались тем, что при  $\mathbf{k}' = \mathbf{R}\mathbf{k}$  меру интегрирования  $d\Omega_{\mathbf{k}}$  можно было заменить величиной  $d\Omega_{\mathbf{k}'}$ . Теперь возникает аналогичная проблема: перейти от интегрирования по  $d\mathbf{k}$  к интегрированию по  $d\mathbf{k}'$ , где  $\mathbf{k}'$  — пространственная часть четырехмерного вектора  $\hat{\mathbf{k}}' = \mathbf{L}\hat{\mathbf{k}}$ . Для этого необходимо вычислить якобиан  $\partial(k'_x k'_y k'_z)/\partial(k_x k_y k_z)$ . Но так как на основании формулы (15.27) мы можем написать  $\mathbf{L} = \mathbf{Q}\mathbf{R}$ , а якобиан вращения равен единице, нам необходимо рассмотреть лишь буст в каком-либо направлении. Если мы выберем направление оси  $z$ , то  $x$ - и  $y$ -компоненты останутся неизменными, так что искомый якобиан равен просто  $\partial k'_z/\partial k_z$ . Из выражения (15.25) для преобразования буста в направлении оси  $z$  получаем

$$\begin{aligned} k'_z &= (k_z - \beta k_t)/(1 - \beta^2)^{1/2}, \\ k'_t &= (k_t - \beta k_z)/(1 - \beta^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (15.80)$$

Таким образом,  $\frac{\partial k'_z}{\partial k_z} = \left(1 - \beta \frac{\partial k_t}{\partial k_z}\right)/(1 - \beta^2)^{1/2}$ ; но, поскольку  $k_t^2 = k^2 + k_x^2 + k_y^2 + k_z^2$ , мы имеем  $\partial k_t/\partial k_z = k_z/k_t$ . В результате с учетом формулы (15.80) получаем  $\partial k'_z/\partial k_z = (1 - \beta k_z/k_t)/(1 - \beta^2)^{1/2} = k_t^{-1} k'_t$ . Это значит, что элемент объема  $d\mathbf{k}'$  можно заменить величиной  $k_t^{-1} k'_t d\mathbf{k}$ , т. е.  $k_t^{-1} d\mathbf{k}'$  можно заменить величиной  $k_t^{-1} d\mathbf{k}$ . Такое же скалярное произведение можно использовать и для представлений  $\mathbf{P}^{(0, n)}$  с той лишь разницей, что в этом случае суммирование по  $m_s$  отсутствует и индекс  $m_s$  заменяется индексом  $m$ .

Как мы видели в § 4, п. А, вектор  $\hat{\mathbf{k}}$  характеризует состояние с определенным импульсом и энергией. Следовательно, если числа  $\psi_{m_s}(\hat{\mathbf{k}})$  нормированы так, что  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ , то мы можем интерпретировать величину  $|\psi_{m_s}(\hat{\mathbf{k}})|^2$  как функцию плотности вероятности, зависящую от  $\hat{\mathbf{k}}$  и  $m_s$  при фиксированном значении величины  $k$ . Иногда  $\psi_{m_s}(\hat{\mathbf{k}})$  называют волновой функцией в импульсном пространстве. Следует иметь в виду, что в нерелятивистских задачах волновые функции в импульсном про-

странстве обычно нормируют так, что они не имеют множителя  $k_t^{-1}$ , который входит в формулу (15.79). Это простая условность.

Отметим, что для векторов  $|\hat{k}sm_s\rangle$  из вышеприведенного определения скалярного произведения следует соотношение

$$\langle \hat{k}'sm_s' | \hat{k}sm_s \rangle = k_t \delta_{m_sm_s'} \delta(k - k'), \quad (15.81)$$

где  $\delta(k - k')$  — трехмерная  $\delta$ -функция. Функция  $\psi_{m_s}(\hat{k})$ , определяющая сам базисный вектор, т. е.  $|\psi\rangle = |\tilde{\mathbf{k}}\tilde{m}_s\rangle$ , дается [формула (15.78)] выражением

$$\psi_{m_s}(\hat{k}) = \delta_{m_s\tilde{m}_s} \delta(k - \hat{k}) k_t. \quad (15.82)$$

## § 5. ГРУППА ПУАНКАРЕ С ПРОСТРАНСТВЕННОЙ ИНВЕРСИЕЙ $\mathcal{P}_s$

Добавление к группе Пуанкаре пространственной инверсии  $I$  приводит лишь к незначительным изменениям структуры представлений. Мы займемся изучением такого расширения группы  $\mathcal{P}$ , пользуясь при этом теми же методами, что и в § 3. Ранее мы уже упоминали о том, что инверсия  $I$  коммутирует с вращениями, и вывели закон умножения для инверсии и бустов:

$$IQ(b) = Q(-b)I. \quad (15.83)$$

Из определений (15.39) и (15.47) инверсии  $I$  и трансляции  $P(\hat{\epsilon})$  непосредственно следует, что

$$IP(\hat{\epsilon}) = P(I\hat{\epsilon})I. \quad (15.84)$$

Неприводимые представления группы  $\mathcal{P}_s$  легко построить, исходя из неприводимых представлений группы  $\mathcal{P}$ . Мы покажем, что всякому представлению  $P^{(k,s)}$  группы  $\mathcal{P}$  можно поставить в соответствие два представления  $P^{(k,s)} \pm$  группы  $\mathcal{P}_s$ . Напомним, что пространство представления  $P^{(k,s)}$  строится при помощи соотношения (15.57) из базисного вектора специального вида  $|\hat{k}_0sm_s\rangle$ , где  $\hat{k}_0 = (0, 0, 0, 1)$ . Поскольку инверсия  $I$  оставляет вектор  $\hat{k}_0$  на месте и коммутирует с преобразованиями подгруппы  $\mathcal{A}_3$ , мы можем приписать нашему базисному вектору в дополнение к параметрам  $\hat{k}_0, s, m_s$  также и определенную четность. Таким

образом, мы можем использовать для базисного вектора обозначение  $|\hat{k}_0 s m_s \pm\rangle$ , причем

$$T(I) |\hat{k}_0 s m_s \pm\rangle = \pm |\hat{k}_0 s m_s \pm\rangle. \quad (15.85)$$

Здесь в обеих частях равенства выбираются либо верхние, либо нижние знаки. Соответственно каждой из этих двух возможностей мы можем построить пространство неприводимого представления группы  $\mathcal{P}_s$ , написав

$$|\hat{k} s m_s \pm\rangle = T(Q[b(\hat{k})]) |\hat{k}_0 s m_s \pm\rangle, \quad (15.86)$$

подобно тому как на основе соотношения (15.57) было построено пространство неприводимого представления группы  $\mathcal{P}$ . Матрица представления для собственных элементов  $T(\hat{\mathbf{e}}, L)$  группы  $\mathcal{P}_s$  дается, как и ранее, формулой (15.59). Оператор же инверсии определяется следующим образом:

$$\begin{aligned} T(I) |\hat{k} s m_s \pm\rangle &= T(I) T(Q[b(\hat{k})]) |\hat{k}_0 s m_s \pm\rangle = \\ &= T(Q[-b(\hat{k})]) T(I) |\hat{k}_0 s m_s \pm\rangle = \text{В силу (15.83).} \\ &= \pm T(Q[-b(\hat{k})]) |\hat{k}_0 s m_s \pm\rangle = \text{В силу (15.85).} \\ &= \pm |\hat{k} s m_s \pm\rangle. \end{aligned} \quad (15.87)$$

Последнее выражение получено с учетом того, что если  $\mathbf{b}$  — параметр буста, переводящего вектор  $\hat{k}_0$  в  $\hat{k}$ , то буст с параметром  $-\mathbf{b}$  переводит вектор  $\hat{k}_0$  в  $\hat{k}$  [формула (15.26)]. Существенной особенностью формулы (15.87) является то, что оператор  $T(I)$ , действуя на произвольный вектор вида  $|\hat{k} s m_s \pm\rangle$ , переводит его в другой вектор вида (15.86). Заметим, что оператор  $T(I)$  не диагонален. Это и неудивительно, так как он меняет пространственное направление четырехмерного вектора  $\hat{k}$ ; как мы увидим в § 7, знак « $\pm$ » относится к внутренней четности системы.

Рассуждения, проведенные выше, неверны для представлений типа  $P^{(0, m)}$ , поскольку в этом случае вектор специального вида  $\hat{k}_0 = (0, 0, 1, 1)$  не инвариантен относительно инверсий. Как мы увидим, оператор инверсии  $T(I)$  преобразует базисный вектор пространства представ-

ления  $P^{(0, m)}$  в базисный вектор пространства представления  $P^{(0, -m)}$ . Из этого следует, что пространство представления  $P^{(0, m)}$  не может быть инвариантным относительно действия группы  $\mathcal{P}_s$ . Но поскольку  $T(I)T(I)=1$ , прямая сумма пространств представлений  $P^{(0, m)}$  и  $P^{(0, -m)}$  инвариантна относительно группы  $\mathcal{P}_s$  и задает ее представление, которое должно быть неприводимым. Мы обозначим это представление через  $P^{(0, |m|)}$ . Чтобы доказать сказанное выше, нам понадобятся соотношения

$$P_q I = -I P_q, \quad P_t I = I P_t, \quad (15.88)$$

следующие непосредственно из равенства (15.84). Эти соотношения приводят к равенствам

$$\begin{aligned} W_q I &= I W_q, \quad W_t I = -I W_t, \\ [\hat{W} \cdot \hat{W}, I] &= [\hat{P} \cdot \hat{P}, I] = 0. \end{aligned} \quad (15.89)$$

Если вектор  $|\hat{k}m\rangle$  принадлежит пространству представления  $P^{(0, m)}$  группы  $\mathcal{P}$ , то для него справедлива формула (15.76) и, как нетрудно убедиться, вектор  $T(I)|\hat{k}m\rangle$  удовлетворяет условиям

$$\begin{aligned} \hat{W} \cdot \hat{W} T(I)|\hat{k}m\rangle &= 0, \\ \hat{P} \cdot \hat{P} T(I)|\hat{k}m\rangle &= 0, \\ (W_q - imP_q) T(I)|\hat{k}m\rangle &= T(I) W_q + imP_q |\hat{k}m\rangle = 0, \\ (W_t - imP_t) T(I)|\hat{k}m\rangle &= -T(I) (W_t + imP_t) |\hat{k}m\rangle = 0, \end{aligned}$$

так что

$$(\hat{W} - im\hat{P}) T(I)|\hat{k}m\rangle = 0. \quad (15.90)$$

$$\begin{aligned} \text{Далее, } P(\hat{\epsilon}) T(I)|\hat{k}m\rangle &= T(I) P(I\hat{\epsilon}) |\hat{k}m\rangle = \\ &= \exp(i\hat{k} \cdot I\hat{\epsilon}) T(I)|\hat{k}m\rangle = \\ &= \exp(iI\hat{k} \cdot \hat{\epsilon}) T(I)|\hat{k}m\rangle, \end{aligned}$$

а это означает, что вектор  $T(I)|\hat{k}m\rangle$  преобразуется при трансляциях по представлению  $T(I\hat{k})$ . Поскольку по определению  $\hat{k}$  является положительным изотропным вектором, это же верно и для вектора  $I\hat{k}$ . Сравнивая формулы (15.90) и (15.76), мы заключаем, что вектор  $T(I)|\hat{k}m\rangle$  принадлежит пространству представления

$P^{(0, -m)}$  группы  $\mathcal{P}$ . Таким образом, при  $m \neq 0$  векторы  $|\hat{k}m\rangle$  и  $T(I)|\hat{k}m\rangle$  линейно-независимы. Следовательно, мы можем написать  $T(I)|\hat{k}_0m\rangle = |\hat{k}_0 - m\rangle$ , и множество векторов  $|\hat{k}m\rangle$  вместе с  $|\hat{k}, -m\rangle$ , полученных при помощи формулы (15.67) для произвольных положительных изотропных векторов  $\hat{k}$ , образует базис пространства неприводимого представления  $P^{(0, |m|)}$  расширенной группы  $\mathcal{P}_s$ . Можно показать, что и в общем случае

$$T(I)|\hat{k}m\rangle = |\hat{k} - m\rangle. \quad (15.91)$$

Следовательно,  $T(I)|\hat{k} - m\rangle = |\hat{k}m\rangle$ . Формула (15.91), а также формула (15.68) для определения действия элемента группы  $T(\hat{\epsilon}, L)$  в представлениях  $P^{(0, m)}$  и  $P^{(0, -m)}$  задают представление  $P^{(0, |m|)}$  группы  $\mathcal{P}_s$ .

Случай  $m=0$  является исключением, так как оба вектора  $T(I)|\hat{k}m\rangle$  и  $|\hat{k} - m\rangle$  преобразуются теперь по представлению  $P^{(0, 0)}$  группы  $\mathcal{P}$ . Поэтому при  $m=0$ , так же как и для представлений типа  $P^{(k, s)}$ , возникают два представления  $P^{(0, 0) \pm}$  группы  $\mathcal{P}_s$  в зависимости от знака в соотношении  $T(I)|\hat{k}_0 0\rangle = \pm |\hat{k}_0 0\rangle$ . Мы не будем разбирать этот случай подробно.

## § 6. ГРУППА ПУАНКАРЕ С ОТРАЖЕНИЕМ ВРЕМЕНИ $\mathcal{P}_t$

Рассмотрев вопросы, связанные с пространственной инверсией, перейдем теперь к отражению времени. Операция отражения времени определяется соотношением  $I_t \hat{\epsilon} = \hat{\epsilon}' = (x, y, z, -ct)$ . Как и в § 5, присоединение этой операции к группе Пуанкаре порождает расширенную группу  $\mathcal{P}_t$ . Из определений трансляций и отражения времени следует, что

$$P(\hat{\epsilon}) I_t = I_t P(I_t \hat{\epsilon}). \quad (15.92)$$

Таким образом, если  $|\hat{k}\rangle$  — базисный вектор, преобразующийся по представлению  $T(\hat{k})$  подгруппы трансляций, то

$$\begin{aligned} T(\hat{\epsilon}) T(I_t) |\hat{k}\rangle &= T(I_t) T(I_t \hat{\epsilon}) |\hat{k}\rangle = \\ &= \exp(i\hat{k} \cdot I_t \hat{\epsilon}) T(I_t) |\hat{k}\rangle = \\ &= \exp(iI_t \hat{k} \cdot \hat{\epsilon}) T(I_t) |\hat{k}\rangle. \end{aligned} \quad (15.93)$$

Последнее равенство означает, что вектор,  $T(I_t)|\hat{k}\rangle$  преобразуется при трансляции по представлению  $T^{(I_t)\hat{k}}$ , т. е. временная компонента вектора  $\hat{k}$  меняет знак. В § 4, п. А мы видели, что с точки зрения физики четвертая компонента  $k_t$  соответствует энергии:  $E = \hbar c k_t$ . Следовательно, отражение времени меняет местами состояния с положительной и отрицательной энергией. По этой причине мы не будем заниматься представлениями, построенными на основе соотношения (15.93).

Тем не менее мы еще вернемся к группе  $\mathcal{P}_t$  в § 7, п. Г, когда речь пойдет об операции обращения времени, которая, как показывает эксперимент, является почти универсальной операцией симметрии. Операция обращения времени с физической точки зрения эквивалентна обращению направления движения и возникает при попытке найти представление для операции  $I_t$ , свободное от трудностей, вытекающих из формулы (15.93). При выводе этой формулы мы предполагали, что  $T(I_t)$  является линейным оператором в пространстве представления, содержащем векторы вида  $|\hat{k}\rangle$ . Если же предположить, что  $T(I_t)$  — «антиунитарный» оператор, то появления состояний с отрицательной энергией удастся избежать. Поскольку исследование этих вопросов требует привлечения новых понятий, мы отложим его до § 7, п. Г.

Если мы хотим включить в рассмотрение как пространственную инверсию  $I$ , так и отражение времени  $I_t$ , определенное равенством  $I_t \hat{e} = (x, y, z, -ct)$ , то для того, чтобы получить группу, нам придется рассматривать также и произведение  $\Pi_t$ , меняющее знак всех четырех компонент вектора:  $\Pi_t \hat{e} = -\hat{e}$ . Обозначим получившуюся таким образом группу через  $\mathcal{P}_{st}$ . Заметим, что произведение  $\Pi_t$  коммутирует со всеми преобразованиями Лоренца и не коммутирует с трансляциями.

## § 7. ИНТЕРПРЕТАЦИЯ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ГРУППЫ ПУАНКАРЕ

Ранее мы уже говорили о физическом смысле многих операций симметрии, входящих в группу Пуанкаре. В § 1, п. А с точки зрения физики рассматривались трехмерные трансляции, в § 1, п. Д — трансляции и вращения в трех-

мерном пространстве, образующие группу  $\mathcal{E}_3$ , а в § 4, п. А — четырехмерные трансляции. Теперь мы рассмотрим другие стороны этой проблемы, относящиеся к полной группе Пуанкаре.

В § 1, п. Д было показано, что группа  $\mathcal{E}_3$  пригодна лишь для описания одной свободной частицы или коллективного движения системы частиц. Параметры же, определяющие представление группы, соответствуют разным свойствам описываемой системы. Так, представление  $\mathbf{E}^{(k|, m)}$  соответствует абсолютной величине  $|k|$  импульса системы и проекции  $m$  внутреннего углового момента (или спина) на направление движения. Состояния, отвечающие различным направлениям вектора  $k$ , эквивалентны в том смысле, что они могут быть получены друг из друга посредством вращений. Инвариантами являются величины  $|k|$  и  $m$ . Поскольку сказанное относится к любым свободным системам, оно должно относиться и к элементарным частицам, внутреннее строение которых может быть нам совершенно неизвестно. Следовательно, мы можем характеризовать различные элементарные частицы значениями инвариантов  $|k|$  и  $m$ . Но, рассуждая таким образом и ограничиваясь лишь группой  $\mathcal{E}_3$ , мы должны считать разными частицами частицы с разными абсолютными значениями импульса  $|k|$  и разными проекциями внутреннего углового момента  $m$  на направление движения. Очевидно, что это неверно, но теперь видно, что такая несуразность обусловлена тем, что мы взяли в качестве группы симметрии группу  $\mathcal{E}_3$ , а не группу  $\mathcal{P}$ . Включение в рассмотрение преобразований, которыми связаны между собой системы, движущиеся относительно друг друга с постоянной скоростью, т. е. преобразований, которые вместе с группой  $\mathcal{E}_3$  составляют группу  $\mathcal{P}$ , устраняет указанную нелогичность. Таким образом, при изучении группы Пуанкаре мы должны найти более естественные фундаментальные инварианты.

## А. Масса

Неприводимые представления группы Пуанкаре характеризуются прежде всего оператором Казимира  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$ , который равен (§ 4, п. В) —  $k^2$  для представления  $\mathbf{P}^{(k, s)}$  и 0 для представления  $\mathbf{P}^{(0, m)}$ . В представлениях, соответ-



ствующих пространственноподобным векторам  $\hat{\mathbf{k}}$ , не рассматривавшихся нами подробно, оператор  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  был бы положительным. По причинам, которые будут ясны из дальнейшего, мы связываем оператор  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  с квадратом массы, а именно: «оператор квадрата массы» с учетом соответствующих размерных множителей определяется как  $-\hbar^2 \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}/c^2$ . Следовательно, обозначив символом  $M^2$  величину «квадрата массы», имеем  $M^2 = \hbar^2 k^2/c^2$  в представлении  $\mathbf{P}^{(k, s)}$  и  $M^2 = 0$  в представлении  $\mathbf{P}^{(0, m)}$ ; для пространственноподобных векторов получается  $M^2 < 0$ . При такой интерпретации масса является мнимой для пространственноподобных  $\mathbf{k}$ , равна нулю для представлений типа  $\mathbf{P}^{(0, m)}$  и принимает значение  $M = \hbar k/c$  для представлений  $\mathbf{P}^{(k, s)}$ . (Отметим, что именно величина  $M^2$ , а не  $M$  имеет в данном случае смысл; точно так же в случае углового момента мы видели, что оператор Казимира  $\mathbf{J} \cdot \mathbf{J}$  имеет собственное значение, равное  $J(J+1)$ , хотя мы используем индекс  $J$ .)

Теперь покажем, что мы правильно употребляем термин «масса». Ранее мы интерпретировали четыре компоненты оператора  $\hat{\mathbf{P}}$ , связав их с импульсом и энергией. Само определение  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}} = \mathbf{P}_i^2 - \sum_q \mathbf{P}_q^2$  указывает на соотношение между собственными значениями компонент оператора  $\hat{\mathbf{P}}$ . В представлении  $\mathbf{P}^{(k, s)}$  оно принимает вид (см. выше определение величины  $M^2$ )

$$-c^2 M^2 / \hbar^2 = -E^2 / \hbar^2 c^2 + \sum_q p_q^2 / \hbar^2,$$

т. е. с учетом определения величин  $\mathbf{p}$  и  $E$  (§ 1, п. А и § 4, п. А)

$$E^2 = M^2 c^4 + c^2 \mathbf{p}^2. \quad (15.94)$$

(Это известное соотношение между энергией и импульсом, справедливое в классической теории относительности; гл. 16, § 1. Величина  $M$  называется массой покоя.) Если импульс мал, т. е.  $p \ll Mc$ , то

$$E = Mc^2 (1 + p^2/M^2 c^2)^{1/2} \approx M^2 c^2 + p^2/2M. \quad (15.95)$$

Последнее выражение дает энергию в виде суммы энергии покоя и кинетической энергии  $p^2/2M = 1/2 M v^2$ .

Различные векторы  $|\hat{k}sm_s\rangle$  пространства представления  $\mathbf{P}^{(k, s)}$  соответствуют разным состояниям движения частицы (или системы) с массой  $M = \hbar k/c$ . Не только направление импульса  $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$ , но и его величина могут быть любыми, а соответствующая энергия дается формулой (15.94). Таким образом, даже при  $s=0$  представление  $\mathbf{P}^{(k, 0)}$  описывает все возможные состояния движения частицы с массой  $M$ . Вскоре мы увидим, что параметр  $s$  связан с внутренним угловым моментом, т. е. спином, системы или частицы.

Прежде чем переходить к случаю нулевой массы, рассмотрим кратко представление, отвечающее случаю  $\hat{\mathbf{k}}=0$  — области 6 (§ 4, п. Б). Это представление отвечает не только нулевой массе, но и нулевым импульсу и энергии во всех состояниях, т. е. во всех системах отсчета. Объект с такими свойствами никогда не наблюдался<sup>1)</sup>, и мы не будем останавливаться на этом случае. Заметим, однако, что точку  $\hat{\mathbf{k}}=0$  следует исключить при рассмотрении представления  $\mathbf{P}^{(0, m)}$ .

Обратимся теперь к представлению  $\mathbf{P}^{(0, m)}$ , соответствующему нулевой массе. Оно выглядит не очень подходящим для описания частицы, но мы замечаем, что в этом случае энергия и импульс могут быть конечными; из формулы (15.94) следует, что они связаны соотношением

$$E = pc. \quad (15.96)$$

Таким образом, несмотря на нулевую массу, наш объект обладает некоторыми физическими свойствами, и на самом деле такие частицы хорошо известны в физике. При квантовом описании электромагнитного поля взаимодействие происходит благодаря обмену фотонами, которые должны иметь нулевую массу. Также и в процессе  $\beta$ -распада испускаются частицы, называемые нейтрино<sup>2)</sup>, с нулевой массой.

В то время как для частицы с конечной массой возможно состояние с  $p=0$  и  $E=Mc^2$ , в котором частица покоится, для частицы с нулевой массой такое состояние

<sup>1)</sup> Представление  $\mathbf{P}^{(0, 0)}$  соответствует вакууму. — *Прим. перев.*

<sup>2)</sup> При  $\beta$ -распаде нейтрона испускается антинейтрино. — *Прим. перев.*

невозможно. Мы не можем получить состояние с  $\mathbf{p}=0$ , не достигнув предельной точки  $\hat{\mathbf{k}}=0$ , которая характеризует уже другое представление. В этом представлении, как говорилось выше, все состояния имеют импульс и энергию, равные нулю. С точки зрения классической механики это означает, что частицы с нулевой массой движутся со скоростью света  $c$ , поскольку, как мы видели в § 2, п. В, в этом случае скорость частицы равна скорости света в любой системе отсчета и состояние покоя невозможно. [Другой довод классической механики в пользу того, что  $v=c$ , заключается в том, что при нулевой массе частица может иметь конечную энергию и конечный импульс лишь в предельном случае  $v=c$ , см. формулу (16.10).]

## Б. Спин

Мы рассмотрели связь между первым оператором Казимира  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  и массой, а также между компонентами оператора  $\hat{\mathbf{P}}$  и энергией и импульсом. Обратимся теперь ко второму оператору Казимира—оператору  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$ , определенному в § 4, п. В. Интерпретация оператора  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$  оказывается неодинаковой в случаях нулевой и ненулевой массы, а потому эти случаи мы рассмотрим отдельно.

### Конечная масса

Рассмотрим сначала случай конечной массы, который описывается представлением  $\mathbf{P}^{(k, s)}$ . Напомним, что величина  $s$ , которая может принимать значения  $0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ , определяет собственные значения оператора  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$ , равные при данном  $k$ , согласно формуле (15.74), —  $k^2 s(s+1)$ . С учетом формулы (15.94) эти собственные значения можно записать в виде

$$-Mc^2 s(s+1)/\hbar^2. \quad (15.97)$$

Так как оператор  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$  является оператором Казимира, все состояния, принадлежащие представлению  $\mathbf{P}^{(k, s)}$ , являются собственными для этого оператора и соответствуют одному и тому же собственному значению. Сле-

довательно, величина  $s$ , как и масса, есть некоторая внутренняя характеристика частицы, не зависящая от системы отсчета.

Мы будем называть эту внутреннюю характеристику спином. Строго говоря, спин равен  $\hbar s$ , так что  $s$  — это спин в единицах  $\hbar$ . Причина, по которой здесь употребляется слово спин (вращение вокруг собственной оси), станет ясна, если рассмотреть операторы  $W_q$  в случае покоящейся частицы, т. е. при  $\hat{k} = (0, 0, 0, k)$ . Тогда из выражения (15.72) следует, что

$$W_q = -i(Mc/\hbar) X_q = -(Mc/\hbar) J_q, \quad W_t = 0 \text{ и} \\ \hat{W} \cdot \hat{W} = (M^2 c^2 / \hbar^2) (X_x^2 + X_y^2 + X_z^2) = -(M^2 c^2 / \hbar^2) \mathbf{J}^2. \quad (15.98)$$

Таким образом, если частица покоится, то оператор  $W_q$  пропорционален оператору углового момента  $J_q$ . Угловой момент покоящейся классической точечной частицы равен, конечно, нулю, а поэтому для параметра  $s$  более подходящим было бы название «внутренний спин»<sup>1)</sup>. Далее, так как оператор  $\hat{W}$  трансляционно-инвариантен, при действии на базисный вектор  $|\hat{k} s m_s\rangle$  пространства представления  $P^{(k, s)}$  он не может изменить параметра  $\hat{k}$ . Следовательно, оператор  $\hat{W}$  просто изменяет величину  $m_s$ , оставляя вектор  $\hat{k}$  неизменным. Заметим, что базис  $|\hat{k} s m_s\rangle$  выбран таким образом, что векторы вида  $|\hat{k}_0 s m_s\rangle$  являются собственными для оператора  $W_z$ :

$$W_z |\hat{k}_0 s m_s\rangle = -m_s k |\hat{k}_0 s m_s\rangle. \quad (15.99)$$

Поскольку оператор  $\hat{W}$  есть четырехмерный вектор, любой базисный вектор  $|\hat{k} s m_s\rangle$  будет собственным для соответствующей компоненты преобразованного оператора  $\hat{W}$ . В самом деле, подействуем на обе части равенства (15.99) преобразованием буста, переводящего вектор  $\hat{k}_0$  в  $\hat{k}$ . С учетом формулы (15.57) получаем

$$T(Q[b(\hat{k})]) W_z T^{-1}(Q[b(\hat{k})]) |\hat{k} s m_s\rangle = -m_s k |\hat{k} s m_s\rangle.$$

На основании формулы (15.26) для действия буста на четырехмерный вектор и с учетом значений величины

<sup>1)</sup> Термин «спин» общепринят. — Прим. перев.

$\mathbf{b}(\mathbf{k})$ , приведенных после формулы (15.58), данное соотношение можно привести к виду

$$\{\mathbf{W}_z - (k_t + k)^{-1} k_z \mathbf{W}_t\} |\hat{\mathbf{k}} s m_s\rangle = -m_s k |\hat{\mathbf{k}} s m_s\rangle. \quad (15.100)$$

При выводе равенства (15.100) мы воспользовались тем, что  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{P}} = 0$  (§ 4, п. В). Это позволило нам заменить  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  оператором  $\mathbf{W}_t \mathbf{P}_t$ . Можно ввести и другой базис (спиральный), в котором диагональна проекция оператора  $\hat{\mathbf{W}}$  на направление движения  $\mathbf{k}$ . Но это приводит к более сложному, чем (15.59), выражению для преобразования общего вида.

Из формулы (15.59) видно, что действие преобразования Лоренца  $\mathbf{T}(0, \mathbf{L})$  на произвольный вектор носит двоякий характер, а именно имеет место суммирование по индексам  $m'_s$  и изменение вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ . Соответственно этому инфинитезимальное преобразование Лоренца описывается суммой матричного оператора, действующего на индекс  $m_s$ , и дифференциального оператора, действующего на переменную  $\hat{\mathbf{k}}$ , но не изменяющего значения  $m_s$ . Дело обстоит так же, как в нерелятивистском случае при разбиении углового момента  $\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{l}$  на спиновую и орбитальную части (гл. 8, § 4). Однако базис  $|\hat{\mathbf{k}} s m_s\rangle$  не обеспечивает полного разбиения, поскольку вращение  $\mathbf{R}' = \mathbf{Q}'^{-1} \mathbf{L} \mathbf{Q}$ , определяющее матрицу, которая входит в формулу (15.59), зависит не только от преобразования  $\mathbf{L}$ , но и от вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ . Тем не менее, изменив базис, можно добиться не только разбиения  $\mathbf{j} = \mathbf{s} + \mathbf{l}$  для инфинитезимальных вращений, но и разбиения  $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_s + \mathbf{Y}_l$  для инфинитезимальных бустов, где  $\mathbf{s}$  и  $\mathbf{Y}_s$  — «спиновые» матричные операторы, коммутирующие с «орбитальными» операторами  $\mathbf{l}$  и  $\mathbf{Y}_l$ . Так как это разбиение тесно связано с уравнением Дирака, мы отложим его обсуждение до следующего параграфа (§ 8, п. Г).

Эксперимент показывает, что для электрона, протона и нейтрона спин  $s$  равен  $1/2$ ,  $\pi$ -мезон имеет спин  $s=0$ , а спин  $\rho$ -мезона равен 1. Составные системы, такие, как ядра или атомы, могут иметь намного бóльшие значения спина, но обязательно целые или полуцелые.

## Нулевая масса

Как мы видели в п. А, представления группы Пуанкаре  $P^{(0, m)}$  описывают частицы с нулевой массой. Рассуждения, проводившиеся выше в случае представлений  $P^{(k, s)}$ , неверны для частиц с нулевой массой, поскольку мы начинали с покоящейся частицы, а частицы с нулевой массой всегда движутся со скоростью света. Однако из формул (15.72) и (15.76) следует, что для любого вектора  $|\hat{k}m\rangle$ , принадлежащего пространству представления  $P^{(0, m)}$ , справедливы равенства

$$\begin{aligned} -(\mathbf{X} \cdot \mathbf{P})|\hat{k}m\rangle &= -W_t|\hat{k}m\rangle = imP_t|\hat{k}m\rangle = \\ &= mk_t|\hat{k}m\rangle = m|\mathbf{k}||\hat{k}m\rangle. \end{aligned} \quad (15.101)$$

Но с физической точки зрения величина  $-\mathbf{X} \cdot \mathbf{P}$  есть проекция углового момента на направление движения, умноженная на модуль импульса. Поскольку для классической точечной частицы такая величина равна нулю, мы и здесь используем слово «спин» применительно к величине  $m$ . Но не следует забывать, что понятия спина для частиц с нулевой массой и массой, отличной от нуля, существенно различаются. В случае нулевой массы нет  $(2s+1)$ -кратного вырождения состояний, соответствующего разным ориентациям спина. На самом деле даже состояние с противоположным спином ( $-m$ ) принадлежит другому представлению группы  $\mathcal{P}$ , а именно представлению  $P^{(0, -m)}$ . Частицу с положительным  $m$  называют частицей с положительной «спиральностью» или «правосторонней» частицей (как обычно, имеется в виду вращение винта). Вопрос о спиральности и ее связи с четностью мы рассмотрим в п. В. Заметим, однако, что путем простых физических рассуждений можно показать, что право- и левосторонность имеет смысл лишь для частиц с нулевой массой. Дело в том, что спиральность, измеренная наблюдателем, движущимся быстрее частицы, противоположна той, которую измерит наблюдатель, движущийся медленнее той же частицы. Таким образом, если бы частица, имеющая конечную массу и движущаяся со скоростью  $v < c$ , обладала свойством право- или левосторонности, то это нарушало бы лоренц-инвариантность. Но так как частица с нулевой массой движется всегда со скоростью света, никакой наблюдатель не может дви-

гаться быстрее нее и противоречие с лоренц-инвариантностью не возникает.

Что касается известных частиц нулевой массы, то фотон может иметь оба значения спиральности  $m = \pm 1$ , тогда как нейтрино имеет  $m = -\frac{1}{2}$ , а антинейтрино  $m = \frac{1}{2}$ . (См. также гл. 16, § 3, п. Д.)

## В. Четность

Выше мы разъясняли физический смысл представлений собственной группы Пуанкаре  $\mathcal{P}$ , не включающей в себя инверсию пространства и отражение времени. Предположим теперь, что пространственная инверсия  $I$  также является симметрией, так что полной группой симметрии будет группа  $\mathcal{P}_s$ , представления которой мы построили в § 5. Как и ранее, мы рассмотрим отдельно случаи нулевой и ненулевой массы.

### Конечная масса

В § 5 было показано, что если группу  $\mathcal{P}$  расширить до группы  $\mathcal{P}_s$ , то каждому представлению  $\mathbf{P}^{(k, s)}$  группы  $\mathcal{P}$  будут соответствовать два неприводимых представления группы  $\mathcal{P}_s$ , обозначенные через  $\mathbf{P}^{(k, s)\pm}$ . Из формулы (15.87) следует, что действие оператора инверсии в представлении  $\mathbf{P}^{(k, s)\pm}$  выражается, во-первых, в изменении направления вектора  $\mathbf{k}$  на обратное и, во-вторых, в добавлении множителя  $\pm 1$  (соответственно знаку в индексе представления). Первое отвечает обращению направления движения, второе же относится даже к покоящейся частице. Поэтому о знаке множителя  $\pm 1$  говорят как о «внутренней четности» частицы — положительной или отрицательной. Подобно спину, внутренняя четность не зависит от того, как частица движется, и характеризует саму частицу. Можно представлять себе, что четность относится к некоторой «внутренней» структуре частицы.

На самом деле определить абсолютную внутреннюю четность частицы возможно лишь в редких случаях: например, для  $\pi^0$ -мезона. Обычно же в реакциях имеют место два и более превращений, и поэтому можно определить лишь относительные четности участвующих в них частиц. Кроме того, в силу законов сохранения, таких,

как закон сохранения электрического заряда, которые считаются абсолютными законами сохранения, некоторые типы переходов запрещены. Это делает невозможным определить даже относительную четность некоторых групп частиц. Абсолютная четность  $\pi^0$ -мезона может быть определена, например, из реакции  $p + p \rightarrow p + p + \pi^0$ ; детальный анализ показывает, что  $\pi^0$ -мезон имеет отрицательную четность. Поскольку  $\pi^\pm$ -мезоны заряжены, невозможно придумать эксперименты по определению их абсолютной четности. Но так как  $\pi^\pm$ -мезон вместе с  $\pi^0$ -мезоном объединяются в изоспиновый триплет ( $T=1$ ; гл. 10, § 2), естественно приписать  $\pi^\pm$ -мезонам отрицательную четность. Тогда относительную четность протона и нейтрона можно определить из реакций типа  $p + p \rightarrow n + p + \pi^+$ . Она оказывается положительной. Принято считать положительной и абсолютную четность протона и нейтрона. В проведенных выше рассуждениях существенно то, что рассматриваемые реакции относятся к сильному взаимодействию, о котором известно, что оно сохраняет четность.

### Нулевая масса

Напомним (§ 5), что в случае нулевой массы неприводимые представления расширенной группы  $\mathcal{P}_s$  строятся из двух представлений группы  $\mathcal{P}$ , а именно  $\mathbf{P}^{(0, |m|)} = \mathbf{P}^{(0, m)} \oplus \mathbf{P}^{(0, -m)}$ , и пространственная инверсия переводит векторы пространства одного неприводимого представления группы  $\mathcal{P}$  в векторы пространства другого неприводимого представления этой группы. Это естественно, так как инверсия коммутирует с операторами спина и, следовательно, изменение направления вектора  $\mathbf{k}$  на противоположное должно приводить к изменению знака спиральности. В случае нулевой массы мы не можем приписать частицам внутренней четности, поскольку неприводимые представления  $\mathbf{P}^{(0, |m|)}$  группы  $\mathcal{P}_s$  не несут индексов типа « $\pm$ ». Физический смысл этого в том, что нельзя говорить о внутренней четности покоящейся частицы, коль скоро частицы с нулевой массой всегда движутся со скоростью света.

Эксперимент показывает наличие в природе фотонов в обоих состояниях  $m = \pm 1$ . Это означает, что фотон



описывается представлением  $P^{(0, 1)} \oplus P^{(0, -1)}$  группы  $\mathcal{P}_s$ , или, другими словами, группой симметрии для фотона является группа  $\mathcal{P}_s$ . В то же время нейтрино, которое всегда находится в состоянии с  $m = -1/2$ , описывается группой  $\mathcal{P}$ , не включающей инверсию. Таким образом, если в электромагнитных процессах, идущих за счет обмена фотонами, четность сохраняется, то в процессах с участием нейтрино, таких, как  $\beta$ -распад, экспериментально наблюдается несохранение четности. Антинейтрино со спиральностью  $m = 1/2$  также существуют, но их следует рассматривать как частицы, отличные от нейтрино, поскольку они появляются в других реакциях (гл. 16, § 3, п. Ж).

## Г. Обращение времени

Если запустить кинофильм задом наперед, то все движения будут протекать в обратном порядке. Вместо падающего камня мы увидим камень, подброшенный вверх. Такое обращенное движение тоже согласуется с физическими законами. Это означает, что камень, подброшенный вверх, будет вести себя в вакууме точно так же, как падающий камень в кинофильме, идущем задом наперед. Дело в том, что уравнения Ньютона в однородном гравитационном поле инвариантны относительно замены времени  $t$  на  $-t$ . Но в квантовой механике, основанной на уравнении Шредингера, простое отражение времени  $t \rightarrow -t$  приводит, как мы видели в § 6, еще и к изменению знака энергии, поскольку оператор энергии равен  $i\hbar\partial/\partial t$ . Таким образом, в квантовой механике отражение времени приводит к большим изменениям, нежели простое обращение направления движения. Поскольку представление об обращении направления движения выглядит совершенно естественно в классической механике, соответствующая операция должна быть возможной и в квантовой механике. Такая операция должна изменять на обратное направление движения, не меняя знака энергии. Ниже мы построим такую операцию; она называется «обращением времени» и обозначается символом  $\Upsilon$ . Оказывается, что  $\Upsilon$  — весьма необычный, нелинейный оператор. Поэтому мы сейчас сделаем небольшое отступление, чтобы объяснить смысл

и значение таких операторов. (Коротко об операторе обращения времени упоминалось в гл. 5, § 10 и в гл. 9, § 8.)

Во всех примерах симметрии в квантовой механике, с которыми мы встречались в этой книге, соответствующие преобразования волновых функций были линейными и унитарными. Рассмотрев подробнее причины такого выбора, мы убедимся, что он не является единственно возможным. Пусть  $|\psi\rangle$  и  $|\varphi\rangle$  — два вектора состояния системы. Один из постулатов квантовой механики гласит, что если система находится в состоянии  $|\psi\rangle$ , то вероятность обнаружить ее при измерении в состоянии  $|\varphi\rangle$  равна квадрату модуля скалярного произведения векторов состояния:  $|\langle\varphi|\psi\rangle|^2$ . Если обозначить через  $|\psi'\rangle = T|\psi\rangle$  и  $|\varphi'\rangle = T|\varphi\rangle$  состояния, полученные путем преобразования симметрии  $T$ , то, поскольку результат измерения должен остаться неизменным, мы имеем

$$|\langle T\varphi | T\psi \rangle|^2 = |\langle \varphi | \psi \rangle|^2. \quad (15.102)$$

Это равенство должно выполняться, если преобразованная в результате операции  $T$  система имеет те же, что и ранее, физические свойства. Ясно, что равенство (15.102) выполняется, если оператор  $T$  унитарен, т. е.  $\langle T\varphi | T\psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle$  для всех векторов  $|\varphi\rangle$  и  $|\psi\rangle$ . Но благодаря тому, что в (15.102) входит квадрат модуля скалярного произведения, имеется и другая возможность. Исходя из соотношения (15.102), можно показать, что с точностью до тривиальных фазовых множителей оператор  $T$  может быть либо линейным и унитарным, как мы и предполагали до сих пор, т. е.

$$\begin{aligned} \langle T\varphi | T\psi \rangle &= \langle \varphi | \psi \rangle, \\ T(a|\varphi\rangle + b|\psi\rangle) &= aT|\varphi\rangle + bT|\psi\rangle, \end{aligned} \quad (15.103)$$

либо антилинейным и антиунитарным, т. е. удовлетворять условиям

$$\begin{aligned} \langle T\varphi | T\psi \rangle &= \langle \psi | \varphi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle^*, \\ T(a|\varphi\rangle + b|\psi\rangle) &= a^*T|\varphi\rangle + b^*T|\psi\rangle. \end{aligned} \quad (15.104)$$

В случае непрерывных групп мы естественным образом приходим к выбору (15.103), поскольку считаем, что единичный оператор соответствует единице группы, а единичный оператор линеен и унитарен. Рассматривая операцию отражения времени в § 6, мы тоже принимали

обычное условие (15.103). Выбрав же теперь вторую возможность, соответствующую условиям (15.104), мы получим преобразование обращения времени, не затрагивающее знака энергии.

Рассмотрим представления группы  $\mathcal{P}_t$ , образованной добавлением к группе  $\mathcal{P}$  операции отражения времени  $I_t$ , в которых элементу  $I_t$  ставится в соответствие антилинейный оператор  $\Upsilon$ . Таким образом, сохраняя уравнение (15.92) для группового умножения и заменяя оператор  $T(I_t)$  антилинейным оператором  $\Upsilon$ , получаем вместо формулы (15.93) следующую цепочку равенств:

$$\begin{aligned} T(\hat{\mathbf{e}}) \Upsilon |\hat{\mathbf{k}}\rangle &= \Upsilon T(I_t \hat{\mathbf{e}}) |\hat{\mathbf{k}}\rangle = \Upsilon \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot I_t \hat{\mathbf{e}}) |\hat{\mathbf{k}}\rangle = \\ &= \exp(-i\hat{\mathbf{k}} \cdot I_t \hat{\mathbf{e}}) \Upsilon |\hat{\mathbf{k}}\rangle = \exp(-iI_t \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \Upsilon |\hat{\mathbf{k}}\rangle = \\ &= \exp(iI_t \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \Upsilon |\hat{\mathbf{k}}\rangle. \end{aligned} \quad (15.105)$$

Мы воспользовались здесь вторым равенством (15.104) и элементарным соотношением  $I_t \hat{\mathbf{k}} = -|\hat{\mathbf{k}}$ , где  $I$  — пространственная инверсия. Итак, при трансляциях вектор  $\Upsilon |\hat{\mathbf{k}}\rangle$  преобразуется по представлению  $T^{(|\hat{\mathbf{k}}|)}$  и трудности, связанные с отрицательными энергиями, не возникают. Оператор  $\Upsilon$  обладает также и желаемым свойством изменять направление движения на противоположное. Хотя обращение времени и похоже на пространственную инверсию, мы не можем ввести физически сколько-нибудь осмысленное понятие «четности по отношению к обращению времени». Это непосредственно связано с антилинейной природой оператора  $\Upsilon$ . Действительно, пусть  $|\psi\rangle$  — собственный вектор оператора  $\Upsilon$ , соответствующий собственному значению  $\lambda$ , так что  $\Upsilon |\psi\rangle = \lambda |\psi\rangle$ . Из антилинейности оператора  $\Upsilon$  следует, что для любой фазы  $\eta$  справедливы соотношения

$$\begin{aligned} \Upsilon \exp(i\eta) |\psi\rangle &= \exp(-i\eta) \Upsilon |\psi\rangle = \exp(-i\eta) \lambda |\psi\rangle = \\ &= [\exp(-2i\eta) \lambda] \exp(i\eta) |\psi\rangle. \end{aligned}$$

Таким образом, вектор  $\exp(i\eta) |\psi\rangle$ , который должен быть физически неотличимым от вектора  $|\psi\rangle$ , соответствует собственному значению  $\exp(-2i\eta) \lambda$  оператора  $\Upsilon$ , и, следовательно, величина  $\lambda$  может иметь физический смысл лишь с точностью до фазы. В частности, несущественен знак величины  $\lambda$ . Все сказанное в равной мере приме-

нимо как к случаю нулевой, так и к случаю ненулевой массы. Однако для того, чтобы дальше изучать представления группы  $\mathcal{P}_t$ , нам необходимо рассмотреть два этих случая по отдельности. Мы обнаружим, что в обоих случаях добавление к группе  $\mathcal{P}$  нового элемента  $I_t$  не приводит к необходимости увеличения размерности пространства неприводимого представления. Чтобы идти далее, нам необходим закон умножения для преобразований Лоренца и отражения времени

$$I_t L(a, b) = L(a, -b) I_t, \quad (15.106)$$

который следует из матричной записи соответствующих преобразований в четырехмерном пространстве. Как обычно, мы предполагаем, что операторы представления подчиняются тому же закону. Иначе говоря, оператор обращения времени коммутирует с вращениями и меняет направления бустов на обратные. Из определения физической операции обращения времени следует, что операция  $\Upsilon^2$  воспроизводит исходную физическую систему. Следовательно,  $\Upsilon^2 |\psi\rangle = \exp(i\alpha) |\psi\rangle$ , где  $\alpha$  — некоторая фаза. Вместе с условием антилинейности (15.104) это приводит к следующему ограничению (задача 15.10):  $\Upsilon^2 |\psi\rangle = \pm |\psi\rangle$ . В случае однозначного представления мы должны были бы выбрать знак «+», так как соответствующий элемент группы удовлетворяет соотношению  $I_t^2 = E$ . Но если мы допускаем наличие двузначных представлений, подобных представлениям группы  $\mathcal{R}_3$  с полуцелыми  $j$ , то приемлем также и знак «—».

### Конечная масса

При изучении поведения базисных векторов  $|\hat{\mathbf{k}} s m_s\rangle$  пространства представления  $\mathbf{P}^{(k, s)}$  группы  $\mathcal{P}$  под действием нового преобразования  $\Upsilon$  мы будем придерживаться метода, изложенного в § 5. Рассмотрим сначала векторы специального вида  $|\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle$  с  $\hat{\mathbf{k}}_0 = (0, 0, 0, 1)$ . Из формулы (15.105) следует, что вектор  $\Upsilon |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle$  отвечает тому же значению  $\hat{\mathbf{k}} = \hat{\mathbf{k}}_0$ . Можно было бы думать, что, так как оператор  $\Upsilon$  коммутирует с вращениями, вектор  $\Upsilon |\hat{\mathbf{k}}_0 s m_s\rangle$  должен характеризоваться тем же значением величины  $m_s$ . Но нужно учесть антилинейность оператора  $\Upsilon$ . Поскольку

собственные значения оператора  $X_z$  являются мнимыми, т. е.  $X_z |\hat{k}_0 s m_s\rangle = -i m_s |\hat{k}_0 s m_s\rangle$  (см., например, гл. 7, § 3, п. Д), получаем

$$X_z Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle = Y X_z |\hat{k}_0 s m_s\rangle = \\ = Y (-i m_s) |\hat{k}_0 s m_s\rangle = i m_s Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle.$$

Отсюда следует, что при вращениях относительно оси  $z$  вектор  $Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle$  преобразуется как вектор, характеризующийся значением  $-m_s$ , хотя, как нетрудно видеть, величина  $s$  остается неизменной. Фактически для произвольного вращения имеем

$$T(R(a)) Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle = Y T(R(a))_a |\hat{k}_0 s m_s\rangle = \\ = \sum_{m'_s} Y D_{m'_s m_s}^{(s)}(a) |\hat{k}_0 s m'_s\rangle = \\ = \sum_{m'_s} D_{m'_s m_s}^{(s)*}(a) Y |\hat{k}_0 s m'_s\rangle. \quad (15.107)$$

Таким образом, множество векторов  $Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle$  с фиксированными  $\hat{k}_0$  и  $s$  преобразуется при вращениях по представлению, комплексно-сопряженному представлению  $D^{(s)}$  группы  $\mathcal{R}_3$ . Но представление  $D^{(s)}$  эквивалентно своему комплексно-сопряженному (гл. 7, § 7), и с учетом обычных соглашений выполняется равенство  $D_{m'_s m_s}^{(s)*}(a) = (-1)^{m_s - m'_s} D_{-m'_s - m_s}^{(s)}(a)$ . Следовательно, набор векторов  $Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle$  преобразуется при вращениях так же, как и набор векторов  $(-1)^{m_s} |\hat{k}_0 s - m_s\rangle$ . Соответственно этому имеются две возможности: либо векторы  $Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle$  линейно-независимы от векторов  $|\hat{k}_0 s - m_s\rangle$ , либо справедливо равенство  $Y |\hat{k}_0 s m_s\rangle = \gamma (-1)^{m_s} |\hat{k}_0 s - m_s\rangle$ , где  $\gamma$  — некоторая постоянная. Так как нас интересуют неприводимые представления группы  $\mathcal{P}_t$ , первую возможность следует отбросить. Дело в том, что представления такого типа, построенные исходя из вектора  $|\hat{k}_0 s m_s\rangle$ , приводимы. Доказательство этого аналогично соответствующему доказательству из § 3. Обратимся ко второй возможности. Принято выбирать множитель  $\gamma = (-1)^s$ , так что множитель  $(-1)^{s+m_s}$  действителен и при полуцелых значениях  $s$ .

Заметив, что набор  $(2s+1)$  векторов  $|\hat{k}_0 s m_s\rangle$  с фиксированными  $\hat{k}_0$  и  $s$  инвариантен по отношению к вращениям и обращению времени, образуем остальные базисные векторы пространства представления группы  $\mathcal{P}_t$ , используя формулу (15.57), определяющую действие буста на векторы вида  $|\hat{k}_0 s m_s\rangle$ . Для произвольного базисного вектора пространства представления имеем

$$\begin{aligned} \Upsilon |\hat{k} s m_s\rangle &= \Upsilon T(Q[b(\hat{k})]) |\hat{k}_0 s m_s\rangle = \\ &= T(Q[-b(\hat{k})]) (-1)^{s+m_s} |\hat{k}_0 s - m_s\rangle = \\ &= (-1)^{s+m_s} |\hat{k} s - m_s\rangle. \end{aligned} \quad (15.108)$$

Это равенство показывает, что операция  $\Upsilon$  изменяет на противоположные направления импульса и спина частицы. Кроме того, из него следует, что

$$\begin{aligned} \Upsilon^2 |\hat{k} s m_s\rangle &= (-1)^{s+m_s} (-1)^{s-m_s} |\hat{k} s m_s\rangle = \\ &= (-1)^{2s} |\hat{k} s m_s\rangle. \end{aligned} \quad (15.109)$$

Таким образом,  $\Upsilon^2 = 1$  для представлений с целым спином и  $\Upsilon^2 = -1$  для представлений с полуцелым спином. Это справедливо независимо от выбора множителя  $\gamma$ . Пользуясь формулой (15.108), мы можем непосредственно определить результат действия оператора  $\Upsilon$  на произвольный вектор  $|\psi\rangle$ , заданный выражением (15.78). Преобразованный вектор  $|\psi'\rangle = \Upsilon |\psi\rangle$  определяется коэффициентами  $\psi'_{m_s}(\hat{k}) = (-1)^{s-m_s} \psi_{-m_s}^*(-\hat{k})$ . Оператор обращения времени можно представить в виде произведения унитарного оператора на оператор  $K$ , осуществляющий комплексное сопряжение  $s$ -чисел — коэффициентов разложения по некоторому базису; однако явный вид такого представления для оператора  $\Upsilon$  будет, очевидно, зависеть от выбора базиса. Заметив [формула (20.40)], что спиновое вращение  $R_y^s(-\pi)$  переводит  $m_s$  в  $-m_s$  и вводит дополнительный множитель  $(-1)^{s+m_s}$ , и определив оператор  $T_k(I)$  как оператор, переводящий базисный вектор пространства представления, отвечающий четырехмерному вектору  $\hat{k}$ , в вектор, отвечающий четырехмерному вектору  $I\hat{k}$ , мы видим, что в базисе  $|\hat{k} s m_s\rangle$  выполняется равенство  $\Upsilon = KR_y^s(-\pi) T_k(I)$ . Однако в координатном представлении операция обращения времени задается формулой  $\Upsilon =$

$= KR_y^s(-\pi) T(I_t)$ , где оператор  $T(I_t)$  меняет  $t$  на  $-t$ . Если  $s=1/2$ , то  $R_y^s(-\pi) \equiv 2is_y$ .

### Нулевая масса

Из закона умножения (15.106) следует, что  $\Upsilon X = X\Upsilon$  и  $\Upsilon Y = -Y\Upsilon$ , а из формулы (15.92) — что  $\Upsilon P = P\Upsilon$  и  $\Upsilon P_t = -P_t\Upsilon$ . Таким образом,  $\Upsilon W = -W\Upsilon$  и  $\Upsilon W_t = W_t\Upsilon$ . Рассмотрим теперь базисный вектор, принадлежащий пространству представления  $P^{(0, m)}$  группы  $\mathcal{P}$ , которое соответствует частице с нулевой массой. Исходя из формулы (15.76), получаем равенство  $\Upsilon(\hat{W} + im\hat{P})|\hat{k}m\rangle = 0$ , так что из вышеприведенных соотношений и антилинейности оператора  $\Upsilon$  следуют равенства

$$\begin{aligned} (-W - imP)\Upsilon|\hat{k}m\rangle &= 0, \\ (W_t + imP_t)\Upsilon|\hat{k}m\rangle &= 0, \end{aligned}$$

или, другими словами,

$$(\hat{W} + im\hat{P})\Upsilon|\hat{k}m\rangle = 0. \quad (15.110)$$

Итак, мы приходим к заключению, что вектор  $\Upsilon|\hat{k}m\rangle$  тоже принадлежит пространству представления  $P^{(0, m)}$  группы  $\mathcal{P}$ . Из формулы же (15.105) следует, что этот вектор преобразуется по отношению к действию группы  $\mathcal{P}$  как вектор  $|\hat{k}m\rangle$ . Как и ранее, можно показать, что предположение о линейной независимости векторов  $\Upsilon|\hat{k}m\rangle$  и  $|\hat{k}m\rangle$  приводит к построению приводимого представления группы  $\mathcal{P}_t$ . Следовательно, в случае неприводимого представления должно выполняться равенство

$$\Upsilon|\hat{k}m\rangle = |\hat{k}m\rangle. \quad (15.111)$$

(Мы выбрали фазовый множитель равным  $+1$ .) Заметим, что независимо от выбора фазового множителя в этом случае  $\Upsilon^2 = +1$ . Как и ранее, смысл формулы (15.111) состоит в том, что операция обращения времени меняет направления импульса и спина на обратные. Но так как  $m$  — это проекция спина на направление движения, величина  $m$  остается неизменной. С точки зрения представлений мы заключаем, что пространство представления  $P^{(0, m)}$  остается инвариантным при добавлении к группе  $\mathcal{P}$  операции  $\Upsilon$  и, следовательно, является пространством неприводимого представления группы  $\mathcal{P}_t$ .

## Д. Некоторые следствия симметрии по отношению к обращению времени

### 1. Теорема Крамера

В качестве первого примера использования симметрии по отношению к обращению времени мы выведем теорему Крамера, сформулированную впервые в 1930 г. Эта теорема гласит, что в системе, состоящей из нечетного числа частиц с полуцелым спином и ненулевой массой, любое состояние двукратно вырождено, если эта система описывается гамильтонианом, инвариантным относительно обращения времени. Для  $n$ -частичных состояний  $|\psi\rangle$  оператор обращения времени определяется как произведение  $n$  одночастичных операторов. Рассмотрим теперь оператор  $\Upsilon^2$ . Для каждой частицы он дает множитель  $(-1)^{2s}$  независимо от того, как эта частица движется. Таким образом, если  $|\psi\rangle$  — состояние, описывающее  $n$  частиц с полуцелым спином, то  $\Upsilon^2|\psi\rangle = (-1)^n|\psi\rangle = -|\psi\rangle$  при нечетном  $n$ . Если  $|\psi\rangle$  является собственным вектором  $\Upsilon$ -инвариантного гамильтониана, то вектор  $|\varphi\rangle = \Upsilon|\psi\rangle$  также является собственным. Но нетрудно видеть, что вектор  $|\varphi\rangle$  независим от вектора  $|\psi\rangle$  и даже ортогонален ему, так как из первого равенства формулы (15.104) следует, что  $\langle\psi|\varphi\rangle = \langle\psi|\Upsilon\psi\rangle = \langle\Upsilon^2\psi|\Upsilon\psi\rangle = -\langle\psi|\Upsilon\psi\rangle = -\langle\psi|\varphi\rangle$ . Таким образом,  $\langle\psi|\varphi\rangle = 0$  и, следовательно, векторы  $|\varphi\rangle$  и  $|\psi\rangle$  независимы. Последнее и означает двукратное вырождение. Добавление к пространственной симметрии операции  $\Upsilon$  не всегда приводит к дополнительному вырождению. Например, в сферически-симметричной системе отмеченное выше вырождение соответствует вырождению между состояниями с проекцией орбитального момента на ось  $z$ , равной  $\pm m$ , и, следовательно, является частью хорошо известного  $(2j+1)$ -кратного вырождения в сферически-симметричной системе.

### 2. Реакции

Применительно к процессам столкновений операция обращения времени означает смену ролей сталкивающихся и разлетающихся частиц. Поэтому предположение об инвариантности относительно обращения времени приводит



к соотношениям между вероятностями прямых и обратных процессов, известным как «принцип детального равновесия». Для процессов взаимодействия, исследуемых в рамках теории возмущений, можно также получить соотношения между матричными элементами, соответствующими одному и тому же процессу. Для иллюстрации рассмотрим разделение операторов  $Q$  на четные и нечетные по отношению к обращению времени в соответствии со знаком «+» или «—» в уравнении  $\Upsilon Q = \pm Q \Upsilon$ . Например, из предыдущего анализа следует, что операторы  $X$  и  $P$  — четные, а оператор  $Y$  — нечетный. Учитывая множитель  $i$ , возникающий при переходе от этих инфинитезимальных операторов к эрмитовым операторам импульса и углового момента, мы видим, что операторы  $\mathbf{j} \cdot \mathbf{s}$  и  $\mathbf{p}$  нечетные, как мы и ожидали, а операторы  $\mathbf{r}$  и  $\mathbf{s} \cdot \mathbf{l}$ , например, четные. (Напомним, однако, что волновые функции нельзя классифицировать по четности относительно обращения времени.) Для матричных элементов имеем выражение

$$\langle \phi | Q | \psi \rangle = \langle \Upsilon \phi | \Upsilon Q \Upsilon^{-1} | \Upsilon \psi \rangle^* = \pm \langle \Upsilon \phi | Q | \Upsilon \psi \rangle^*, \quad (15.112)$$

в котором плюс относится к четным, а минус — к нечетным операторам. Производя измерения, связывающие значения матричных элементов между некоторыми состояниями и другими состояниями, полученными из первых действием операции обращения времени, можно решить вопрос о том, является ли оператор  $Q$  четным, нечетным или имеет смешанный тип по отношению к обращению времени.

В качестве примера рассмотрим электрический дипольный момент покоящейся частицы с полужелым спином и ненулевой массой. Дипольный момент определяется по изменению энергии, пропорциональному внешнему электрическому полю  $E$ , т. е. соответствующий член в гамильтониане взаимодействия имеет вид  $\mathbf{D} \cdot \mathbf{E}$ , где  $\mathbf{D}$  — оператор дипольного момента. В квантовой механике оператор  $\mathbf{D}$  является вектором. В случае частицы со спином  $s$  нас будут интересовать матричные элементы вида  $\langle m_s | \mathbf{D}_z | m_s \rangle$ , если в качестве оси  $z$  мы выберем направление поля  $E$ . Поскольку  $\mathbf{D}$  — векторный оператор, по теореме Вигнера—Эккарта [формула (7.54)] имеем

$$\langle m_s | \mathbf{D}_z | m_s \rangle = (-1)^{s+m_s} \langle -m_s | \mathbf{D}_z | -m_s \rangle. \quad (15.113)$$

Но из (15.108) следует, что  $\Gamma|m_s\rangle = (-1)^{+m_s}|-m_s\rangle$ , так что в зависимости от того, является ли оператор  $D_z$  четным или нечетным по отношению к обращению времени, имеем  $\langle m_s|D_z|m_s\rangle = \pm\langle -m_s|D_z|-m_s\rangle^* = \pm\langle -m_s|D_z|-m_s\rangle$ , поскольку оператор  $D_z$  должен быть эрмитовым для того, чтобы изменение энергии в электрическом поле было действительным. Сравнивая это выражение с выражением (15.113), мы видим, что дипольный момент не равен нулю только в том случае, если  $D_z$  — нечетный оператор. Согласно принятой в настоящее время теории электромагнитных взаимодействий, инвариантной относительно обращения времени,  $D_z$  — четный оператор. Это согласуется с тем фактом, что ни у одной частицы дипольный момент не обнаружен. В настоящее время проводятся очень точные измерения, имеющие целью выяснить наличие хотя бы весьма малого дипольного момента у нейтрона. Наличие такого дипольного момента указывало бы на нарушение симметрии относительно обращения времени. Это также указывало бы на несохранение четности, поскольку, согласно принятой в настоящее время теории, в которой четность сохраняется, оператор  $D_z$  имеет отрицательную четность относительно пространственной инверсии. Поэтому для частицы, имеющей определенную четность, диагональный матричный элемент оператора  $D_z$  должен быть равен нулю.

Несмотря на многочисленные эксперименты, определенных указаний на нарушение симметрии относительно обращения времени найдено не было<sup>1)</sup>. Эта ситуация резко отличается от ситуации с пространственной инверсией. Левосторонность нейтрино приводит к тому, что в слабых взаимодействиях, таких, как  $\beta$ -распад, симметрия относительно пространственной инверсии сильно нарушается.

### Группа $\mathcal{P}_{st}$

Поскольку переход от группы  $\mathcal{P}$  к группе  $\mathcal{P}_t$  не вызывает никаких изменений в пространствах неприводимых представлений, переход от группы  $\mathcal{P}_t$  к группе  $\mathcal{P}_{st}$ , со-

<sup>1)</sup> Такое нарушение симметрии обнаружено в реакции распада  $K$ -мезонов. — *Прим. ред.*

держающей как отражение времени, так и пространственную инверсию, ничем не отличается от проделанного в § 5 перехода от группы  $\mathcal{P}$  к группе  $\mathcal{P}_s$ . Другими словами, мы просто можем объединить формулы § 5 с теми, которые получены в этом параграфе для оператора  $\Upsilon$ . Вид преобразований, соответствующих новому элементу  $\Upsilon T(I)$ , следует из формул преобразований для операторов  $\Upsilon$  и  $T(I)$ .

## § 8. ОДНОЧАСТИЧНЫЕ ВОЛНОВЫЕ ФУНКЦИИ И ВОЛНОВЫЕ УРАВНЕНИЯ

На протяжении всей главы мы изучали неприводимые представления группы Пуанкаре. Это позволило нам установить трансформационные свойства функций, принадлежащих пространствам каждого из этих представлений. Постулат пуанкаре-инвариантности законов природы позволил нам интерпретировать параметры, задающие неприводимые представления группы Пуанкаре, как инвариантные свойства частиц — массу, спин. Анализ свойств элементарных частиц позволил нам связать с каждой частицей неприводимое представление группы Пуанкаре, подобно тому как в нерелятивистской теории каждое решение стационарного уравнения Шредингера мы связывали с некоторым представлением группы симметрии гамильтониана. Однако мы никогда не занимались построением волновых функций в явном виде. Мы придерживались везде той точки зрения, которая была принята при анализе группы  $\mathcal{R}_3$ , а именно, что свойства базисных векторов пространства представления  $D^{(\lambda)}$  можно установить, не рассматривая конкретных выражений для этих векторов. При таком подходе результаты оказываются столь общими, что их можно применять к любой сферически-симметричной системе. Например, функции вида  $|jm\rangle$  имеют одинаковые свойства по отношению к вращениям независимо от того, относятся они к одной или к нескольким частицам. Но в случае одной частицы можно найти явный вид зависимости волновой функции от углов. Для этого надо воспользоваться дифференциальной формой инфинитезимальных операторов вращений. Тогда оператор Казимира будет дифференциальным оператором. Решения уравнения на собственные значения для этого

оператора дают базисные волновые функции  $|jm\rangle$  неприводимых представлений группы  $\mathcal{R}_3$ .

В данном параграфе мы сначала детально разработаем сделанные выше замечания, относящиеся к группе  $\mathcal{R}_3$ , а затем, перенеся те же соображения на евклидову группу и группу Пуанкаре, выведем известные уравнения Клейна—Гордона, Дирака, Вейля и Максвелла. Если ограничиваться случаем свободных частиц, то эти уравнения не дают новой информации по сравнению с той, которая содержится в структуре неприводимых представлений. Но они необходимы при исследовании взаимодействий (§ 8, п. Б), а также при построении теории квантованных полей (гл. 16, § 3).

### А. Группа $\mathcal{R}_3$

Напомним (гл. 7, § 5), что оператор Казимира для группы  $\mathcal{R}_3$  есть  $\mathbf{J}^2$  и его собственные значения в представлении  $\mathbf{D}^{(j)}$  равны  $j(j+1)$ , где  $j=0, 1/2, 3/2$  и т. д. В гл. 7, § 4, п. Д мы нашли явный вид дифференциальных операторов  $\mathbf{J}_q = -i(\mathbf{r} \times \nabla)_q$ . Таким образом, базисные векторы пространства представления должны удовлетворять следующему «волновому уравнению»:

$$\{(\mathbf{r} \times \nabla)^2 + j(j+1)\} |jm\rangle = 0. \quad (15.114)$$

Так как длина вектора  $\mathbf{r}$  инвариантна относительно вращений, при изучении базисных векторов пространства представления  $\mathbf{D}^{(j)}$  мы можем рассматривать величину  $r$  как постоянную. В этом случае уравнение (15.114) с учетом формулы (7.57) приводится к виду

$$\{r^2 \nabla^2 + j(j+1)\} |jm\rangle = 0. \quad (15.115)$$

Следовательно, свойства базисных векторов  $|jm\rangle$  можно установить, исходя из решений волнового уравнения (15.115). Фактически это уравнение является уравнением Шредингера для частицы, движущейся по сфере радиусом  $r$ , и его решениями являются сферические гармоники с целыми  $j$ , а именно  $Y_m^{(j)}(\theta, \varphi)$ .

Для построения волновых функций, отвечающих полужелым значениям  $j$ , мы должны обобщить уравнение (15.115), рассмотрев, как говорилось в гл. 8, § 4, функции с несколькими компонентами. Если, в частности, мы

ограничимся двумя компонентами, преобразующимися по представлению  $\mathbf{D}^{(1/2)}$ , то инфинитезимальные операторы вращения принимают вид  $\mathbf{J} = \mathbf{l} + \mathbf{s} = -i\mathbf{r} \times \nabla + \mathbf{s}$ , где  $\mathbf{s}$  обозначает набор из трех  $2 \times 2$ -матриц  $s_q$  вида (8.15). Поступая точно так же, как и ранее, получаем новое уравнение

$$\left\{ \mathbf{r}^2 \nabla^2 - \frac{3}{4} + 2i\mathbf{s} \cdot \mathbf{r} \times \nabla + j(j+1) \right\} |jm\rangle = 0, \quad (15.116)$$

где вместо  $\mathbf{s}^2$  мы подставили значение  $3/4$ . Подразумевается, что слагаемые, не содержащие множителей типа  $\mathbf{s}$ , умножены на единичную  $2 \times 2$ -матрицу, а волновые функции  $|jm\rangle$  имеют две компоненты:

$$|jm\rangle = \begin{pmatrix} \psi_+(\theta, \varphi) \\ \psi_-(\theta, \varphi) \end{pmatrix}$$

(обозначения такие же, как и в гл. 8, § 4). Таким образом, уравнение (15.116) представляет собой систему двух дифференциальных уравнений для двух функций  $\psi_{\pm}(\theta, \varphi)$ . Эта система уравнений выглядит довольно сложно, но мы уже решили ее в гл. 8, § 4. Два дифференциальных оператора, входящие в уравнение (15.116), коммутируют друг с другом, и, следовательно, их можно одновременно привести к диагональному виду, причем диагонализация первого из них осуществляется путем перехода к сферическим гармоникам  $Y_{m_l}^{(l)}$ . В то же время нам известно (гл. 8, § 4), что по правилу сложения моментов при данном  $j$  и  $s = 1/2$  единственно возможные значения величины  $l$  таковы:  $l = j \pm 1/2$ . Используя свойства повышающих и понижающих операторов  $l_{\pm}$  [формула (7.40)], можно показать, что (задача 15.11) два решения уравнения (15.116) имеют вид

$$|jm\rangle = \begin{pmatrix} \left\{ \left( l + \frac{1}{2} - m \right) / (2l+1) \right\}^{1/2} Y_{m-1/2}^{(l)}(\theta, \varphi) \\ - \left\{ \left( l + \frac{1}{2} + m \right) / (2l+1) \right\}^{1/2} Y_{m+1/2}^{(l)}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \\ \text{при } l = j + 1/2, \\ |jm\rangle = \begin{pmatrix} \left\{ \left( l + \frac{1}{2} + m \right) / (2l+1) \right\}^{1/2} Y_{m-1/2}^{(l)}(\theta, \varphi) \\ \left\{ \left( l + \frac{1}{2} - m \right) / (2l+1) \right\}^{1/2} Y_{m+1/2}^{(l)}(\theta, \varphi) \end{pmatrix} \\ \text{при } l = j - 1/2.$$

Числовые коэффициенты перед сферическими гармониками—это просто коэффициенты векторного сложения, и вышеприведенные решения фактически совпадают с решениями (8.24) при  $s=1/2$ .

### Б. Группа $\mathcal{G}_3$

В § 1 мы показали, что группа симметрии  $\mathcal{G}_3$  имеет неприводимые представления  $E^{(|k|, m)}$  с  $m=0, \pm 1/2, \pm 1, \dots$  и  $|k| > 0$ , а также  $E^{(0, s)} \equiv D^{(s)}$ . Операторы Казимира теперь имеют вид  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{P}$  и  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$ ; их собственные значения в представлении  $E^{(|k|, m)}$  равны  $-|k|^2$  и  $-|k|m$ . Если воспользоваться явными выражениями  $\mathbf{P} = -\mathbf{V}$  и  $\mathbf{X} = -\mathbf{r} \times \mathbf{V}$ , то оператор  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  обращается в нуль и мы можем построить лишь представление  $E^{(|k|, 0)}$  с  $m=0$ . Соответствующее волновое уравнение в этом случае имеет вид

$$(\nabla^2 + |k|^2)|\psi\rangle = 0. \quad (15.117)$$

Это уравнение Шредингера для свободной бесспиновой частицы, энергия которой в единицах  $\hbar^2/2M$  равна  $|k|^2$ .

Чтобы построить волновые функции для случая  $m \neq 0$ , мы снова введем многокомпонентные величины. Записав, как и ранее, инфинитезимальный оператор вращения в виде  $\mathbf{X} = -i\mathbf{J} = -i(\mathbf{l} + \mathbf{s}) = -\mathbf{r} \times \mathbf{V} - i\mathbf{s}$ , получаем, что оператор Казимира  $\mathbf{P} \cdot \mathbf{X}$  дается выражением  $-i\mathbf{P} \cdot \mathbf{s} = i\mathbf{V} \cdot \mathbf{s}$ . Ограничиваясь опять двумя компонентами и полагая операторы  $\mathbf{s}$  равными спиновым  $2 \times 2$ -матрицам, мы ожидаем получить базисные векторы с  $m = \pm 1/2$ . Это сразу же можно проверить, написав новое волновое уравнение  $(i\mathbf{V} \cdot \mathbf{s} + |k|m)|\psi\rangle = 0$ , из которого следует, что

$$\{(\mathbf{V} \cdot \mathbf{s})^2 + |k|^2 m^2\}|\psi\rangle = 0. \quad (15.118)$$

Но так как спиновые матрицы удовлетворяют соотношениям  $s_q^2 = 1/4$ ,  $s_x s_y + s_y s_x = 0$  и т. д., мы имеем  $(\mathbf{V} \cdot \mathbf{s})^2 = 1/4 \nabla^2$ . Таким образом, сравнивая уравнения (15.118) и (15.117), мы приходим к выводу, что  $m^2 = 1/4$  и, следовательно,  $m = \pm 1/2$ . Так при помощи двухкомпонентных функций удастся построить базисные векторы для представлений  $E^{(|k|, 1/2)}$  и  $E^{(|k|, -1/2)}$ . Воспользовавшись явным видом спиновых матриц (8.15), получаем, что эти базис-

ные векторы (ненормированные) равны

$$|m = 1/2\rangle = \begin{pmatrix} |k| + k_z \\ k_x + ik_y \end{pmatrix} e^{ik \cdot r}, \quad |m = -1/2\rangle = \begin{pmatrix} -k_x + ik_y \\ |k| + k_z \end{pmatrix} e^{ik \cdot r}, \quad (15.119)$$

где, как обычно, диагональной считается матрица  $s_z$ .

### Спиновое гироманнитное отношение

Теперь мы можем вывести значение  $g_s = 2$  для спинного  $g$ -фактора электрона, приведенное в гл. 8, § 4. Часто приходится сталкиваться с утверждением, что данное значение  $g$ -фактора следует из уравнения Дирака, но это не совсем верно. Конечно, это значение величины  $g_s$  естественным образом следует из уравнения Дирака, но столь же естественно оно следует и из нерелятивистского уравнения (15.118). Уравнение свободного движения частицы с зарядом  $-e$  в магнитном поле можно вывести в классической механике, заменив в гамильтониане импульс  $\mathbf{p}$  величиной  $\mathbf{p} + e\mathbf{A}/c$ , где  $\mathbf{A}$  — векторный потенциал электромагнитного поля. Если воспользоваться приближением некантованного электромагнитного поля, то же самое можно сделать и в квантовой механике. Применительно к уравнению (15.118) при  $m = \pm 1/2$  с учетом равенства  $\mathbf{p} = -i\hbar\nabla$  это дает

$$\left[ \{(\nabla + ie\mathbf{A}/c\hbar) \cdot \mathbf{s}\}^2 + \frac{1}{4} |\mathbf{k}|^2 \right] |\psi\rangle = 0. \quad (15.120)$$

Уравнение (15.120) иногда называют уравнением Паули. В случае однородного электромагнитного поля можно положить  $\mathbf{A} = 1/2 \mathbf{B} \times \mathbf{r}$ , где  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  — постоянный вектор напряженности магнитного поля. Учитывая свойства спинных матриц и некоммутативность оператора  $\nabla$  с векторным потенциалом  $\mathbf{A}$ , уравнение (15.120) можно привести к виду

$$[\nabla^2 + |\mathbf{k}|^2 - (e/\hbar c) \{ \mathbf{B} \cdot (\mathbf{I} + 2\mathbf{s}) \}] |\psi\rangle = 0 \quad (15.121)$$

мы опустили члены второго порядка по  $\mathbf{B}$ . Сравнивая (это уравнение с уравнением Шредингера (15.117), мы об-

наруживаем член, отвечающий взаимодействию магнитного поля с орбитальным и спиновым угловыми моментами электрона. Если умножить уравнение (15.121) на постоянную  $-\hbar^2/2M$ , в результате чего оно преобразуется к обычной форме уравнения Шредингера с правильной размерностью энергии, то член, описывающий взаимодействие, можно будет записать в виде  $-\mu \cdot \mathbf{B}$ , где  $\mu = -\mu_B (\mathbf{i} + g_s \mathbf{s})$ . Здесь магнетон Бора определен равенством  $\mu_B = e\hbar/2Mc$ , а спиновый  $g$ -фактор  $g_s$  равен 2. Этот результат согласуется с экспериментальным значением величины  $g_s$ , которая очень близка к 2 (гл. 8, § 4).

Следует подчеркнуть, что мы вовсе не доказали равенство  $g_s = 2$  для любой частицы со спином  $s = 1/2$ . Мы продемонстрировали лишь, что это значение величины  $g_s$  появляется естественным образом. Но всегда можно добавить в гамильтониан дополнительные члены и тем самым получить любое значение величины  $g_s$ . В самом деле, для протона, который также имеет спин  $s = 1/2$ , величина  $g_s$  равна 5,58 в единицах ядерного магнетона. О таком значении  $g_s$  говорят как об «аномальном». Предполагается, что это отклонение от естественного значения  $g_s = 2$  обусловлено внутренним движением частей, составляющих протон. Такие частицы, как электрон и мюон, у которых величина  $g_s$  близка к своему естественному значению, рассматриваются как более элементарные, нежели частицы, у которых отклонение величины  $g_s$  от 2 велико. Даже у электрона  $g_s = 2,0023$ , но это незначительное отклонение находит объяснение в рамках квантовой электродинамики.

## В. Группа Пуанкаре с $s = 0$ , уравнение Клейна—Гордона

Перейдем теперь к волновым уравнениям, которыми описываются свободные частицы, движущиеся с релятивистскими скоростями. Нам нужно построить уравнения, решения которых принадлежат пространствам неприводимых представлений группы Пуанкаре. Сначала мы займемся частицами с ненулевой массой, и нас будут интересовать представления вида  $P^{(k, s)}$ . В данном пункте параграфа мы рассмотрим бесспиновые частицы ( $s = 0$ ), а в п. Г — частицы со спином  $s = 1/2$ .



Представления  $P^{(k, s)}$  характеризуются собственными значениями  $-k^2$  и  $-k^2 s(s+1)$  операторов Казимира  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  и  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$  (§ 4, п. В). Как и в двух предыдущих пунктах, напишем явные дифференциальные выражения для инфинитезимальных операторов:  $\mathbf{P} = -\nabla$ ,  $P_t = -(1/c)(\partial/\partial t)$ ,  $\mathbf{X} = \mathbf{r} \times \nabla$  и  $\mathbf{Y} = ct\nabla + (\mathbf{r}/c)(\partial/\partial t)$ . Тогда из определения (15.72) следует, что оператор  $\hat{\mathbf{W}}$  тождественно равен нулю. При  $k \neq 0$  это означает, что  $s=0$ , и оператор Казимира  $\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  приводит к простому уравнению Клейна—Гордона

$$\left(-\nabla^2 + c^{-2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + k^2\right) |\psi\rangle = 0. \quad (15.122)$$

Если ввести обозначение  $\square^2 = -\nabla^2 + c^{-2} \partial^2/\partial t^2$ , то это уравнение запишется в виде  $(\square^2 + k^2) |\psi\rangle = 0$ , весьма напоминающем уравнение Шредингера (15.117). Но если в случае уравнения Шредингера постоянная  $|k|^2$  связана с энергией:  $E = \hbar^2 |k|^2/2M$ , то постоянная  $k^2$ , входящая в уравнение Клейна—Гордона, связана с массой:  $M = \hbar k/c$ . Уравнение (15.122) имеет решения в виде плоских волн

$$|\psi\rangle = \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - k_t ct)]. \quad (15.123)$$

Мы уже говорили о таких решениях в § 4, п. А. Напомним также, что в § 4, п. Б мы определяли представление  $P^{(k, s)}$  с помощью положительного времениподобного вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ , т. е. вектора, для которого  $k_t > 0$ , так что энергия  $E = \hbar c k_t$  всегда положительна. Таким образом, мы накладываем ограничение на решения уравнения (15.122), которое имеет, очевидно, решения при любом знаке компоненты  $k_t$ .

Как и в классической механике, релятивистский гамильтониан можно обобщить на случай взаимодействия частицы, несущей электрический заряд  $-e$ , с электромагнитным полем, заменив четырехмерный вектор энергии-импульса  $\hat{\mathbf{p}} = (\mathbf{p}, E/c)$  вектором  $\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}/c$ . Здесь  $\mathbf{A}$  — четырехмерный вектор  $\hat{\mathbf{A}} = (\mathbf{A}, \phi)$ , описывающий электромагнитное поле, причем  $\phi$  — обычный скалярный потенциал (гл. 16, § 1, п. В). Следовательно, уравнение Клейна—Гордона модифицируется путем замены  $\partial/\partial t$  на  $\partial/\partial t - ie\phi/\hbar$  и  $\nabla$  на  $\nabla + ie\mathbf{A}/\hbar c$ .

## Г. Группа Пуанкаре с $s = 1/2$ , уравнение Дирака

Чтобы построить волновое уравнение в случае  $s \neq 0$ , мы должны снова обратиться к многокомпонентным волновым функциям, т. е. (на языке теории групп) к построению произведения представлений. Например, рассматривая в п. Б представления  $E(|k|, \pm 1/2)$  группы  $\mathcal{G}_3$ , мы фактически имели дело с произведением представлений  $E(|k|, 0) \otimes E(0, 1/2) \equiv E(|k|, 0) \otimes D^{(1/2)}$ , так что инфинитезимальные операторы представлялись в виде суммы дифференциальных операторов, относящихся к представлению  $E(|k|, 0)$ , и матричных (спиновых) операторов, относящихся к представлению  $D^{(1/2)}$ . Мы установили, что это произведение представлений разлагается на неприводимые представления: оно равно сумме  $E(|k|, 1/2) \oplus E(|k|, -1/2)$ . Теперь мы применим такой же метод для описания представления  $P^{(k, 1/2)}$  группы Пуанкаре и для построения уравнения Дирака.

В случае  $s = 1/2$  естественно начать с произведения представлений вида  $P^{(k, 0)} \otimes L^{(1/2, 0)}$ , где второй сомножитель есть трансляционно-инвариантное представление, соответствующее выбору  $\hat{k} = 0$  (область 6 в § 4, п. Б). Будучи трансляционно-инвариантным, это представление является представлением группы Лоренца  $\mathcal{L}$  (§ 2, п. Д). (Выбор представления  $L^{(0, 1/2)}$  вместо  $L^{(1/2, 0)}$  столь же естествен и приводит к точно таким же результатам.) Базисные векторы пространства такого произведения представлений обозначаются через  $|\hat{k}n\rangle$ , где переменная  $\hat{k}$  относится к представлению  $P^{(k, 0)}$ , а индекс  $n = \pm 1/2$  относится к компонентам вектора в пространстве представления  $L^{(1/2, 0)}$ . Преобразования из группы Пуанкаре в этом базисе имеют вид

$$T(\hat{\epsilon}, L)|\hat{k}, n\rangle = \exp(i\hat{k}' \cdot \hat{\epsilon}) \sum_{n'} L_{n'/n}^{(1/2, 0)} |(L)\hat{k}'n'\rangle, \quad (15.124)$$

где  $\hat{k}' = L\hat{k}$ . Матричные элементы операторов представления  $L^{(1/2, 0)}$  можно получить, исходя из матричных элементов операторов представления  $D^{(1/2)}$ , заметив, что в представлении  $L^{(1/2, 0)}$  инфинитезимальные операторы имеют вид  $X = A + B = -is$  и  $Y = -i(A - B) = -s$ ; мы пользуемся теми же обозначениями, что и в § 2, п. Г, а  $s$  —

обычные спинные матрицы. Но сейчас нам такие детали не понадобятся. Существенным для нас моментом в уравнении (15.124) является факторизация в его правой части, при которой матрицы представления  $L^{(1/2, 0)}$  не зависят от вектора  $\hat{k}$ . Эта ситуация отлична от той, с которой мы имели дело в § 4, п. Б при рассмотрении представления  $P^{(k, 1/2)}$  в базисе  $|\hat{k}^{1/2} m_s\rangle$ . В таком базисе, как следует из формулы (15.59), факторизация также имеется, но вращение  $R'$  зависит от вектора  $\hat{k}$ . Эта зависимость определяется равенствами (15.60) и (15.61). На самом деле мы можем перейти от базиса  $|\hat{k} n\rangle$  к базису  $|\hat{k}^{1/2} m_s\rangle$ , чем доказывается эквивалентность представлений  $P^{(k, 0)} \otimes L^{(1/2, 0)}$  и  $P^{(k, 1/2)}$ . Соответствующее преобразование имеет вид

$$|\hat{k}^{1/2} m_s\rangle = \sum_n L_{nm_s}^{(1/2, 0)}(Q) |\hat{k} n\rangle, \quad (15.125)$$

где  $Q$  — буст, определяемый формулой (15.58). Чтобы убедиться в справедливости соотношения (15.125), заметим, что из него с учетом выражения (15.124) и соотношения, обратного соотношению (15.125), следует равенство

$$\begin{aligned} T(\hat{\epsilon}, L) |\hat{k}^{1/2} m_s\rangle &= \\ &= \exp(i\hat{k}' \cdot \hat{\epsilon}) \sum_n [L^{(1/2, 0)}(L) L^{(1/2, 0)}(Q)]_{nm_s} |\hat{k}' n\rangle = \\ &= \exp(i\hat{k}' \cdot \hat{\epsilon}) \sum_{m'_s} [L^{(1/2, 0)-1}(Q') L^{(1/2, 0)}(L) L^{(1/2, 0)}(Q)]_{m'_s m_s} \times \\ &\quad \times |\hat{k}'^{1/2} m'_s\rangle. \end{aligned}$$

Но поскольку  $L^{(1/2, 0)}$  — представление группы, матрица в правой части последнего равенства есть просто  $L^{(1/2, 0)}(Q'^{-1} L Q)$  и из формулы (15.60) следует, что она в точности равна  $L^{(1/2, 0)}(R') = D^{(1/2)}(R')$ . Таким образом, состояния, определенные соотношением (15.125), имеют правильные трансформационные свойства (15.59).

Итак, базис  $|\hat{k} n\rangle$  допускает простое двухкомпонентное описание частицы со спином  $s = 1/2$ . Волновое уравнение в данном случае — это просто уравнение Клейна — Гордона

$$(\square^2 + k^2) |\psi\rangle = 0 \quad (15.126)$$

для двухкомпонентной волновой функции  $|\psi\rangle$ . Это уравнение обеспечивает наличие в волновой функции, отвечающей произведению представлений, множителя вида (15.123), соответствующего представлению  $\mathbf{P}^{(k, 0)}$ . Заметим, что волновое уравнение (15.126) не содержит спинных операторов и потому не накладывает никаких условий на «направление» вектора  $|\psi\rangle$  в двухкомпонентном пространстве.

Что же касается второго оператора Казимира  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$ , то можно показать, что в представлении  $\mathbf{P}^{(k, 0)} \otimes \mathbf{L}^{(1/2, 0)}$  выполняется равенство  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}} = \frac{3}{4} \hat{\mathbf{p}} \cdot \hat{\mathbf{p}}$  (задача 15.12). Этого и следовало ожидать в представлении  $\mathbf{P}^{(k, 1/2)}$  на основании формулы (15.74). Однако в присутствии электромагнитного поля замена  $\hat{\mathbf{p}}$  на  $\hat{\mathbf{p}} + e\hat{\mathbf{A}}/c$  в выражении для  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}$  приводит к появлению в уравнении Клейна — Гордона нового члена, описывающего взаимодействие электромагнитного поля со спином.

Рассмотренное двухкомпонентное описание частицы со спином  $s = 1/2$  неудовлетворительно по двум причинам. Во-первых, преобразование (15.124) не унитарно (напомним, что представление  $\mathbf{L}^{(1/2, 0)}$  группы Лоренца не унитарно; § 2, п. Д). Унитарность можно восстановить, если путем преобразования (15.125) перейти к исходному базису  $|\hat{\mathbf{k}}^{1/2} m_s\rangle$  пространства представления  $\mathbf{P}^{(k, 1/2)}$ , но при этом мы потеряем факторизацию. Во-вторых, пространство двухкомпонентных волновых функций не инвариантно относительно пространственной инверсии (напомним, что, как мы показали в § 3, пространственная инверсия переводит векторы, преобразующиеся по представлению  $\mathbf{L}^{(1/2, 0)}$ , в векторы, преобразующиеся по представлению  $\mathbf{L}^{(0, 1/2)}$ , и из этих двух представлений группы  $\mathcal{L}$  можно построить одно неприводимое представление  $\mathbf{L}^{(1/2, 0)} \oplus \mathbf{L}^{(0, 1/2)}$  группы  $\mathcal{L}_s$ ). Таким образом, двухкомпонентное описание непригодно для частиц, имеющих определенную четность. Покажем теперь, что от обеих указанных трудностей свободно четырехкомпонентное описание, основанное на произведении представлений  $\mathbf{P}^{(k, 0)} \otimes \mathbf{L}^{(1/2, 0)} \oplus \mathbf{L}^{(0, 1/2)}$ . Переход от четырех спинных состояний к двум, соответствующим представлению  $\mathbf{P}^{(k, 1/2)}$ , осуществляется путем решения уравнения, называемого уравнением Дирака.

Действуя так же, как и в предыдущем случае, введем базисные векторы  $|\hat{k}\alpha\rangle$  пространства представления  $\mathbf{P}^{(k, 0)} \otimes (\mathbf{L}^{(1/2, 0)} \oplus \mathbf{L}^{(0, 1/2)})$ , где индекс  $\alpha = 1, 2, 3, 4$  нумерует компоненты, соответствующие второму сомножителю. Преобразование группы Пуанкаре принимает в этом случае вид

$$T(\hat{\epsilon}, \mathbf{L}) |\hat{k}\alpha\rangle = \exp(i\hat{k}' \cdot \hat{\epsilon}) \sum_{\beta=1}^4 M_{\beta\alpha}(\mathbf{L}) |\hat{k}'\beta\rangle, \quad (15.127)$$

где  $M_{\beta\alpha}$  — матричные элементы  $4 \times 4$ -матрицы

$$M = \begin{pmatrix} \mathbf{L}^{(1/2, 0)} & 0 \\ 0 & \mathbf{L}^{(0, 1/2)} \end{pmatrix}, \quad (15.128)$$

записанной в блочном виде, а  $\mathbf{L}^{(1/2, 0)}$  и т. д. — матрицы  $2 \times 2$ . Ясно, что пространство четырехкомпонентных волновых функций слишком велико для представления  $\mathbf{P}^{(k, 1/2)}$ , на самом деле  $\mathbf{P}^{(k, 0)} \otimes (\mathbf{L}^{(1/2, 0)} \oplus \mathbf{L}^{(0, 1/2)}) = 2\mathbf{P}^{(k, 1/2)}$ . Предыдущее наше двухкомпонентное описание было одним из способов выделения единственного представления  $\mathbf{P}^{(k, 1/2)}$ , но возможны и другие способы смешивания пространств представлений  $\mathbf{L}^{(0, 1/2)}$  и  $\mathbf{L}^{(1/2, 0)}$ . Чтобы выяснить эти возможности, определим сначала некоторые операторы, связывающие между собой эти два двумерных пространства. Из формулы разложения произведения представлений группы  $\mathcal{L}$  на неприводимые [формула (15.37)] следует, что такие операторы должны преобразовываться по представлению  $\mathbf{L}^{(1/2, 1/2)}$  группы  $\mathcal{L}$  и, следовательно, образовывать четырехмерный вектор, который мы обозначим через  $\hat{\gamma}$ . Нетрудно убедиться (задача 15.13), что удовлетворяющий этим требованиям набор операторов задается четырьмя  $4 \times 4$ -матрицами

$$\gamma_i = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma_q = 2 \begin{pmatrix} 0 & s_q \\ s_q & 0 \end{pmatrix}, \quad q = x, y, z, \quad (15.129)$$

где  $1$  есть единичная матрица размера  $2 \times 2$ , а  $s_q$  — спинорные матрицы. Теперь мы можем построить пуанкаре-инвариантный оператор  $\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  и диагонализировать его. Чтобы найти собственные значения этого оператора, заметим, что

$$(\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{P}})^2 = \sum_{ij} q_{ii} \gamma_i \mathbf{P}_i g_{jj} \gamma_j \mathbf{P}_j = \sum_i \gamma_i^2 \mathbf{P}_i^2 + \sum_{i \neq j} g_{ii} g_{jj} \mathbf{P}_i \mathbf{P}_j \times \\ \times (\gamma_i \gamma_j + \gamma_j \gamma_i).$$

Но из определения (15.129) и свойств спинных матриц следует, что  $\gamma$ -матрицы удовлетворяют антиперестановочным соотношениям

$$\gamma_i \gamma_j + \gamma_j \gamma_i = 2g_{ij}. \quad (15.130)$$

Поэтому справедливо равенство  $(\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{P}})^2 = \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}}$ , так что в представлении  $\mathbf{P}^{(k,0)} \otimes (\mathbf{L}^{(1/2,0)} \oplus \mathbf{L}^{(0,1/2)})$  оператор  $(\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{P}})^2$  с точностью до множителя  $-k^2$  равен единичному оператору. Следовательно, возможные собственные значения оператора  $\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{P}}$  равны  $\pm ik$ , и если мы будем классифицировать базисные векторы пространства представления  $\mathbf{P}^{(k,0)} \otimes (\mathbf{L}^{(1/2,0)} \oplus \mathbf{L}^{(0,1/2)})$  в соответствии с этими собственными значениями, то пространство представления распадется на два инвариантных подпространства, в каждом из которых действует представление  $\mathbf{P}^{(k,1/2)}$ . Таким образом, путем ограничения наших волновых функций одним из этих подпространств мы получим базис представления  $\mathbf{P}^{(k,1/2)}$ . Какое именно из этих двух подпространств мы выберем, несущественно. Если мы выберем подпространство, соответствующее собственному значению  $-ik$ , то ограничение, накладываемое на волновую функцию  $|\psi\rangle$ , примет вид

$$[\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{P}} + ik]|\psi\rangle = 0. \quad (15.131)$$

Данное уравнение называют уравнением Дирака. Если мы выразим величину  $k$  через массу  $M$  (§ 7, п. А) как  $k = cM/\hbar$  и возьмем оператор  $\hat{\mathbf{P}}$  в дифференциальной форме  $\hat{\mathbf{P}} = (-\nabla, (1/c)\partial/\partial t)$ , то оно примет более привычный вид

$$\left[ i\hbar \gamma_t \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - Mc^2 \right] |\psi\rangle = 0.$$

Умножая обе части этого уравнения на матрицу  $\gamma_t$  и учитывая, что  $\gamma_t^2 = 1$ , получаем

$$\left[ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar c \gamma_t \boldsymbol{\gamma} \cdot \nabla - Mc^2 \gamma_t \right] |\psi\rangle = 0. \quad (15.132)$$

Далее мы будем рассматривать уравнение Дирака в форме (15.131).

Чтобы найти вид решений уравнения Дирака и показать, что при данном  $\hat{\mathbf{k}}$  имеются два, а не четыре неза-

висимых решения, заметим, что в случае покоящейся частицы  $\hat{\mathbf{P}}|\psi\rangle=0$ ,  $\hat{\mathbf{P}}_t|\psi\rangle=-ik|\psi\rangle$  и уравнение (15.131) принимает вид

$$(\gamma_t - 1)|\psi\rangle = 0. \quad (15.133)$$

Из определения (15.129) матрицы  $\gamma_t$  нетрудно видеть, что любое решение этого уравнения линейно выражается через два следующих решения:

$$\left| \hat{\mathbf{k}}_0 \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} |\hat{\mathbf{k}}_0\rangle, \quad \left| \hat{\mathbf{k}}_0 \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = 2^{-1/2} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} |\hat{\mathbf{k}}_0\rangle, \quad (15.134)$$

где  $|\hat{\mathbf{k}}_0\rangle$  обозначает плоскую волну (15.123) с  $\mathbf{k}=0$ . Для произвольного вектора  $\hat{\mathbf{k}}$  матричное уравнение, отвечающее уравнению (15.133), получается из формул (15.129) и (15.131) с учетом равенства  $\hat{\mathbf{P}}|\psi\rangle=-i\hat{\mathbf{k}}|\psi\rangle$ . Решения при произвольном  $\hat{\mathbf{k}}$  даются линейной комбинацией двух решений вида

$$\left| \hat{\mathbf{k}} \frac{1}{2} \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \{k(k+k_t)\}^{-1/2} \begin{pmatrix} k+k_t+k_z \\ k_x+ik_y \\ k+k_t-k_z \\ -k_x-ik_y \end{pmatrix} |\hat{\mathbf{k}}\rangle, \quad (15.135)$$

$$\left| \hat{\mathbf{k}} \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right\rangle = \frac{1}{2} \{k(k+k_t)\}^{-1/2} \begin{pmatrix} k_x-ik_y \\ k+k_t-k_z \\ -k_x+ik_y \\ k+k_t+k_z \end{pmatrix} |\hat{\mathbf{k}}\rangle.$$

Эти два решения выбраны таким образом, что в нерелятивистском пределе  $\mathbf{k} \rightarrow 0$  они переходят в решения (15.134). Смысл нормировочного множителя мы установим позже. Вспоминая, что четырехкомпонентная структура отвечает представлению  $\mathbf{L}^{(1/2, 0)} \oplus \mathbf{L}^{(0, 1/2)}$ , мы видим, что эти предельные состояния  $|\hat{\mathbf{k}}_0 \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2}\rangle$  соответствуют двум спиновым состояниям  $m_s = \pm \frac{1}{2}$  покоящейся частицы. Можно также показать (задача 15.14), что волновые функции (15.135) получаются из решений для покоящейся

частицы (15.134) действием буста  $Q[\mathbf{b}(\hat{\mathbf{k}})]$  как векторы пространства представления  $P^{(k, 1/2)}$  [формула (15.54)]. В заключение подчеркнем, что, хотя мы имеем дело с пространством четырехкомпонентных функций, частицы с данным значением  $\hat{\mathbf{k}}$  отвечают лишь два независимых состояния (15.135) и любое состояние частицы можно представить в виде линейной комбинации этих решений. Это согласуется со структурой представлений группы Пуанкаре с  $s = 1/2$ , где, как мы видели, при данном значении  $\hat{\mathbf{k}}$  имеется два состояния с  $m_s = \pm 1/2$ .

Ясно, что выбор базиса в пространстве четырехкомпонентных волновых функций является делом соглашения. Наш выбор задан формулой (15.128), т. е. условием, что две первые компоненты преобразуются по представлению  $L^{(1/2, 0)}$ . Мы видели, что в этом базисе даже в нерелятивистском пределе происходит смешивание компонент [формула (15.134)]. При анализе нерелятивистского предела удобнее, очевидно, пользоваться базисом, в котором состояния (15.134) даются векторами-столбцами  $(1, 0, 0, 0)$  и  $(0, 1, 0, 0)$ . В таком базисе первые две компоненты называют «большими», а вторые две — «малыми». Эти названия связаны с поведением компонент волновой функции в нерелятивистском пределе, когда отношение  $|\mathbf{k}|/k$  мало. Мы этим базисом пользоваться не будем.

Решения (15.135) можно было бы получить непосредственно из состояний (15.125) и аналогичных состояний, построенных на основе представления  $L^{(0, 1/2)}$ , образовав состояния с определенной четностью. Если мы обозначим через  $|\hat{\mathbf{k}}n\rangle'$  два состояния, преобразующиеся по представлению  $P^{(k, 0)} \otimes L^{(0, 1/2)}$ , то решения (15.135) по аналогии с решениями (15.125) можно записать в виде

$$|\hat{\mathbf{k}} \frac{1}{2} m_s\rangle = \sum_n \{L_{nm_s}^{(1/2, 0)}(Q) |\hat{\mathbf{k}}n\rangle + L_{nm_s}^{(0, 1/2)}(Q) |\hat{\mathbf{k}}n\rangle'\} 2^{-1/2}. \quad (15.135a)$$

В этом можно убедиться, воспользовавшись выражением  $L^{(1/2, 0)}(Q) = \{(k + k_t) + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{s}\} / \{2k(k + k_t)\}^{1/2}$  и равенством  $L^{(0, 1/2)}[Q(\hat{\mathbf{k}})] = L^{(1/2, 0)}[Q(\hat{\mathbf{k}})]$ , следующим из формулы (15.58) и результатов § 2, п. Д.



Теперь мы покажем, как в пространстве четырехкомпонентных волновых функций определить пуанкаре-инвариантное скалярное произведение. Точнее, мы построим скалярное произведение, относительно которого преобразования, индуцированные в пространстве волновых функций элементами группы Пуанкаре, будут унитарными. Такое скалярное произведение пригодно для вычисления значений физических наблюдаемых. По аналогии с выражением (15.78) запишем произвольную волновую функцию в виде

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \int \psi_{\alpha}(\hat{\mathbf{k}}) |\hat{\mathbf{k}}_{\alpha}\rangle k_t^{-1} dk. \quad (15.136)$$

Но скалярное произведение определим теперь выражением

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_{\alpha, \beta} \int \varphi_{\beta}^*(\hat{\mathbf{k}}) (\gamma_t)_{\beta\alpha} \psi_{\alpha}(\hat{\mathbf{k}}) k_t^{-1} dk, \quad (15.137)$$

отличающимся от формулы (15.79) наличием матрицы  $\gamma_t$ . Эта матрица нужна для того, чтобы скалярное произведение было инвариантным относительно преобразований (15.127). Как мы уже отмечали ранее, матрица  $M$ , входящая в эти преобразования, не унитарна. Поэтому без матрицы  $\gamma_t$  наше скалярное произведение было бы не инвариантным. Для доказательства инвариантности скалярного произведения (15.137) нужно установить справедливость равенства  $M^{\dagger} \gamma_t M = \gamma_t$ , которое с учетом формул (15.128) и (15.129) сводится к равенству  $(L^{(0, 1/2)})^{\dagger} = (L^{(1/2, 0)})^{-1}$ . Это равенство справедливо как для чистых вращений, так и для чистых бустов, а следовательно, и для всех преобразований Лоренца. Набор четырех функций

$$\bar{\psi}_{\alpha}(\hat{\mathbf{k}}) = \sum_{\beta} \psi_{\beta}^*(\hat{\mathbf{k}}) (\gamma_t)_{\beta\alpha} \quad (15.138)$$

называется иногда сопряженным к набору  $\psi_{\alpha}(\hat{\mathbf{k}})$ . Очевидно, что при таком обозначении упрощается запись скалярного произведения (15.137). Альтернативное, хотя и совершенно эквивалентное первому, определение скалярного произведения получается из (15.137) с помощью уравнения Дирака (15.131):

$$\langle\varphi|\psi\rangle = \sum_{\alpha} \int \varphi_{\alpha}^*(\hat{\mathbf{k}}) \psi_{\alpha}(\hat{\mathbf{k}}) k k_t^{-2} dk. \quad (15.139)$$

Если в качестве состояния  $|\psi\rangle$  взять решение в виде плоской волны  $|\tilde{\mathbf{k}}^{1/2} 1/2\rangle$ , заданное соотношением (15.135), то коэффициенты  $\psi_\alpha(\hat{\mathbf{k}})$  будут такими:

$$\psi_1(\hat{\mathbf{k}}) = (k + k_t + k_z) k_t \delta(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \frac{1}{2} \{k(k + k_t)\}^{-1/2},$$

$$\psi_2(\hat{\mathbf{k}}) = (k_x + ik_y) k_t \delta(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \frac{1}{2} \{k(k + k_t)\}^{-1/2},$$

$$\psi_3(\hat{\mathbf{k}}) = (k + k_t - k_z) k_t \delta(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \frac{1}{2} \{k(k + k_t)\}^{-1/2},$$

$$\psi_4(\hat{\mathbf{k}}) = (-k_x - ik_y) k_t \delta(\mathbf{k} - \tilde{\mathbf{k}}) \frac{1}{2} \{k(k + k_t)\}^{-1/2}.$$

Аналогичные выражения получаются в случае  $|\psi\rangle = |\tilde{\mathbf{k}}^{1/2} -1/2\rangle$ . Как нетрудно убедиться, при нашем определении скалярного произведения эти решения взаимно-ортогональны, а их нормировочное соотношение имеет вид

$$\langle \tilde{\mathbf{k}}' \frac{1}{2} m_s | \hat{\mathbf{k}} \frac{1}{2} m_s' \rangle = k_t \delta(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \delta_{m_s m_s'}. \quad [(15.140)]$$

Что же касается пространственной инверсии и четности, то при четырехкомпонентном описании можно воспроизвести результаты § 5. Для этого запишем оператор инверсии в виде  $T(\mathbf{I}) = T_{\text{внутр}}(\mathbf{I}) T_k(\mathbf{I}) T_s(\mathbf{I})$ , где последние два сомножителя соответствуют произведению представлений  $\mathbf{P}^{(k, 0)} \otimes (\mathbf{L}^{(1/2, 0)} \oplus \mathbf{L}^{(0, 1/2)})$ , а  $T_{\text{внутр}}(\mathbf{I})$  — внутренняя четность. Как мы видели ранее, оператор  $T_k(\mathbf{I})$  просто изменяет направление пространственной части вектора  $\hat{\mathbf{k}}$  на противоположное. Из результатов же § 3 следует, что матрица оператора  $T_s(\mathbf{I})$  совпадает с  $\gamma_t$ . Таким образом, для частицы, обладающей четностью  $\pi = \pm 1$ , имеем

$$T(\mathbf{I}) | \hat{\mathbf{k}} \alpha \rangle = \pi \sum_{\beta} (\gamma_t)_{\beta\alpha} | \hat{\mathbf{k}} \beta \rangle. \quad (15.141)$$

Легко показать (задача 15.15), что оператор  $T(\mathbf{I})$  коммутирует с оператором  $\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{p}}$ ; поэтому пространственная инверсия переводит решения уравнения Дирака в его же решения.

Включение в рассмотрение электромагнитного поля достигается, как и ранее (§ 8, п. В), заменой  $\hat{\mathbf{p}}$  на  $\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}/c$ , где, как обычно,  $\hat{\mathbf{p}} = i\hbar \nabla$ .

В заключение данного пункта, посвященного уравнению Дирака, подчеркнем, что в четырехкомпонентном подходе преобразования группы Пуанкаре представляются в виде произведения орбитальной и спиновой частей. Соответственно этому инфинитезимальные операторы имеют вид  $\mathbf{X} = \mathbf{X}_l + \mathbf{X}_s$ ,  $\mathbf{Y} = \mathbf{Y}_l + \mathbf{Y}_s$ , где  $\mathbf{X}_l$ ,  $\mathbf{Y}_l$  — дифференциальные операторы, а  $\mathbf{X}_s$  и  $\mathbf{Y}_s$  —  $4 \times 4$ -матрицы. Из структуры матрицы  $\mathbf{M}$  (15.128) и выражений для инфинитезимальных операторов группы Лоренца (§ 2, п. Г) следует, что

$$(\mathbf{X}_s)_x = \mathbf{A}_x + \mathbf{B}_x = -i \begin{pmatrix} s_x & 0 \\ 0 & s_x \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \gamma_y \gamma_z \text{ и т. д.}, (15.142)$$

$$(\mathbf{Y}_s)_x = -i (\mathbf{A}_x - \mathbf{B}_x) = -i \begin{pmatrix} s_x & 0 \\ 0 & -s_x \end{pmatrix} = -\frac{1}{2} \gamma_t \gamma_x \text{ и т. д.}$$

Чтобы найти  $\mathbf{X}_l$  и  $\mathbf{Y}_l$ , нам необходим явный вид оператора, осуществляющего преобразование от  $|\hat{\mathbf{k}}\rangle$  к  $|\mathbf{L}\hat{\mathbf{k}}\rangle$ , когда преобразование Лоренца  $\mathbf{L}$  близко к тождественному. При этих вычислениях мы можем не принимать во внимание индекс  $\alpha$ . Тогда для произвольного состояния  $|\psi\rangle$  на основании выражения (15.136) получаем, что преобразованное состояние  $|\psi'\rangle$  имеет вид

$$|\psi'\rangle = \int \psi(\hat{\mathbf{k}}) |\mathbf{L}\hat{\mathbf{k}}\rangle k_t^{-1} d\mathbf{k} = \int \psi(\mathbf{L}^{-1}\hat{\mathbf{k}}) |\hat{\mathbf{k}}\rangle k_t^{-1} d\mathbf{k}.$$

При выводе последнего равенства мы произвели замену переменных интегрирования и учли инвариантность элемента объема (§ 4, п. Г). Таким образом, функция  $\psi(\hat{\mathbf{k}})$ , описывающая состояние  $|\psi\rangle$ , переходит при преобразовании Лоренца в  $\psi(\mathbf{L}^{-1}\hat{\mathbf{k}})$ . Если мы положим, как в § 2, п. Г,  $\mathbf{L} = 1 + \Lambda$ , где  $\Lambda$  — инфинитезимальный элемент, и разложим затем функцию  $\psi(\mathbf{L}^{-1}\hat{\mathbf{k}})$  в ряд Тэйлора, то получим

$$(\mathbf{X}_l)_x = - \left( k_y \frac{\partial}{\partial k_z} - k_z \frac{\partial}{\partial k_y} \right) \text{ и т. д.},$$

$$(\mathbf{Y}_l)_x = \left( k_x \frac{\partial}{\partial k_t} + k_t \frac{\partial}{\partial k_x} \right) \text{ и т. д.}$$

Первый из этих операторов есть не что иное, как знакомый нам инфинитезимальный оператор вращения (7.21), записанный в импульсном представлении. Вторая формула дает соответствующее выражение для инфинитезимальных бустов.

Д. Частицы нулевой массы со спином  $|m| = 1/2$ , уравнение Вейля

Теперь нашей задачей является построение факторизованной формы для представления  $P^{(0, m)}$  группы Пуанкаре с  $|m| = 1/2$  (§ 4, п. Б и В). Для этого естественно рассмотреть произведение представлений  $P^{(0, 0)}$  и  $L^{(1/2, 0)}$  (или  $L^{(0, 1/2)}$ ). Подчеркнем, что  $P^{(0, 0)}$  — не тривиальное представление, а представление  $P^{(k, 0)}$  с  $k=0$ , т.е.  $k=0$ , но  $\hat{k} \neq 0$ . Для определенности рассмотрим представление  $P^{(0, 0)} \otimes L^{(0, 1/2)}$ , которое, как мы убедимся, соответствует случаю  $m = -1/2$  и описывает нейтрино. Так как в пространстве представления  $P^{(0, m)}$  каждому значению  $\hat{k}$  соответствует один базисный вектор, а в пространстве представления  $P^{(0, 0)} \otimes L^{(0, 1/2)}$  — два, эти два представления, очевидно, не могут быть эквивалентными. Но мы постараемся построить пространство первого представления из векторов пространства второго. Если мы, как и в § 4, п. Б, обозначим базисные векторы пространства представления  $P^{(0, m)}$  через  $|\hat{k}m\rangle$ , а базисные векторы для  $P^{(0, 0)} \otimes L^{(0, 1/2)}$  через  $|\hat{k}\alpha\rangle_0$ , где  $\alpha = \pm 1/2$ , то, как мы покажем,

$$|\hat{k} - 1/2\rangle = \sum_{\alpha} L_{\alpha - 1/2}^{(0, 1/2)} (R_{xy} Q_z) |\hat{k}\alpha\rangle_0, \quad (15.143)$$

где (§ 4, п. Б) преобразование Лоренца  $R_{xy} Q_z$  переводит вектор  $(0, 0, 1, 1)$  в вектор  $\hat{k}$ . Это выражение аналогично выражению (15.125) и непосредственно обобщается на случай произвольного отрицательного  $m$ . При  $m = +1/2$  нужно использовать представление  $L^{(1/2, 0)}$ . Причины этого будут изложены ниже. Доказательство соотношения (15.143) аналогично доказательству соотношения (15.125). Имеем

$$\begin{aligned} T(\hat{e}, L) |\hat{k} - \frac{1}{2}\rangle &= \exp(i\hat{k}' \cdot \hat{e}) \times \\ &\times L_{-1/2 - 1/2}^{(0, 1/2)} [(R'_{xy} Q'_z)^{-1} L R_{xy} Q_z] |\hat{k}' - \frac{1}{2}\rangle. \end{aligned} \quad (15.144)$$

Отсутствие суммирования в выражении (15.144) связано с тем, что элемент группы  $(R'_{xy} Q'_z)^{-1} L R_{xy} Q_z$  принадлежит подгруппе  $\mathcal{G}_2$  (§ 4, п. Б), инфинитезимальные операторы которой даются выражениями (15.62):  $X_z, X_x - Y_y, X_y + Y_x$ . Но в представлении  $L^{(0, 1/2)}$  справедливо равенство  $X = -iY$ ,

так что  $X_x - Y_y = X_x - iX_y$ , а  $X_y + Y_x = i(X_x - iX_y)$ . Но оба эти оператора являются понижающими по отношению к величине  $m$  и поэтому не дают вклада при  $m = -1/2$ . Это приводит к тому, что ненулевой вклад дает лишь инфинитезимальный оператор  $X_z$  группы  $\mathcal{G}_2$ . В результате выражение (15.144) сводится к простому преобразованию (15.68) для вектора  $|\hat{\mathbf{k}} - 1/2\rangle$ .

Покажем теперь, как к результату (15.143) можно прийти, используя в качестве условия для двухкомпонентных волновых функций некоторое волновое уравнение. Напомним (§ 4), что представление  $\mathbf{P}^{(0, m)}$  характеризуется уравнением [формула (15.76)]  $(\hat{\mathbf{W}} + im\hat{\mathbf{P}})|\psi\rangle = 0$  и, кроме того,  $\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}} = \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}} = 0$ . Ясно, что представление  $\mathbf{P}^{(0, 0)} \otimes \mathbf{L}^{(0, 1/2)}$  удовлетворяет второй паре уравнений. Уравнение же  $(\hat{\mathbf{W}} + im\hat{\mathbf{P}})|\psi\rangle = 0$ , которое является  $2 \times 2$ -матричным уравнением, есть искомое условие для волновых функций. Чтобы найти матричную составляющую оператора  $\hat{\mathbf{W}}$ , воспользуемся определением (15.72) оператора  $\hat{\mathbf{W}}$ , а также двумя последними строками и столбцами выражения (15.142) для матричной составляющей операторов  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Y}$ . (Напомним, что дифференциальная часть оператора  $\hat{\mathbf{W}}$  тождественно равна нулю; § 8, п. В.) Тогда условие (15.76) принимает вид

$$\{m\mathbf{P}_t - \mathbf{P} \cdot \mathbf{s}\} |\psi\rangle = 0, \quad (15.145)$$

$$\{m\mathbf{P} - \mathbf{P}_t \mathbf{s} - i\mathbf{P} \times \mathbf{s}\} |\psi\rangle = 0. \quad (15.145a)$$

Мы получили систему четырех уравнений, поскольку уравнение (15.76) связывает четырехмерные векторы. Однако при  $m = -1/2$  уравнение (15.145a) на самом деле является следствием уравнения (15.145). В этом можно убедиться, умножив последнее уравнение на  $\mathbf{s}$ . Следовательно, условию, которому должны удовлетворять волновые функции в случае  $m = -1/2$ , есть просто уравнение (15.145), называемое уравнением Вейля. Если подставить в него дифференциальные выражения для компонент оператора  $\hat{\mathbf{P}}$ , то оно принимает более привычный вид

$$\left\{ \frac{\partial}{\partial t} - 2c \nabla \cdot \mathbf{s} \right\} |\psi\rangle = 0. \quad (15.146)$$

Для построения решений с  $m = +1/2$ , которые соответствуют антинейтрину (гл. 16, § 3, п. Ж), следует воспользоваться представлением  $L^{(1/2, 0)}$ , а в остальном метод остается неизменным.

Вернемся к уравнению (15.145) и рассмотрим его решения в виде плоских волн. Для этого заменим оператор  $\hat{\mathbf{P}}$  величиной  $-i\hat{\mathbf{k}}$ . В этом случае, используя явный вид матриц  $\mathbf{s}$ , нетрудно решить уравнение (15.145). Единственное с точностью до нормировки решение имеет вид

$$|\hat{\mathbf{k}} - \frac{1}{2}\rangle = \{2(k_t + k_z)\}^{-1/2} \begin{pmatrix} -k_x + ik_y \\ k_t + k_z \end{pmatrix} |\hat{\mathbf{k}}\rangle. \quad (15.147)$$

Единственность решения согласуется со свойствами представления  $\mathbf{P}^{(0, -1/2)}$ , в котором данному значению  $\hat{\mathbf{k}}$  отвечает единственный базисный вектор. В нашем случае мы также имеем единственный допустимый вектор  $|\hat{\mathbf{k}} - 1/2\rangle$ , выраженный, однако, через двухкомпонентную волновую функцию. Фактически уравнение (15.145) можно записать в виде  $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{s})|\psi\rangle = m|\mathbf{k}||\psi\rangle$ . Это значит, что  $|\psi\rangle$  является собственным вектором проекции оператора спина на направление  $\mathbf{k}$ , соответствующим собственному значению  $m$ . Если учесть явный вид матриц представления  $L^{(0, 1/2)}$  (§ 2, п. Д), то окажется, что уравнения (15.143) и (15.147) совпадают.

К таким же результатам можно прийти и в рамках четырехкомпонентного дираковского описания. Для этого нужно перейти к пределу при  $k \rightarrow 0$  и наложить дополнительное условие  $(\hat{\mathbf{W}} + im\hat{\mathbf{P}})|\psi\rangle = 0$  с  $m = -1/2$ . Снова ограничиваясь временной компонентой этого уравнения и привлекая выражение (15.142) для оператора  $\mathbf{X}$ , получаем

$$(1 + \gamma_5)|\psi\rangle = 0, \quad (15.148)$$

где для удобства введено обозначение  $\gamma_5 = i\gamma_t\gamma_x\gamma_y\gamma_z$ . Как нетрудно убедиться, матрица  $\gamma_5$  имеет вид  $\gamma_5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ , где  $\pm 1$  — единичные  $2 \times 2$ -матрицы. Поэтому условие (15.148) попросту выделяет векторы  $|\psi\rangle$  с равными нулю первой и второй компонентами. Другими словами, мы

возвращаемся к представлению  $P^{(0,0)} \otimes L^{(0,1/2)}$ , использованному выше.

Решения уравнения Вейля составляют подмножество множества решений уравнения Дирака при  $k \rightarrow 0$ . Поэтому при определении скалярного произведения для решений уравнения Вейля мы можем использовать результаты, полученные нами при анализе скалярного произведения для решений уравнения Дирака. Скалярное произведение  $\langle \phi | \psi \rangle$ , записанное в форме (15.137), в данном случае не годится, поскольку для решений уравнения Вейля оно равно нулю. Однако небольшая модификация эквивалентной формы скалярного произведения (15.139), заключающаяся в устранении инвариантной константы  $k$ , приводит к ненулевому скалярному произведению для решений уравнения Вейля. На самом деле эту константу можно было бы устранить уже из обоих предыдущих выражений для  $\langle \phi | \psi \rangle$ . Заметим, что теперь суммирование в формуле (15.139) распространяется лишь на значения  $\alpha=3$  и  $\alpha=4$ , поскольку первые две компоненты тождественно равны нулю. Нормировочный множитель в решении (15.147) выбран таким образом, что  $\langle \hat{k}'m | \hat{k}m \rangle = k_t \delta(k' - k)$ .

Заметим, что с учетом равенства  $k_t = |k|$ , которое выполняется в случае нулевой массы, решение (15.147) и решение (15.119) для евклидовой группы очень схожи между собой. Это и естественно, [если учесть интерпретацию, принятую нами в § 7, п. Б, согласно которой частицы с нулевой массой вращаются вокруг направления своего движения. Чтобы проиллюстрировать это, положим  $k_x = k_y = 0$ , а  $k_z > 0$ , так что  $k_t = k_z$  и  $|\hat{k} - 1/2\rangle \propto \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} |\hat{k}\rangle$ . Таким образом, проекция спина на направление движения отрицательна. Если же положить  $k_x = k_y = 0$ , а  $k_z < 0$ , так что  $k_t = -k_z$ , то  $|\hat{k} - 1/2\rangle \propto \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} |\hat{k}\rangle$ . В этом случае проекция спина на ось  $z$  положительна, но, поскольку частица движется теперь вдоль оси  $z$  в отрицательном направлении, проекция спина на направление движения снова отрицательна.

# Е. Частицы нулевой массы со спином $|m|=1$ , уравнения Максвелла

В этом случае мы будем близко следовать методу п. Д, заменив  $m=1/2$  на  $m=1$  и используя представление  $\mathbf{P}^{(0,0)} \otimes \mathbf{L}^{(1,0)}$ . В результате мы получим пространство трехкомпонентных функций и должны будем использовать условие  $(\hat{\mathbf{W}} + im\hat{\mathbf{P}})|\psi\rangle = 0$  с  $m=1$ . При построении  $3 \times 3$ -матриц, входящих в выражение для оператора  $\hat{\mathbf{W}}$ , мы должны использовать теперь матрицы  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Y}$  в представлении  $\mathbf{L}^{(1,0)}$ . Но поскольку в этом представлении справедливо равенство  $\mathbf{B}=0$  (§ 2, п. Г), из формулы (15.33) следует, что  $\mathbf{Y}=i\mathbf{X}$ . В свою очередь матрицы инфинитезимальных вращений  $\mathbf{X}$  в представлении  $\mathbf{L}^{(1,0)}$  совпадают с такими же матрицами в представлении  $\mathbf{D}^{(1)}$  группы  $\mathcal{R}_3$ . Таким образом, матрицы  $\mathbf{X}$  даются формулами (7.24), откуда получаются также и выражения для матриц  $\mathbf{Y}$  и  $\hat{\mathbf{W}}$ . Имеются два стандартных базиса представления  $\mathbf{D}^{(1)}$ . Мы предпочитаем использовать декартов базис из формулы (8.15). Как и ранее, система четырех уравнений  $(\hat{\mathbf{W}} + i\hat{\mathbf{P}})|\psi\rangle = 0$  является до некоторой степени избыточной. После несложных преобразований эти уравнения с помощью векторных обозначений можно записать в компактном виде

$$i\mathbf{P}_t|\psi\rangle = -\mathbf{P} \times |\psi\rangle, \quad (15.149)$$

$$\mathbf{P} \cdot |\psi\rangle = 0, \quad (15.150)$$

где трехкомпонентная волновая функция представлена в виде вектора  $|\psi\rangle$ . В конфигурационном пространстве с учетом явного вида дифференциального оператора  $\hat{\mathbf{P}}$  получаем

$$\text{rot}|\psi\rangle = \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} |\psi\rangle,$$

$$\text{div}|\psi\rangle = 0.$$

Если взять базис из плоских волн, так что при фиксированном значении  $\hat{\mathbf{k}}$  решение имеет вид

$$\psi = \begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} |\hat{\mathbf{k}}\rangle,$$



то после замены  $\hat{\mathbf{P}} \equiv -i\hat{\mathbf{k}}$  уравнения (15.149) и (15.150) становятся матричными уравнениями для коэффициентов  $a$ ,  $b$  и  $c$ . Выбрав для определенности вектор  $\mathbf{k}$ , направленный вдоль оси  $z$ , так что  $k_z = k_t$ , мы увидим, что структура решения  $|\psi\rangle$  определяется вектором

$$\begin{pmatrix} a \\ b \\ c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Поскольку этот вектор ортогонален направлению движения  $\mathbf{k}$ , решение называют «поперечным». Это, конечно, общее свойство, следующее непосредственно из уравнения (15.150). Как и следовало ожидать в случае  $m=1$ , наше решение описывает состояние с положительной спиральностью, т. е. со спином  $1$ , направленным в направлении движения частицы.

Чтобы перейти к спиральности  $m=-1$ , достаточно лишь простой замены знака. В природе фотоны (частицы, ответственные за электромагнитное взаимодействие) имеют нулевую массу и спиральность  $m=\pm 1$ . Следовательно, их движение описывается уравнениями Максвелла, приведенными выше (см. также гл. 16, § 3, п. Ж).

## ЛИТЕРАТУРА

Подробное изложение специальной теории относительности и ссылки на оригинальные работы можно найти в книге:

1. *Muirhead H.*, *The Special Theory of Relativity*, Macmillan, London, 1973.

Строгая теория групп Лоренца и Пуанкаре весьма сложна; для дальнейшего чтения мы рекомендуем книгу Бернера в литературе к гл. 4 и статью Т. Ньютона в книге:

2. *Kahan T.*, *Theory of Groups in Classical and Quantum Physics*, Oliver and Boyd, Edinburgh, 1965,

а также имеющиеся там ссылки. Оригинальные работы Вигнера включены в книгу:

3. *Dyson F. J.*, *Symmetry Groups in Nuclear and Particle Physics*, Benjamin, New York, 1966.

Изложение применений группы Пуанкаре, включающее подробное обсуждение фазовых множителей, дано в книге:

4. *Halpern F. R.*, *Special Relativity and Quantum Mechanics*, Prentice Hall, Englewood Cliffs, New York, 1968.

Волновые уравнения обсуждаются в книге:

5. *Omnes R.*, *Introduction to Particle Physics*, Wiley-Interscience, London, 1969.

Удобная сводка результатов, касающихся групп Лоренца, Пуанкаре и их представлений, дана в книге:

6. *Lomont J. S., Applications of Finite Groups, Academic Press, New York, 1959.*

Описание представлений группы Лоренца можно найти в книгах<sup>1)</sup>:

7. *Гельфанд И. М., Минлос Р. А., Шапиро З. Я.* Представления группы вращения и группы Лоренца. — М.: Физматгиз, 1958.

8. *Наймарк М. А.* Линейные представления группы Лоренца. — М.: Физматгиз, 1958.

## ЗАДАЧИ

- 15.1. Записав операторы сдвига и вращения в виде  $P(\rho) = 1 + \xi P_x + \eta P_y + \zeta P_z$  и  $R(a) = 1 + \sum_q a_q X_q$  при малых значениях параметров  $\rho$  и  $a$ , с учетом формул (15.5) и (7.22) выведите перестановочные соотношения (15.15). (Нужно удерживать лишь члены первого порядка по  $a$  и  $\rho$ .)
- 15.2. Исходя из определения (15.23) матриц преобразований Лоренца, покажите, что последние образуют группу.
- 15.3. Исходя из формулы (15.26), покажите, что матричный элемент  $Q_{yt}$  буста равен  $-u_y \operatorname{sh} b$ .
- 15.4. Покажите, что "если  $ct > z$ , то не существует собственного преобразования Лоренца, переводящего точку  $(0, 0, z, ct)$  в точку  $(0, 0, z, -ct)$ ".
- 15.5. Выпишите матрицы  $A_z$  и  $B_z$  в представлении  $L^{(1/2, 1/2)}$ , используя базис  $e_{mm'}^{1/2, 1/2}$ . Выведите выражения для матриц  $X_z$  и  $Y_z$  и покажите, что при подходящем выборе базиса они согласуются с формулой (15.30).
- 15.6. Покажите, что если оператор трансляции  $P(\hat{e})$  [формула (15.48)] выразить через компоненты  $\hat{e}_i$  вектора  $\hat{e}$  относительно нового базиса:  $\hat{e}'_i = L \hat{e}_i$ , то соответствующие инфинитезимальные операторы  $\bar{P}_i$  будут связаны с исходными операторами  $P_i$  обычным соотношением  $\bar{P}_i = \sum_j (L^{-1})_{ij} P_j$ , т. е. операторы  $P_i$  преобразуются как компоненты четырехмерного вектора. [Воспользуйтесь формулой (15.23) и выражением для величин  $\varepsilon_i$ , приведенным перед ней.]
- 15.7. Исходя из формулы (15.53) для бесконечно малых  $a$ ,  $b$  и  $\hat{e}$ , формулы (15.48), а также выражения (15.30) для матрицы  $\Lambda = L - 1$ , выведите перестановочные соотношения (15.69).
- 15.8. На основании перестановочных соотношений (15.32) и (15.69) покажите правильность равенства (15.72).
- 15.9. На том основании, что компоненты  $P_i$  четырехмерного вектора  $\hat{P}$  удовлетворяют соотношению  $T(L) P_i T^{-1}(L) = \sum_j (L^{-1})_{ij} P_j$  и

<sup>1)</sup> Добавлено при переводе. — Прим<sup>2</sup> ред.

такому же соотношению удовлетворяют компоненты четырехмерного вектора  $\hat{\mathbf{W}}$ , выведите, что из уравнения (15.76) следует уравнение  $(\hat{\mathbf{W}} + im\hat{\mathbf{P}})|\hat{\mathbf{k}}m\rangle = 0$ , где  $|\hat{\mathbf{k}}m\rangle = T(L)|\hat{\mathbf{k}}_0m\rangle$ .

15.10. Исходя из соотношения  $\Gamma^2|\psi\rangle = \exp(i\alpha)|\psi\rangle$ , покажите, что  $\exp(i\alpha) = \pm 1$ . (Рассмотрите действие оператора  $\Gamma^2$  на состояние  $|\psi\rangle + |\phi\rangle$ , где  $|\phi\rangle = \Gamma|\psi\rangle$ , и учтите антиунитарность оператора  $\Gamma$ .)

15.11. Покажите, что в матричной записи оператор  $2s \times 1$  имеет вид

$\begin{pmatrix} l_z & l_- \\ l_+ & -l_z \end{pmatrix}$  и что поэтому собственные векторы  $|jm\rangle$  уравнения (15.116) имеют вид, указанный в тексте.

15.12. Исходя из выражений (15.33), покажите, что в представлении  $L^{(1/2, 0)}$  справедливо равенство  $\mathbf{X} = i\mathbf{Y} = -i\mathbf{s}$  и, таким образом, из выражения (15.72) следует, что  $\mathbf{W}_t^2 = 1/4\mathbf{P}^2$ ,  $\mathbf{W}^2 = 1/2\mathbf{P}^2 + 3/4\mathbf{P}_t^2$ , так что  $(\hat{\mathbf{W}} \cdot \hat{\mathbf{W}}) = 3/4(\hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{P}})$ .

15.13. Покажите, что матрица  $\gamma_t$ , даваемая формулой (15.129), коммутирует с матрицами  $X_q$  и поэтому преобразуется как временная компонента вектора в представлении  $L^{(1/2, 1/2)}$ . С помощью соотношений (15.69) выведите из  $\gamma_t$  остальные три компоненты  $\gamma_q$ .

15.14. Исходя из  $4 \times 4$ -матриц оператора  $\mathbf{Y}$  в базисе представления  $L^{(1/2, 0)} \oplus L^{(0, 1/2)}$ , покажите, что конечный буст  $Q(\mathbf{b}) = \exp(\mathbf{b} \cdot \mathbf{Y})$  имеет вид  $\text{ch}^{1/2}b + 2b^{-1}(\mathbf{b} \cdot \mathbf{Y}) \text{sh}^{1/2}b$ . На этом основании выведите решения (15.135) из решений (15.134), взяв для этого значение величины  $b(\hat{\mathbf{k}})$ , приведенное после формулы (15.58).

15.15. Покажите, что  $\gamma_t \gamma_q \gamma_t^{-1} = -\gamma_q$  и, следовательно, оператор  $T(l)$ , выражение для которого дано перед формулой (15.141), коммутирует с оператором  $(\hat{\gamma} \cdot \hat{\mathbf{P}})$ .

## ЧАСТИЦЫ, ПОЛЯ И АНТИЧАСТИЦЫ

В предыдущей главе мы ввели понятия импульса, энергии, массы и спина, исходя лишь из свойств представлений группы Пуанкаре. Мы работали в алгебраическом формализме векторов состояния, принятом в квантовой механике, и связывали элементарные частицы с неприводимыми представлениями этой группы. Определяя эти понятия, мы не пользовались каким-либо фундаментальным уравнением, подобным уравнению Шредингера, которое было главным при обсуждении симметрии в первых двенадцати главах. Более того, в гл. 15, § 8 нам удалось вывести волновые уравнения из заранее заданных трансформационных свойств. Но все это относится лишь к свободным частицам, а при переходе к взаимодействующим частицам требуется еще какая-то динамическая основа. Такой основой, по-видимому, достаточно универсальной, могут служить лагранжева теория и эквивалентная ей гамильтонова теория, покоящиеся на принципе Гамильтона. В своей простейшей форме принцип Гамильтона применим лишь к движению частиц в нерелятивистской механике. Но он естественным образом обобщается и на релятивистскую классическую механику частиц. При описании же электромагнитных явлений его обобщение должно включать также понятие взаимодействия с полем и поведение самого поля. И наконец, при обобщении этого принципа на квантовую механику, где понятия частиц и полей объединяются, необходимо вводить «античастицы». Это приводит нас к тому разделу квантовой теории поля, где осталось много нерешенных проблем. Поэтому данная глава в большей мере, чем предыдущие, носит характер неоконченности.

## § 1. КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА ЧАСТИЦ

## А. Лагранжева теория

Движение частиц в классической механике подчиняется принципу наименьшего действия, т. е. принципу Гамильтона. Согласно этому принципу, для любой механической системы можно определить функцию Лагранжа  $L(q_i, \dot{q}_i, t)$ , которая зависит от координат  $q_i$ , их производных  $\dot{q}_i$  по времени и от самого времени. Движение системы определяется теми функциями  $q_i(t)$ , для которых интеграл

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt \quad (16.1)$$

минимален при любых временах  $t_1$  и  $t_2$ . В этом состоит вариационный принцип. В точке минимума (или по крайней мере экстремума) изменение величины  $S$  при малых изменениях формы любой из функций  $q_i(t)$  должно быть равно нулю. Мы запишем это условие так:  $\delta S = 0$ . Методами вариационного исчисления из условия  $\delta S = 0$  можно вывести уравнения Лагранжа

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0. \quad (16.2)$$

При заданной форме лагранжиана  $L$  это — система дифференциальных уравнений для координат  $q_i(t)$  как функций времени. Уравнений столько же, сколько координат, и, задав начальные условия, можно найти единственное решение для  $q_i(t)$ . Следовательно, движение системы полностью определяется лагранжианом. Одна система отличается от другой формой лагранжиана  $L$  как функции переменных  $q_i, \dot{q}_i$  и  $t$ .

## Б. Гамильтонова теория

Лагранжева теория имеет дело с координатами и скоростями. Но иногда удобнее работать с координатами и импульсами, особенно когда речь идет о симметрии или о связи между классической и квантовой механиками. И существует другая теория, гамильтонова (полностью эквивалентная лагранжевой), в которой используются

импульсы, а не координаты. Сначала введем обобщенные импульсы  $p_i$ :

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i}. \quad (16.3)$$

На основании уравнения Лагранжа (16.2) дифференциал  $dL$  можно записать в виде

$$\begin{aligned} dL &= \sum_i \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i + \sum_i \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt = \\ &= \sum_i \dot{p}_i dq_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i + \frac{\partial L}{\partial t} dt. \end{aligned}$$

Но

$$d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i\right) = \sum_i \dot{q}_i dp_i + \sum_i p_i d\dot{q}_i;$$

таким образом, разность

$$d\left(\sum_i p_i \dot{q}_i - L\right) = \sum_i \dot{q}_i dp_i - \sum_i \dot{p}_i dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt \quad (16.4)$$

не содержит дифференциалов  $d\dot{q}_i$  скоростей. Значит, величина  $\sum_i p_i \dot{q}_i - L$  не содержит скоростей в явном виде; мы назовем ее гамильтонианом и обозначим через  $H$ :

$$H(p_i, q_i, t) = \sum_i p_i \dot{q}_i - L. \quad (16.5)$$

Из уравнения (16.4) получаем

$$\frac{\partial H}{\partial p_i} = \dot{q}_i, \quad \frac{\partial H}{\partial q_i} = -\dot{p}_i. \quad (16.6)$$

Это — уравнения Гамильтона. Если уравнения Лагранжа содержат вторые производные по времени от координат  $q_i$  (поскольку величина  $\partial L / \partial \dot{q}_i$ , вообще говоря, зависит от скоростей  $\dot{q}_i$ ), то в уравнения Гамильтона входят лишь первые производные по времени от переменных  $p_i$  и  $q_i$ . Но теперь число уравнений удвоилось. Естественно, оба метода дают одно и то же решение.

С точки зрения симметрии легко заметить, что если лагранжиан  $L$  (или гамильтониан  $H$ ) не зависит от некоторой координаты  $q_i$ , то соответствующий обобщенный импульс  $p_i$  постоянен, поскольку из уравнений (16.2)

или (16.6) мы получаем  $\dot{p}_i = 0$ . Отметим также, что из уравнения (16.4) следует равенство

$$\frac{dH}{dt} = \sum_i \dot{q}_i \dot{p}_i - \sum_i \dot{p}_i \dot{q}_i - \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial L}{\partial t}. \quad (16.7)$$

Таким образом, если лагранжиан  $L$  (или гамильтониан  $H$ ) не зависит от времени (явно), то гамильтониан  $H$  постоянен. Эта постоянная, связанная с однородностью времени, может быть отождествлена с энергией системы подобно тому, как однородность пространства,  $\partial L / \partial q_i = 0$ , приводит к постоянству импульса  $p_i$ .

При описании колебаний молекул в гл. 6, § 2 мы уже встречались с простым примером использования уравнений Лагранжа.

## В. Примеры из релятивистской механики

Рассмотрим сначала свободную частицу с массой  $M$ . Мы требуем, чтобы действие  $S$  было инвариантным относительно преобразований из группы Пуанкаре, что совпадает с требованием независимости движения от положения, ориентации и скорости равномерного движения всей системы в пространстве. Поскольку интеграл (16.1) может рассматриваться для любых интервалов, должно быть инвариантным само подынтегральное выражение. В обозначениях гл. 15, § 2 координаты частиц записывались так:

$$\hat{\mathbf{e}} = (x, y, z, ct),$$

$$d\hat{\mathbf{e}} = (dx, dy, dz, cdt) = (v_x, v_y, v_z, c) dt,$$

$$\text{т. е. } |d\hat{\mathbf{e}}| = (d\hat{\mathbf{e}} \cdot d\hat{\mathbf{e}})^{1/2} = (c^2 - v^2)^{1/2} dt,$$

где  $v$  — скорость. По построению величина  $|d\hat{\mathbf{e}}|$  инвариантна, и, следовательно, по крайней мере с точки зрения инвариантности выражение  $(c^2 - v^2)^{1/2}$  подходит для роли лагранжиана  $L$ . Величина  $|d\hat{\mathbf{e}}|$  — это интервал между соседними точками  $\hat{\mathbf{e}}$  и  $\hat{\mathbf{e}} + d\hat{\mathbf{e}}$  на траектории частицы в четырехмерном пространстве. Она подобна расстоянию  $ds = (dx^2 + dy^2)^{1/2}$  вдоль кривой в двумерном пространстве. В самом деле, мы видим, что выбор

$$L = -Mc(c^2 - v^2)^{1/2} \quad (16.8)$$

приводит к обычным уравнениям движения частицы массы  $M$ . При таком подходе массу следовало бы определить как постоянную  $M$ , входящую в выражение (16.8) для лагранжиана  $L$ . Пользуясь уравнением Лагранжа (16.2) и отсутствием зависимости лагранжиана  $L$  от переменных  $x, y, z$ , получаем постоянные импульсы  $\partial L / \partial \dot{x}$  и т. д.:

$$p_x = Mv_x (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = \text{const и т. д.}, \quad (16.9)$$

а для энергии

$$\begin{aligned} E = H = \sum_i p_i \dot{q}_i - L &= Mv^2 (1 - v^2/c^2)^{-1/2} + Mc^2 (1 - v^2/c^2)^{1/2} = \\ &= Mc^2 (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = Mc^2 (1 + p^2/M^2/c^2)^{1/2}. \end{aligned} \quad (16.10)$$

Из равенств (16.9) и (16.10) можно вывести обычное соотношение между энергией и импульсом

$$E^2 - p^2 c^2 = M^2 c^4,$$

такое же, как и в квантовом случае [формула (15.94)]. При малых  $v/c$  выражение (16.10) сводится к известному выражению

$$E = Mc^2 + \frac{1}{2} Mv^2, \quad (16.11)$$

содержащему энергию покоя  $Mc^2$  и кинетическую энергию.

В качестве второго простого примера возьмем электромагнитное поле, которое задается векторным потенциалом  $\hat{\mathbf{A}} = (A_x, A_y, A_z, \varphi)$ . Для описания движения в этом поле частицы с зарядом  $e$  мы должны таким образом изменить лагранжиан (16.8), чтобы он содержал  $\hat{\mathbf{A}}$ , но оставался инвариантным. Самый простой инвариант — скалярное произведение

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot d\hat{\mathbf{e}} = (-\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} + c\varphi) dt.$$

Обычные уравнения движения заряженной частицы в электромагнитном поле получаются путем включения именно такого члена с подходящей постоянной  $-e/c$ , так что

$$L = -Mc(c^2 - v^2)^{1/2} + (e/c)(\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}) - e\varphi. \quad (16.12)$$

Теперь обобщенные импульсы имеют следующий вид:

$$p_x = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = Mv_x (1 - v^2/c^2)^{-1/2} + (e/c) A_x, \quad (16.13)$$



а гамильтониан таков:

$$\begin{aligned} H &= Mc^2(1 - v^2/c^2)^{-1/2} + e\varphi = \\ &= Mc^2 \{1 + (\mathbf{p} - e\mathbf{A}/c)^2/M^2c^2\}^{1/2} + e\varphi. \end{aligned} \quad (16.14)$$

Уравнение Лагранжа (16.2) для лагранжиана (16.12) после некоторых алгебраических преобразований переходит в обычное уравнение движения заряда в поле. В нерелятивистском пределе  $v \ll c$  мы получаем уравнение

$$m\ddot{\mathbf{v}} = - (e/c) \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A} - e \operatorname{grad} \varphi + (e/c) \mathbf{v} \times \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (16.15)$$

которое обычно записывается в виде

$$m\ddot{\mathbf{v}} = e\mathbf{E} + (e/c) \mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad (16.16)$$

где

$$\mathbf{E} = - \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}/c - \operatorname{grad} \varphi, \quad \mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}. \quad (16.17)$$

Векторы  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  называются напряженностями электрического и магнитного полей. Величина, стоящая в правой части уравнения (16.16), имеет размерность силы (в левой части стоит произведение массы на ускорение) и называется силой Лоренца.

Дифференциальный оператор  $\square = \left( \partial/\partial x, \partial/\partial y, \partial/\partial z, -\frac{\partial}{\partial ct} \right)$  есть четырехмерный вектор (гл. 15, § 4); следовательно, шестнадцать величин  $\square_i A_j$  преобразуются по представлению  $\mathbf{L}^{(1/2, 1/2)} \otimes \mathbf{L}^{(1/2, 1/2)}$ , равному произведению представлений группы Лоренца. Так как векторы  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  являются первыми производными компонент векторного потенциала  $\hat{\mathbf{A}}$ , они содержат эти шестнадцать величин, и на основании разложения (15.37) произведения представлений можно отождествить сумму  $\mathbf{E} + i\mathbf{B}$  с представлением  $\mathbf{L}^{(1, 0)}$ , а разность  $\mathbf{E} - i\mathbf{B}$  — с представлением  $\mathbf{L}^{(0, 1)}$  (задача 16.1).

Электромагнитное поле проявляется лишь во влиянии, оказываемом на движение заряженной частицы в соответствии с уравнением (16.16). Значит, любые два поля  $\hat{\mathbf{A}}$  с одинаковыми напряженностями  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  с физической точки зрения идентичны. Из уравнений (16.17) мы видим, что векторный потенциал  $\hat{\mathbf{A}}$  определяется неоднозначно. Так, если  $f(\mathbf{r}, t)$  — любая скалярная функция, то вектор-

ный потенциал  $\hat{A}' = (A', \varphi')$ , где

$$A' = A + \text{grad } f, \quad \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t},$$

описывает ту же физическую ситуацию, что и  $\hat{A}$ . Выбор функции  $f$  называется выбором калибровки.

## §2. КЛАССИЧЕСКАЯ МЕХАНИКА ПОЛЕЙ

Понятие поля вводится для описания взаимодействия на расстоянии. Так, если заряд  $e$  помещен в начало координат, а другой заряд  $e$  свободно движется, то можно сказать, что первый заряд создает силовое поле с напряженностью  $e^2/r^2$ , направленное от начала координат, а второй заряд движется в этом поле. В данном случае мы имеем статическое поле, но, вообще говоря, поле, может зависеть также от времени. Кроме того, поле силе подобное рассмотренному выше, имеет в каждой точке направление. Правда, в данном примере направление всегда задается просто вектором  $\mathbf{r}$ , но можно представить себе и более общие ситуации. Поле сил в нашем примере, как хорошо известно, можно характеризовать полем потенциальной энергии  $V(r) = e^2/r$ , и тогда сила  $\mathbf{F}$  определяется по величине и по направлению соотношением  $\mathbf{F} = -\text{grad}V(r)$ . Заметим также, что поле  $V(r)$  не имеет направления и представляет собой пример скалярного поля, тогда как  $\mathbf{F}$  — это пример векторного поля. Малые перемещения  $\mathbf{q}$ , которые мы рассматривали при изучении колебаний молекул в гл. 6, — другой пример векторного поля; правда, такое поле не является функцией непрерывной переменной  $\mathbf{r}$ , вектор смещения зависит лишь от дискретного множества равновесных положений колеблющихся атомов. Ниже мы дадим более точное определение понятий скалярного, векторного и более общих полей.

### А. Преобразования полей

Если при вращении  $\mathbf{R}$  поле  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  преобразуется как  $\varphi'(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}, t)$ , то поле  $\varphi$  называется скалярным по отношению к вращениям. Если же поле имеет  $2s+1$  компонент  $\varphi_m(\mathbf{r}, t)$ , где  $m=s, s-1, \dots, -s$  и  $m$ -я компо-

нента повернутого поля дается соотношением

$$\varphi'_m(\mathbf{r}, t) = \sum_{\tilde{m}'} D_{m\tilde{m}'}^{(s)}(\mathbf{R}) \varphi_{\tilde{m}'}(\mathbf{R}^{-1}\mathbf{r}, t), \quad (16.18)$$

то поле называется тензорным полем  $s$ -го ранга. Это то самое преобразование, которое мы получили в формуле (8.20) для компонент волновой функции со спином  $s$ . Самый известный пример — векторное поле с  $s=1$ . Здесь направление поля в каждой точке пространства определяется тремя компонентами. Можно построить, конечно, поля, являющиеся комбинациями полей с разными  $s$ . При заданном  $s$  поле неприводимо по отношению к группе вращений и преобразуется по неприводимому представлению  $\mathbf{D}^{(s)}$ .

В четырехмерном случае поля можно классифицировать по их поведению при преобразованиях Пуанкаре. Мы могли бы назвать величину  $\varphi(\hat{\mathbf{e}})$  (в обозначениях гл. 15, § 4, п. Б) скалярным полем, если преобразование Пуанкаре дает новое поле  $\varphi'(\hat{\mathbf{e}}) = \varphi(\mathbf{L}^{-1}(\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}}))$ . Тензорные поля можно классифицировать по представлениям  $\mathbf{L}^{(j, j')}$ , которым они принадлежат, в соответствии с естественным обобщением равенства (16.18)

$$\varphi'_{mm'}(\mathbf{e}') = \sum_{\tilde{m}\tilde{m}'} L_{m\tilde{m}', m'\tilde{m}'}^{(j, j')}(\mathbf{L}) \varphi_{\tilde{m}\tilde{m}'}(\mathbf{L}^{-1}(\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}})). \quad (16.19)$$

## Б. Уравнение Лагранжа для полей

Во втором примере в § 1, п. В мы включили поле в лагранжиан, но там поле считалось заданным. Мы рассматривали только движение частицы в заданном поле. Теперь мы посмотрим, как поле может вести себя само по себе, т. е. в свободном пространстве. Более общую и более сложную задачу, когда поле взаимодействует с частицами, движение которых в свою очередь воздействует на поле, мы затронем лишь очень кратко. На основании вариационного принципа (16.1) с подходящим лагранжианом можно вывести уравнения, описывающие поведение поля. Лагранжиан будет зависеть от компонент поля  $\varphi_{mm'}(\hat{\mathbf{e}})$ , а не от координат  $q_i$ . Его можно представить в виде интеграла

по всему пространству. В случае скалярного поля

$$L = \int dV \mathcal{L}(\varphi, \nabla\varphi, \dot{\varphi}), \quad (16.20)$$

где  $\mathcal{L}$  — функция поля  $\varphi$  и его производных  $\nabla\varphi$  по пространственным переменным, а также его производной по времени  $\dot{\varphi} (= \partial\varphi/\partial t)$ . Такая функция называется плотностью лагранжиана. Далее из вариационного принципа  $\delta S = 0$  получаем обобщенное уравнение Лагранжа

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\varphi}} \right) + \nabla \cdot \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \nabla \varphi} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \varphi} = 0, \quad (16.21)$$

которое называется уравнением поля.

Уравнение (16.21) — это уравнение, описывающее изменение поля, так же как уравнение (16.2) — это уравнение движения частицы. Если мы, как обычно, выберем в качестве  $\mathcal{L}$  квадратичную функцию переменных  $\varphi$ ,  $\nabla\varphi$  и  $\dot{\varphi}$ , то уравнение (16.21) для полей  $\varphi(\mathbf{r}, t)$  будет линейным уравнением с частными производными не более второго порядка. Значит, обыкновенные дифференциальные уравнения для координат частицы  $q_i(t)$  (§ 1) заменяются теперь уравнением в частных производных для поля  $\varphi(\mathbf{r}, t)$ . Уравнения поля непосредственно обобщаются на случай тензорных полей.

### Симметрия полей

При построении лагранжианов частиц в § 1, п. В мы пользовались инвариантностью относительно преобразований Пуанкаре подинтегрального выражения  $L dt$  в интеграле действия. Применим тот же принцип к полевым лагранжианам, подобным выражению (16.20). Тогда плотность лагранжиана  $\mathcal{L}$  должна быть инвариантной, поскольку инвариантен элемент объема  $dV dt$ . (Определитель матрицы преобразования Лоренца равен 1.) Иначе говоря, плотность лагранжиана  $\mathcal{L}$  должна удовлетворять уравнению, которое формально можно записать в виде  $\mathcal{L}[\varphi(\hat{\mathbf{e}})] = \mathcal{L}[\varphi'(\mathbf{L}\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{z}})]$ , где производные поля мы для краткости опустили. Скалярное поле, определенное в п. А, удовлетворяет этому требованию, что же касается производ-

ных поля  $\nabla\phi$ ,  $\dot{\phi}$  и тензорных полей, то они должны входить в плотность лагранжиана в виде сумм по компонентам, чтобы плотность была скаляром.

### Законы сохранения

Гамильтониан мы определяем так же, как и в § 1, п. Б. Он тоже будет динамическим инвариантом. В случае полей можно определить плотность гамильтониана формулой

$$\mathcal{H} = \dot{\phi} (\partial \mathcal{L} / \partial \dot{\phi}) - \mathcal{L}.$$

Тогда на основании инвариантности плотности  $\mathcal{L}$  по отношению к временным сдвигам можно доказать, что гамильтониан  $H = \int \mathcal{H} dV$  постоянен. Аналогично, если плотность лагранжиана инвариантна по отношению к пространственным сдвигам, то постоянен вектор  $\mathbf{P}$  с компонентами  $P_q = \int \mathcal{P}_q dV$ , где

$$\mathcal{P}_x = \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} \text{ и т. д.}$$

Доказательство этих результатов намечено в задаче 16.2. Компоненты  $\mathcal{P}_q$  естественно назвать компонентами плотности импульса, поскольку это постоянные величины, возникающие в результате трансляционной инвариантности. Аналогично из инвариантности плотности  $\mathcal{L}$  относительно вращений следует закон сохранения углового момента.

### В. Электромагнитное поле

Рассмотрим в качестве примера электромагнитное поле, которое, как мы убедились в § 1, п. В, описывается четырехмерным векторным потенциалом  $\hat{\mathbf{A}}$  или векторами напряженностей  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$ . Плотность лагранжиана должна быть инвариантной. Для плотности лагранжиана можно было бы выбрать очевидное выражение  $\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}$ . Но такое выражение приводит к тривиальному уравнению для поля, и, кроме того, согласно сказанному в § 1, п. В, лишь производные  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  потенциала  $\hat{\mathbf{A}}$  имеют физический смысл.

В силу того что вектор  $\mathbf{E} + i\mathbf{B}$  преобразуется по представлению  $\mathbf{L}^{(1, 0)}$ , а вектор  $\mathbf{E} - i\mathbf{B}$  — по представлению  $\mathbf{L}^{(0, 1)}$ , выражения  $\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2$  и  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$  лоренц-инвариантны. Последнее выражение не инвариантно по отношению к пространственной инверсии. Поэтому для плотности лагранжиана более предпочтительно первое выражение. Такой выбор согласуется с экспериментом. Обычно полагают

$$\mathcal{L} = \frac{\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2}{8\pi}. \quad (16.22)$$

Мы не можем применить уравнение (16.21) непосредственно, так как оно написано для скалярного поля. Но если в выражении (16.20) заменить поле  $\varphi$  четырехмерным вектором  $\hat{\mathbf{A}}$ , то для каждой из четырех компонент потенциала  $\hat{\mathbf{A}}$  получается уравнение поля типа уравнения (16.21). В силу определения векторов  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  [формула (16.17)] выражение (16.22) для плотности  $\mathcal{L}$  квадратично относительно первых производных потенциала  $\hat{\mathbf{A}}$ . После алгебраических преобразований четыре полевых уравнения принимают следующий вид:

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \operatorname{div} \mathbf{E} &= 0. \end{aligned} \quad (16.23)$$

Это уравнения Максвелла, описывающие поведение поля в отсутствие заряженных частиц. Два других уравнения Максвелла получаются непосредственно из определений (16.17):

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0, \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (16.24)$$

В § 1, п. V мы рассматривали поведение частицы в поле, которое считалось фиксированным, т. е. частица не влияла на само поле. Выше мы описали поведение поля в отсутствие зарядов. В общем случае мы должны учесть, что заряженные частицы действуют на поле. Формально это учитывается путем выбора в качестве плотности лагранжиана суммы члена (16.22), отвечающего полю, и члена типа выражения (16.12), просуммированного по всем присутствующим заряженным частицам. Тогда полу-

чаются уравнения поля, более общие, нежели уравнения (16.23). Они содержат члены, возникающие из-за присутствия в выражении (16.12) потенциала  $\hat{A}$ . Эти члены представляют собой плотность заряда и плотность тока заряженных частиц. Таким образом, движение частиц в соответствии с уравнением (16.16) и поведение самого поля оказываются связанными.

### § 3. КВАНТОВАННЫЕ ПОЛЯ

Классическое понятие поля было введено для описания взаимодействия между частицами. Например, если одна заряженная частица создает поле и это поле действует на другую заряженную частицу, то мы имеем взаимодействие между двумя частицами. Хорошо известно, что движение частиц на малых расстояниях должно описываться квантовой механикой и в соответствии с принципом неопределенности неизбежна некоторая неточность описания. Поэтому при исследовании движения частицы в поле возникает несоответствие между квантовомеханическим описанием частицы и чисто классическим описанием поля. Значит, мы должны ввести квантовое описание поля. Для этого заменяют поле оператором поля и рассматривают матричные элементы последнего, как это обычно делается в квантовой механике. Оператор поля представляет собой линейную комбинацию так называемых оператора рождения и оператора уничтожения квантов поля. Следовательно, в дополнение к частицам, взаимодействующим с помощью поля, мы вводим новые частицы — кванты поля. Например, фотон — это квант электромагнитного поля, а  $\pi$ -мезон есть основной квант поля ядерных сильных взаимодействий. Введение операторов рождения и уничтожения частиц — это не просто математический прием. Такие процессы рождения и уничтожения обычны как для безмассовых фотонов при излучении света, так и для массивных частиц, подобных  $\pi$ -мезону, при высокоэнергетических столкновениях протонов  $p + p \rightarrow p + p + \pi^0$ . Рождение массивной частицы не противоречит инвариантности системы относительно преобразований Пуанкаре (задача 16.4). В общей теории сами взаимодействующие частицы тоже должны рассматриваться как некие поля.

Поэтому в указанном примере должен иметься механизм, допускающий рождение большего числа протонов и  $\pi$ -мезонов, и такие процессы экспериментально наблюдаются.

## А. Вторичное квантование

Рассмотрим теперь алгебраический аппарат, необходимый для описания процессов рождения и уничтожения частиц. Мы уже отмечали в гл. 8, § 6, п. Б, что волновые функции совокупности тождественных частиц либо полностью симметричны, либо полностью антисимметричны по отношению к перестановкам частиц. Установлено, что волновые функции частиц с целым спином (называемых бозонами) симметричны, а частиц с полуцелым спином (называемых фермионами)—антисимметричны. О такой закономерности говорилось также в гл. 5, § 9, и мы объясним эту связь между значением спина и симметрией, т. е. статистикой, в п. Г. В силу полной симметричности или антисимметричности волновых функций, а также в силу симметрии всех физических операторов нумерация частиц не имеет физического значения и служит лишь для выявления этой полезной симметрии. Поэтому неудивительно, что можно построить теорию, в которой номера частиц вовсе не фигурируют, а симметрия обеспечивается определенными правилами умножения операторов рождения и уничтожения частицы.

Для простоты и для определенности рассмотрим случай бозонов со спином, равным нулю. Изменения, необходимые в случае фермионов, мы отметим в конце. На случай частиц с ненулевым спином все обобщается непосредственно. Полное множество одночастичных состояний для частиц заданной массы  $M = \hbar k/c$  обозначим векторами  $|\hat{k}\rangle$ , где длина  $k$  четырехмерного вектора  $\hat{k}$  фиксирована. Симметричное состояние  $n$  частиц можно обозначить вектором состояния  $|\hat{k}_1, \hat{k}_2, \dots, \hat{k}_n\rangle$ , где множество  $n$  аргументов  $\hat{k}_i$  описывает  $n$  состояний, занимаемых частицами (аргументы не обязаны быть все различными). Состояние, в котором нет частиц, называют вакуумом и обозначают вектором  $|0\rangle$ . Он нормирован:  $\langle 0|0\rangle = 1$ . (Обозначение вакуума  $|0\rangle$  не следует путать с вектором  $|\hat{k}\rangle$  одночастичного состояния; согласно сказанному в гл. 15, § 7, п. А,



равенство  $\hat{k}=0$  невозможно для частицы.) В рассматриваемом нами векторном пространстве (называемом пространством Фока) целое неотрицательное число  $n$  не фиксировано и может принимать любые значения. Поэтому мы должны рассматривать число частиц как оператор  $N$ , который в общем случае не обязан быть диагональным, причем число  $n$  — это собственное значение оператора  $N$  в состоянии с  $n$  частицами. Для [того чтобы работать с таким большим векторным пространством, мы должны ввести операторы, связывающие подпространства с разными числами  $n$ . Простейший такой оператор, обозначаемый символом  $a^\dagger(\hat{k})$ , обладает следующим свойством:

$$a^\dagger(\hat{k})|0\rangle = |\hat{k}\rangle. \quad (16.25)$$

Он называется оператором рождения частицы в состоянии  $|\hat{k}\rangle$ . На более общем состоянии с  $n$  частицами он определяется равенством

$$a^\dagger(\hat{k})|\hat{k}_1\hat{k}_2 \dots \hat{k}_n\rangle = C|\hat{k}\hat{k}_1\hat{k}_2 \dots \hat{k}_n\rangle. \quad (16.26)$$

Значение нормировочного множителя  $C$  для нас несущественно. В силу симметрии волновой функции из равенства (16.26) следует, что

$$[a^\dagger(\hat{k}), a^\dagger(\hat{k}')] = 0. \quad (16.27)$$

Оператор  $a(\hat{k})$ , эрмитово-сопряженный оператору  $a^\dagger(\hat{k})$ , должен уменьшать число частиц на единицу. Он называется оператором уничтожения. При действии на вакуум он дает нуль:  $a(\hat{k})|0\rangle = 0$ . Переходя в уравнении (16.27) к сопряженным операторам, получаем

$$[a(\hat{k}), a(\hat{k}')] = 0. \quad (16.28)$$

Как нетрудно убедиться, коммутатор операторов рождения и уничтожения удовлетворяет соотношению

$$\langle 0|[a(\hat{k}), a^\dagger(\hat{k}')] | 0 \rangle = \langle 0|a(\hat{k})a^\dagger(\hat{k}')|0\rangle = \langle \hat{k}|\hat{k}'\rangle,$$

т. е. в вакуумном состоянии мы имеем

$$[a(\hat{k}), a^\dagger(\hat{k}')] = \langle \hat{k}|\hat{k}'\rangle. \quad (16.29)$$

На основании равенства (16.26) можно показать, что это перестановочное соотношение справедливо вообще, а не

только в частном случае вакуумного состояния. При выборе нормировки (15.81) это соотношение принимает вид

$$[a(\hat{k}), a^\dagger(\hat{k}')] = k_t \delta(k - k'). \quad (16.29a)$$

Теперь физические операторы можно выразить через операторы рождения и уничтожения. Например, оператор, не меняющий числа частиц, должен содержать одинаковое число сомножителей из операторов  $a$  и операторов  $a^\dagger$ . В частности, оператор числа частиц дается выражением (задача 16.5)

$$N = \int a^\dagger(\hat{k}) a(\hat{k}) k_t^{-1} dk. \quad (16.30)$$

Как и в гл. 15, § 4, п. Г, область интегрирования охватывает все векторы  $\hat{k}$  фиксированной длины (массы), компонента  $k_t$  которых положительна, т. е.  $k_t = (k^2 + |\mathbf{k}|^2)^{1/2}$ .

В силу симметрии преобразования Пуанкаре не должны изменять число частиц. Значит, если считать вакуум единственным, то он должен быть инвариантным. Поэтому оператор рождения  $a^\dagger(\hat{k})$  должен преобразовываться как одночастичное состояние, т. е. в соответствии с равенством (15.59). Это легко доказать на основании равенства (16.26). В рассматриваемом здесь случае нулевого спина

$$T(\hat{e}, L) a^\dagger(\hat{k}) T^{-1}(\hat{e}, L) = \exp(i\hat{L}\hat{k} \cdot \hat{e}) a^\dagger(L\hat{k}). \quad (16.31)$$

На случай фермионов, когда вместо симметричных волновых функций должны рассматриваться антисимметричные, результаты этого пункта переносятся путем простой замены коммутатора  $[A, B] = AB - BA$  антикоммутатором  $[A, B]_+ = AB + BA$ . В необходимости такой замены можно убедиться при переходе от равенства (16.26) к равенству (16.27).

## Б. Операторы полей

Найдем линейную комбинацию операторов  $a^\dagger(\hat{k})$ , которой соответствует рождение частицы не в состоянии  $|\hat{k}\rangle$ , а в точке  $\hat{e}$  пространства-времени. Этот новый оператор мы обозначим символом  $\phi^\dagger(\hat{e})$  и будем называть оператором поля. По определению преобразованный оператор

должен быть оператором в преобразованной точке  $\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{e}}$ , т. е. мы потребуем, чтобы выполнялось равенство

$$T(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) \varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) = \varphi^\dagger(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}}). \quad (16.32)$$

На основании свойства (16.31) легко убедиться в том, что необходимая линейная комбинация операторов  $\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}})$  имеет вид

$$\varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}) = \int \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) k_{\hat{\mathbf{t}}}^{-1} d\mathbf{k} (2\pi)^{-3/2} 2^{-1/2}. \quad (16.33)$$

Здесь взят обычный нормировочный множитель. Проверка проводится просто:

$$\begin{aligned} T(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) \varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) &= \\ &= \int \exp[i(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}} + \mathbf{L}\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}})] \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{L}\hat{\mathbf{k}}) k_{\hat{\mathbf{t}}}^{-1} d\mathbf{k} (2\pi)^{-3/2} 2^{-1/2} = \\ &= \int \exp[i\mathbf{L}\hat{\mathbf{k}} \cdot (\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}})] \mathbf{a}^\dagger(\mathbf{L}\hat{\mathbf{k}}) k_{\hat{\mathbf{t}}}^{-1} d\mathbf{k} (2\pi)^{-3/2} 2^{-1/2} = \\ &= \int \exp[i\hat{\mathbf{k}} \cdot (\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}})] \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) k^{-1} d\mathbf{k} (2\pi)^{-3/2} 2^{-1/2} = \\ &= \varphi^\dagger(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}}). \end{aligned}$$

Здесь мы перешли к новой переменной интегрирования, а именно  $\mathbf{L}\hat{\mathbf{k}} \rightarrow \hat{\mathbf{k}}$ , и воспользовались инвариантностью элемента объема  $k_{\hat{\mathbf{t}}}^{-1} d\mathbf{k}$  (гл. 15, § 4, п. Г). Вспоминая изложенное в § 2, п. А, можно сказать, что операторы  $\varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})$  описывают скалярное поле. [В формулу (16.32) входит вектор  $\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{e}}$  вместо вектора  $\mathbf{L}^{-1}\hat{\mathbf{e}}$ , фигурирующего в § 2, п. А. Это объясняется тем, что  $\varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})$  — оператор, а величина  $\varphi(\hat{\mathbf{e}})$  в § 2, п. А есть значение классического поля в точке  $\hat{\mathbf{e}}$ .]

В случае ненулевого спина можно совершенно аналогично построить операторы поля  $\varphi_\alpha(\hat{\mathbf{e}})$  с несколькими компонентами  $\alpha$ , которые преобразуются так:

$$T(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) \varphi_\alpha(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) = \sum_{\beta} M_{\alpha\beta}^{-1}(\mathbf{L}) \varphi_\beta(\hat{\mathbf{L}}\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}}), \quad (16.34)$$

причем  $\mathbf{M}$  — представление группы Лоренца. Это равенство означает возможность факторизации преобразования индексов  $\alpha$  и аргументов полей, т. е. матрица  $\mathbf{M}$  не зависит от вектора  $\hat{\mathbf{e}}$ . (О такой же факторизации говорилось в связи с уравнением Дирака в гл. 15, § 8, п. Г.) Значит,

в случае массивной частицы со спином  $s = 1/2$  поле типа (16.34) должно иметь четыре компоненты. Случай ненулевого спина мы кратко рассмотрим в п. Ж.

## В. Физический смысл операторов поля

Прежде чем продолжить анализ следствий симметрии для квантовых полей, мы продемонстрируем, каким образом используются в физической теории операторы поля.

Обычно в квантовой механике операторы, представляющие физические наблюдаемые, не зависят от времени, а эволюция системы во времени описывается волновой функцией. Но нужно иметь в виду, что можно пользоваться также волновой функцией, которая от времени не зависит. Тогда эволюция системы во времени будет определяться явной зависимостью операторов от времени. Первый способ описания называется шредингеровской, а второй — гейзенберговской картиной. В релятивистской квантовой механике более удобна гейзенберговская картина, поскольку релятивистскую инвариантность легче определить для операторов, зависящих от четырех координат  $x, y, z$  и  $t$ . Отсутствие зависимости волновой функции от времени не является каким-либо недостатком схемы. Волновой функцией определяются «начальные условия» задачи. С математической точки зрения гамильтониан  $H(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  в шредингеровской картине — это функция координат  $\mathbf{r}$  и импульсов  $\mathbf{p}$ , причем уравнение движения имеет следующий вид:

$$H(\mathbf{p}, \mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (16.35)$$

Формально гейзенберговская картина получается путем введения преобразования  $S = \exp(iHt/\hbar)$ . Тогда при любом начальном состоянии  $\psi(\mathbf{r}, 0)$  решение в последующий момент времени  $t$  определяется равенством

$$\psi(\mathbf{r}, t) = S^{-1} \psi(\mathbf{r}, 0). \quad (16.36)$$

Среднее значение  $\langle \psi(\mathbf{r}, t) | Q | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle$  оператора  $Q(\mathbf{p}, \mathbf{r})$  в шредингеровской картине совпадает в гейзенберговской картине со средним значением в начальном состоянии

преобразованного оператора  $Q' = SQS^{-1}$ :

$$\langle \psi(\mathbf{r}, 0) | Q' | \psi(\mathbf{r}, 0) \rangle = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | S^{-1} (SQS^{-1}) S | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle = \\ = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | Q | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle.$$

Здесь мы воспользовались тем, что в случае эрмитова гамильтониана  $H$  преобразование  $S$  унитарно. Таким образом, если в гейзенберговской картине известны зависящие от времени операторы  $Q'$ , то можно вычислить любое среднее значение, определяемое начальным состоянием  $\psi(\mathbf{r}, 0)$ . Вместо нахождения волновой функции  $\psi(\mathbf{r}, t)$  задача в гейзенберговской картине сводится к отысканию операторов  $Q'(\mathbf{p}, \mathbf{r}, t)$ . «Уравнение движения» для операторов  $Q'$  следует прямо из определения. Если  $Q$  — оператор, не зависящий от времени, то  $\frac{dQ'}{dt} = i\hbar Q'/\hbar - -iQ'H/\hbar$ , т. е.

$$[H, Q'] = -i\hbar \frac{d}{dt} Q'. \quad (16.37)$$

Это гейзенберговский эквивалент уравнения Шредингера (16.35). В действительности преобразование  $S$  есть сдвиг на величину  $t$  во времени, а  $-i\hbar/\hbar c$  — инфинитезимальный оператор сдвига (гл. 15, § 4, п. А).

Рассмотрим простейший вид поля: эрмитово (действительное) поле  $\Phi = \varphi + \varphi^\dagger$ , где оператор  $\varphi^\dagger$  определяется равенством (16.33) через операторы  $a^\dagger(\mathbf{k})$  рождения частиц с массой  $M = \hbar k/c$  и нулевым спином. Сумма  $\varphi + \varphi^\dagger$  — единственная (с точностью до фазового множителя) линейная комбинация двух таких полей, которая удовлетворяет требованию причинности (п. Г). Будем считать такие частицы бозонами, для которых выполняются перестановочные соотношения (16.29а). Мы должны рассматривать зависящие от времени операторы поля  $\Phi$  как операторы, подобные операторам  $Q'$  в гейзенберговской картине. Возвращаясь к лагранжевой теории классических полей (§ 2, п. Б), построим из оператора поля  $\Phi$  и его первых производных  $\square\Phi$  простейший инвариантный относительно преобразований Пуанкаре оператор плотности лагранжиана:

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} (\square\Phi \cdot \square\Phi - k^2\Phi^2) \hbar c. \quad (16.38)$$

Второй член удовлетворяет условию инвариантности плотности  $\mathcal{L}$  относительно преобразований Пуанкаре, так как

$\Phi$  — скалярное поле. Первый член тоже инвариантен, поскольку мы взяли скалярное произведение производных поля. Ниже мы объясним, почему в плотности лагранжиана  $\mathcal{L}$  берется коэффициент  $k^2$ . Действуя так же, как и в § 2, п. Б, построим из плотности лагранжиана плотность гамильтониана

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} (\dot{\Phi}^2 c^{-2} + \nabla \Phi \cdot \nabla \Phi + k^2 \Phi^2) \hbar c \quad (16.39)$$

и компоненты плотности импульса

$$\mathcal{P}_q = \dot{\Phi} \nabla_q \Phi \hbar c^{-1}.$$

Путем алгебраических преобразований на основании определения (16.33) оператора поля  $\phi^\dagger$  можно следующим образом выразить операторы  $\mathbf{H}$  и  $\mathbf{P}$  через операторы рождения и уничтожения частиц с массой  $M = \hbar k/c$ :

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2} \hbar c \int k_t [\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) + \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}})] k_t^{-1} dk,$$

$$\mathbf{P} = \frac{1}{2} \hbar \int \mathbf{k} [\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) + \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}})] k_t^{-1} dk.$$

В большинстве полевых теорий возникают проблемы расходимостей. Рассматриваемый здесь простой пример теории не является исключением. В самом деле, вакуумное среднее  $\langle 0 | \mathbf{H} | 0 \rangle$  бесконечно. В этом можно убедиться, воспользовавшись полученным на основании равенства (16.29а) соотношением  $\mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}') = \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}') \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) + k_t \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}')$ . Тогда, в силу того что  $\mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) | 0 \rangle = 0$ , из-за наличия  $\delta$ -функции возникает бесконечность. Если же придавать физический смысл лишь разности между собственным значением оператора  $\mathbf{H}$  и его вакуумным средним, то мы получим конечные выражения для операторов

$$\begin{aligned} \tilde{\mathbf{H}} &= \mathbf{H} - \langle 0 | \mathbf{H} | 0 \rangle = \hbar c \int k_t \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) k_t^{-1} dk, \\ \tilde{\mathbf{P}} &= \mathbf{P} - \langle 0 | \mathbf{P} | 0 \rangle = \hbar \int \mathbf{k} \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}) k_t^{-1} dk. \end{aligned} \quad (16.40)$$

Сравнивая выражение (16.40) с оператором числа частиц (16.30), мы видим, что оператор  $\tilde{\mathbf{H}}$  можно интерпретировать как интеграл по возможным состояниям  $\mathbf{k}$  от функции, равной произведению энергии частицы  $\hbar c k_t$  на

число частиц в этом состоянии. Аналогичная интерпретация допустима и для операторов компонент импульса  $\vec{P}$ . Таким образом, от поля мы перешли к частицам.

Поскольку оператор  $\Phi$  содержит как операторы  $a^\dagger$ , так и операторы  $a$ , в оператор  $H$  должны входить члены типа  $a^\dagger a^\dagger$ . Но члены такого вида, получающиеся из двух разных частей лагранжиана, взаимно уничтожаются. Лишь отсутствие членов типа  $a^\dagger a^\dagger$  позволило нам интерпретировать оператор  $H$  как гамильтониан системы невзаимодействующих частиц, к чему мы стремились. Этим объясняется выбор коэффициента  $k^2$  в выражении для плотности лагранжиана  $\mathcal{L}$ . Конечно, теория невзаимодействующих частиц, подобная изложенной выше, бессодержательна. Но, добавляя в лагранжиан другие члены, подобно тому как мы это делали в классических примерах § 1, п. В, можно ввести взаимодействие полей и, следовательно, взаимодействие частиц.

Так же как и в случае классических полей (§ 2, п. Б), закон сохранения величин  $P$  и  $H$  вытекает из инвариантности плотности лагранжиана  $\mathcal{L}$  относительно пространственных и временных сдвигов.

Рассмотренное выше поле подходит для описания  $\pi^0$ -мезонов. Может показаться, что некоторые наши рассуждения следуют по замкнутому кругу. Поэтому мы подведем краткий итог изложенному выше относительно квантованных полей. В гл. 15, § 4 мы классифицировали все возможные частицы по неприводимым представлениям группы Пуанкаре. Затем, пользуясь операторами рождения и уничтожения для частиц с нулевым спином, построили оператор скалярного поля  $\phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})$ , который преобразуется согласно соотношению (16.32). Из таких операторов мы построили лагранжиан, а также гамильтониан, собственные векторы которых соответствуют состояниям с определенным числом частиц. При этом мы не опирались ни на вариационный принцип (§ 1, п. А), ни на уравнения поля, которые, как показано в § 2, п. Б, следуют из этого принципа. Если же мы напишем уравнение поля (16.21) для операторной плотности лагранжиана (16.38), то получим дифференциальное уравнение

$$(\square^2 + k^2) \Phi(\hat{\mathbf{e}}) = 0.$$

Это известное уравнение Клейна—Гордона, с которым мы уже встречались в гл. 15, § 8, п. В связи с волновыми функциями частиц. Здесь же оно появляется в другой роли, как условие для операторов поля. Из выражения (16.33) для оператора  $\Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})$  следует, что оператор  $\Phi(\hat{\mathbf{e}})$  в самом деле удовлетворяет такому уравнению поля и, следовательно, удовлетворяет вариационному принципу. (Отметим сходство наших рассуждений с тем, что говорилось об уравнениях для волновых функций частиц в гл. 15, § 8.) При наличии взаимодействий уравнения поля играют более существенную роль.

## Г. Причинность и теорема о спине и статистике

В классической релятивистской теории ни частица, ни какой-либо сигнал не могут двигаться со скоростью, превышающей скорость  $c$ . Поэтому квантовомеханические измерения в двух пространственно-временных точках  $\hat{\mathbf{e}}$  и  $\hat{\mathbf{e}}'$  должны быть независимы друг от друга, если разность векторов  $\hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{e}}'$  пространственно-подобна, т. е. если  $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| > c|t - t'|$ . Данное положение называется микроскопической причинностью. Математически независимость величин в квантовой механике выражается в том, что соответствующие операторы коммутируют между собой, т. е. должно выполняться условие

$$[\mathbf{Q}(\hat{\mathbf{e}}), \mathbf{Q}(\hat{\mathbf{e}}')] = 0, \quad (16.41)$$

если вектор  $\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}}$  пространственно-подобен, а  $\mathbf{Q}(\hat{\mathbf{e}})$  есть оператор некоторой наблюдаемой в точке  $\hat{\mathbf{e}}$ . Подобно операторам  $\mathcal{H}$  и  $\mathcal{P}_a$  в равенствах (16.39) операторы  $\mathbf{Q}(\hat{\mathbf{e}})$  обычно задаются в виде квадратичных комбинаций полей и их производных. Поэтому условие причинности (16.41) будет выполнено, если операторы поля в пространственно-разделенных точках коммутируют или антикоммутируют между собой. Проверим сначала, удовлетворяет ли такому условию рассматривавшийся в п. В оператор поля  $\Phi = \varphi + \varphi^\dagger$ . В силу равенства (16.27) и определения (16.33)



получаем  $[\varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}), \varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}')] = [\varphi(\hat{\mathbf{e}}), \varphi(\hat{\mathbf{e}}')] = 0$ . Значит,

$$\begin{aligned} [\Phi(\hat{\mathbf{e}}), \Phi(\hat{\mathbf{e}}')] &= [\varphi(\hat{\mathbf{e}}), \varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}')] + [\varphi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}), \varphi(\hat{\mathbf{e}}')] = \\ &= \frac{1}{2} \iint k_i^{-1} k_i'^{-1} dk dk' \{ \exp[i(\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}})] - \\ &- \exp[i(\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}} - \hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}}')] \} k_i \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') (2\pi)^{-3} = \\ &= i \int k_i^{-1} dk \sin\{\hat{\mathbf{k}} \cdot (\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}})\} (2\pi)^{-3}. \end{aligned} \quad (16.42)$$

Интеграл, очевидно, зависит только от разности  $\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}}$ . Более того, он зависит лишь от «длины»  $[c^2(t' - t)^2 - |\mathbf{r}' - \mathbf{r}|^2]^{1/2}$  вектора  $\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}}$ . В доказательство этого достаточно сослаться на то, что любую другую разность с той же «длиной» можно представить в виде  $\mathbf{L}(\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}})$ , где  $\mathbf{L}$  — преобразование Лоренца. Но  $\hat{\mathbf{k}} \cdot \mathbf{L}(\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}}) = \mathbf{L}^{-1} \hat{\mathbf{k}} \cdot (\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}})$ . Тогда в силу инвариантности элемента объема  $k_i^{-1} dk$  (гл. 15, § 4, п. Г) интеграл (16.42) не меняется при замене вектора  $\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}}$  вектором  $\mathbf{L}(\hat{\mathbf{e}}' - \hat{\mathbf{e}})$ . Поэтому если интеграл (16.42) обращается в нуль для одного пространственно-подобного вектора, то он будет равен нулю для всех пространственно-подобных векторов той же «длины». Проще всего рассмотреть случай, когда  $t' = t$ . Тогда мы получаем простое выражение

$$[\Phi(\hat{\mathbf{e}}), \Phi(\hat{\mathbf{e}}')] = -i \int k_i^{-1} dk \sin\{\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}' - \mathbf{r})\} (2\pi)^{-3}, \quad (16.43)$$

которое равно нулю, поскольку мы интегрируем по всему трехмерному пространству векторов  $\mathbf{k}$  нечетную функцию (синус).

Итак, поле  $\Phi$  удовлетворяет условию причинности. Оно описывает частицы с нулевым спином и с симметричными многочастичными состояниями, т. е. частицы, операторы рождения и уничтожения которых удовлетворяют перестановочным соотношениям (16.27) — (16.29). Если мы выберем поле  $\Phi$ , соответствующее частицам с нулевым спином и с антисимметричными многочастичными состояниями, т. е. с антиперестановочными соотношениями вместо соотношений (16.27) — (16.29), то, повторяя наши рассуждения, мы получим в равенстве (16.43) косинус вместо синуса. Тогда наш интеграл в нуль не

обращается и условие причинности не выполнено. Таким образом, предполагая условие причинности, мы приходим к заключению о том, что частицы с нулевым спином не могут подчиняться статистике Ферми, т. е. их волновые функции не могут быть антисимметричными. Проведенные выше рассуждения можно обобщить на случай любого целого спина. Вывод остается таким же. В случае полуцелых спинов в перестановочных соотношениях изменяется знак, и мы приходим к заключению, что статистика Бозе, соответствующая симметричным состояниям, противоречит причинности. Такие выводы называются «теоремой о спине и статистике».

## Д. Античастицы

Заметим, что рассматривавшееся эрмитово поле  $\Phi = \varphi + \varphi^\dagger$  — это единственная (с точностью до фазового множителя) линейная комбинация полей  $\varphi$  и  $\varphi^\dagger$ , удовлетворяющая условию причинности. Более общее неэрмитово поле можно построить лишь с помощью нового оператора поля  $\chi^\dagger$ , который подобно оператору  $\varphi^\dagger$  задается равенством (16.33), где вместо операторов  $a^\dagger(\mathbf{k})$  стоят операторы  $b^\dagger(\mathbf{k})$ . Это операторы рождения частиц, так же как и раньше, преобразующихся при преобразованиях Пуанкаре, но отличающихся другими, внутренними свойствами, такими, как еще не определенные заряд или гиперзаряд. Предположим, что для новых частиц операторы  $b^\dagger$  и  $b$  удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям (16.27) — (16.29), что и операторы  $a^\dagger$  и  $a$ , и будем считать, что все новые операторы коммутируют со всеми старыми операторами. (Для частиц с полуцелым спином нужно пользоваться антиперестановочными соотношениями.) Тогда можно, как и в п. Г, показать, что неэрмитово поле  $\Phi$ , определенное соотношениями

$$\Phi = \varphi + \chi^\dagger, \quad \Phi^\dagger = \varphi^\dagger + \chi, \quad (16.44)$$

удовлетворяет условию причинности. Новые частицы называются античастицами по отношению к старым частицам.

Плотность лагранжиана простого вида можно построить подобно плотности (16.38), где для эрмитовости плотности  $\mathcal{L}$  член  $\Phi^2$  заменен членом  $\Phi^\dagger \Phi$ . Тогда выражения

для операторов  $\mathbf{H}$  и  $\mathbf{P}$  будут такими же, как и раньше, если не считать добавочных членов, содержащих операторы  $\mathbf{b}$  вместо операторов  $\mathbf{a}$ . Кроме того, появляется новая сохраняющаяся величина

$$Q = i \int dV (\dot{\Phi}^\dagger \Phi - \Phi^\dagger \dot{\Phi}),$$

которая следующим образом выражается через операторы  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ :

$$Q = \int [\mathbf{a}^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{a}(\mathbf{k}) - \mathbf{b}^\dagger(\mathbf{k}) \mathbf{b}(\mathbf{k})] k_i^{-1} dk.$$

Это оператор разности числа частиц и числа античастиц. В одночастичном состоянии  $|\hat{\mathbf{k}}\rangle$  среднее значение оператора  $Q$  равно  $\langle \hat{\mathbf{k}} | Q | \hat{\mathbf{k}} \rangle = 1$ , а в состоянии с одной античастицей  $\langle Q \rangle = -1$ . Оператор  $Q$  однозначно различает частицы и античастицы. Если частицы и античастицы — это  $\pi^+$ - и  $\pi^-$ -мезоны, то наш оператор можно использовать в качестве оператора электрического заряда поля. Если же поле описывает нейтральные  $K^0$ - и  $\bar{K}^0$ -мезоны, различающиеся тем, что первый из них имеет гиперзаряд 1, а второй —1, то оператор  $Q$  представляет собой оператор гиперзаряда. Для поля  $K^\pm$ -мезонов, которое обладает как электрическим зарядом, так и гиперзарядом, оператор  $Q$  может соответствовать одновременно обоим зарядам. (При наличии нескольких разных частиц выражение для оператора  $Q$  становится более сложным, чем приведенное выше, и содержит добавочные члены, отвечающие другим частицам.) В данной ситуации выражения для операторов электрического заряда и гиперзаряда будут, естественно, различаться. Но кроме этих двух зарядов существуют и другие «заряды», такие, как число барионов или число лептонов (гл. 11, § 3).

Заметим, что по отношению к оператору  $Q$  поле  $\Phi$  имеет очень простые свойства: оператор  $\Phi^\dagger$  повышает, а оператор  $\Phi$  понижает величину заряда  $Q$  на единицу. В результате заряд может сохраняться даже в случае лагранжиана, содержащего члены взаимодействия. Этого можно добиться путем добавления к плотности  $\mathcal{L}$  произведения некоторой степени поля  $\Phi$  на соответствующую степень поля, имеющего противоположные свойства по

отношению к оператору  $Q$ . Закон сохранения заряда связан с внутренними свойствами частицы. Тем не менее, вводя преобразование  $\Phi \rightarrow U\Phi U^{-1}$ , где  $U = \exp(i\varepsilon Q)$ , можно связать сохранение заряда с преобразованиями поля подобно тому, как сохранение импульса связано с трансляциями. Поскольку поле  $\Phi$  уменьшает значение оператора  $Q$  на единицу, мы имеем  $[Q, \Phi] = -\Phi$ , и, следовательно, наше преобразование дается соотношением  $\Phi \rightarrow \exp(-i\varepsilon) \Phi$ , т. е. состоит в изменении фазы на постоянную величину. Такое преобразование называется калибровочным (см. также § 1, п. В). Оператор  $Q$  служит инфинитезимальным оператором для преобразования  $U$  подобно оператору  $P$  для преобразований трансляции. В действительности из инвариантности лагранжиана относительно преобразований такого типа всегда следует закон сохранения заряда. Более того, с инвариантностью связан «сохраняющий ток», который в рассмотренном примере определяется как четырехмерный вектор:

$$\mathbf{j} = i \{ (\nabla \Phi^\dagger) \Phi - \Phi^\dagger (\nabla \Phi) \}, \quad j_t = -i \{ \Phi^\dagger \Phi - \Phi^\dagger \dot{\Phi} \}.$$

Пользуясь уравнением Клейна—Гордона, легко убедиться, что  $\nabla \cdot \mathbf{j} + \partial j_t / \partial t = 0$ . Именно из-за этого равенства ток называется сохраняющимся. Проинтегрируем его по всему трехмерному пространству и воспользуемся теоремой Гаусса:  $\int \nabla \cdot \mathbf{j} dV = \int \mathbf{j} \cdot d\mathbf{S}$ . Будем считать, что ток  $\mathbf{j}$  при больших  $r$  убывает быстрее, чем  $r^{-2}$ . Тогда поверхностный интеграл обращается в нуль и  $(\partial/\partial t) \int j_t dV = 0$ . Это — закон сохранения заряда, так как, сравнивая с приведенным выше выражением для заряда, мы находим, что  $Q = - \int j_t dV$ .

Наиболее хорошо изученной античастицей является, вероятно, позитрон — положительно заряженная частица с массой, равной массе электрона. Поэтому ее рассматривают как антиэлектрон. При высокоэнергетических столкновениях наблюдались отрицательно заряженные антипротоны. Поля этих частиц подобны описанным выше, но их спин равен  $1/2 \hbar$ . Поля с ненулевым спином мы кратко рассмотрим в п. Ж.

## Е. Зарядовое сопряжение и теорема РСТ

Мы продолжим свое очень краткое обсуждение теории квантованных полей и рассмотрим теорему РСТ. Эта теорема связана с произведением трех преобразований: преобразования пространственной инверсии  $P$ , которое в данной книге (гл. 15, § 3 и 5) обозначалось символом  $I$ ; преобразования  $T$ , отражения времени, которое мы обозначали символом  $\Upsilon$  (гл. 15, § 7, п. Г), и нового преобразования  $C$ , называемого зарядовым сопряжением, которое частицу переводит в античастицу и наоборот. Произведение РСТ рассматривается потому, что при очень общих предположениях удастся доказать, что РСТ есть преобразование симметрии. В случае электромагнитных и сильных ядерных взаимодействий это не очень важно, поскольку эксперименты показывают, что любое из трех преобразований  $P$ ,  $C$  и  $T$  является преобразованием симметрии. В случае же слабых ядерных взаимодействий ни преобразование  $P$ , ни преобразование  $C$  не является преобразованием симметрии, хотя опыт свидетельствует о том, что произведение  $PC$  и преобразование  $T$  будут преобразованиями симметрии, и это согласуется с теоремой РСТ. (Имеются некоторые экспериментальные данные, указывающие на небольшое нарушение симметрии относительно преобразования  $PC$  в слабых взаимодействиях, но это все-таки не противоречит симметрии относительно преобразования РСТ.)

Посмотрим, как действуют эти преобразования на поле  $\Phi$ , определенное в п. Д. Мы ограничимся случаем нулевого спина, но все сказанное можно будет обобщить и на случай любого спина. Чтобы сохранить единство обозначений, мы, как и в предыдущих главах, оператор, соответствующий преобразованию  $P$ , обозначим через  $T(I)$ , а оператор преобразования  $T$  — через  $\Upsilon$ . В силу сказанного в гл. 15, § 5 операторы рождения частиц при пространственной инверсии ведут себя соответственно равенству  $T(I) a^\dagger(\hat{k}) T^{-1}(I) = \pm a^\dagger(I\hat{k})$ , где знак « $\pm$ » отвечает внутренней четности частицы. Аналогично при отражении времени из равенства (15.108) в случае нулевого спина получаем  $\Upsilon a^\dagger(\hat{k}) \Upsilon^{-1} = a^\dagger(I\hat{k})$ . Унитарный оператор зарядового сопряжения  $C$  определим соотношениями  $C^2 = 1$

и  $\text{Ca}^\dagger(\mathbf{k})\text{C}^{-1} = \text{b}^\dagger(\mathbf{k})$ , где  $\text{b}^\dagger$  — оператор, соответствующий античастицам. Тогда с учетом антиунитарности оператора  $\Upsilon$  имеем

$$\Upsilon(I)\text{C}\Upsilon\Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})(\Upsilon(I)\text{C}\Upsilon)^{-1} = \pm \Phi(-\hat{\mathbf{e}}). \quad (16.45)$$

Значит, действие оператора РСТ [или оператора  $\Upsilon(I)\text{C}\Upsilon$  в наших обозначениях] на поле сводится к эрмитовому сопряжению и замене вектора  $\hat{\mathbf{e}}$  вектором  $-\hat{\mathbf{e}}$ . Знак « $\pm$ » в равенстве (16.45) не существен из-за произвола в выборе фазового множителя оператора  $\Upsilon$  (гл. 15, § 7, п. Г). Преобразование  $\hat{\mathbf{e}} \rightarrow -\hat{\mathbf{e}}$ , состоящее в отражении времени и пространства, называют иногда полным отражением. В силу эрмитовости плотности лагранжиана  $\mathcal{L}$ , построенной из поля  $\Phi$  аналогично выражению (16.38), преобразование РСТ сводится к замене  $\mathcal{L}(\hat{\mathbf{e}}) \rightarrow \mathcal{L}(-\hat{\mathbf{e}})$ . Для плотности гамильтониана  $\mathcal{H}(\hat{\mathbf{e}})$ , построенной из плотности  $\mathcal{L}(\hat{\mathbf{e}})$  подобно выражению (16.39), получается такое же преобразование:  $\mathcal{H}(\hat{\mathbf{e}}) \rightarrow \mathcal{H}(-\hat{\mathbf{e}})$ . И наконец, гамильтониан  $\mathbf{H} = \int \mathcal{H}(\hat{\mathbf{e}}) dV$ , определяемый как интеграл по всему трехмерному пространству, преобразуется следующим образом:  $\mathbf{H}(t) \rightarrow \mathbf{H}(-t)$ . Значит, оператор  $\mathbf{H}$  не меняется при преобразовании РСТ, так как оператор  $\mathbf{H}$  не должен зависеть от времени. Тем самым доказано, что РСТ есть преобразование симметрии. Значение полученного результата состоит в том, что намеченное выше доказательство пригодно и для лагранжиана, содержащего члены взаимодействия. Доказательство основано лишь на эрмитовости лагранжиана и инвариантности его относительно собственных преобразований Пуанкаре. (Подразумевается также, что частицы точечные и не имеют внутренней структуры. Мы решаем дифференциальные уравнения и, следовательно, предполагаем, что пространство непрерывно, а не дискретно.)

Более строгое доказательство теоремы РСТ основано на том, что из инвариантности теории поля относительно собственных преобразований Пуанкаре следует инвариантность относительно собственных комплексных преобразований Пуанкаре, а данная комплексная группа содержит полное отражение  $\hat{\mathbf{e}} \rightarrow -\hat{\mathbf{e}}$ .

Продemonстрируем симметрию относительно преобразования РСТ на двух примерах, где нет симметрии относительно преобразования Р или С, но произведение РС сохраняется. В гл. 15, § 7, п. В мы убедились, что нейтрино не имеет определенной четности. В самом деле, преобразование отражения дает частицу со спиральностью, соответствующей правому винту. Такая частица экспериментально не наблюдалась. Преобразование же РС будет переводить нейтрино со спиральностью, соответствующей левому винту, в антинейтрино со спиральностью, соответствующей правому винту. Такая частица обнаружена. Здесь, хотя оператор Р не сохраняется, произведение СР так же, как оператор Т, сохраняется.

Второй пример —  $K^0$ -мезон, который имеет ненулевую массу, нулевой спин и странность —1. Его античастицей является  $\bar{K}^0$ -мезон со странностью +1. Эти частицы рождаются в сильных ядерных взаимодействиях, в которых странность сохраняется. Распадаются же они в слабых взаимодействиях, где странность не сохраняется. При этом операторы С и Р в отдельности не сохраняются, но произведение СР сохраняется с большой точностью. Для  $K^0$ -мезона наблюдались два канала распада: на два  $\pi$ -мезона с временем жизни  $K^0$ -мезона около  $10^{-10}$  с и на три  $\pi$ -мезона с временем жизни  $K^0$ -мезона около  $10^{-7}$  с. Эти результаты можно объяснить следующим образом. Частица  $K^0$  характеризуется определенной четностью. Поэтому мы имеем  $\text{СР}|K^0\rangle = |\bar{K}^0\rangle$ . Значит, линейные комбинации состояний  $|K_S^0\rangle = 2^{-1/2}(|K^0\rangle + |\bar{K}^0\rangle)$ ,  $|K_L^0\rangle = 2^{-1/2}(|K^0\rangle - |\bar{K}^0\rangle)$  должны быть собственными векторами оператора СР:  $\text{СР}|K_S^0\rangle = |K_S^0\rangle$ ,  $\text{СР}|K_L^0\rangle = -|K_L^0\rangle$ . Вектор  $|K^0\rangle$  можно представить в виде суммы двух векторов:  $|K^0\rangle = 2^{-1/2}(|K_S^0\rangle + |K_L^0\rangle)$ . Нижнее состояние системы из двух  $\pi$ -мезонов с нулевым относительным угловым моментом является собственным вектором оператора СР с собственным значением +1. Следовательно, в процессе, в котором сохраняется СР, лишь компонента  $|K_S^0\rangle$  может распадаться таким образом. Другая компонента  $|K_L^0\rangle$  распадается сложнее: на три  $\pi$ -мезона, комбинация которых соответствует собственному вектору оператора СР с собственным значением —1. Естественно, время распада на два  $\pi$ -мезона меньше, и нижние ин-

дексы  $S$  и  $L$  у символа  $K^0$ -мезона соответствуют малому и большому временам распада. В экспериментальном отношении возникает довольно интересная ситуация. Рассмотрим рассеяние  $\pi^-$ -мезонов на протонах, в результате которого могут рождаться потоки  $K^0$ -частиц:  $\pi^- + p = K^0 + \Lambda$ . Пройдя короткий отрезок пути, компонента  $K_S^0$  распадается. Остается компонента  $K_L^0$ , которая представляет собой смесь частицы  $K^0$  с ее античастицей  $\bar{K}^0$ . Иначе говоря, поток, первоначально содержащий лишь  $K^0$ -частицы, в результате распада компонент  $K_S^0$  постепенно приобретает составляющую  $\bar{K}^0$ . Наличие в потоке  $\bar{K}^0$ -частиц можно обнаружить, регистрируя процесс

$$\bar{K}^0 + p = \pi^+ + \Lambda, \quad (16.46)$$

который невозможен для  $K^0$ -частиц в силу закона сохранения странности. Другими словами, процесс (16.46) невозможен для первоначального потока частиц и становится возможным лишь после распада составляющей  $K_S^0$ .

Отметим, что проведенные недавно эксперименты обнаружили очень слабое нарушение  $CP$ -симметрии в распадах  $K^0$ -частиц. Предполагается, что существуют какие-то «сверхслабые» взаимодействия, при которых нарушаются как  $CP$ -симметрия, так и  $T$ -симметрия, но симметрия  $CPT$  все-таки сохраняется. «Сила» таких взаимодействий должна составлять не более  $10^{-8}$  «силы» слабых взаимодействий. Таким образом, можно полагать, что абсолютных симметрий очень мало. Вместо этого можно говорить об иерархии взаимодействий, сила которых быстро убывает по мере того, как нарушается все большее число симметрий.

## Ж. Поля частиц с ненулевым спином

В данной главе, говоря о полях, мы до сих пор ограничивались случаем нулевого спина. Наш метод естественным образом обобщается на более общий случай. Мы проведем это обобщение для трех интересных случаев: для случая  $s=1/2$  и массы, не равной нулю, для случая нулевой массы и  $|m|=1/2$  (предложенное Вейлем поле нейтрино), а также для случая  $|m|=1$  (электромагнитное поле).



## Поле Дирака

Напомним, что в гл. 15, § 8, п. Г мы ввели четырехкомпонентное пространство, хотя при каждом векторе  $\hat{\mathbf{k}}$  частица имеет лишь два независимых состояния с  $m_s = \pm 1/2$ . Это потребовалось для того, чтобы отделить преобразование компонент от преобразования вектора  $\hat{\mathbf{k}}$ . С помощью уравнения Дирака (15.132) четырехкомпонентное пространство сводилось к двухкомпонентному пространству. Аналогично здесь мы построим четырехкомпонентное поле. Вместо простого закона (16.32) для преобразования скалярного поля мы теперь требуем, чтобы четыре компоненты  $\Phi_\alpha(\hat{\mathbf{e}})$  операторов поля преобразовались согласно соотношению (16.34), которое можно представить в виде

$$T(\hat{\mathbf{e}}, L) \Phi(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, L) = M^{-1}(L) \Phi(L\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}}), \quad (16.47)$$

где  $M$  —  $4 \times 4$ -матрица, введенная в соотношении (15.128), а символ  $\Phi$  теперь означает вектор-столбец. Это требование согласуется с трансформационными свойствами классических полей (16.19), поскольку среднее  $\langle \psi | \Phi_\alpha(\hat{\mathbf{e}}) | \psi \rangle$  соответствует классическому полю  $\varphi_\alpha(\hat{\mathbf{e}})$ . Напомним, что  $T(\hat{\mathbf{e}}, L)$  — унитарный оператор, действующий на векторы состояний  $|\psi\rangle$ . Хотя матрица  $M$  не унитарна, она удовлетворяет соотношению  $M^\dagger \gamma_t M = \gamma_t$  (гл. 15, § 8, п. Г). Поэтому, переходя в равенстве (16.47) к эрмитово-сопряженным величинам, получаем  $T(\hat{\mathbf{e}}, L) \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, L) = \Phi^\dagger(L\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}}) (M^{-1})^\dagger = \Phi^\dagger(L\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}}) \gamma_t M \gamma_t$ . Вводя обозначение  $\bar{\Phi}(\hat{\mathbf{e}}) = \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}) \gamma_t$ , перепишем это равенство в виде

$$T(\hat{\mathbf{e}}, L) \bar{\Phi}(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, L) = \bar{\Phi}(L\hat{\mathbf{e}} + \hat{\mathbf{e}}) M(L). \quad (16.48)$$

Значит, преобразование вектор-строки  $\bar{\Phi}$  сводится к умножению справа на матрицу  $M(L)$ .

Четырехкомпонентный оператор поля  $\Phi$  построим с помощью формул, аналогичных формулам (16.44) и (16.33), но используя в них операторы  $a^\dagger(\hat{\mathbf{k}} m_s)$  рождения частиц со спином  $s = 1/2$  и операторы  $b^\dagger(\hat{\mathbf{k}} m_s)$  рождения

соответствующих античастиц. Итак,

$$\Phi_{\alpha}(\hat{\mathbf{e}}) = k^{1/2}(2\pi)^{-3/2} \int k_i^{-1} d\mathbf{k} \sum_{m_s} \{ u_{\alpha m_s}(\hat{\mathbf{k}}) a(\hat{\mathbf{k}} m_s) \exp(-i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) + v_{\alpha m_s}(\hat{\mathbf{k}}) b^{\dagger}(\hat{\mathbf{k}} m_s) \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \}, \quad (16.49)$$

где взят обычный нормировочный множитель, а коэффициенты  $u$  и  $v$  подобраны так, чтобы поле преобразовалось согласно соотношению (16.47) и удовлетворяло требованиям причинности. Рассматривая величины  $u$  и  $v$  как  $4 \times 2$ -матрицы, мы покажем, что они имеют вид

$$u_i^{\dagger}(\hat{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} L^{(1/2, 0)}(\mathbf{Q}) \\ L^{(0, 1/2)}(\mathbf{Q}) \end{pmatrix}, \quad v(\hat{\mathbf{k}}) = \begin{pmatrix} -L^{(1/2, 0)}(\mathbf{Q}) \\ L^{(0, 1/2)}(\mathbf{Q}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (16.50)$$

где буст  $\mathbf{Q}$ , от которого зависят  $2 \times 2$ -матрицы  $\mathbf{L}$ , переводит вектор  $(0 \ 0 \ 0 \ 1)$  в вектор  $\hat{\mathbf{k}}$  [формула (15.125)]. [В самом деле, два столбца матрицы  $u(\hat{\mathbf{k}})$  — это столбцы двух одночастичных состояний  $|\hat{\mathbf{k}} \pm\rangle$ , определяемых формулой (15.135 а).]

Для доказательства того, что поле  $\Phi$  преобразуется требуемым образом, мы должны воспользоваться известными трансформационными свойствами (15.59) состояний, соответствующих частицам и (античастицам):  $T(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) a^{\dagger}(\hat{\mathbf{k}} m_s) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) = \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \sum_{m'_s} D_{m_s m'_s}^{(1/2)}(\mathbf{R}') a^{\dagger}(\hat{\mathbf{k}}' m'_s)$ .

Здесь  $\hat{\mathbf{k}}' = \mathbf{L}\hat{\mathbf{k}}$  и  $\mathbf{R}' = \mathbf{Q}'^{-1}\mathbf{L}\mathbf{Q}$ , согласно формуле (15.60), где  $\mathbf{Q}'$  — буст для вектора  $\hat{\mathbf{k}}'$ . Переходя в этом равенстве к эрмитово-сопряженным величинам, в силу унитарности матрицы  $\mathbf{D}$  получаем  $T(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) a(\hat{\mathbf{k}} m_s) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, \mathbf{L}) = \exp(-i\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}}) \sum_{m'_s} D_{m_s m'_s}^{(1/2)}(\mathbf{R}'^{-1}) a(\hat{\mathbf{k}}' m'_s)$ . Для преобразования поворота  $\mathbf{D}^{1/2} = \mathbf{L}^{(1/2, 0)} = \mathbf{L}^{(0, 1/2)}$ . Поэтому нашу матрицу можно представить в виде произведения матриц:

$$\mathbf{D}^{(1/2)}(\mathbf{R}'^{-1}) = \mathbf{L}^{(1/2, 0)}(\mathbf{Q}^{-1}) \mathbf{L}^{(1/2, 0)}(\mathbf{L}^{-1}) \mathbf{L}^{(1/2, 0)}(\mathbf{Q}') = \quad (16.51)$$

$$= \mathbf{L}^{(0, 1/2)}(\mathbf{Q}^{-1}) \mathbf{L}^{(0, 1/2)}(\mathbf{L}^{-1}) \mathbf{L}^{(0, 1/2)}(\mathbf{Q}'). \quad (16.51a)$$

Тогда из соотношения (16.49) следует выражение

$$\begin{aligned} T(\hat{\mathbf{e}}, L) \Phi_{\alpha}(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(\hat{\mathbf{e}}, L) &= k^{1/2} (2\pi)^{-3/2} \int k_t^{-1} dk \sum_{m'_s} \{ \exp(-i\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}} - \\ &- i\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}} [\mathbf{u}(\hat{\mathbf{k}}) D^{(1/2)}(\mathbf{R}'^{-1})]_{\alpha m'_s} a(\hat{\mathbf{k}}' m'_s) + \exp(i\hat{\mathbf{k}}' \cdot \hat{\mathbf{e}} + i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \times \\ &\times [\mathbf{v}(\hat{\mathbf{k}}) D^{(1/2)*}(\mathbf{R}'^{-1})]_{\alpha m'_s} b^{\dagger}(\hat{\mathbf{k}}' m'_s), \end{aligned} \quad (16.52)$$

где мы опять воспользовались унитарностью матрицы  $\mathbf{D}$  и записали ее в виде  $D_{m'_s m_s}^{(1/2)}(\mathbf{R}') = D_{m_s m'_s}^{(1/2)*}(\mathbf{R}'^{-1})$ . С учетом соотношений (16.50) и двух равенств (16.51) выражения для матриц  $\mathbf{uD}$  и  $\mathbf{vD}^*$  значительно упрощаются:

$$\begin{aligned} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{k}}) D^{(1/2)}(\mathbf{R}'^{-1}) &= \begin{pmatrix} L^{(1/2, 0)}(L^{-1}) & L^{(1/2, 0)}(Q') \\ L^{(0, 1/2)}(L^{-1}) & L^{(0, 1/2)}(Q') \end{pmatrix} = M^{-1} \mathbf{u}(\hat{\mathbf{k}}'), \\ \mathbf{v}(\hat{\mathbf{k}}) D^{(1/2)*}(\mathbf{R}'^{-1}) &= \mathbf{v}(\hat{\mathbf{k}}) \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} D^{(1/2)}(\mathbf{R}'^{-1}) \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} -L^{(1/2, 0)}(L^{-1}) & L^{(1/2, 0)}(Q') \\ L^{(0, 1/2)}(L^{-1}) & L^{(0, 1/2)}(Q') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = M^{-1} \mathbf{v}(\hat{\mathbf{k}}'). \end{aligned} \quad (16.53)$$

Здесь матрица  $M$  взята в форме (15.128). Матрицы  $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_y$  нужны для преобразования матрицы  $\mathbf{D}^*$  в матрицу  $\mathbf{D}$ . (Согласно сказанному в гл. 7, § 7, такие представления эквивалентны.) Подставляя теперь выражения (16.53) в равенство (16.52) и переходя затем от переменной интегрирования  $\mathbf{k}$  к переменной  $\mathbf{k}'$ , получаем желаемый результат (16.47). Заметим, что наш вывод справедлив и в том случае, если первые две строки матрицы  $\mathbf{v}$  в равенстве (16.50) не берутся со знаком минус. Но такой выбор знака гарантирует соответствие принципу причинности. В этом можно убедиться, вычислив, как в п. Г, антикоммутатор полей  $\Phi^{\dagger}(\hat{\mathbf{e}})$  и  $\Phi(\hat{\mathbf{e}}')$ .

Интересным следствием структуры поля Дирака является то, что внутренняя четность частицы должна быть противоположна внутренней четности античастицы. Этим поле Дирака отличается от случая нулевого спина, где обе четности совпадали. Прежде чем подробно остано-

ливаться на поле Дирака, обратимся на время к случаю нулевого спина. Пусть  $T(I)$  — унитарный оператор, соответствующий пространственной инверсии  $I$ . Обозначим через  $\pi$  внутреннюю четность частицы. Из соотношения (15.87) следует, что  $T(I) a^\dagger(\hat{k}) T^{-1}(I) = \pi a^\dagger(I\hat{k})$ ,  $T(I) a(\hat{k}) \times \times T^{-1}(I) = \pi a(I\hat{k})$ . Обозначим внутреннюю четность античастицы через  $\pi'$ . Тогда  $T(I) b^\dagger(\hat{k}) T^{-1}(I) = \pi' b^\dagger(I\hat{k})$ . Если потребовать, чтобы поле  $\Phi$  имело определенную четность, то

$$T(I) \Phi(\hat{e}) T^{-1}(I) = \pm \Phi(I\hat{e}). \quad (16.54)$$

Из определения (16.44) поля  $\Phi$  и свойств операторов  $a$  и  $b^\dagger$  следует, что равенство (16.54) справедливо лишь при  $\pi = \pi'$ . В этом случае

$$T(I) \Phi(\hat{e}) T^{-1}(I) = \pi \Phi(I\hat{e}), \quad (16.55)$$

т. е. четностью частицы задается четность поля. Для мезонов четность  $\pi = -1$  и поле нечетно. (Просим извинить нас за двоякое использование символа  $\pi$  в одном предложении!) В этом случае наше скалярное поле называется псевдоскалярным.

Возвращаясь к полю Дирака, мы должны начать с преобразования инверсии для состояний, соответствующих частицам:

$$T(I) a^\dagger(\hat{k}m_s) T^{-1}(I) = \pi a^\dagger(I\hat{k}m_s). \quad (16.56)$$

Будем считать, что

$$T(I) b^\dagger(\hat{k}m_s) T^{-1}(I) = \pi' b^\dagger(I\hat{k}m_s). \quad (16.57)$$

Напомним (гл. 15, § 8, п. Г), что оператор инверсии в четырехкомпонентном пространстве представляется матрицей  $\gamma_t$ . Поэтому мы потребуем, чтобы поле, имеющее определенную четность, удовлетворяло соотношению

$$T(I) \Phi(\hat{e}) T^{-1}(I) = \pm \gamma_t \Phi(I\hat{e}), \quad (16.58)$$

где  $\Phi(\hat{e})$  — опять вектор-столбец. Но, подставляя выражения (16.56) и (16.57) в равенство (16.49), получаем

$$T(I) \Phi_\alpha(\hat{e}) T^{-1}(I) = k^{1/2} (2\pi)^{-3/2} \int k_t^{-1} dk \sum_{m_s} \{ u_{\alpha m_s}(\hat{k}) \pi a(I\hat{k}m_s) \times \times \exp(-i\hat{k} \cdot \hat{e}) + v_{\alpha m_s}(\hat{k}) \pi' b^\dagger(I\hat{k}m_s) \exp(i\hat{k} \cdot \hat{e}) \}. \quad (16.59)$$

Чтобы связать это выражение с полем  $\Phi(\hat{1}\hat{e})$ , произведем замену переменной интегрирования  $\hat{1}\hat{k} \rightarrow \hat{k}$ . Воспользуемся также свойством  $u(\hat{1}\hat{k}) = \gamma_t u(\hat{k})$ , которое вытекает из явного вида (15.135a) матрицы  $u(\hat{k})$ . Аналогично  $v(\hat{1}\hat{k}) = -\gamma_t v(\hat{k})$ , и, так как знак здесь другой, соотношение (16.59) сводится к виду (16.58) лишь при  $\pi' = -\pi$ . В этом случае

$$T(l) \Phi(\hat{e}) T^{-1}(l) = \pi \gamma_t \Phi(\hat{1}\hat{e}). \quad (16.60)$$

Экспериментальные данные для системы электрон—позитрон подтверждают наш вывод о том, что в случае  $s = 1/2$  четность античастицы противоположна четности частицы.

Уравнение Дирака (15.131) написано для одночастичных состояний. В него входят инфинитезимальные операторы  $\hat{P}$ , соответствующие трансляциям векторов состояния. Покажем, что операторы поля  $\Phi(\hat{e})$  удовлетворяют уравнению Дирака

$$(\hat{\gamma} \cdot \square + ik) \Phi(\hat{e}) = 0, \quad (16.61)$$

где  $\square = (-\nabla, \partial/\partial ct)$  — дифференциальный оператор, действующий на переменные  $\hat{e}$ . Этот результат прямо следует из определения (16.49). [Нужно оператором  $\square$  подействовать на экспоненты и применить соотношение (16.60).] Уравнение Дирака (16.61) — это опять уравнение поля, следующее из лагранжиана. В данном случае плотность лагранжиана, которая приводит к этому уравнению поля, имеет вид  $\mathcal{L} = \Phi(\hat{e}) (\hat{\gamma} \cdot \square + ik) \Phi(\hat{e})$ . Как и в п. В, такой плотности лагранжиана соответствует описание, основанное на представлении о частицах.

### Поле нейтрино

В гл. 15, § 8, п. Д мы, пользуясь представлением  $L^{(0,1/2)}$  и уравнением Вейля, показали, что одночастичное состояние для нейтрино, соответствующее нулевой массе и  $m = -1/2$ , представляется в двухкомпонентной форме. Поэтому мы будем строить двухкомпонентный оператор поля  $\Phi(\hat{e})$ , подобный оператору поля, определяемому равенством (16.49). Предполагается, что он преобразуется со-

гласно равенству

$$T(\hat{\epsilon}, L) \Phi(\hat{e}) T^{-1}(\hat{\epsilon}, L) = (L^{(0, 1/2)})^{-1} \Phi(L\hat{e} + \hat{e}). \quad (16.62)$$

Поле будет строиться из операторов рождения нейтрино  $a^\dagger(\hat{k}-)$  и операторов рождения антинейтрино  $b^\dagger(\hat{k}+)$ . Знак минус в обозначении оператора  $a^\dagger$  напоминает о том, что для нейтрино  $m = -1/2$ . Нейтрино преобразуется по представлению  $P^{(0, -1/2)}$ , согласно равенству (15.68) или равенству (15.144). Антинейтрино мы приписываем положительную спиральность, но это, как мы увидим, необходимо для того, чтобы поле удовлетворяло условиям инвариантности и причинности. Положим

$$\Phi_\alpha(\hat{e}) = (2\pi)^{-3/2} \int k_t^{-1} dk \omega_\alpha(\hat{k}) \{a(\hat{k}-) \exp(-i\hat{k} \cdot \hat{e}) + b^\dagger(\hat{k}+) \exp(i\hat{k} \cdot \hat{e})\}. \quad (16.63)$$

Мы покажем, что коэффициенты  $w$ , которые в данном случае являются  $2 \times 1$ -матрицами, определяются вторым столбцом матрицы  $L^{(0, 1/2)}(R_{xy} Q_z)$ , где  $R_{xy} Q_z$  — преобразование Лоренца, которое задавалось в гл. 15, § 4, п. Б как преобразование, переводящее вектор  $(0, 0, 1, 1)$  в вектор  $\hat{k}$ . Выбор такого выражения оправдан тем, что, применяя соотношение (15.144) для преобразования частиц к уравнению (16.63), получаем

$$\begin{aligned} T(\hat{\epsilon}, L) \Phi_\alpha(\hat{e}) T^{-1}(\hat{\epsilon}, L) &= (2\pi)^{-3/2} \int k_t^{-1} dk \omega_\alpha(\hat{k}) \times \\ &\times \{ \exp(-i\hat{k}' \cdot \hat{\epsilon} - i\hat{k} \cdot \hat{e}) L_{1/2-1/2}^{(0, 1/2)} [(R'_{xy} Q'_z)^{-1} L R_{xy} Q_z]^* a(\hat{k}'-) + \\ &+ \exp(i\hat{k}' \cdot \hat{\epsilon} + i\hat{k} \cdot \hat{e}) L_{1/2+1/2}^{(1/2, 0)} [(R'_{xy} Q'_z)^{-1} L R_{xy} Q_z] b^\dagger(\hat{k}+) \}. \end{aligned} \quad (16.64)$$

Представляя вектор  $w(\hat{k})$  в виде второго столбца матрицы  $L^{(0, 1/2)}$ :  $w(\hat{k}) = L^{(0, 1/2)}(R_{xy} Q_z) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ , мы в силу унитарности преобразования (15.144) имеем  $w(\hat{k}) L_{1/2-1/2}^{(0, 1/2)} \times [(R'_{xy} Q'_z)^{-1} L R_{xy} Q_z]^* = \{ L^{(0, 1/2)}(R_{xy} Q_z) L^{(0, 1/2)} [(R_{xy} Q_z)^{-1} \times L^{-1} R'_{xy} Q'_z] \} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = L^{(0, 1/2)}(L^{-1}) w(\hat{k}')$ . Здесь мы воспользовались тем, что  $L_{1/2-1/2}^{(0, 1/2)} [(R'_{xy} Q'_z)^{-1} L R_{xy} Q_z] = 0$  [см. текст после формулы (15.144)]. Поскольку представления  $L^{(1/2, 0)}$  и  $L^{(0, 1/2)*}$  эквивалентны (гл. 15, § 2, п. Д), подобное же

соотношение справедливо и для второго члена равенства (16.64):  $w(\hat{k}) L_{1/2, 1/2}^{(1/2, 0)} [(R'_{xy} Q'_z)^{-1} L R_{xy} Q_z] = L^{(0, 1/2)} (L^{-1}) w(\hat{k}')$ . Подставляя оба эти выражения в равенство (16.64) и производя замену переменной интегрирования  $\hat{k}' \rightarrow \hat{k}$ , приходим к желаемому результату (16.62).

Так же как и в предыдущих примерах, поле  $\Phi(\hat{e})$  удовлетворяет соответствующему уравнению поля. В данном случае это уравнение Вейля (15.146):

$$\left( s \cdot \nabla - \frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Phi(\hat{e}) = 0.$$

Плотность лагранжиана для свободного поля нейтрино равна

$$\mathcal{L} = \Phi^\dagger(\hat{e}) \left( s \cdot \nabla - \frac{1}{2c} \frac{\partial}{\partial t} \right) \Phi(\hat{e}).$$

Заметим, что поле  $\Phi^\dagger$  преобразуется по представлению  $L^{(1/2, 0)}$  и оператор Вейля является компонентой четырехмерного вектора  $\hat{W} + im\hat{P}$ . Довольно удивительно, что для инвариантности плотности  $\mathcal{L}$  не требуются другие компоненты. Но как объясняется в тексте, следующем за формулой (15.145), это обусловлено особой формой соотношений между этими компонентами.

Хотя нейтрино не имеет электрического заряда, мы можем, как и в п. Д, ввести оператор  $Q$  разности между числом нейтрино и числом антинейтрино. Он называется оператором «лептонного заряда». Если аналогичный заряд приписать электронам и мюонам, то можно доказать экспериментально, что такой лептонный заряд сохраняется подобно электрическому заряду. Это можно продемонстрировать на примере  $\beta$ -распада  $n \rightarrow p + e + \bar{\nu}$  нейтрона на протон, электрон и антинейтрино  $\bar{\nu}$ . (Более тяжелым частицам  $n$  и  $p$  приписывается нулевой лептонный заряд.) Сказанное подтверждается многими экспериментами. Например, процесс  $\bar{\nu} + n \rightarrow p + e$  не наблюдается, но наблюдается процесс  $\bar{\nu} + p \rightarrow n + e$ , где  $e$  — антиэлектрон (т. е. позитрон). Отметим, что более тяжелые частицы, подобные нуклонам  $n$  и  $p$ , образуют семейство частиц, называемых «барионами», с барионным зарядом  $+1$ . Барионный заряд — еще один пример сохраняющегося заряда.

В гл. 15, § 7, п. В мы видели, что пространственная инверсия меняет спиральность, т. е. изменяет знак величины  $m$ . Поэтому поле нейтрино не может иметь определенной четности, как поле Дирака. Пространственная инверсия должна переводить нейтрино ( $m = -1/2$ ) в нейтрино с  $m = 1/2$ , но в природе нет такой частицы, и, следовательно, она не может входить в поле. Однако существуют антинейтрино с  $m = 1/2$ . Если мы, как в п. Е, введем оператор зарядового сопряжения  $C$ , то относительно комбинированного преобразования зарядового сопряжения и пространственной инверсии поле может преобразоваться простым образом. Комбинированное преобразование обозначим символом  $CP$ . Унитарный оператор  $CP$  мы определим соотношениями  $CPa^\dagger(\hat{k}) (CP)^{-1} = \eta(\hat{k}) b^\dagger(l\hat{k} +)$ ,  $(CP)^2 = 1$ , где  $\eta(\hat{k})$  — фазовый множитель. Основываясь на свойствах вектора  $w(\hat{k})$ , мы можем доказать, что оператор  $CP$  преобразует компоненты поля  $\Phi(\hat{e})$  в компоненты поля  $\Phi^\dagger(l\hat{e})$ . В самом деле,

$$CP\Phi_\alpha(\hat{e})(CP)^{-1} = \sum_\beta (t\sigma_\nu)_{\alpha\beta} \Phi_\beta^\dagger(l\hat{e}),$$

где  $\sigma_y = 2s_y$  есть  $2 \times 2$ -матрица спина. Значит, можно так построить лагранжиан, содержащий поле нейтрино, что он будет инвариантным относительно преобразования  $CP$ , но не инвариантным относительно отдельных преобразований  $C$  или  $P$ . (Подчеркнем, что сохранение заряда и инвариантность относительно зарядового сопряжения — это совершенно разные свойства.)

### Электромагнитное поле

Электромагнитное поле — хорошо известное, классическое понятие. Электромагнитное поле проявляется и на макроскопических расстояниях. Этим оно отличается от ядерных полей, которые убывают экспоненциально с расстоянием, начиная с расстояний порядка  $10^{-13}$  см. Тем не менее для построения последовательной теории, а также для согласования теории с точными экспериментами мы должны проквантовать электромагнитное поле. Мы убедимся ниже, что если операторы поля соответствуют



частицам нулевой массы с  $m = \pm 1$ , т. е. преобразуются по представлениям группы Пуанкаре  $P^{(0, \pm 1)}$ , то построенное таким образом поле обладает свойствами электромагнитного поля. Соответствующие частицы называются фотонами. Классическая интерпретация поля восстанавливается точно так же, как это делается при переходе от квантовой к классической механике частиц. Метод квантования аналогичен методу квантования поля нейтрино. Нужно только заменить  $|m| = 1/2$  на  $|m| = 1$  и внести еще два существенных изменения. Прежде всего, для фотона возможны состояния с двумя спиральностями  $m = \pm 1$ . Следовательно, можно построить поле, имеющее определенную четность, т. е. при электромагнитных взаимодействиях четность может сохраняться. Второе изменение связано с тем, что фотон не несет заряда, а значит нет античастицы, отличающейся от самого фотона. В поле нейтрино присутствовали состояния с обеими спиральностями: одно для частицы, другое для античастицы. Принимая во внимание два указанных отличия, мы получаем естественное обобщение равенства (16.63) на случай  $|m| = 1$ :

$$\Phi_{\alpha}(\hat{e}) = (2\pi)^{-3/2} \int k_T^{-1} dk \omega_{\alpha}^*(\hat{k}) \{ a(\hat{k}-) \exp(-i\hat{k} \cdot \hat{e}) + a^{\dagger}(\hat{k}+) \exp(i\hat{k} \cdot \hat{e}) \}, \quad (16.65)$$

где  $a^{\dagger}(\hat{k} \pm)$  — операторы рождения фотонов со спиральностями  $\pm 1$ . Теперь само поле и коэффициенты  $w(\hat{k})$  являются трехмерными векторами. Выбирая в качестве вектора  $w(\hat{k})$  трехмерный вектор, стоящий в третьем столбце матрицы  $L^{(0, 1)}(R_{xy} Q_z)$  (он соответствует значению  $m = -1$ ), мы, как и раньше, можем доказать, что поля преобразуются следующим образом:

$$\begin{aligned} T(\hat{e}, L) \Phi(\hat{e}) T^{-1}(\hat{e}, L) &= (L^{(0, 1)})^{-1} \Phi(L\hat{e} + \hat{e}), \\ T(\hat{e}, L) \Phi^{\dagger}(\hat{e}) T^{-1}(\hat{e}, L) &= \Phi^{\dagger}(L\hat{e} + \hat{e}) L^{(1, 0)}. \end{aligned} \quad (16.66)$$

Такой выбор вектора  $w(\hat{k})$  обосновывается точно так же, как и в случае нейтрино. Но необходимо выяснить струк-

туру вектора  $w(\hat{k})$ . Он дается выражением

$$\begin{aligned} w(\hat{k}) &= L^{(0,1)}(R_{xy} Q_z) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = L^{(0,1)}(R_{xy}) L^{(0,1)}(Q_z) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \\ &= k_t D^{(1)}(R_{xy}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (16.67)$$

где мы воспользовались тем, что для вращений  $L^{(0,1)}(R_{xy}) = D^{(1)}(R_{xy})$ , а также тем, что для буста  $Q_z = \exp(bY_z) = \exp(ibX_z) = \exp(bs_z)$  матрица  $L^{(0,1)}(Q_z)$  становится диагональной, причем  $L^{(0,1)}_{-1-1}(Q_z) = \exp(-b) = k_t$ . Соотношение между величинами  $b$  и  $k_t$  следует из того, что  $Q_z(0\ 0\ 1\ 1) = (0\ 0\ k_t\ k_t)$ , и в силу равенства (15.24) мы имеем  $\text{ch } b - \text{sh } b = k_t$ . Напомним (гл. 7, § 4, п. Д), что заданный в  $m$ -базисе вектор

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

в декартовом базисе имеет вид  $(e_x - ie_y)/2^{1/2}$ . Равенство (16.67) говорит нам, что  $w(\hat{k})$  — это вектор длины  $k_t$ , пропорциональный вектору

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

повернутому с помощью преобразования  $R_{xy}$ . Поскольку преобразование  $R_{xy}$  переводит ось  $z$  в ось, направленную вдоль вектора  $k$ , вектор  $w(\hat{k})$  представляется в виде

$$w(\hat{k}) = k_t [e_1(\hat{k}) - ie_2(\hat{k})]/2^{1/2}, \quad (16.68)$$

где  $e_1$  и  $e_2$  — ортогональные единичные векторы, лежащие в плоскости, перпендикулярной вектору  $k$ . Положение вектора  $e_1$  на этой плоскости не имеет значения, так как любой поворот в этой плоскости изменяет лишь фазовый

множитель вектора  $\mathbf{w}(\hat{\mathbf{k}})$ . Но, выбрав вектор  $\mathbf{e}_2$  в качестве оси вращения  $\mathbf{R}_{xy}$ , можно добиться, чтобы наши единичные векторы обладали следующими простыми свойствами:  $\mathbf{e}_2(\hat{\mathbf{l}}\mathbf{k}) = \mathbf{e}_2(\hat{\mathbf{k}})$  и  $\mathbf{e}_1(\hat{\mathbf{l}}\mathbf{k}) = -\mathbf{e}_1(\hat{\mathbf{k}})$  (вектор  $\hat{\mathbf{l}}\mathbf{k}$  получается в результате поворота  $\mathbf{R}_{xy}$  на угол  $\pi$ ). Тогда из формулы (16.68) следует, что  $\mathbf{w}(\hat{\mathbf{l}}\mathbf{k}) = -\mathbf{w}^*(\hat{\mathbf{k}})$ .

Согласно формуле (15.91), операторы рождения частиц при пространственной инверсии преобразуются следующим образом:

$$T(I) \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}} \pm) T^{-1}(I) = -\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{l}}\mathbf{k} \mp). \quad (16.69)$$

Здесь выбран знак минус, но, вообще говоря, отношение фазовых множителей двух состояний с разными спиральностями может быть любым. [В равенстве (15.91) был взят знак плюс.] Но поскольку выбор сделан, теперь приобретает значение знак плюс перед операторами  $\mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}} -)$  и  $\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}} +)$  в выражении (16.65). С учетом равенства (16.69) убеждаемся в том, что поле удовлетворяет соотношению  $T(I) \Phi(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(I) = \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{l}}\hat{\mathbf{e}})$ . Следовательно, из полей  $\Phi$  и  $\Phi^\dagger$  можно образовать четную и нечетную относительно пространственной инверсии линейные комбинации:  $\mathbf{V}(\hat{\mathbf{e}}) = [\Phi(\hat{\mathbf{e}}) + \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})]/2^{1/2}$ ,  $\mathbf{E}(\hat{\mathbf{e}}) = -i[\Phi(\hat{\mathbf{e}}) - \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})]/2^{1/2}$ . Здесь выбраны обычные числовые множители. Множитель  $i$  введен для того, чтобы оператор  $\mathbf{E}$  был эрмитов, так же как оператор  $\mathbf{V}$ . Используя символы  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{V}$ , мы предвидим связь этих операторов с электрическим и магнитным полями классической теории (§ 2, п. В). Для построения квантованного поля, соответствующего классическому векторному потенциалу  $\hat{\mathbf{A}}$ , введем удобные операторы рождения

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_1^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) &= [\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}} +) - \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}} -)]/2^{1/2}, \\ \mathbf{a}_2^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) &= -i[\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}} +) + \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}} -)]/2^{1/2}. \end{aligned} \quad (16.70)$$

Это линейные комбинации двух состояний со спиральностями « $\pm$ ». Они описывают состояния с плоской поляризацией. Подставляя выражение (16.68) для вектора  $\mathbf{w}$  в равенство (16.65) и переходя к новым операторам, полу-

чаем

$$\mathbf{E}(\hat{\mathbf{e}}) = (2\pi)^{-3/2} 2^{-1/2} i \int d\mathbf{k} \{ [\mathbf{e}_1(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_1(\hat{\mathbf{k}}) + \\ + \mathbf{e}_2(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_2(\hat{\mathbf{k}})] \exp(-i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) - \\ - [\mathbf{e}_1(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_1^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) + \mathbf{e}_2(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_2^\dagger(\hat{\mathbf{k}})] \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \}, \quad (16.71)$$

$$\mathbf{B}(\hat{\mathbf{e}}) = (2\pi)^{-3/2} 2^{-1/2} i \int d\mathbf{k} \{ [\mathbf{e}_2(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_1(\hat{\mathbf{k}}) - \\ - \mathbf{e}_1(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_2(\hat{\mathbf{k}})] \exp(-i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) - \\ - [\mathbf{e}_2(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_1^\dagger(\hat{\mathbf{k}}) - \mathbf{e}_1(\hat{\mathbf{k}}) \mathbf{a}_2^\dagger(\hat{\mathbf{k}})] \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \}$$

Из вида формул (16.71) следует, что оба оператора  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$  можно выразить через одно векторное поле

$$\mathbf{A}(\mathbf{e}) = (2\pi)^{-3/2} 2^{-1/2} \int k_t^{-1} d\mathbf{k} \sum_{\lambda=1,2} \mathbf{e}(\hat{\mathbf{k}}, \lambda) \{ \mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}}, \lambda) \exp(-i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) + \\ + \mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}}, \lambda) \exp(i\hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{e}}) \} \quad (16.72)$$

следующим образом:

$$\mathbf{E}(\hat{\mathbf{e}}) = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{e}}), \quad \mathbf{B}(\hat{\mathbf{e}}) = \text{rot } \mathbf{A}(\hat{\mathbf{e}}). \quad (16.73)$$

Здесь мы использовали простые свойства  $\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2$ ,  $\mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_2 = -\mathbf{e}_1$  системы ортонормальных векторов с правой ориентацией.

Нетрудно убедиться, что, как и в других примерах, это поле удовлетворяет волновым уравнениям, выведенным в гл. 15, § 8, п. Е. Фактически приведенным там уравнениям удовлетворяет поле  $\Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}})$ , преобразующееся по представлению  $L^{(1,0)}$ , а для поля  $\Phi(\hat{\mathbf{e}})$  нужно изменить знак в формуле (15.149). Итак,

$$\text{rot } \Phi(\mathbf{e}) = -\frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\hat{\mathbf{e}}), \quad \text{rot } \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}) = \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial t} \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}), \\ \text{div } \Phi(\hat{\mathbf{e}}) = 0, \quad \text{div } \Phi^\dagger(\hat{\mathbf{e}}) = 0.$$

Эти уравнения, если их переписать с использованием напряженностей поля  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$ , преобразуются в известные уравнения Максвелла:

$$\text{rot } \mathbf{B} = \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{E}, \quad \text{rot } \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \mathbf{B}, \quad \text{div } \mathbf{B} = \text{div } \mathbf{E} = 0. \quad (16.74)$$

Поэтому такое поле, состоящее из частиц нулевой массы  $c|m|=1$  (фотонов), отождествляют с электромагнитным

полем, характеризуемым напряженностями  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$ , в которое оно переходит в классическом пределе. Напряженности  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$ , как и должно быть, получаются из одного поля  $\mathbf{A}$  таким же путем, как и в классической теории (§ 1, п. В). Напомним, однако, что в классическом случае мы для описания инвариантности теории относительно преобразований Лоренца пользовались четырехмерным векторным потенциалом  $\hat{\mathbf{A}} = (\mathbf{A}, \varphi)$  а в выражении (16.72) дается трехмерный вектор. В § 1, п. В мы показали, что любые два потенциала  $\hat{\mathbf{A}}$ , приводящие к одинаковым напряженностям  $\mathbf{E}$  и  $\mathbf{B}$ , с физической точки зрения эквивалентны. Значит, имеется некоторый произвол в выборе потенциала  $\hat{\mathbf{A}}$ . Один из возможных выборов (он называется «калибровкой излучения» или «кулоновской калибровкой») состоит в том, что полагают  $\varphi = 0$ . Выбор потенциала  $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{e}})$  в формуле (16.72) соответствует такой калибровке.

Мы построили поле  $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{e}})$  довольно сложным путем, исходя из произведений представлений  $P^{(0,0)} \otimes L^{(1,0)}$  и  $P^{(0,0)} \otimes L^{(0,1)}$ . Преимуществом такого пути была аналогия с построением поля нейтрино. Но можно было бы построить поле  $\mathbf{E}(\hat{\mathbf{e}})$  проще — на основании произведения представлений  $P^{(0,0)} \otimes L^{(1/2, 1/2)}$ , которое также содержит представление  $P^{(0, \pm 1)}$ .

Наконец, отметим, что по построению напряженность  $\mathbf{E}$  имеет положительную, а напряженность  $\mathbf{B}$  — отрицательную внутреннюю четность. Поэтому из выражения (16.72) следует, что поле  $\mathbf{A}$  должно иметь отрицательную внутреннюю четность:  $T(l) \mathbf{A}(\hat{\mathbf{e}}) T^{-1}(l) = -\mathbf{A}(l\hat{\mathbf{e}})$ . Поэтому фотону приписывается отрицательная внутренняя четность. Если взять в операторах  $\mathbf{a}(\hat{\mathbf{k}} -)$  и  $\mathbf{a}^\dagger(\hat{\mathbf{k}} +)$ , входящих в поле  $\Phi_\alpha(\hat{\mathbf{e}})$  [формула (16.65)], другие знаки, то получится поле с положительной внутренней четностью, но это противоречит экспериментальным данным для электромагнитного поля.

## ЛИТЕРАТУРА<sup>1)</sup>

Для дальнейшего чтения мы рекомендуем следующие книги по классической механике и теории поля:

<sup>1)</sup> Литература, помеченная звездочкой, добавлена при переводе. — Прим. ред.

Landau L. D., Lifshitz E. M., A Shorter Course of Theoretical Physics, vol. 1, Mechanics and electrodynamics, Pergamon Press, London, 1972.

[См. также: Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Краткий курс теоретической физики/Т. 1: Механика. Электродинамика.— М.: Наука, 1969.]

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика/Т. 1: Механика.— М.: Наука, 1973\*.

Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика/Т. 2: Теория поля.— М.: Наука, 1973\*.

Подробное введение в релятивистскую квантовую теорию поля можно найти в любой из следующих книг:

Bjorken J. D., Drell S. D., Relativistic Quantum Fields, McGraw-Hill, New York, 1965.

[Имеется перевод: Бьёркен Дж., Дрелл С. Релятивистская квантовая теория/Т. 2: Релятивистские квантовые поля.— М.: Наука, 1978.]

Schweber S. An Introduction to Relativistic Quantum Field Theory, Harper and Row, New York, 1961.

[Имеется перевод: Швеебер С. Введение в релятивистскую квантовую теорию поля.— М.: ИЛ, 1963.]

Боголюбов Н. Н., Ширков Д. В. Введение в теорию квантованных полей.— М.: Наука, 1976\*.

Для ознакомления с математическим аппаратом квантовой теории поля рекомендуем книги:

Streater R. F., Wightman A. S. PCT, Spin and Statistics and all that, Benjamin, New York, 1964.

[Имеется перевод: Стример Р., Вайтман А. С. PCT, спин и статистика и все такое.— М.: Наука, 1966.]

Боголюбов Н. Н., Логунов А. А., Тодоров И. Т. Основы аксиоматического подхода в квантовой теории поля.— М.: Наука, 1969\*.

Подробные экспериментальные данные, на которых основаны такие новые понятия, как зарядовое сопряжение, можно найти в работах Перкинса из литературы к гл. 11 и Дайсона из литературы к гл. 15.

## ЗАДАЧИ

- 16.1. Покажите, что поле  $E + iB$  [формула (16.17)] преобразуется по представлению группы Лоренца  $L^{(10)}$ , а поле  $E - iB$  — по представлению  $L^{(01)}$ . [Возьмите матрицы (15.30) для операторов  $X$  и  $Y$  в представлении  $L^{(10)}$  и покажите, что  $(X - iY)(E + iB) = 0$ .]
- 16.2. Докажите, что для плотности лагранжиана, инвариантной относительно временных сдвигов ( $d\mathcal{L}/dt = 0$ ), гамильтониан  $H = \int \mathcal{H} dV$  постоянен. [Примените уравнение поля (16.21) и теорему Гаусса, предполагая, что поля убывают на бесконечности.]
- 16.3. Точно так же докажите, что вектор импульса поля  $P$ , определенный в § 2, п. Б, постоянен, если плотность  $\mathcal{L}$  инвариантна относительно пространственных сдвигов.
- 16.4. В результате столкновения две частицы с массой покоя  $M$  и

с равными по величине, но противоположными по направлению импульсами  $\pm \mathbf{p}$  останавливаются и рожают также покоящуюся частицу. Покажите, что ее масса покоя равна  $2 \{(M^2 + p^2/c^2)^{1/2} - M\}$ .

- 16.5. Покажите, что оператор числа частиц, определенный равенством (16.30), обладает следующими свойствами:

$$N|0\rangle = 0, \quad N|\hat{k}\rangle = |\hat{k}\rangle \quad \text{и в общем случае} \quad N|\hat{k}_1\hat{k}_2 \dots \hat{k}_n\rangle = \\ = n|\hat{k}_1\hat{k}_2 \dots \hat{k}_n\rangle.$$

## ГРУППА ПЕРЕСТАНОВОК $\mathcal{S}_n$

Группа перестановок<sup>1)</sup>  $\mathcal{S}_n$ , которая состоит из всех перестановок  $n$  объектов, играет в теории симметрии любопытную роль. Можно достичь глубокого понимания симметрии, совершенно не зная свойств группы  $\mathcal{S}_n$ , но в то же время эта группа лежит в основании многих физических проблем. Группа перестановок связана с точечными группами гл. 9 так называемой теоремой Кэли, согласно которой любая точечная группа изоморфна некоторой группе перестановок, хотя и не обязательно группе всех перестановок  $\mathcal{S}_n$ . Например, в гл. 2 мы убедились, что изоморфны группы  $D_3$  и  $\mathcal{S}_3$ . Группа перестановок также связана с группой вращений и унитарной группой. Неприводимые представления этих групп строят как произведения элементарных представлений. Затем исследуют поведение таких произведений при перестановках представлений. В гл. 18 мы разберем этот вопрос подробно. В физических приложениях соответственно статистике Бозе или Ферми полная волновая функция либо полностью симметрична, либо полностью антисимметрична (гл. 5, § 9). Но когда такая волновая функция состоит из отдельных волновых функций, описывающих координаты положения, переменные спина или другие степени свободы, поведение отдельных составляющих при перестановках может быть гораздо более сложным. Мы уже использовали группу перестановок  $\mathcal{S}_3$  при описании атомной структуры в гл. 8, § 6, п. Г и при описании структуры ядер и элементарных частиц в гл. 12. Мы могли сделать это, не прибегая к подробному анализу, так как при малых числах  $n$  группа перестановок весьма проста. Кроме того, наша группа

<sup>1)</sup> Группу перестановок иногда называют симметрической группой и группой подстановок.— *Прим. перев.*



перестановок изоморфна группе  $D_3$ , которая подробно рассмотрена ранее в этой книге. В физических задачах при больших числах  $n$  группы перестановок применяются точно так же, как и группы перестановок при малых числах  $n$ . Поэтому в данной главе мы не будем рассматривать какие-либо новые приложения групп перестановок. Мы хотим лишь изложить общие свойства группы  $\mathcal{S}_n$  и ее представлений.

Анализ группы  $\mathcal{S}_n$  упрощается тем, что в отличие от точечных групп ее свойства можно исследовать при произвольном  $n$ , не рассматривая каждое значение  $n$  отдельно. Мы часто будем называть объекты перестановки частицами, так как в приложениях это типичная ситуация. В первых трех параграфах мы остановимся на некоторых свойствах самих перестановок. Параграфы 4—9 посвящены неприводимым представлениям и характерам группы  $\mathcal{S}_n$ . Там же введены схемы и таблицы Юнга, как удобный способ нумерации неприводимых представлений и базисных векторов. Вопрос о явном виде матрицы произвольного представления мы отложили до § 13. Продолжая начатое в § 10 обсуждение обычного прямого произведения, мы в § 11 введем понятие внешнего произведения, которое также пригодится в гл. 18. Основное внимание в данной главе будет уделено разъяснению сути дела, а не строгому изложению. Поэтому мы не доказываем все утверждения в общем случае любых чисел  $n$ . Мы не выводим общих формул для таких величин, как характеры, хотя и объясняем, как эти величины можно найти при любом заданном  $n$ .

## § 1. Циклы

Цикл—это перестановка особого вида. Она определяется следующим образом. Предположим, что целые числа  $p_1, p_2, \dots, p_l$  расставлены по порядку с угловым интервалом  $2\pi/l$  вдоль единичной окружности. Поворот на угол  $2\pi/l$  (в обозначениях примера 10 гл. 2, § 2) приводит к перестановке

$$\begin{pmatrix} p_1 & p_2 & p_3 & \dots & p_{l-1} & p_l \\ p_2 & p_3 & p_4 & \dots & p_l & p_1 \end{pmatrix}.$$

Такая перестановка называется циклом, длина которого равна  $l$ , и обозначается символом  $(p_1 p_2 p_3 \dots p_l)$ .

Любую перестановку

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}$$

можно представить в виде произведения циклов. Так, например, мы можем представить перестановку в виде  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 & 7 & 8 & 9 & 10 \\ 3 & 7 & 5 & 4 & 8 & 10 & 2 & 1 & 6 & 9 \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 & 8 \\ 3 & 5 & 8 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 7 \\ 7 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 6 & 9 & 10 \\ 10 & 6 & 9 \end{pmatrix} \equiv (1358)(6109)(27)(4)$ , т. е. в виде произведения четырех циклов длиной 4, 3, 2 и 1. В случае произвольной перестановки  $P$  число 1 заменяется числом  $p_1$ , тогда как само число  $p_1$ , стоящее где-то в первой строке матрицы  $P$ , заменяется числом, стоящим ниже, допустим числом  $q_1$ . Точно так же число  $q_1$  заменяется некоторым числом  $r_1$ . Следовательно, мы получаем последовательность чисел 1,  $p_1$ ,  $q_1$ ,  $r_1$ , ..., которая продолжается до тех пор, пока снова не появится число 1. Эта последовательность дает цикл  $(1 p_1 q_1 r_1 \dots)$ . Цикл может содержать все числа от 1 до  $n$ , но, вообще говоря, этого может и не быть. В таком случае выберем число, не входящее в цикл. Тем же способом, начиная с этого числа, строится новый цикл, у которого нет общих элементов с первым циклом. Таким образом перестановку  $P$  однозначно представляют в виде произведения циклов. Перестановки, соответствующие отдельным циклам, очевидно, коммутируют, так как нет чисел, принадлежащих одновременно любым двум циклам. Заметим, что если какое-либо число не меняется при перестановке  $P$ , то ему соответствует цикл длиной  $l=1$ , который состоит именно из этого числа. Сумма длин  $l_i$  циклов перестановки  $P$  должна быть равна числу  $n$ . Поэтому разбиение  $n$  на циклы связано с разбиением  $n = \sum_i l_i$  целого числа  $n$  на положительные целые числа  $l_i$ . Для определенности мы всегда расставляем циклы в порядке убывания длин, т. е.  $l_i \geq l_{i+1}$ . Мы будем использовать обозначение  $[l_1 l_2 \dots l_n]$ . В приведенном выше примере при  $n=10$  перестановке сопоставляется разбиение  $[4 3 2 1]$ .

Цикл длиной  $l=2$  называется «простой перестановкой» и обозначается символом  $P_{ij}$ . В частности, перестановка  $P_{i i+1}$  называется «смежной перестановкой».

Любой цикл и, следовательно, любую перестановку можно представить в виде произведения простых перестановок. В самом деле, нетрудно убедиться, что

$$(1\ 2\ 3\ \dots\ k) \equiv \begin{pmatrix} 1\ 2\ 3\ \dots\ k-1\ k \\ 2\ 3\ 4\ \dots\ k\ 1 \end{pmatrix} = P_{12}P_{23}P_{34}\dots P_{k-1k}. \quad (17.1)$$

Любую простую перестановку можно путем последовательного применения соотношений типа  $P_{1k} = P_{12}P_{2k}P_{12}$  представить в виде произведения смежных перестановок.

## § 2. ЧЕТНОСТЬ ПЕРЕСТАНОВКИ

Перестановке можно приписать «четность»  $+1$  или  $-1$  следующим образом: 1) цикл нечетной длины имеет положительную четность  $+1$ ; 2) цикл четной длины имеет отрицательную четность  $-1$ ; 3) четность перестановки равна произведению четностей всех ее циклов. Положительная четность ставится в соответствие нечетной длине цикла не из прихоти, такое сопоставление естественно, поскольку при этом цикл единичной длины, при котором ничто не переставляется, имеет положительную четность.

Существуют еще два эквивалентных определения четности перестановки. В первом из них каждый цикл представляют в виде произведения простых перестановок. Тогда цикл нечетной длины содержит четное число простых перестановок и наоборот. Значит, перестановка с положительной четностью содержит четное число простых перестановок, а перестановка с отрицательной четностью — нечетное. Во втором из эквивалентных определений берут функцию

$$\Phi_A = \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \varphi_2(x_1) & \dots & \varphi_n(x_1) \\ \varphi_1(x_2) & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \varphi_1(x_n) & \varphi_2(x_n) & \dots & \varphi_n(x_n) \end{vmatrix}. \quad (17.2)$$

Это определитель, построенный из  $n$  разных функций  $\varphi_q$  совокупности  $n$  разных переменных  $x_1, x_2, \dots, x_n$ . Любая перестановка переменных приводит к определителю  $\Phi_A$  с переставленными строками. Согласно теории определе-

телей, это эквивалентно умножению определителя на  $+1$  или  $-1$  в зависимости от того, четное или нечетное число простых перестановок строк. Но такое число в точности совпадает с четностью перестановки, т. е.

$$P\Phi_A = \pi(P)\Phi_A, \quad (17.3)$$

где через  $\pi(P)$  мы обозначили четность перестановки  $P$ . Величина  $\pi(P)$  может принимать лишь значения  $\pm 1$ . Таким образом, четность  $\pi(P)$  определяется как результат действия перестановки  $P$  на определитель  $\Phi_A$ .

### § 3. КЛАССЫ СОПРЯЖЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

В гл. 2, § 7 мы показали для групп вращений, что если два вращения  $R$  и  $R'$  лежат в одном классе сопряженных элементов, то группа должна содержать вращение, переводящее ось вращения  $R$  в ось вращения  $R'$ . Для группы перестановок аналогичный результат формулируется так: если две перестановки  $P$  и  $P'$  лежат в одном классе сопряженных элементов группы  $\mathcal{S}_n$ , то должна существовать перестановка  $Q$ , которая при действии на обе строки перестановки  $P$  дает перестановку  $P'$ . Для доказательства этого утверждения определим сначала перестановки

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix}, \quad (17.4)$$

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ q_1 & q_2 & \dots & q_n \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ r_1 & r_2 & \dots & r_n \end{pmatrix}. \quad (17.5)$$

Последнее тождество позволяет найти числа  $r_i$ , если известны числа  $p_i$  и  $q_i$ . Далее,

$$\begin{aligned} QPQ^{-1} &= \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ r_1 & r_2 & \dots & r_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \dots & q_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \dots & q_n \\ r_1 & r_2 & \dots & r_n \end{pmatrix} = P'. \end{aligned} \quad (17.6)$$

Но перестановка  $P'$  — это как раз перестановка  $P$  [формула (17.4)], у которой числа обеих строк переставлены согласно перестановке  $Q$ , заданной формулой (17.5), т. е.

числа  $1\ 2\ \dots\ n$  заменены числами  $q_1\ q_2\ \dots\ q_n$ , а числа  $p_1\ p_2\ \dots\ p_n$  — числами  $r_1\ r_2\ \dots\ r_n$ .

Если говорить о циклах, то этот результат означает, что все элементы группы  $\mathcal{S}_n$ , соответствующие одному разбиению  $[l_1\ l_2\ \dots]$ , лежат в одном классе сопряженных элементов и, наоборот, все элементы из одного класса сопряженных элементов имеют одинаковую структуру распределения длин циклов, т. е. им сопоставляется одно разбиение. Например, две перестановки

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 5 & 4 \end{pmatrix} = (1\ 3\ 2)(4\ 5), \quad (17.7)$$

$$P' = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 1 & 4 & 5 & 3 \end{pmatrix} = (1\ 2)(3\ 4\ 5) = (3\ 4\ 5)(1\ 2) \quad (17.8)$$

из группы  $\mathcal{S}_5$  лежат в одном классе сопряженных элементов. Чтобы определить перестановку  $Q$ , при которой  $P' = QPQ^{-1}$ , достаточно просто заменить числа в циклах формулы (17.7) числами из циклов формулы (17.8), что дает  $Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ . Нетрудно убедиться, что

$$\begin{aligned} QPQ^{-1} &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 4 & 1 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 1 & 2 & 5 & 4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 5 & 4 & 1 & 2 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 3 & 5 & 4 & 1 & 2 \\ 4 & 3 & 5 & 2 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 1 & 4 & 5 & 3 \end{pmatrix} = P'. \end{aligned}$$

Конечно, перестановка  $Q$  не единственная, так как она задается лишь соотношением  $P' = QPQ^{-1}$ , которое не меняется, если перестановку  $Q$  умножить справа на перестановку, коммутирующую с перестановкой  $P$ .

Мы видим, например, что шесть элементов группы  $\mathcal{S}_5$  распадаются на три класса сопряженных элементов

$$\mathcal{C}_1 = E \text{ (тождественная перестановка),}$$

$$\mathcal{C}_2 = (1\ 2\ 3), (1\ 3\ 2),$$

$$\mathcal{C}_3 = (1\ 2), (1\ 3), (2\ 3),$$

которым сопоставляются три разбиения  $[111]$ ,  $[3]$  и  $[21]$ . Циклы единичной длины обычно опускают, как выше в классе  $\mathcal{C}_3$ . Недоразумения из-за этого не возникают. Считается, что все ненаписанные числа остаются неизмен-

ными. В данном примере классы сопряженных элементов  $\mathcal{C}_1$ ,  $\mathcal{C}_2$ , и  $\mathcal{C}_3$  упорядочены в соответствии с примерами гл. 2, § 7, п. Б и В. Более логично было бы упорядочивать классы сопряженных элементов по наибольшим длинам цикла, начиная с тех классов, у которых наибольшая длина цикла минимальна. Классы сопряженных элементов, у которых длина наибольших циклов одинакова, можно упорядочивать по длине следующего наибольшего цикла и т. д.

#### § 4. ТРИВИАЛЬНОЕ И АНТИСИММЕТРИЧНОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ, СИММЕТРИЧНЫЕ И АНТИСИММЕТРИЧНЫЕ ФУНКЦИИ

Оставшаяся часть данной главы посвящена в основном неприводимым представлениям группы  $\mathcal{S}_n$ . Завершением всего будет построение матриц  $T(P)$  в § 13. В данном же параграфе мы ограничимся рассмотрением двух простых одномерных представлений. Они строятся для любого  $n$ . Во-первых, у группы перестановок, как и любой группы, есть тривиальное одномерное представление, которое каждому элементу группы сопоставляет число  $+1$ . Следовательно, функция  $\Phi_S$ , преобразующаяся по этому представлению, не меняется при любой перестановке. Ее обычно называют полностью симметричной функцией. Итак, при любой перестановке  $P$

$$P\Phi_S = \Phi_S. \quad (17.9)$$

При произвольном  $n$  существует и другое одномерное представление, называемое антисимметричным. Оно каждому элементу  $P$  сопоставляет четность  $\pi(P) = \pm 1$ . Это есть представление группы перестановок, поскольку четность произведения перестановок равна произведению четностей перестановок. В самом деле, посмотрим, как произведение  $R = QP$  действует на функцию  $\Phi_A$  [формула (17.2)]:  $R\Phi_A = QP\Phi_A = Q\pi(P)\Phi_A = \pi(Q)\pi(P)\Phi_A$ . Отсюда получаем, что, действительно,  $\pi(R) = \pi(Q)\pi(P)$ . Функция  $\Phi_A$  — это удобная базисная функция антисимметричного представления

$$P\Phi_A = \pi(P)\Phi_A. \quad (17.10)$$

Функция типа функции  $\Phi_A$ , которая преобразуется по антисимметричному представлению, называется полностью антисимметричной. В частности, она обладает свойством

$$P_{ij}\Phi_A = -\Phi_A \quad (17.11)$$

при любых простых перестановках  $P_{ij}$ .

В гл. 4, § 19 мы построили проекционный оператор, который, действуя на произвольную функцию, дает функцию с определенным типом симметрии. Проекционные операторы для двух одномерных представлений, рассмотренных выше, таковы:

$$\begin{aligned} S &= \frac{1}{n!} \sum_P P, \\ A &= \frac{1}{n!} \sum_P \pi(P) P. \end{aligned} \quad (17.12)$$

Численный множитель  $1/n!$  в большинстве случаев не имеет значения. Первый из этих двух операторов называется симметризатором, а второй — антисимметризатором. Какова бы ни была функция  $f$ , функция  $f_S = Sf$  будет, согласно общей теории гл. 4, § 19, полностью симметричной, а функция  $f_A = Af$  — полностью антисимметричной. Правда, для некоторых функций  $f$  функции  $f_S$  и  $f_A$  могут тождественно равняться нулю.

Рассмотрим, например, случай, когда  $n=2$  и  $f=x_1$ . Имеем

$$\begin{aligned} Sf &= \frac{1}{2} (E + P_{12}) x_1 = \frac{1}{2} (x_1 + x_2) = f_S, \\ Af &= \frac{1}{2} (E - P_{12}) x_1 = \frac{1}{2} (x_1 - x_2) = f_A. \end{aligned}$$

Заметим, что здесь  $E = S + A$ , т. е.  $f = f_S + f_A$ . Значит, любую функцию двух переменных можно представить в виде суммы симметричной и антисимметричной составляющих.

В качестве второго примера возьмем  $n=3$  и снова

будем проектировать функцию  $f = x_1$ . Тогда

$$\begin{aligned} Sf &= \frac{1}{6} \left[ E + P_{12} + P_{13} + P_{23} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \right] x_1 = \\ &= \frac{1}{6} (x_1 + x_2 + x_3 + x_1 + x_2 + x_3) = \\ &= \frac{1}{3} (x_1 + x_2 + x_3) = f_S, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} Af &= \frac{1}{6} \left[ E - P_{12} - P_{13} - P_{23} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \right] x_1 = \\ &= \frac{1}{6} (x_1 - x_2 - x_3 - x_1 + x_2 + x_3) = 0. \end{aligned}$$

Значит, функция  $f = x_1$  слишком проста для того, чтобы получить полностью антисимметричную функцию. Она не содержит полностью антисимметричной составляющей, которую можно было бы спроектировать. Видно также, что при  $n > 2$  нельзя написать  $E = S + A$ . Поэтому для разложения произвольной функции при  $n > 2$  необходимо в дополнение к операторам  $S$  и  $A$  ввести другие операторы симметризации. Иначе говоря, при  $n > 2$  тривиальное и антисимметричное представления не исчерпывают всех возможных неприводимых представлений.

## § 5. ТАБЛИЦА ХАРАКТЕРОВ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В § 3 мы показали, что при любом числе  $n$  классы сопряженных элементов группы перестановок определяются разбиениями числа  $n$ . В силу общего результата гл. 4, § 13 число неприводимых представлений группы совпадает с числом классов сопряженных элементов. Поэтому число неприводимых представлений группы  $\mathcal{S}_n$  равно числу разбиений  $[n_1 n_2 \dots]$  числа  $n$ . При  $n = 2$  существуют два неприводимых представления, соответствующих разбиениям  $[2]$  и  $[11]$ , при  $n = 3$  существуют три неприводимых представления, соответствующих разбиениям  $[3]$ ,  $[21]$  и  $[111]$ , а при  $n = 4$  существуют пять неприводимых представлений.

В гл. 4, § 10 мы уже приводили таблицу характеров группы  $\mathcal{S}_3$ . Вернее, мы приводили таблицу характеров



группы  $D_3$ , но группы  $D_3$  и  $\mathcal{S}_3$  изоморфны (гл. 2, § 3). Методами, изложенными в гл. 4, § 15, можно также построить таблицы характеров при других небольших числах  $n$  (задача 17.2). Но сейчас мы рассмотрим общий метод построения таблиц характеров. Он также облегчит нам понимание свойств базисных векторов неприводимых представлений. Мы убедимся в том, что не только число неприводимых представлений равно числу разбиений, но и каждому неприводимому представлению можно естественным образом сопоставить некоторое разбиение.

Рассмотрим  $n$  частиц, которые можно распределить по  $n$  одночастичным состояниям  $\varphi_i$ . Тогда символ  $\varphi_i(k)$  означает, что частица  $k$  находится в состоянии  $i$ . Каждому разбиению  $[n_1 n_2 \dots]$  числа  $n$  мы сопоставим функцию

$$\Phi([n_1 n_2 \dots]) = \varphi_1(1) \varphi_1(2) \dots \varphi_1(n_1) \varphi_2(n_1+1) \varphi_2(n_1+2) \dots \\ \dots \varphi_2(n_1+n_2) \varphi_3(n_1+n_2+1) \dots \quad (17.13)$$

Здесь первые  $n_1$  частиц находятся в состоянии  $\varphi_1$ , следующие  $n_2$  — в состоянии  $\varphi_2$  и т. д. Построим теперь для каждого разбиения семейство из  $n!/(n_1! n_2! \dots)$  независимых функций  $\mathbf{P}\Phi([n_1 n_2 \dots])$ , где  $\mathbf{P}$  — любая перестановка частиц. [Существуют  $n!$  перестановок  $\mathbf{P}$ , но, учитывая, что некоторые из них не меняют функцию (17.13), мы должны разделить это число на  $n_1! n_2! \dots$ .] Таким семейством состояний определяется для каждого разбиения векторное пространство  $L[n_1 n_2 \dots]$ , инвариантное относительно группы перестановок, т. е. некоторое представление группы  $\mathcal{S}_n$ . В общем случае такие представления не являются неприводимыми, но их характеры довольно легко вычислить. После этого можно вычислить характеры неприводимых представлений путем вычитания, начиная с простого разбиения  $[n]$ . В этом случае функция (17.13) инвариантна относительно любых перестановок, т. е. соответствующее представление совпадает с тривиальным представлением.

Вычислим характер, соответствующий перестановке  $\mathbf{Q}$  в представлении, порождаемом векторным пространством  $L[n_1 n_2 \dots]$ . Мы должны просуммировать диагональные матричные элементы оператора  $\mathbf{Q}$  в этом пространстве. Но в результате действия оператора  $\mathbf{Q}$  на произвольный базисный вектор  $\mathbf{P}\Phi([n_1 n_2 \dots])$  получается другой базисный вектор, так как  $\mathbf{Q}\mathbf{P}$  — это просто другая перестановка.

Поэтому в каждом столбце матрицы  $Q$  имеется  $+1$ , а все остальные элементы равны нулю. Вклад в характер будут давать лишь диагональные элементы матрицы, равные  $+1$ . Иначе говоря, всякий базисный вектор, не меняющийся при перестановке  $Q$ , дает вклад  $+1$ . Следовательно, характер, соответствующий перестановке  $Q$ , равен числу базисных векторов типа  $P\Phi([n_1 n_2 \dots])$ , не меняющихся при перестановке  $Q$ . Достаточно, конечно, выбрать лишь одну перестановку  $Q$  из каждого класса сопряженных элементов. Характер тождественной перестановки  $E$  равен просто размерности  $n!/n_1!n_2!\dots$  пространства  $L([n_1 n_2 \dots])$ . Если  $Q$  — это простая перестановка  $P_{12}$ , то характер равен числу базисных векторов, для которых частицы 1 и 2 находятся в одинаковых состояниях: либо в состоянии  $\varphi_1$ , либо в состоянии  $\varphi_2$ . Это число можно найти, подсчитав, сколькими способами можно расположить оставшиеся  $n-2$  частиц; оно будет равно сумме

$$\frac{(n-2)!}{(n_1-2)!n_2!n_3!\dots} + \frac{(n-2)!}{n_1!(n_2-2)!n_3!\dots} + \dots \quad (17.14)$$

Если  $Q$  — это цикл длиной  $l$ , то подобные рассуждения дают для характера перестановки  $Q$  значение

$$\frac{(n-l)!}{(n_1-l)!n_2!n_3!\dots} + \frac{(n-l)!}{n_1!(n_2-l)!n_3!\dots} + \dots \quad (17.15)$$

Если же  $Q$  — произведение циклов, то нужно учитывать все возможные распределения циклов по состояниям, причем в каждом состоянии допускается любое число полных циклов. Можно вывести громоздкую общую формулу, но мы не будем здесь приводить ее. Из сказанного ранее следует, что характер будет равен нулю, если числа разбиения  $n_i$  недостаточно велики, чтобы вместить в каком-либо порядке циклы  $l_i$  перестановки  $Q$ . Этим объясняется наличие треугольных блоков, состоящих из нулей, в приводимых ниже таблицах.

Применяя эти результаты к вычислению характеров для перестановки  $Q$ , действующей в пространствах  $L([n_1 n_2 \dots])$  при  $n \leq 4$ , приходим к табл. 17.1. Характер мы обозначаем символом  $\psi^{[n_1 n_2 \dots]}$ , а классы сопряженных элементов группы  $\mathcal{S}_n$  — через  $(l_1 l_2 \dots)$ , где  $l_i$  — длины циклов любой перестановки из данного класса сопряжен-

Таблица 17.1

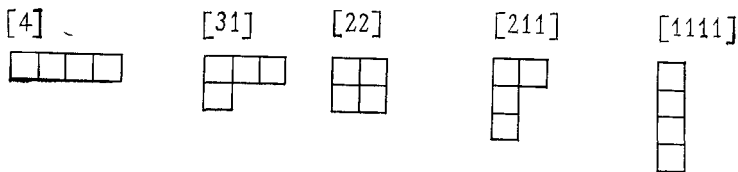
| $\mathcal{S}_2$ | (11)  | (2)  | $\mathcal{S}_4$ | (1111)          | (211) | (22) | (31) | (4) |
|-----------------|-------|------|-----------------|-----------------|-------|------|------|-----|
| $\psi^{[2]}$    | 1     | 1    | $\psi^{[4]}$    | 1               | 1     | 1    | 1    | 1   |
| $\psi^{[11]}$   | 2     | 0    | $\psi^{[31]}$   | 4               | 2     | 0    | 1    | 0   |
|                 |       |      | $\psi^{[22]}$   | 6               | 2     | 2    | 0    | 0   |
| $\chi^{[2]}$    | 1     | 1    | $\psi^{[211]}$  | 12              | 2     | 0    | 0    | 0   |
| $\chi^{[11]}$   | 1     | -1   | $\psi^{[1111]}$ | 24              | 0     | 0    | 0    | 0   |
|                 |       |      |                 |                 |       |      |      |     |
|                 |       |      | $\chi^{[4]}$    | 1               | 1     | 1    | 1    | 1   |
| $\mathcal{S}_3$ | (111) | (21) | (3)             | $\chi^{[31]}$   | 3     | 1    | -1   | 0   |
|                 |       |      |                 | $\chi^{[22]}$   | 2     | 0    | 2    | -1  |
| $\psi^{[3]}$    | 1     | 1    | 1               | $\chi^{[211]}$  | 3     | -1   | -1   | 0   |
| $\psi^{[21]}$   | 3     | 1    | 0               | $\chi^{[1111]}$ | 1     | -1   | 1    | 1   |
| $\psi^{[111]}$  | 6     | 0    | 0               |                 |       |      |      |     |
|                 |       |      |                 |                 |       |      |      |     |
| $\chi^{[3]}$    | 1     | 1    | 1               |                 |       |      |      |     |
| $\chi^{[21]}$   | 2     | 0    | -1              |                 |       |      |      |     |
| $\chi^{[111]}$  | 1     | -1   | 1               |                 |       |      |      |     |

ных элементов. Вычислив характеры  $\psi^{[n_1 n_2 \dots]}$ , характеры  $\chi$  неприводимых представлений можно найти следующим образом. Прежде всего, очевидно, что  $\psi^{[n]}$  есть характер неприводимого представления (оно одномерно). Обозначим этот характер через  $\chi^{[n]}$ . Перейдем теперь ко второй строке и рассмотрим характер  $\psi^{[n-1, 1]}$ . Методами, изложенными в гл. 4, § 11, мы можем показать, что в разложении характера  $\psi^{[n-1, 1]}$  характер  $\chi^{[n]}$  встречается один раз, причем, согласно критерию (4.29), оставшийся характер отвечает неприводимому представлению. Этот оставшийся характер обозначим через  $\chi^{[n-1, 1]}$ . Продвигаясь таким образом вниз таблицы, мы на каждом шагу обнаруживаем, что характер  $\psi^{[n_1 n_2 \dots]}$  разлагается на сумму неприводимых характеров, вычисленных ранее, и еще одного характера, тоже неприводимого представления. Методами гл. 4, § 11 можно установить, сколько раз

каждый из вычисленных ранее характеров входит в разложение, и показать, что оставшийся характер неприводим. Оставшийся характер обозначим символом  $\chi^{[n_1 n_2 \dots]}$ . Таким образом, каждому разбиению мы сопоставили неприводимый характер. Результаты такого анализа характеров при  $n \leq 4$  отражены в табл. 17.1. Интересно, что  $\psi^{[111 \dots]}$  — это характер регулярного представления (гл. 4, § 13), которое содержит каждое неприводимое представление с кратностью, равной размерности данного представления. Продвижение вниз таблицы соответствует введению все большего числа базисных функций  $\varphi_q$  в выражении (17.13) и, следовательно, большему простору для антисимметрии. Наконец, в последней строке число функций  $\varphi_q$  совпадает с числом частиц, и можно построить любой тип симметрии, включая полностью антисимметричное представление  $\chi^{[111 \dots]}$ , о котором говорилось в § 4.

## § 6. СХЕМЫ ЮНГА

Хотя мы и не приводили полного доказательства, в § 5 мы показали, что неприводимые представления группы  $\mathcal{S}_n$  соответствуют разбиениям  $[n_1 n_2 \dots]$  числа  $n$ . Для разбиений часто оказывается более удобным следующее наглядное обозначение. Для каждого разбиения строится схема из  $n$  квадратиков,  $n_1$  из которых находятся в первой строке,  $n_2$  — во второй строке и т. д. Левые концы всех строк лежат на одной вертикальной прямой. Такая схема носит имя математика А. Юнга. Ниже в качестве примера приведены схемы Юнга, соответствующие пяти разбиениям числа  $n = 4$ :



Далее, согласно результатам § 5, каждому неприводимому представлению группы  $\mathcal{S}_n$  сопоставляется схема Юнга, составленная из  $n$  квадратов. Хотя на первый взгляд такое обозначение может показаться не очень компактным,

в § 8 мы убедимся в том, что с его помощью можно характеризовать не только неприводимые представления группы  $\mathcal{S}_n$ , но и базисные векторы представлений.

## § 7. ОГРАНИЧЕНИЕ СГРУППЫ $\mathcal{S}_n$ НА ПОДГРУППУ $\mathcal{S}_{n-1}$

Рассмотрим группу  $\mathcal{S}_{n-1}$  перестановок объектов  $1, 2, \dots, n-1$ , которые оставляют объект  $n$  на месте. Очевидно, что это подгруппа группы  $\mathcal{S}_n$ . Поэтому любое неприводимое представление группы  $\mathcal{S}_n$  будет представлением группы  $\mathcal{S}_{n-1}$ , хотя и не обязательно неприводимым по отношению к группе  $\mathcal{S}_{n-1}$ . Следовательно, возникает вопрос, какие неприводимые представления группы  $\mathcal{S}_{n-1}$  будут входить в разложение неприводимого представления группы  $\mathcal{S}_n$ . Ответ на этот вопрос дается таблицей характеров.

Обозначим  $T^{(\alpha_n)}$  неприводимое представление группы  $\mathcal{S}_n$ , соответствующее разбиению  $\alpha_n$  числа  $n$ . Тогда ограничение этого представления на подгруппу  $\mathcal{S}_{n-1}$  имеет вид

$$T^{(\alpha_n)} = \sum_{\alpha_{n-1}} m'(\alpha_{n-1}) T^{(\alpha_{n-1})}, \quad (17.16)$$

где  $T^{(\alpha_{n-1})}$  — неприводимое представление группы  $\mathcal{S}_{n-1}$ , а суммирование распространяется на все разбиения  $\alpha_{n-1}$  числа  $n-1$ .

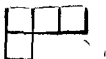
Характер представления  $T^{(\alpha_n)}$  для элементов подгруппы  $\mathcal{S}_{n-1}$  определяется таблицей характеров группы  $\mathcal{S}_n$ . Нужно только выбирать лишь те классы сопряженных элементов, у которых есть хотя бы один цикл единичной длины. Коэффициенты  $m(\alpha_{n-1})$  можно вычислить по формуле (4.28) на основании полной таблицы характеров группы  $\mathcal{S}_{n-1}$ .

Рассмотрим, например, случай  $n=4$ . Классами сопряженных элементов группы  $\mathcal{S}_4$ , которые содержат элементы группы  $\mathcal{S}_3$ , будут  $(1111)$ ,  $(211)$  и  $(31)$ . Они содержат, соответственно, элементы из следующих классов сопряженных элементов группы  $\mathcal{S}_3$ :  $(111)$ ,  $(21)$  и  $(3)$ . В табл. 17.2 приведены характеры представлений  $T^{(\alpha_4)}$  и  $T^{(\alpha_3)}$ , взятые из табл. 17.1. Разложение характеров приведено справа. Мы видим, что числа  $m(\alpha_3)$  равны либо нулю, либо единице.

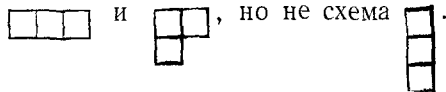
Таблица 17.2

|                | (111) | (21) | (3)                            |
|----------------|-------|------|--------------------------------|
| $\chi^{[3]}$   | 1     | 1    | 1                              |
| $\chi^{[21]}$  | 2     | 0    | -1                             |
| $\chi^{[111]}$ | 1     | -1   | 1                              |
| $\chi^{[4]}$   | 1     | 1    | 1 $\chi^{[3]}$                 |
| $\chi^{[31]}$  | 3     | 1    | 0 $\chi^{[3]} + \chi^{[21]}$   |
| $\chi^{[22]}$  | 2     | 0    | -1 $\chi^{[21]}$               |
| $\chi^{[211]}$ | 3     | -1   | 0 $\chi^{[21]} + \chi^{[111]}$ |
| $\chi^{[111]}$ | 1     | -1   | 1 $\chi^{[111]}$               |

Можно показать, что в формуле (17.16) коэффициенты  $m(\alpha_{n-1})$  всегда равны либо нулю, либо единице. Существует простое правило, позволяющее определять, какие именно коэффициенты  $m(\alpha_{n-1})$  равны единице: схемы Юнга  $\alpha_{n-1}$ , для которых  $m(\alpha_{n-1})=1$ , получаются путем удаления одного квадрата из схемы Юнга  $\alpha_n$ . Например, при удалении одного квадрата из схемы Юнга



получаются схемы



## § 8. БАЗИСНЫЕ ВЕКТОРЫ НЕПРОВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Базисные векторы неприводимого представления  $T^{(\alpha_n)}$  группы  $\mathcal{S}_n$  можно нумеровать соответственно их поведению при последовательных ограничениях на подгруппы  $\mathcal{S}_n \rightarrow \mathcal{S}_{n-1} \rightarrow \mathcal{S}_{n-2} \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{S}_2$ . На каждом шаге мы рассматриваем разложение (17.16). Цепочка подгрупп получается путем удаления сначала объекта  $n$ , затем объекта  $n-1$ , и так до тех пор, пока не останутся лишь объекты 2 и 1, на которые действует группа  $\mathcal{S}_2$ . Каждому век-

тору базиса для представления  $T^{(\alpha_n)}$  приписывается последовательность разбиений  $\alpha_n, \alpha_{n-1}, \dots, \alpha_2$ , описывающая его поведение при таком последовательном ограничении на подгруппы. Обычно это делается в четыре этапа.

1. В качестве первого индекса всем базисным векторам неприводимого представления  $T^{(\alpha_n)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ , очевидно, можно приписать одно и то же разбиение  $\alpha_n$ .

2. При ограничении на подгруппу  $\mathcal{S}_{n-1}$  базисные векторы в разложении представления  $T^{(\alpha_n)}$  можно выбирать из неприводимых представлений  $T^{(\alpha_{n-1})}$  группы  $\mathcal{S}_{n-1}$ , которые входят в разложение (17.16). Следовательно, в качестве второго индекса базисного вектора можно взять соответствующее разбиение  $\alpha_{n-1}$ . Так как представления  $T^{(\alpha_{n-1})}$  входят в разложение не более одного раза, число базисных векторов с индексом  $\alpha_{n-1}$  совпадает с размерностью представления  $T^{(\alpha_{n-1})}$ .

3. При ограничении с группы  $\mathcal{S}_{n-1}$  на подгруппу  $\mathcal{S}_{n-2}$  каждое неприводимое представление  $T^{(\alpha_{n-1})}$  будет разлагаться в сумму неприводимых представлений  $T^{(\alpha_{n-2})}$  группы  $\mathcal{S}_{n-2}$ . Последовательность базисных векторов с двумя индексами  $\alpha_n \alpha_{n-1}$  теперь можно выбрать так, чтобы векторы принадлежали каким-либо представлениям  $T^{(\alpha_{n-2})}$ . Значит, в дополнение к индексам  $\alpha_n$  и  $\alpha_{n-1}$  базисные векторы приобретают индекс  $\alpha_{n-2}$ . Число базисных векторов с набором индексов  $\alpha_n \alpha_{n-1} \alpha_{n-2}$  снова совпадает с размерностью неприводимого представления  $T^{(\alpha_{n-2})}$ .

4. Очевидно, что такой процесс можно продолжить до тех пор, пока мы не придем к базисным векторам с набором индексов  $\alpha_n \alpha_{n-1} \alpha_{n-2} \dots \alpha_2$ . Число базисных векторов, имеющих данный набор индексов, опять будет равно размерности последнего неприводимого представления. Но теперь это представление  $T^{(\alpha_2)}$ , а группа  $\mathcal{S}_2$  имеет лишь одномерные неприводимые представления. Поэтому векторы полностью определяются набором  $\alpha_n \alpha_{n-1} \alpha_{n-2} \dots \alpha_2$ , т. е. в представлении  $T^{(\alpha_n)}$  нет двух базисных векторов с одинаковым набором индексов, и любому набору индексов соответствует некоторый базисный вектор представления  $T^{(\alpha_n)}$ . Нужно, конечно, помнить, что в любом таком наборе схема Юнга  $\alpha_{n-1}$  должна получаться путем удаления одного квадрата из схемы  $\alpha_n$ , схема  $\alpha_{n-2}$  должна получаться путем удаления одного квадрата из схемы  $\alpha_{n-1}$  и т. д.

Набор индексов  $\alpha_n \alpha_{n-1} \alpha_{n-2} \dots \alpha_2$  может показаться слишком сложной системой нумерации векторов, так как каждое разбиение  $\alpha_r$  соответствует схеме Юнга, состоящей из  $r$  квадратов. Но можно обозначить этот набор одной схемой Юнга  $\alpha_n$ , в квадраты которой вписаны числа от 1 до  $n$ . Тогда мы получим так называемую таблицу Юнга. Числа определяются следующим образом. В квадрат, при удалении которого из схемы Юнга  $\alpha_n$  получается схема Юнга  $\alpha_{n-1}$ , вписывается число  $n$ ; в квадрат схемы Юнга  $\alpha_{n-1}$ , при удалении которого получается схема Юнга  $\alpha_{n-2}$ , вписывается  $n-1$  и т. д. Из способа построения явствует, что числа в квадратах таблицы Юнга должны уменьшаться в направлении справа налево и снизу вверх.

Наша система нумерации полностью определяет базисные векторы. Поэтому размерность неприводимого представления  $T^{(\alpha_n)}$  равна числу разных таблиц Юнга, которые можно получить из схемы Юнга  $\alpha_n$ . Таким образом, мы получили простой способ вычисления размерности любого неприводимого представления группы  $\mathcal{S}_n$  [4]. Правда, эти размерности фигурируют в таблице характеров как характеры единичного элемента.

Таблица 17.3

Таблицы Юнга при  $n = 2, 3$  и 4

| Разбиение           | Таблица Юнга                                                                                                                                      | Разбиение | Таблица Юнга |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
|---------------------|---------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------|--------------|---------------------|-------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|---|---|-------|----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|---|---|---|---|---|--|---|---|---|---|---|--|---|---|---|--|---|--|
| $\mathcal{S}_2$ [2] | <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr></table>                                                                                                      | 1         | 2            | $\mathcal{S}_4$ [4] | <table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr></table>                                                                                                                                                                                                                    | 1                                                                                                                                                   | 2 | 3 | 4 |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 | 3         | 4            |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| [11]                | <table><tr><td>1</td></tr><tr><td>2</td></tr></table>                                                                                             | 1         | 2            | [31]                | <table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr><tr><td>4</td><td></td><td></td></tr></table> <table><tr><td>1</td><td>2</td><td>4</td></tr><tr><td>3</td><td></td><td></td></tr></table> <table><tr><td>1</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td>2</td><td></td><td></td></tr></table> | 1                                                                                                                                                   | 2 | 3 | 4 |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                | 1 | 2 | 4 | 3 |   |  | 1 | 3 | 4 | 2 |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 | 3         |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 4                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 | 4         |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 3                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 3                                                                                                                                                 | 4         |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| $\mathcal{S}_3$ [3] | <table><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr></table>                                                                                            | 1         | 2            | 3                   | [22]                                                                                                                                                                                                                                                                                | <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>3</td><td>4</td></tr></table> <table><tr><td>1</td><td>3</td></tr><tr><td>2</td><td>4</td></tr></table> | 1 | 2 | 3 | 4     | 1                                                                                                                                                                                                                                                                                                              | 3 | 2 | 4 |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 | 3         |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 3                   | 4                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 3                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   | 4                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| [21]                | <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>3</td><td></td></tr></table> <table><tr><td>1</td><td>3</td></tr><tr><td>2</td><td></td></tr></table> | 1         | 2            | 3                   |                                                                                                                                                                                                                                                                                     | 1                                                                                                                                                   | 3 | 2 |   | [211] | <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>3</td><td></td></tr><tr><td>4</td><td></td></tr></table> <table><tr><td>1</td><td>3</td></tr><tr><td>2</td><td></td></tr><tr><td>4</td><td></td></tr></table> <table><tr><td>1</td><td>4</td></tr><tr><td>2</td><td></td></tr><tr><td>3</td><td></td></tr></table> | 1 | 2 | 3 |   | 4 |  | 1 | 3 | 2 |   | 4 |  | 1 | 4 | 2 |  | 3 |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 3                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 3                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 2                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 3                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 4                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 3                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 4                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   | 4                                                                                                                                                 |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 3                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| [111]               | <table><tr><td>1</td></tr><tr><td>2</td></tr><tr><td>3</td></tr></table>                                                                          | 1         | 2            | 3                   | [1111]                                                                                                                                                                                                                                                                              | <table><tr><td>1</td></tr><tr><td>2</td></tr><tr><td>3</td></tr><tr><td>4</td></tr></table>                                                         | 1 | 2 | 3 | 4     |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 3                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 1                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 2                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 3                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |
| 4                   |                                                                                                                                                   |           |              |                     |                                                                                                                                                                                                                                                                                     |                                                                                                                                                     |   |   |   |       |                                                                                                                                                                                                                                                                                                                |   |   |   |   |   |  |   |   |   |   |   |  |   |   |   |  |   |  |



В табл. 17.3 приведены таблицы Юнга для всех неприводимых представлений групп  $\mathcal{S}_2, \mathcal{S}_3, \mathcal{S}_4$ . Например, для представления [31] группы  $\mathcal{S}_4$  возможны три таблицы Юнга, соответствующие трем базисным векторам. Это соответствует размерности неприводимого представления, приведенной в табл. 17.1. Эквивалентность громоздких обозначений  $\alpha_4 \alpha_3 \alpha_2$  и таблиц Юнга можно продемонстрировать на примере:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 4 \\ \hline 3 & & \\ \hline \end{array} \equiv \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \equiv [31] [21] [2]$$

Яманучи предложил еще более удобное для печати обозначение. Вместо таблиц Юнга он ввел символ Яманучи  $(r_n r_{n-1} \dots r_1)$ , в котором  $r_k$  — номер строки, где находится число  $k$ . Для приведенного выше примера символ Яманучи — это (1211). Таким символом полностью определяется таблица Юнга. В самом деле, начиная с числа  $r_1$ , нужно двигаться влево, помня, что в таблице Юнга числа должны возрастать в направлении слева направо и сверху вниз. При этом всегда  $r_1 = 1$ ,  $r_2 = 1$  или 2 и т. д. Одним из преимуществ обозначения Яманучи является то, что, убирая число  $r_n$ , мы получаем символ Яманучи, определяющий поведение базисного вектора представления  $\Gamma^{(\alpha_n)}$  при ограничении представления на подгруппу  $\mathcal{S}_{n-1}$ . Последовательно отбрасывая числа  $r_{n-1}, r_{n-2}, \dots, r_3$ , получаем символы Яманучи, характеризующие поведение базисного вектора при последовательных ограничениях представления на подгруппы  $\mathcal{S}_{n-2}, \mathcal{S}_{n-3}, \dots, \mathcal{S}_2$ .

## § 9. ПРИМЕРЫ БАЗИСНЫХ ВЕКТОРОВ И МАТРИЦ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ

В предыдущем параграфе мы ввели систему нумерации базисных векторов неприводимого представления. Это очень стройная, но довольно формальная система. Теперь мы на основании функций (17.13) построим несколько конкретных примеров базисных векторов при малых  $n$ , что позволит нам записать матрицы представлений в явном виде. Элегантные общие правила для написания таких матриц будут приведены позже (§ 13).

При любом  $n$  одномерные представления  $[n]$  и  $[111\dots]$  соответствуют полностью симметричному и полностью антисимметричному представлениям (§ 4). Если начать с малых  $n$ , то первое представление, отличное от этих представлений, соответствует разбиению  $[21]$  числа  $n=3$ , а соответствующая функция (17.13) равна

$$\Phi([21]) = \varphi_1(1) \varphi_1(2) \varphi_2(3). \quad (17.17)$$

Упростим обозначения и положим  $\Phi([21]) = |112\rangle$ , где  $|ijk\rangle$  — краткая запись функции  $\varphi_i(1) \varphi_j(2) \varphi_k(3)$ . В обозначениях § 5 пространство  $L[21]$  — это пространство, порождаемое перестановками аргументов функции  $\Phi([21])$ . Пространство  $L[21]$  трехмерно. Его базисными векторами будут функции  $|112\rangle$ ,  $|121\rangle$  и  $|211\rangle$ . Из табл. 17.1 следует, что представление, действующее в пространстве  $L[21]$ , разлагается на два неприводимых представления  $\Gamma^{[3]}$  и  $\Gamma^{[21]}$ . Полностью симметричный вектор имеет вид

$$\theta([3]) = \{|112\rangle + |121\rangle + |211\rangle\} / \sqrt{3}, \quad (17.18)$$

где  $\sqrt{3}$  — нормировочный множитель. Представление  $\Gamma^{[21]}$  порождается ортогональным дополнением, т. е. двумерным пространством векторов, ортогональных вектору (17.18). Естественно, в выборе пары базисных векторов этого пространства имеется некоторый произвол. Если мы выберем два вектора

$$\begin{aligned} \theta([21]a) &= \{2|112\rangle - |121\rangle - |211\rangle\} / \sqrt{6}, \\ \theta([21]b) &= \{|121\rangle - |211\rangle\} / \sqrt{2}, \end{aligned} \quad (17.19)$$

то очевидно, что они не только ортогональны вектору (17.18) и друг другу, но и принадлежат неприводимым представлениям подгруппы  $\mathcal{S}_2$ , действующей на частицы 1 и 2. Вектор  $\theta([21]a)$  симметричен по отношению к перестановке  $P_{12}$ , а вектор  $\theta([21]b)$  антисимметричен. Поэтому они соответствуют таблицам Юнга

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \quad \text{и} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array}.$$

В таком базисе представления  $\Gamma^{[21]}$  матрица перестановки  $P_{12}$  имеет вид  $\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$ . Производя перестановки в формулах (17.19), например,  $P_{23}\theta([21]a) = \{2|121\rangle -$

$-|112\rangle - |211\rangle\}/\sqrt{6} = -\frac{1}{2}\theta([12]a) + \sqrt{\frac{3}{4}}\theta([21]b)$ , находим матрицу перестановки  $P_{23}$ :  $P_{23} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$ . В § 1 мы

доказали, что любую перестановку можно представить в виде произведения простых смежных перестановок. Поэтому, зная правила умножения элементов группы, все матрицы представления  $T^{[21]}$  можно выразить через известные матрицы  $P_{12}$  и  $P_{23}$ . Так, например,  $P_{13} = P_{12}P_{23}P_{12}$  и матрица перестановки  $P_{13}$  равна произведению матриц:

$$P_{13} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ \sqrt{\frac{3}{4}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\sqrt{\frac{3}{4}} \\ -\sqrt{\frac{3}{4}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

Подобное упражнение при  $n=4$  мы предлагаем в качестве задачи 17.5. В § 13 мы приведем простые правила написания матриц простых смежных перестановок в любом неприводимом представлении. Правда, вывод этих правил довольно сложен.

Отметим, что в силу изоморфизма между группой  $\mathcal{S}_3$  и точечной группой  $D_3$  (гл. 2, § 3) приведенные выше матрицы совпадают с матрицами из табл. 4.1, отличаясь от них лишь порядком базисных векторов.

## § 10. ПРЯМОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ ДВУХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Из любых двух представлений  $T^{(\alpha_1)}$  и  $T^{(\alpha_2)}$  мы можем построить представление, равное прямому произведению представлений  $T^{(\alpha_1)} \otimes T^{(\alpha_2)}$ . Его размерность равна произведению размерностей представлений  $T^{(\alpha_1)}$  и  $T^{(\alpha_2)}$ . В общем случае это понятие определено в гл. 4, § 17. Конечно, такое определение применимо и к группе  $\mathcal{S}_n$ . Разложение произведения представлений в сумму неприводимых представлений мы рассматривали на основании таблицы характеров [формула (4.45)]. Так, например, табл. 17.1 дает нам:  $T^{[21]} \otimes T^{[21]} = T^{[3]} \oplus T^{[21]} \oplus T^{[111]}$ .

Имеются два важных примера таких произведений. Рассмотрим сначала произведение  $T^{(\alpha)} \otimes T^{[111\dots 1]}$  любого неприводимого представления на полностью антисимметричное представление. Так как представление  $T^{[111\dots 1]}$  одномерно, произведение представлений имеет ту же размерность, что и представление  $T^{(\alpha)}$ . Более того, если  $\chi_p^{(\alpha)}$  — характер представления  $T^{(\alpha)}$  на перестановке из класса  $\mathcal{C}_p$

сопряженных элементов группы, то характер произведения представлений на этой перестановке равен просто  $\pi_p \chi_p^{(\alpha)}$ , где  $\pi_p$  — четность элементов из класса  $\mathcal{C}_p$ . Здесь мы воспользовались тем, что, согласно формуле (17.10), четность  $\pi_p$  есть характер представления  $\Gamma^{[111\dots]}$ . В силу критерия (4.29) из неприводимости представления  $\Gamma^{(\alpha)}$  следует неприводимость произведения представлений, так как  $\pi_p^2 = 1$ . Значит,

$$\Gamma^{(\alpha)} \otimes \Gamma^{[111\dots]} = \Gamma^{(\tilde{\alpha})}, \quad \chi_p^{(\tilde{\alpha})} = \pi_p \chi_p^{(\alpha)}, \quad (17.20)$$

где  $\tilde{\alpha}$  — индекс другого неприводимого представления группы  $\mathcal{S}_n$ . Например, если  $\alpha \equiv [n]$ , то  $\tilde{\alpha} = [111\dots]$ , т. е. два представления  $\Gamma^{(\alpha)}$  и  $\Gamma^{(\tilde{\alpha})}$  получаются одно из другого путем замены в схеме Юнга строк на столбцы. Просматривая табл. 17.1, мы приходим к тому же выводу, например, при  $\alpha \equiv [31]$  и  $\tilde{\alpha} \equiv [211]$ . Можно доказать, что и в общем случае схемы Юнга  $\alpha$  и  $\tilde{\alpha}$  получаются одна из другой путем замены строк на столбцы, иначе говоря, путем отражения относительно диагонали, выходящей из левого верхнего угла схемы под углом  $45^\circ$ . Представление  $\Gamma^{(\tilde{\alpha})}$  называется сопряженным или ассоциированным представлением представления  $\Gamma^{(\alpha)}$ . Некоторые представления, такие, как  $\Gamma^{[21]}$  и  $\Gamma^{[22]}$ , называются самосопряженными. Характер самосопряженного представления должен быть равен нулю на классах сопряженных элементов с отрицательной четностью. Это легко проверить по табл. 17.1.

Рассмотрим теперь разложение

$$\Gamma^{(\alpha)} \otimes \Gamma^{(\beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} \Gamma^{(\gamma)} \quad (17.21)$$

произведения двух неприводимых представлений. Вычислим два довольно специальных коэффициента  $m_{\gamma}$ , а именно коэффициенты  $m_{[n]}$  и  $m_{[111\dots]}$ . Подставляя известные характеры 1 и  $\pi_p$  представлений  $\Gamma^{[n]}$  и  $\Gamma^{[111\dots]}$  в общую формулу (4.45) и применяя соотношения (17.20), получаем

$$m_{[n]} = (n!)^{-1} \sum_p c_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)},$$

$$m_{[111\dots]} = (n!)^{-1} \sum_p c_p \pi_p \chi_p^{(\alpha)} \chi_p^{(\beta)} = (n!)^{-1} \sum_p c_p \chi_p^{(\tilde{\alpha})} \chi_p^{(\beta)}. \quad (17.22)$$

Наконец, с учетом соотношения ортогональности характеров [формула (4.256)] и действительности характеров группы  $\mathcal{S}_n$  выражения (17.22) можно привести к виду

$$m_{[n]} = \delta_{\alpha, \beta}, \quad m_{[1, 1, 1, \dots]} = \delta_{\tilde{\alpha}, \beta^*} \quad (17.23)$$

Смысл этого результата состоит в том, что полностью симметричное представление входит лишь в произведение двух одинаковых или по крайней мере эквивалентных (гл. 4, § 6) неприводимых представлений. Точно так же полностью антисимметричное представление входит лишь в произведения представлений и их сопряженных. Последний результат мы уже использовали при построении антисимметричных волновых функций в задачах атомной и ядерной физики (гл. 8, § 6, п. Г; гл. 12). Например, в гл. 8 при описании атомной структуры орбитальное состояние с симметрией  $\alpha$  должно было объединяться со спиновым состоянием с симметрией  $\tilde{\alpha}$ . Кроме того, схемы Юнга  $\tilde{\alpha}$  могут содержать не более двух строк, так как спин электрона  $s$  равен  $1/2$  и для электрона возможны лишь два спиновых состояния. Поэтому схемы Юнга  $\alpha$  для орбитальной части должны содержать не более двух столбцов. Связь между полным спином  $S$  и схемой Юнга  $\tilde{\alpha}$  рассматривается в гл. 18, § 10. В результате получается соотношение  $S = 1/2(\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2)$ , где  $\tilde{n}_1$  и  $\tilde{n}_2$  — длины двух строк схемы  $\tilde{\alpha}$ .

Чтобы действительно получить такие полностью симметричные или антисимметричные функции из произведений векторов, нужно, конечно, следуя общей методике гл. 4, § 17, просуммировать произведения различных базисных векторов двух представлений с соответствующими коэффициентами Клебша—Гордана. Эти коэффициенты легко вычисляются (задача 17.6).

## § 11. ВНЕШНЕЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ ДВУХ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В этом и следующих параграфах мы рассмотрим новое произведение двух представлений, называемое внешним произведением. Из представления  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{S}_n$  и представления  $T^{(\alpha')}$  группы  $\mathcal{S}_{n'}$  мы образуем представление  $T$  группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$ . В физике такие произведения нужны для

построения волновых функций системы из  $n + n'$  частиц на основании волновых функций систем из  $n$  и  $n'$  частиц, но мы не будем приводить примеров. С математической точки зрения интересна связь между внешним произведением представлений групп перестановок и обычным произведением представлений унитарных групп. Этот вопрос рассматривается в гл. 18.

Рассмотрим произведения вида

$$f_i(1, 2, \dots, n) g_j(n+1, n+2, \dots, n+n'), \quad (17.24)$$

где функции  $f_i$  преобразуются по некоторому неприводимому представлению  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ , действующей на частицы  $1, \dots, n$ , а функции  $g_j$  — по некоторому представлению  $T^{(\alpha')}$  группы  $\mathcal{S}_{n'}$ , действующей на частицы  $n+1, \dots, n+n'$ . Множество произведений (17.24), где функции  $f_i$  пробегают все семейство  $s_\alpha$  базисных векторов представления  $T^{(\alpha)}$ , а функции  $g_j$  — все семейство  $s_{\alpha'}$  базисных векторов представления  $T^{(\alpha')}$ , не образует пространства, инвариантного относительно группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$ . Если же разрешить всевозможные перестановки между частицами в функциях  $f$  и в функциях  $g$ , то такое расширенное пространство будет инвариантным. Поскольку существует  $(n+n')!/n!n'!$  способов выбора  $n$  частиц из  $(n+n')$  частиц, размерность расширенного пространства равна

$$s_\alpha s_{\alpha'} (n+n')!/n!n'!. \quad (17.25)$$

В расширенном пространстве действует представление  $T$  группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$ , которое, вообще говоря, не является неприводимым. Представление  $T$  группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$  называется «внешним произведением» представления  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{S}_n$  на представление  $T^{(\alpha')}$  группы  $\mathcal{S}_{n'}$ . Оно обозначается символом  $T = T^{(\alpha)} \otimes T^{(\alpha')}$ . Мы столкнулись с интересной задачей: по заданным неприводимым представлениям с индексами  $\alpha$  и  $\alpha'$ , которые равны разбиениям  $n$  и  $n'$  частиц, нужно найти все возможные неприводимые представления группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$ , входящие в разложение представления  $T$ . Рассмотрим сначала несколько простых примеров.

Если  $n = n' = 1$ , то размерность представления  $T$  равна двум. Базисными векторами представления будут функции  $f(1)g(2)$  и  $f(2)g(1)$ . Рассматривая симметричную и антисимметричную линейные комбинации этих функ-

ций, мы получим разложение нашего двумерного представления на неприводимые представления группы  $\mathcal{S}_2$ . Пользуясь схемами Юнга, это можно записать в виде

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array}.$$

При  $n=2$ ,  $n'=1$  произведение

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}$$

имеет три базисных вектора. Если мы в качестве симметричной двухчастичной функции  $f(1, 2)$  из формулы (17.24) возьмем функцию  $\varphi(1)\varphi(2)$ , то базисные векторы можно выбрать в виде  $\varphi(1)\varphi(2)g(3)$ ,  $\varphi(1)\varphi(3)g(2)$  и  $\varphi(2)\varphi(3)g(1)$ . Это семейство функций совпадает с семейством, порождаемым функцией  $\Phi([21])$  [формула (17.13)]. В табл. 17.1, а также в § 9 мы показали, как это трехмерное пространство разлагается на подпространство, порождаемое одним симметричным вектором, и на подпространство, порождаемое парой векторов с симметрией  $[21]$ . Итак,

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \quad (17.26)$$

Этот результат можно получить и другим способом, который легко распространяется на общий случай. Разложим произведение  $\varphi(1)\varphi(2)g(3)$  по компонентам, соответствующим таблицам схем Юнга с  $n=3$ . В силу симметрии по 1 и 2 в разложение могут входить лишь компоненты, соответствующие двум таблицам

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \quad \text{и} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 \\ \hline \end{array}$$

в которых числа 1 и 2 находятся в одной строке. Если теперь мы образуем всевозможные функции  $P\varphi(1)\varphi(2)g(3)$ , где перестановки  $P$  пробегает всю группу  $\mathcal{S}_3$ , то единственной новой компонентой будет оставшаяся базисная функция

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 \\ \hline \end{array}$$

для представления [21]. Следовательно, мы приходим к равенству (17.26), т. е. внешнее произведение содержит все неприводимые представления группы  $\mathcal{S}_3$ , которые можно образовать путем добавления одного квадрата к первоначальной схеме



Все сказанное можно обобщить на случай разложения

$$T^{(\alpha)} \otimes \square = \sum_{\alpha'} T^{(\alpha')}, \quad (17.27)$$

где суммирование проводится по схемам Юнга  $\alpha'$ , которые получаются из схемы  $\alpha$  путем добавления одного квадрата. Можно даже вывести правила для нахождения коэффициентов  $m(\beta; \alpha, \alpha')$  в общем случае:

$$T = T^{(\alpha)} \otimes T^{(\alpha')} = \sum_{\beta} m(\beta; \alpha, \alpha') T^{(\beta)}, \quad (17.28)$$

где  $\beta$  — разбиение числа  $n + n'$ . Мы приведем эти правила без доказательства.

1. Впишем букву  $a$  в каждый квадрат первой строки схемы  $\alpha'$ , букву  $b$  в каждый квадрат второй строки и т. д.

2. Добавим заполненные буквами квадраты схемы  $\alpha'$  к схеме Юнга  $\alpha$  следующим образом: 1) сначала добавляются квадраты с буквами  $a$ , затем квадраты с буквами  $b$ , затем квадраты с буквами  $c$  и т. д.; 2) на каждом шаге должна получаться схема Юнга; 3) в одном столбце не должно быть двух одинаковых букв; 4) если на полученной схеме последовательно пересчитывать добавленные квадраты с буквами, начиная с первой строки и двигаясь справа налево, то на каждом этапе число квадратов с буквой  $b$  не должно превышать числа квадратов с буквой  $a$ , а число квадратов с буквой  $c$  не должно превышать числа квадратов с буквой  $b$  и т. д.

3. Представления, отвечающие схемам Юнга  $\beta$ , которые получаются в результате добавления таким способом всех квадратов с буквами, будут входить в сумму (17.28) с ненулевыми коэффициентами. Если по изложенным правилам некоторая схема  $\beta$  может быть построена  $p$  разными способами, то в формуле (17.28) для такой схемы  $\beta$  коэффициент  $m(\beta; \alpha, \alpha')$  равен  $p$ .



Приведем два примера.

I.

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|c|} \hline a & a & a \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|c|c|} \hline & & & & a & a & a \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & a & a \\ \hline a & & & & & \\ \hline \end{array} \\
 \oplus \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline & & & & a \\ \hline a & a & & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & & \\ \hline a & a & a & \\ \hline \end{array}$$

т. е.  $T^{[4]} \otimes T^{[3]} = T^{[7]} \oplus T^{[61]} \oplus T^{[52]} \oplus T^{[43]}.$

II.

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline a & a \\ \hline b & \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & & b & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & a & a \\ \hline & & b & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & a & b \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & b \\ \hline \end{array} \\
 \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & b \\ \hline a & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & a \\ \hline a & & b \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & a \\ \hline a & & b \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & a \\ \hline & & a \\ \hline a & & b \\ \hline \end{array}$$

т. е.

$$\begin{aligned}
 T^{[21]} \otimes T^{[21]} = & T^{[42]} \oplus T^{[411]} \oplus T^{[33]} \oplus 2T^{[321]} \oplus \\
 & \oplus T^{[3111]} \oplus T^{[222]} \oplus T^{[2211]}.
 \end{aligned} \quad (17.29)$$

В процессе добавления квадратов разбиение  $[321]$  в примере II получается двумя способами. Значит, представление  $T^{[321]}$  входит в разложение (17.28) с коэффициентом  $m=2$ . Пользуясь формулой (17.25), проверим, совпадают ли размерности в обеих частях таких разложений. В этих двух случаях размерности таковы:  $1 \times 1 \times 7!/4!3! = 35$  для примера I и  $2 \times 2 \times 6!/3!3! = 80$  для примера II. Нетрудно убедиться, что эти числа совпадают с суммами размерностей [с учетом коэффициентов  $m(\beta; \alpha, \alpha')$ ] представлений  $T^{(\beta)}$ , входящих в разложения.

## § 12. ОГРАНИЧЕНИЕ НА ПОДГРУППУ И ВНЕШНЕЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ

В § 7 мы изучали разложения неприводимых представлений группы  $\mathcal{S}_n$  при ограничении их на подгруппу  $\mathcal{S}_{n-1}$ . Произведение групп  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$  является подгруппой группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$  (например, как в § 11, группа  $\mathcal{S}_n$  действует на частицы с номерами  $1, 2, \dots, n$ , а группа  $\mathcal{S}_{n'}$  — на

частицы с номерами  $n+1, n+2, \dots, n+n'$ ). Следовательно, неприводимое представление  $T^{(\beta)}$  группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$  будет, вообще говоря, приводимым представлением подгруппы  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$ :

$$T^{(\beta)} = \sum_{\alpha, \alpha'} m(\beta; \alpha, \alpha') T^{(\alpha \times \alpha')}, \quad (17.30)$$

где неприводимое представление произведения групп  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$  задается двумя схемами Юнга  $\alpha$  и  $\alpha'$ . Коэффициенты  $m(\beta; \alpha, \alpha')$ , фигурирующие в этом разложении, можно вычислить с помощью таблицы характеров, пользуясь выражением (4.66) для характеров произведения групп.

Читатель, возможно, уже заметил, что мы обозначаем одинаково через  $m(\beta; \alpha, \alpha')$  коэффициенты в двух на первый взгляд совершенно не связанных между собой выражениях (17.28) и (17.30). Это мы сделали намеренно и теперь докажем, что эти коэффициенты совпадают. Из равенства (17.30) следует, что

$$\chi^{(\beta)} = \sum_{\alpha, \alpha'} m(\beta; \alpha, \alpha') \chi^{(\alpha \times \alpha')}.$$

В силу ортогональности характеров неприводимых представлений группы  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$  коэффициенты можно вычислить по формуле

$$\frac{1}{n!n'!} \sum_{G, G'} \chi^{(\beta)}(GG') \chi^{(\alpha \times \alpha')}(GG') = m(\beta; \alpha, \alpha'), \quad (17.31)$$

где  $G$  — элемент группы  $\mathcal{S}_n$ , а  $G'$  — элемент группы  $\mathcal{S}_{n'}$ . Для коэффициентов в разложении (17.28) внешнего произведения представлений соответствующая формула имеет вид

$$\frac{1}{(n+n')!} \sum_H \chi^{(\beta)}(H) \chi(H) = m(\beta; \alpha, \alpha'), \quad (17.32)$$

где  $H$  — элемент группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$ , а  $\chi$  — характер внешнего произведения представлений  $T = T^{(\alpha)} \otimes T^{(\alpha')}$ . Поскольку представление  $T$  порождено функциями типа (17.24), характер представления  $T$  должен обращаться в нуль на любом классе сопряженных элементов группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$ , который не содержит элементов подгруппы  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$ , т. е.  $\chi(H) = 0$  для элементов  $H$  из таких классов. Можно пока-

зять, что для остальных элементов характер имеет вид

$$N_H \chi(H) = \frac{(n+n')!}{n! n'!} \tilde{N}_{GG'} \chi^{(\alpha \times \alpha')}(GG'), \quad (17.33)$$

где  $GG'$  — элемент группы  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$ , принадлежащий тому же классу сопряженных элементов, что и элемент  $H$ . Величина  $N_H$  есть число элементов в этом классе сопряженных элементов группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$ , а величина  $\tilde{N}_{GG'}$  — число элементов в соответствующем классе сопряженных элементов группы  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$ . Наконец, подставляя выражение (17.33) в равенство (17.32), мы видим, что суммы (17.31) и (17.32) совпадают, так как все элементы одного класса сопряженных элементов дают одинаковый вклад. Значит, использование одинакового обозначения  $m(\beta; \alpha, \alpha')$  в равенствах (17.28) и (17.30) вполне обоснованно.

В частном случае  $n'=1$  разложение (17.30) есть не что иное, как рассмотренное в § 7 разложение при ограничении  $\mathcal{S}_{n+1} \rightarrow \mathcal{S}_n$ . Мы убедились там, что все коэффициенты  $m$  равны либо единице, либо нулю. Таким образом, это другой способ доказательства формулы (17.27).

В качестве примера разложения (17.30) рассмотрим случай группы  $\mathcal{S}_4$  и ее подгруппы  $\mathcal{S}_2 \times \mathcal{S}_2$ . Характеры этой группы приведены в табл. 17.4. Классами сопряжен-

Таблица 17.4

(11)(11) (11)(2) (2)(11) (2)(2)

|                                      |   |    |    |                                                                         |
|--------------------------------------|---|----|----|-------------------------------------------------------------------------|
| $\mathcal{S}_2 \times \mathcal{S}_2$ |   |    |    |                                                                         |
| $[2] \otimes [2]$                    | 1 | 1  | 1  | 1                                                                       |
| $[2] \otimes [11]$                   | 1 | -1 | 1  | -1                                                                      |
| $[11] \otimes [2]$                   | 1 | 1  | -1 | -1                                                                      |
| $[11] \otimes [11]$                  | 1 | -1 | -1 | 1                                                                       |
| $\mathcal{S}_4$                      |   |    |    |                                                                         |
| $[4]$                                | 1 | 1  | 1  | 1 = $[2] \otimes [2]$                                                   |
| $[31]$                               | 3 | 1  | 1  | -1 = $[2] \otimes [2] \oplus [2] \otimes [11] \oplus [11] \otimes [2]$  |
| $[22]$                               | 2 | 0  | 0  | 2 = $[2] \otimes [2] \oplus [11] \otimes [11]$                          |
| $[211]$                              | 3 | -1 | -1 | -1 = $[2] \otimes [2] \oplus [11] \otimes [2] \oplus [11] \otimes [11]$ |
| $[1111]$                             | 1 | -1 | -1 | 1 = $[11] \otimes [11]$                                                 |

ных элементов произведения групп  $\mathcal{S}_2$  являются всевозможные произведения классов сопряженных элементов (11) и (2) каждой из групп  $\mathcal{S}_2$ . Аналогично все неприводимые представления произведения групп  $\mathcal{S}_2$  одномерны

и являются произведениями представлений [2] и [11] каждой из групп  $\mathcal{S}_2$ . Для неприводимых представлений группы  $\mathcal{S}_4$  соответствующие характеры находятся с помощью таблицы характеров группы  $\mathcal{S}_4$ , указанных в табл. 17.1 (§ 5). При этом нужно отождествить классы сопряженных элементов (11)(2) и (2)(11), так как они принадлежат одному классу сопряженных элементов (211) группы  $\mathcal{S}_4$ . Произведение классов (2)(2) принадлежит классу сопряженных элементов (22). Приведенные в правой части таблицы разложения получаются простым подбором, хотя, конечно, в сомнительных случаях можно воспользоваться соотношением ортогональности (4.28).

На основании этого примера, подставляя соответствующие коэффициенты  $m(\beta; [2], [2])$  из табл. 17.4, мы получаем соответствующее разложение (17.28) внешнего произведения представлений

$$[2] \otimes [2] = [4] \oplus [31] \oplus [22]. \quad (17.34)$$

Как нетрудно убедиться, размерность обеих частей равенства (17.34) одинакова:  $1 \times 1 \times 4! / 2! 2! = 1 + 3 + 2$ .

### § 13. КАНОНИЧЕСКИЙ ВИД МАТРИЦ НЕПРИВОДИМЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В § 8 мы рассмотрели систему нумерации базисных векторов неприводимых представлений группы  $\mathcal{S}_n$  с помощью таблиц Юнга, основанную на цепочке подгрупп. В § 9 мы привели несколько примеров таких векторов и вычислили соответствующие матрицы представлений. В данном параграфе мы сначала приведем совершенно общие правила написания таких матриц (см. книгу [1]), а затем после нескольких примеров обоснуем эти правила. В различных эквивалентных представлениях эти матрицы неодинаковы. Но часто их записывают в виде, который мы назовем каноническим. Его преимуществом является то, что матрицы тогда ортогональны. Если матрицы известны, то с помощью проекционных операторов (гл. 4, § 19; в случае группы  $\mathcal{S}_n$  они называются симметризаторами Юнга) можно из любой заданной функции построить семейство базисных векторов. Таким образом, порядок изложения будет обратным по сравнению

с изложением в § 9, где мы сначала строили в простых случаях базисные векторы, а затем получали матрицы.

Рассмотрим какое-либо неприводимое представление  $T^{(\alpha_n)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ . Разбиение  $\alpha_n$  числа  $n$  задает схему Юнга. Как говорилось в § 8, индексы базисных векторов определяются возможными таблицами Юнга  $\alpha_n \alpha_{n-1} \dots \alpha_2$ . (Например, в табл. 17.5 изображены девять таблиц Юнга, соответствующих разбиению [42].) В § 1 мы показали, что любую перестановку можно выразить через смежные перестановки  $P_{i-1, i}$ . Назовем перестановку  $P_{i-1, i}$  последней простой перестановкой подгруппы  $\mathcal{S}_i$ . Общее правило для нахождения матрицы последней простой перестановки  $P_{n-1, n}$  группы  $\mathcal{S}_n$  позволит нам найти матрицы всех смежных перестановок и, следовательно, матрицы вообще всех перестановок. Здесь мы исходим из того, что таблица  $\alpha_n, \alpha_{n-1}, \dots, \alpha_2$  для группы  $\mathcal{S}_n$  при последовательном отбрасывании разбиений  $\alpha_n, \alpha_{n-1}, \dots, \alpha_3$  переходит в таблицы для цепочки подгрупп  $\mathcal{S}_{n-1}, \mathcal{S}_{n-2}, \dots, \mathcal{S}_2$ .

На объектах с номерами  $1, 2, \dots, n-2$  перестановка  $P_{n-1, n}$  является тождественным преобразованием. Значит, ненулевыми матричными элементами перестановки  $P_{n-1, n}$  будут лишь матричные элементы между теми векторами, у которых таблицы Юнга из чисел  $1, 2, \dots, n-2$  совпадают. Поэтому мы должны для заданного разбиения  $[n_1 n_2 \dots]$  искать таблицы, которые содержат одинаковые таблицы из чисел  $1, 2, \dots, n-2$ . Обозначим через  $y$  таблицу разбиения  $[n_1 n_2 \dots]$ , а через  $\bar{y}$  — таблицу, которая получается из таблицы  $y$  в результате удаления чисел  $n$  и  $n-1$ . Все возможные таблицы  $y$  можно разделить на четыре типа: а) таблицы, в которых числа  $n$  и  $n-1$  находятся в одной строке; б) таблицы, в которых числа  $n$  и  $n-1$  находятся в одном столбце; с<sub>1</sub>) таблицы, в которых числа  $n$  и  $n-1$  не лежат ни в одной строке, ни в одном столбце, причем число  $n$  лежит в более низкой строке, чем число  $n-1$ ; с<sub>2</sub>) этот тип таблиц подобен типу с<sub>1</sub>, но теперь число  $n$  лежит в более высокой строке, чем число  $n-1$ . В табл. 17.5 таблицы Юнга в первой, восьмой и девятой строках принадлежат типу а, во второй, третьей и четвертой строках — типу с<sub>1</sub>, а в пятой, шестой и седьмой строках — типу с<sub>2</sub>.

Таблица 17.5

Матрица перестановки  $P_{56}$  в неприводимом представлении  $T_{[42]}$  группы  $\mathcal{S}_6$

[illegible]

Легко видеть, что таблица  $\tilde{y}$ , получающаяся из какой-либо таблицы  $y$  типа  $a$  или  $b$ , не может порождаться никакой другой таблицей разбиения  $[n_1 n_2 \dots]$ . Таблица  $\tilde{y}$ , порожденная таблицей типа  $c_1$ , будет также получаться из соответствующей таблицы типа  $c_2$ , в которой числа  $n$  и  $n-1$  переставлены наоборот. Следовательно, единственными ненулевыми матричными элементами перестановки  $P_{n-1, n}$  будут диагональные матричные элементы для таблиц типа  $a$  или  $b$ , а также матричные элементы, образующие блоки из  $2 \times 2$ -матриц, связывающих пары таблиц типа  $c_1$  и  $c_2$ .

В табл. 17.5 приведены ненулевые элементы матрицы перестановки  $P_{56}$  для разбиения  $[42]$ . Способ нахождения численных значений матричных элементов будет указан позднее. Отметим, что индексом первой строки служит таблица Юнга

|   |   |   |   |
|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 5 | 6 |   |   |

принадлежащая типу  $a$ . Для этой строки таблица  $\tilde{y}$  равна

|   |   |   |   |
|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|

Она больше нигде не встречается. Поэтому единственный ненулевой элемент первой строки должен находиться на диагонали. Таблица второй строки принадлежит типу  $c_1$ . Парной для нее таблицей типа  $c_2$  будет таблица пятой строки. Лишь эти две таблицы имеют общую таблицу:

|   |   |   |
|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 |
| 4 |   |   |

Следовательно, на пересечении второй строки с пятым столбцом, а также пятой строки со вторым столбцом находятся ненулевые матричные элементы. Все другие матричные элементы во второй и пятой строках, кроме диагональных, равны нулю. Немногочисленные ненулевые матричные элементы вычисляются по следующим правилам:

1. Диагональный матричный элемент таблицы типа  $a$  равен  $+1$ .

2. Диагональный матричный элемент таблицы типа  $b$  равен  $-1$ .

3. Диагональный матричный элемент таблиц типа  $c_1$  и типа  $c_2$  равен  $-l^{-1}$  и  $+l^{-1}$ , где  $l$  — число, называемое «аксиальным расстоянием» от числа  $n-1$  до числа  $n$ . Оно определяется как наименьшее число шагов, которое нужно сделать, чтобы от числа  $n-1$  перейти к числу  $n$ , двигаясь последовательно в горизонтальном и вертикальном направлениях от одного квадрата к другому соседнему квадрату. Перемещение на один квадрат влево или вниз считается положительным шагом. На самом деле вышеприведенные правила 1 и 2 являются частными случаями правила 3.

4. Недиагональные матричные элементы, соответствующие паре таблиц типа  $c_1$  и  $c_2$ , равны  $+(1-l^{-2})^{1/2}$ . Этим обеспечивается ортогональность матрицы.

По этим правилам можно вычислять, как говорилось ранее, не только матрицу перестановки  $P_{56}$ , приведенную в табл. 17.5, но и матрицы всех других смежных перестановок. Так, например, матрица перестановки  $P_{34}$  в представлении  $T^{[42]}$  имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & & & & & \\ & -\frac{1}{3} & \sqrt{\frac{8}{9}} & & & & & & & \\ & \sqrt{\frac{8}{9}} & \frac{1}{3} & & & & & & & \\ & & & 1 & & & & & & \\ & & & & -\frac{1}{3} & \sqrt{\frac{8}{9}} & & & & \\ & & & & \sqrt{\frac{8}{9}} & \frac{1}{3} & & & & \\ & & & & & & 1 & & & \\ & & & & & & & 1 & & \\ & & & & & & & & 1 & \\ & & & & & & & & & -1 \end{pmatrix}.$$

В качестве другого примера можно, пользуясь этими правилами, проверить правильность вычисления в § 9 матриц простых перестановок  $P_{12}$  и  $P_{23}$  в представлении [21] группы  $\mathcal{S}_3$ .

В заключение дадим обоснование наших правил. Обозначим через  $T(P_{n-1, n})$  матрицу перестановки  $P_{n-1, n}$ . Так как  $P_{n-1, n}^2 = E$ , где  $E$  — тождественное преобразование,



мы имеем  $T^2 = 1$ . В силу сказанного в гл. 4, § 6 любое представление конечной группы эквивалентно унитарному. Поэтому мы можем потребовать, чтобы матрица  $T$  была унитарной, т. е. выполнялось условие  $TT^\dagger = 1$ . Из этих двух условий для матрицы  $T$  следует, что диагональные матричные элементы, соответствующие таблицам типа  $a$  и  $b$ , должны быть равны  $\pm 1$ , а блоки из  $2 \times 2$ -матриц, соответствующие таблицам типа  $c_1$  и  $c_2$ , должны иметь вид

$$\begin{pmatrix} -a & \sqrt{1-a^2} \\ \sqrt{1-a^2} & a \end{pmatrix}, \quad (17.35)$$

где  $a$  — некоторое действительное число. Положительные квадратные корни соответствуют определенному выбору отношения фазовых множителей для базисных векторов. Осталось доказать, что  $a = l^{-1}$ , где  $l$  — аксиальное расстояние в таблице типа  $c_1$  от числа  $n-1$  до числа  $n$ . Доказательство проведем по индукции: мы покажем, что если наши правила справедливы для чисел  $n-2$  и  $n-1$ , то они справедливы и для числа  $n$ . Тогда, зная, что наши правила применимы к специальным случаям  $n=2, 3$ , мы можем считать, что они применимы для всех чисел  $n$ . Для доказательства нам потребуется тождество

$$P_{n-1, n} P_{n-2, n-1} P_{n-1, n} = P_{n-2, n-1} P_{n-1, n} P_{n-2, n-1}, \quad (17.36)$$

в справедливости которого нетрудно убедиться. Предположим, что парные таблицы типа  $c_1$  и  $c_2$  расположены в строках  $r$  и  $s$  представления  $T$ . Для двух эквивалентных выражений в равенстве (17.36) построим матричный элемент, расположенный на пересечении строки  $r$  со столбцом  $s$ . Заметим, что такой матричный элемент для перестановки  $P_{n-2, n-1}$  должен быть равен нулю, так как схемы Юнга, получаемые путем удаления числа  $n$  из этих двух таблиц, неодинаковы, а перестановка  $P_{n-2, n-1}$  принадлежит подгруппе  $\mathcal{S}_{n-1}$ . По предположению диагональные матричные элементы перестановки  $P_{n-2, n-1}$  вычисляются в соответствии со сформулированными выше правилами, так что  $T_{rr}(P_{n-2, n-1}) = -l_1^{-1}$ ,  $T_{ss}(P_{n-2, n-1}) = -l_2^{-1}$ , где  $l_1$  — аксиальное расстояние от числа  $n-2$  до числа  $n-1$  в таблице Юнга строки  $r$ , а  $l_2$  — аксиальное расстояние от числа  $n-2$  до  $n-1$  в таблице Юнга строки  $s$ . Подставляя выражение (17.35) для матрицы  $T(P_{n-1, n})$

в тождество (17.36), получаем матричный элемент, стоящий на пересечении строки  $r$  со столбцом  $s$ :  $al_1^{-1}\sqrt{(1-a^2)} - \sqrt{(1-a^2)}l_2^{-1}a = l_1^{-1}\sqrt{(1-a^2)}l_2^{-1}$ . Отсюда  $a = (l_2 - l_1)^{-1}$ . Таблицы Юнга строк  $r$  и  $s$  различаются лишь заменой чисел  $n$  и  $n-1$ . Значит,  $l_2$  — это аксиальное расстояние от числа  $n-2$  до числа  $n$  в таблице строки  $r$ . Следовательно, разность  $(l_2 - l_1)$  должна совпадать с аксиальным расстоянием от числа  $n-1$  до числа  $n$  в таблице строки  $r$ . Другими словами,  $a = l^{-1}$ . Таким образом, считая, что правила применимы к перестановке  $P_{n-2, n-1}$ , мы доказали, что они применимы и к перестановке  $P_{n-1, n}$ , что и требовалось. Правила 1 и 2 можно рассматривать как частные случаи, соответствующие аксиальным расстояниям  $\mp 1$ .

#### § 14. ОПЕРАТОР $\sum_{i < j} T(P_{ij})$ КЛАССА СОПРЯЖЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Можно показать (приложение 3, § 3), что в любом неприводимом представлении  $T^{(\alpha)}$  сумма  $\sum_{\gamma} T^{(\alpha)}(G_{\gamma})$  операторов представления по всем элементам группы  $G_{\gamma}$ , лежащим в выбранном классе  $\mathcal{C}$  сопряженных элементов, пропорциональна единичной матрице. Коэффициент пропорциональности  $\lambda$  выражается через характер этого класса сопряженных элементов:  $\lambda_{\alpha} = n_{\mathcal{C}} \chi_{\mathcal{C}}^{(\alpha)} / s_{\alpha}$ , где  $n_{\mathcal{C}}$  — число элементов в классе сопряженных элементов, а  $s_{\alpha}$  — размерность представления. Для группы перестановок  $\mathcal{S}_n$  простые перестановки  $P_{ij}$  образуют класс сопряженных элементов (211...) (в обозначениях § 3). Поэтому сумма  $\sum_{i < j} T^{(\alpha)}(P_{ij})$  операторов в неприводимом представлении  $T^{(\alpha)}$  должна быть пропорциональной единичному оператору. Коэффициент пропорциональности  $\lambda_{\alpha}$  можно вычислить на основании таблицы характеров. Такой оператор дает удобный критерий симметрии представления. Например, в полностью симметричном представлении он равен  $1/2 n(n-1)$ , а в полностью антисимметричном представлении этот оператор отрицателен. В силу сказанного в § 10 этот оператор обращается в нуль в самосопряженном представлении. Мы можем рассматривать этот опера-

тор класса сопряженных элементов как оператор разности между числом симметричных и антисимметричных пар. Конечно, нужно иметь в виду, что отдельные операторы  $T(P_{ij})$  не являются, вообще говоря, диагональными. Для чисел  $\lambda_\alpha$  существует простая формула, позволяющая вычислять их прямо на основании схемы Юнга представления  $T^\alpha$ . Если длину строки  $p$  обозначить через  $n_p$ , а длину столбца  $q$  через  $m_q$ , то можно показать (задача 17.7), что

$$\lambda_\alpha = \frac{1}{2} \sum_p n_p (n_p - 1) - \frac{1}{2} \sum_q m_q (m_q - 1). \quad (17.37)$$

## ЛИТЕРАТУРА <sup>1)</sup>

Подробное изложение теории группы перестановок, ее представлений и проекционных операторов можно найти в книгах:

1. *Rutherford D. E.*, *Substitutional Analysis*, Edinburgh University Press, 1948.

2\*. *Наймарк М. А.* Теория представлений групп.— М.: Наука, 1976.

Коэффициенты Клебша—Гордана для этой группы подробно обсуждаются в книге:

3. *Hamermesh M.*, *Group Theory and its Application to Physical Problems*, Addison Wesley, Reading, Mass., 1962.

[Имеется перевод: *Хамермеш М.* Теория групп и ее применение к физическим проблемам.— М.: Мир, 1966.]

В следующих книгах описана связь между группой  $\mathcal{S}_n$  и непрерывными группами  $U_N$  и  $\mathcal{R}_N$ ; в них можно также найти формулы для характеров и другие полезные формулы:

4. *Littlewood D. E.*, *The Theory of Group Characters*, Oxford University Press, 1950.

5\*. *Вейль Г.* Классические группы. Их инварианты и представления.— М.: ИЛ, 1947.

## ЗАДАЧИ

- 17.1. Представьте перестановку  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 4 & 6 & 1 & 5 & 3 \end{pmatrix}$  в виде произведения циклов. Покажите, что она принадлежит классу сопряженных элементов [321] и имеет отрицательную четность.
- 17.2. Пользуясь методами гл. 4, § 15, постройте таблицу характеров группы  $\mathcal{S}_4$ . Сопоставьте ваш результат с табл. 17.1 (§ 5).
- 17.3. Постройте табл. 17.1 для значений характеров  $\psi^{[n_1, n_2, \dots]}$  и  $\chi^{[n_1, n_2, \dots]}$  в случае  $n=4$ .

<sup>1)</sup> Литература, помеченная звездочкой, добавлена при переводе.— *Прим. ред.*

- 17.4. Перечислив возможные таблицы Юнга, найдите размерность представления [32] группы  $\mathcal{S}_5$ .
- 17.5. Пользуясь методами § 9, постройте матрицы перестановок  $P_{12}$ ,  $P_{23}$  и  $P_{34}$  в представлении  $\Gamma^{[31]}$  группы  $\mathcal{S}_4$ . Сравните ваши ответы с матрицами, вычисленными по правилам § 13.
- 17.6. Пусть  $f_i$  и  $g_i$  — семейства функций, преобразующихся по представлению  $\Gamma_{ij}^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ , матрицы которого ортогональны. Покажите, что сумма  $F_s = \sum_i f_i g_i$  полностью симметрична.

Пусть  $h_i$  — семейство функций, преобразующихся по сопряженному представлению  $\Gamma^{[11\dots 1]} \otimes \Gamma^{(\alpha)}$ . Покажите, что сумма  $F_a = \sum_i f_i h_i$  полностью антисимметрична.

- 17.7. Вычислите величину  $\lambda_\alpha$  [формула 17.37)] для оператора класса сопряженных элементов  $Q = \sum_{i < j} \Gamma(P_{ij})$  в представлении  $\Gamma^{[n_1 n_2 \dots 1]}$ .

Вычисления нужно проводить в следующей последовательности: а) пусть  $f$  — базисный вектор, для которого числа от 1 до  $n_1$  находятся в первой строке его таблицы Юнга  $y$ , числа от  $n_1 + 1$  до  $n_1 + n_2$  — во второй строке и т. д.; постройте функцию  $g = A f$ , где  $A$  — произведение антисимметризаторов для столбцов таблицы  $y$ ; б) оператор  $Q$  представьте в виде  $Q = Q_r + Q_c + Q_m$ , где  $Q_r$  содержит те пары  $ij$ , которые лежат в одной строке,  $Q_c$  содержит пары, лежащие в одном столбце, а  $Q_m$  содержит оставшиеся пары; в) покажите, что  $Q_c g = -1/2 \sum_q m_q (m_q - 1) g$ ; г) покажите, что  $(Q_r + Q_m) A f = A (Q_r + Q_m) f$ ; д) покажите, что  $Q_r f = 1/2 \sum_p m_p (m_p - 1) f$ ; е) покажите, что  $A Q_m f = 0$ .

## УНИТАРНАЯ ГРУППА $U_N$

В гл. 10 и 11 мы весьма подробно исследовали специальные унитарные группы  $SU_2$  и  $SU_3$ . Их неприводимые представления строились в виде диаграмм из одномерных и двумерных представлений, как показано на рис. 11.1 и 11.5 (т. 1, гл. 11, § 6). Этот метод трудно применять при больших числах  $N$ , в чем мы убедились при кратком рассмотрении групп  $SU_4$  и  $SU_6$  в гл. 12. В данной главе мы изложим простой метод описания неприводимых представлений группы  $U_N$  при произвольных  $N$ . Он основан на некоторых свойствах группы перестановок  $\mathcal{S}_n$ , изученной в предыдущей главе. В самом деле, как мы покажем в данной главе, эти две совершенно разные группы тесно связаны между собой. Наиболее ясно их связь видна в самой интересной физической ситуации, а именно при классификации волновых функций системы  $n$  частиц, для каждой из которых возможны  $N$  разных состояний. Здесь можно рассматривать как перестановки частиц, так и унитарные преобразования в  $N$ -мерном векторном пространстве состояний каждой отдельной частицы. Мы будем исследовать свойства группы  $U_N$  в самой общей ситуации, хотя и будем говорить о частицах и состояниях.

В гл. 10—12 мы видели, что группы  $SU_2$ ,  $SU_3$ ,  $SU_4$  и  $SU_6$  представляют интерес в физике как группы приближенных симметрий гамильтонианов элементарных частиц и ядер. Анализ группы  $U_N$  при произвольных  $N$  поможет нам взглянуть с единой точки зрения на эти более ранние результаты. Мы увидим также, что группы  $U_{2l+1}$  и  $U_{2j+1}$  можно использовать для классификации сложных многоэлектронных волновых функций, которые можно построить из  $n$  электронов, находящихся на валентных орбитах с угловым моментом  $l$  или  $j$ . Применение

унитарных групп в этой задаче является скорее математическим приемом, чем использованием группы симметрии гамильтониана.

Сначала мы остановимся на неприводимых представлениях группы  $U_N$ . Затем с помощью цепочки подгрупп  $U_N \rightarrow U_{N-1} \rightarrow \dots \rightarrow U_1$  мы пронумеруем базисные векторы этих представлений. В § 7 общие результаты прилагаются к простым случаям групп  $SU_2$ ,  $SU_3$  и  $SU_4$ , которые рассматривались в предыдущих главах. Инфинитезимальные операторы группы  $U_N$  рассмотрены в § 8. В § 10 обсуждаются некоторые приложения группы  $U_N$  к изучению многочастичных волновых функций. Параграфы 11 и 12 посвящены характеристам неприводимых представлений группы  $U_N$ . В § 13 обсуждается связь между группами  $SU_2$  и  $\mathcal{R}_3$ .

## § 1. НЕПРИВОДИМЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ $U_N$

В гл. 7 при построении неприводимых представлений группы  $\mathcal{R}_3$  мы использовали перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов. Тот же метод мы применили в гл. 11 к группе  $SU_3$ . В данном параграфе мы для группы  $U_N$  унитарных преобразований  $N$ -мерного пространства изберем другой подход. С помощью  $N$  базисных векторов исходного пространства, где действует группа  $U_N$ , мы построим  $n$ -кратное произведение пространств. Таким образом, новые представления строятся из исходного представления унитарных  $N \times N$ -матриц. Устраивая подходящую симметризацию произведения пространств, мы получим полный набор неприводимых представлений группы  $U_N$ .

Обозначим через  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_N$  множество базисных векторов исходного  $N$ -мерного пространства. Тогда группа  $U_N$  определяется унитарными преобразованиями

$$\varphi'_i = U \varphi_j = \sum_{i=1}^N U_{ij} \varphi_j \quad (18.1)$$

где  $U_{ij}$  — произвольная унитарная  $N \times N$ -матрица. Произведение пространств мы построим с помощью множества из  $N^n$  произведений типа

$$\Phi = \varphi_i(1) \varphi_j(2) \varphi_k(3) \dots \varphi_p(n). \quad (18.2)$$

Каждый сомножитель имеет два вида индексов: нижние индексы  $i, j$  и т. д., которые меняются в пределах от 1 до  $N$  и описывают свойства вектора при унитарном преобразовании (18.1), и индексы в скобках  $1, 2, \dots, n$ , которыми различаются между собой сомножители, так что можно строить антисимметричные произведения. (Без этих индексов в скобках произведения вида  $\varphi_i(1)\varphi_j(2) - \varphi_j(1)\varphi_i(2)$  обращались бы в нуль.) Порядок сомножителей несуществен; например, произведение  $\varphi_i(1)\varphi_j(2)$  означает то же, что и произведение  $\varphi_j(2)\varphi_i(1)$ . Обычно мы пишем произведения в порядке возрастания индексов в скобках:  $1, 2, \dots, n$ . Отметим, что индексы в скобках должны быть разными для всех сомножителей, тогда как нижние индексы могут быть одинаковыми для различных сомножителей. Мы будем считать индекс в скобках номером «частицы», а нижний индекс — номером «состояния». (Это соответствует физической задаче о построении волновой функции системы  $n$  электронов, каждый из которых может находиться в одном из  $N$  вырожденных одночастичных состояний. Например, случай  $N=2$  связан с возможными спиновыми состояниями системы  $n$  электронов, каждый из которых имеет спин  $s=1/2$ , а случай  $N=2l+1$  связан с возможными орбитальными состояниями системы  $n$  электронов, находящихся на валентной орбите с угловым моментом  $l$  и проекциями  $m_l=l, l-1, \dots, -l$ .)

Пусть  $T(U)$  — преобразование пространства (18.2), порождаемое унитарным преобразованием (18.1) для всех частиц. Оно задается следующим образом:

$$\begin{aligned} T_k(U)\Phi &= \varphi'_i(1)\varphi'_j(2)\varphi'_k(3)\dots\varphi'_p(n) = \\ &= \sum_{i'j'k'\dots p'} U_{i'i}U_{j'j}U_{k'k}\dots U_{p'p}\varphi_{i'}(1)\varphi_{j'}(2)\varphi_{k'}(3)\dots\varphi_{p'}(n). \end{aligned} \quad (18.3)$$

Следовательно,  $N^n$ -мерное пространство  $L$  произведений типа  $\Phi$  инвариантно относительно преобразования  $T(U)$ . Оно порождает представление  $T$  группы  $U_N$ , заданное в виде  $n$ -кратного прямого произведения  $U \otimes U \otimes U \dots \otimes U$  матриц  $U$  размера  $N \times N$ . Представление  $T$  приводимо. Покажем, как с помощью перестановок номеров частиц пространство  $L$  можно разложить на несколько инвариантных подпространств. Ясно, что пространство  $L$  также

инвариантно относительно группы  $\mathcal{S}_n$  всех перестановок номеров частиц. Эти перестановки коммутируют с унитарными преобразованиями  $T(U)$ . Например,

$$\begin{aligned} T(U) P_{12} \Phi &= T(U) \varphi_j(1) \varphi_i(2) \varphi_k(3) \dots \varphi_p(n) = \\ &= \sum_{i'j'k' \dots p'} U_{j'j} U_{i'i} U_{k'k} \dots U_{p'p} \Phi_{j'}(1) \Phi_{i'}(2) \Phi_{k'}(3) \dots \Phi_{p'}(n), \end{aligned}$$

тогда как  $P_{12} T(U) \Phi = \sum_{i'j'k' \dots p'} U_{i'i} U_{j'j} U_{k'k} \dots U_{p'p} \Phi_{j'}(1) \Phi_{i'}(2) \times \times \varphi_{k'}(3) \dots \varphi_{p'}(n)$ , так что эти выражения одинаковы. Значит, преобразование  $T(U)$  будет коммутировать с проекционными операторами  $P^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ , где  $(\alpha) \equiv [n_1 n_2 \dots]$  — индекс неприводимого представления группы  $\mathcal{S}_n$ . Поэтому если мы разложим пространство  $L$  на подпространства  $L^{(\alpha)}$ , соответствующие каждому проекционному оператору:

$$L = \sum_{(\alpha)} L^{(\alpha)},$$

то каждое подпространство  $L^{(\alpha)}$  будет инвариантно относительно преобразования  $T(U)$ , так как  $T(U) P^{(\alpha)} \Phi = P^{(\alpha)} T(U) \Phi = P^{(\alpha)} \Phi'$ , т. е., действуя на любой вектор из подпространства  $L^{(\alpha)}$ , преобразование  $T(U)$  снова дает вектор из подпространства  $L^{(\alpha)}$ . Кроме того, всякое пространство  $L^{(\alpha)}$  очевидным образом инвариантно относительно группы  $\mathcal{S}_n$ . Значит, пространство  $L^{(\alpha)}$  инвариантно относительно произведения групп  $\mathcal{S}_n \times U_N$ , так как перестановки коммутируют с унитарными преобразованиями. Поэтому мы для базисных векторов пространства  $L^{(\alpha)}$  можем ввести обозначение  $\Phi_{ix}^{(\alpha)}$ , причем для унитарного преобразования

$$T(U) \Phi_{ix}^{(\alpha)} = \sum_{x'} U_{x'x}^{(\alpha)} \Phi_{ix'}^{(\alpha)}, \quad (18.4)$$

а для перестановки  $P$

$$P \Phi_{ix}^{(\alpha)} = \sum_{i'} T_{i't}^{(\alpha)}(P) \Phi_{i'x}^{(\alpha)}. \quad (18.5)$$

Здесь  $i$  — обычный индекс строки неприводимого представления  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{S}_n$  (гл. 17), а  $x$  — новый индекс, введенный для нумерации базиса подпространства из всех векторов пространства  $L^{(\alpha)}$ , которые имеют одинаковый индекс  $i$ . Поэтому  $U^{(\alpha)}$  — как раз то представление группы  $U_N$ , которое будет интересовать нас в данной главе.



Представление  $T^{(\alpha)}(P)$  группы  $\mathcal{S}_n$  обязательно неприводимо, так как оно строится с помощью проекционного оператора  $P^{(\alpha)}$ . Удивительно, что представление  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_N$ , построенное таким способом, тоже неприводимо, но мы не будем доказывать это. Набор представлений  $U^{(\alpha)}$  для всех разбиений всех целых чисел  $n$  в действительности не является полным набором представлений, но после небольшого пополнения (§ 9) он становится полным. При фиксированном  $\alpha$  базисные векторы  $\Phi_{tx}^{(\alpha)}$  пространства  $L^{(\alpha)}$  обычно располагаются в виде прямоугольного блока:

$$\begin{array}{ccccccc} \Phi_{11}^{(\alpha)} & \Phi_{12}^{(\alpha)} & \Phi_{13}^{(\alpha)} & \dots & \Phi_{1d_\alpha}^{(\alpha)} & & \\ \Phi_{21}^{(\alpha)} & \Phi_{22}^{(\alpha)} & \dots & & \Phi_{2d_\alpha}^{(\alpha)} & & \\ \Phi_{31}^{(\alpha)} & & & & \vdots & & \\ \vdots & & & & & & \\ \Phi_{s_\alpha 1}^{(\alpha)} & \Phi_{s_\alpha 2}^{(\alpha)} & \dots & & \Phi_{s_\alpha d_\alpha}^{(\alpha)} & & \end{array} \quad (18.6)$$

Векторы в каждом столбце преобразуются по (одинаковому для всех столбцов) неприводимому представлению  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ , а каждая строка порождает (одинаковое для всех строк) представление  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_N$ . Размерность представления  $T^{(\alpha)}$  мы обозначим через  $s_\alpha$ , как и в гл. 17, а размерность представления  $U^{(\alpha)}$  — через  $d_\alpha$ . Резюмируем сказанное: отдельные индексы появляются из-за инвариантности пространства  $L^{(\alpha)}$  относительно произведения групп  $\mathcal{S}_n \times U_N$ ; неприводимость представления  $T^{(\alpha)}$  является следствием использования соответствующего проекционного оператора; утверждение о неприводимости представления  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_N$  нам еще предстоит доказать. Для представления  $T$  группы  $\mathcal{S}_n \times U_N$ , действующего на пространстве  $L$ , мы имеем

$$T = \sum_{\alpha} T^{(\alpha)} \otimes U^{(\alpha)}. \quad (18.7)$$

Приравнивая размерности обеих частей этого равенства, получаем соотношение

$$N^n = \sum_{\alpha} s_{\alpha} d_{\alpha} \quad (18.8)$$

между размерностями  $s_{\alpha}$  представлений  $T^{(\alpha)}$  и размерностями  $d_{\alpha}$  представлений  $U^{(\alpha)}$ . Важно осознать, что раз-

биения  $\alpha$  служат как для нумерации неприводимых представлений конечной группы  $\mathcal{S}_n$ , так и для нумерации неприводимых представлений непрерывной группы  $U_N$ . При фиксированном числе  $N$  можно брать любые положительные целые числа  $n$ , соответствующие разным числам сомножителей в произведениях (18.2). Поэтому, как и должно быть в случае непрерывной группы, мы получаем бесконечное число неприводимых представлений. Существует, однако, одно ограничение на возможные разбиения  $[n_1 n_2 \dots]$ . Напомним, что, согласно сказанному в гл. 17, разбиение на  $p$  частей предполагает полную антисимметрию для множеств из  $p$  частиц, выбранных из первоначальных  $n$  частиц. Но при  $p > N$  это невозможно, так как имеется всего  $N$  различных одночастичных состояний. Значит, неприводимые представления  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_N$  нумеруются разбиениями  $[n_1 n_2 \dots]$  любого целого числа  $n$  на не более чем  $N$  частей. Иначе говоря, их можно занумеровать схемами Юнга с не более чем  $N$  строками.

## § 2. НЕКОТОРЫЕ ПРИМЕРЫ

Чтобы проиллюстрировать довольно абстрактные утверждения предыдущего параграфа, рассмотрим примеры с небольшими числами  $N$  и  $n$ .

1)  $N=2$ ,  $n=2$ . Введем обозначение  $\varphi_i(1)\varphi_j(2)\varphi_k(3)\dots\varphi_p(n) \equiv |ijk\dots p\rangle$ . Тогда существуют  $N^n=4$  произведения  $|11\rangle$ ,  $|12\rangle$ ,  $|21\rangle$ ,  $|22\rangle$ . Неприводимые представления группы  $\mathcal{S}_2$  нумеруются двумя возможными разбиениями  $[2]$  и  $[11]$ , а соответствующие подпространства определяются следующими базисными векторами:

$$L^{[2]}: |11\rangle, (|12\rangle + |21\rangle)/\sqrt{2}, |22\rangle,$$

$$L^{[11]}: (|12\rangle - |21\rangle)/\sqrt{2}.$$

Так, например, разбиению  $[2]$  соответствует, как мы видим, трехмерное представление группы  $U_2$  и, согласно сказанному в гл. 17, § 5, одномерное представление группы  $\mathcal{S}_2$ .

2)  $N=3$ ,  $n=2$ . Пользуясь тем же обозначением, что и выше, разложим  $3^2=9$ -мерное пространство  $L$  на под-

пространства

$$L^{[2]}: \quad |11\rangle, |22\rangle, |33\rangle, (|12\rangle + |21\rangle)/\sqrt{2}, (|13\rangle + |31\rangle)/\sqrt{2}, \\ (|23\rangle + |32\rangle)/\sqrt{2},$$

$$L^{[11]}: \quad (|12\rangle - |21\rangle)/\sqrt{2}, (|13\rangle - |31\rangle)/\sqrt{2}, \\ (|23\rangle - |32\rangle)/\sqrt{2}.$$

Таким образом, разбиения  $[2]$  и  $[11]$  теперь соответствуют шестимерному и трехмерному представлениям группы  $U_3$ .

3)  $N=2$ ,  $n=3$ . Теперь  $2^3=8$  произведений имеют вид  $|111\rangle, |112\rangle, |121\rangle, |211\rangle, |122\rangle, |212\rangle, |221\rangle, |222\rangle$ . Подпространство  $L^{[3]}$  — это просто множество полностью симметричных комбинаций таких векторов. Его легко построить:

$$L^{[3]}: \quad |111\rangle, (|112\rangle + |121\rangle + |211\rangle)/\sqrt{3}, \\ |222\rangle, (|221\rangle + |212\rangle + |122\rangle)/\sqrt{3}.$$

Представление группы  $\mathcal{S}_3$ , соответствующее разбиению  $[21]$ , двумерно. Поэтому соответствующий блок (18.6) имеет две строки. Вспомнив пример из гл. 17, § 9 или применив проекционный оператор, мы убеждаемся, что в качестве блока базисных векторов можно взять следующую таблицу:

$$L^{[21]}: \\ (2|112\rangle - |121\rangle - |211\rangle)/\sqrt{6}, (2|221\rangle - |212\rangle - |122\rangle)/\sqrt{6}, \\ (|121\rangle - |211\rangle)/\sqrt{2}, \quad (|212\rangle - |122\rangle)/\sqrt{2}.$$

В каждом столбце мы расположили векторы, преобразующиеся по обычному представлению  $T^{[21]}$  (гл. 17, § 9). Мы не получили еще представления  $U^{[21]}$  в обычном виде, но два вектора в первой строке различаются числом «частиц» в каждом «состоянии». Очевидно, что они взаимно ортогональны, но любая пара ортогональных векторов, построенных как их линейные комбинации, тоже может служить базисом. О выборе обычного базиса представлений  $U^{(\alpha)}$  говорится в § 4. Для доказательства того, что каждая строка порождает одно и то же представление группы  $U_N$ , достаточно показать, что матрицы общего

унитарного преобразования  $T(U)$  одинаковы в этих двух пространствах. При этом нужно воспользоваться соотношением  $\langle i'j'k' | T(U) | ijk \rangle = U_{i'i} U_{j'j} U_{k'k}$ , вытекающим из определения (18.3). На этом заканчивается разложение пространства  $L$ , так как пространство  $L^{[111]}$  отсутствует из-за того, что  $N=2$ . Любая попытка спроектировать на такое пространство приводит к нулевым векторам.

4)  $N=3$ ,  $n=3$ . Мы оставляем этот пример в качестве упражнения. Пространство  $L$  теперь  $3^3=27$ -мерно. Оно разлагается на десятимерное пространство  $L^{[3]}$ , на шестнадцатимерное пространство  $L^{[21]}$ , которое описывается блоком с двумя строками и восемью столбцами, и на одномерное пространство  $L^{[111]}$ .

### § 3. ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОСТЬ ПОДГРУПП $U_N \rightarrow U_{N-1} \rightarrow \dots \rightarrow U_2 \rightarrow U_1$

Часто бывает удобно выделить последовательность подгрупп. С ее помощью можно занумеровать базисные векторы представлений. Например, в гл. 7, используя подгруппу  $\mathcal{R}_2$  группы  $\mathcal{R}_3$ , нумеровали с помощью числа  $m$  базисные векторы представления  $D^{(\nu)}$  группы  $\mathcal{R}_3$ . В гл. 11 мы нумеровали базисные векторы представлений  $(\lambda, \mu)$  группы  $SU_3$  числами  $T$ ,  $M_T$  и  $Y$ , которые связаны с подгруппами  $SU_2$ ,  $\mathcal{R}_2$  и  $U_1$  группы  $SU_3$ . Тот же способ применялся к группе перестановок  $\mathcal{S}_n$  в гл. 17, § 8, где рассматривалась последовательность  $\mathcal{S}_n \rightarrow \mathcal{S}_{n-1} \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{S}_2$ .

В случае унитарных групп мы возьмем последовательность подгрупп  $U_N \rightarrow U_{N-1} \rightarrow \dots \rightarrow U_2 \rightarrow U_1$ . Она получается путем последовательного ограничения преобразований на пространства, размерность которых на единицу меньше. Достаточно рассмотреть лишь первый шаг в этой последовательности. Для простоты рассмотрим сужение  $U_N \rightarrow U_{N-1} \times U_1$ , которое для отбрасываемого одномерного пространства сохраняет простые преобразования из группы  $U_1$ . Группа  $U_1$  состоит из  $1 \times 1$ -матриц вида  $\exp(-i\theta)$  и, как и группа  $\mathcal{R}_2$  в гл. 7, § 3, имеет одномерные неприводимые представления  $\exp(-im\theta)$ , нумеруемые целым числом  $m$ . Пусть для определенности  $\varphi_N$  — базисный вектор отбрасываемого пространства (в тех же обозначениях, что и в § 1). Тогда

преобразования  $U_{N-1}$  действуют на базисные векторы  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_{N-1}$ . Произведение вида  $\Phi$  [формула (18.2)] будет преобразовываться по представлению  $\exp(-ir\theta)$  группы  $U_1$ , если в него вектор  $\varphi_N$  входит  $r$  раз, т. е. если  $r$  из  $n$  частиц находятся в состоянии  $\varphi_N$ . Найдем разложение представления  $U^{(\alpha_n)}$  группы  $U_N$  при ограничении его на подгруппу  $U_{N-1} \times U_1$ . Индекс  $n$  удобно включить в обозначение  $\alpha_n$ , чтобы подчеркнуть, что  $\alpha_n$  — это разбиение числа  $n$ , или, иначе говоря, схема Юнга из  $n$  квадратов. Сначала мы сформулируем результат, а затем докажем его. Итак,

$$U^{(\alpha_n)} = \sum_{r=0}^n \sum'_{\alpha_{n-r}} V^{(\alpha_{n-r})} \times \exp(-ir\theta), \quad (18.9)$$

где  $V^{(\alpha_{n-r})}$  — неприводимое представление группы  $U_{N-1}$ . Штрих у суммы означает, что берутся лишь те схемы Юнга  $\alpha_{n-r}$ , которые можно получить из схемы Юнга  $\alpha_n$ , удаляя  $r$  квадратов, причем нельзя брать два квадрата из одного столбца. Не доказывая пока этот результат, проиллюстрируем его на примерах § 2 для ограничения  $U_3 \rightarrow U_2 \times U_1$  и  $n=2$ :

$$U^{[2]} = V^{[2]} \oplus \exp(-i\theta) V^{[1]} \oplus \exp(-2i\theta) V^{[0]}, \\ U^{[11]} = V^{[11]} \oplus \exp(-i\theta) V^{[1]}.$$

Замечая, что число  $r$  соответствует числу частиц в состоянии  $\varphi_3$ , нетрудно каждому представлению  $V^{(\alpha_{2-r})}$  сопоставить базисные векторы из примера 2, § 2:

$$U^{[2]} \begin{cases} r=0 \ V^{[2]}: |11\rangle, |22\rangle, (|12\rangle + |21\rangle)/\sqrt{2}, \\ r=1 \ V^{[1]}: (|13\rangle + |31\rangle)/\sqrt{2}, (|23\rangle + |32\rangle)/\sqrt{2}, \\ r=2 \ V^{[0]}: |33\rangle, \end{cases} \\ U^{[11]} \begin{cases} r=0 \ V^{[11]}: (|12\rangle - |21\rangle)/\sqrt{2}, \\ r=1 \ V^{[1]}: (|13\rangle - |31\rangle)/\sqrt{2}, (|23\rangle - |32\rangle)/\sqrt{2}, \end{cases}$$

Приведенные здесь для представлений  $V^{[2]}$  и  $V^{[11]}$  векторы совпадают с векторами из примера 1, § 2. Две пары векторов, соответствующие представлению  $V^{[1]}$ , различны, но при действии группы  $U_2$  на состояния  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$  они преобразуются одинаковым образом. В самом деле, они преобразуются, как векторы  $|1\rangle$  и  $|2\rangle$  с помощью  $2 \times 2$ -

матриц исходного представления группы  $U_2$ , которое соответствует  $n=1$ . Оставшийся вектор  $|33\rangle$  очевидным образом инвариантен относительно группы  $U_2$ .

Для доказательства формулы (18.9), или «закона ветвления», как она иногда называется, мы применим разложение внешнего произведения неприводимых представлений группы  $\mathcal{S}_n$  (гл. 17, § 11). Сначала мы разложим пространство  $L$ , состоящее из всех произведений типа (18.2), на подпространства,  $L = \sum_{r=0}^n L_r$ , в соответствии с поведением векторов при преобразованиях из подгруппы  $U_1$ . Иначе говоря, подпространство  $L_r$  состоит из тех произведений, у которых  $r$  частиц находятся в состоянии  $\varphi_N$ , а  $n-r$  частиц — в остальных состояниях: от  $\varphi_1$  до  $\varphi_{N-1}$ . При анализе структуры подпространства  $L_r$  мы можем считать, что оно построено из произведений вида

$$\varphi_i(1) \varphi_j(2) \dots \varphi_p(n-r) \varphi_N(n-r+1) \dots \varphi_N(n) \quad (18.10)$$

путем а) всевозможного выбора индексов  $i, j, \dots, p$  из чисел  $1, 2, \dots, N-1$  и б) всевозможных перестановок, которые перемешивают между собой частицы с номерами от  $1$  до  $n-r$  и от  $(n-r+1)$  до  $n$ . Структура такого произведения подобна структуре произведения (17.24), рассматривавшегося в гл. 17, § 11, где говорилось о внешних произведениях. Шаг «а» совпадает с процедурой построения пространства  $L$  (§ 1). Правда, здесь числа  $n$  и  $N$  заменены числами  $n-r$  и  $N-1$ . Поэтому для частиц с номерами от  $1$  до  $n-r$  мы можем построить представления со всеми схемами Юнга  $\alpha_{n-r}$ , составленными из  $n-r$  квадратов и содержащими не более  $N-1$  строк. Эти схемы Юнга  $\alpha_{n-r}$  описывают поведение векторов при преобразованиях как из группы  $U_{n-1}$ , так и из группы  $\mathcal{S}_{n-r}$ . Чтобы установить, как ведут себя произведения (18.10) при преобразованиях из группы  $\mathcal{S}_n$ , нужно построить внешнее произведение представления  $\alpha_{n-r}$  группы  $\mathcal{S}_{n-r}$  с полностью симметричным представлением  $[r]$  группы  $\mathcal{S}_r$ , которое соответствует последним  $r$  частицам в произведении (18.10). Это возможно как частный случай правила (17.28). Тогда при заданной схеме Юнга  $\alpha_{n-r}$  схемы Юнга  $\alpha_n$ , связанные с группой  $\mathcal{S}_n$ , получаются путем добавления  $r$  квадратов к схеме  $\alpha_{n-r}$  таким

способом, чтобы никакие два добавленных квадрата не лежали в одном столбце. Обратив рассуждения, мы теперь можем вывести разложение (18.9). Таким образом, при заданной схеме Юнга  $\alpha_n$  и при заданном числе  $r$  все возможные представления группы  $U_{N-1}$  соответствуют тем схемам Юнга  $\alpha_{n-r}$ , которые можно получить, удалив из схемы  $\alpha_n$   $r$  квадратов, лежащих в разных столбцах.

#### § 4. СИСТЕМА НУМЕРАЦИИ БАЗИСНЫХ ВЕКТОРОВ

В гл. 17, § 8 мы применили последовательность подгрупп  $\mathcal{S}_{n-1} \rightarrow \mathcal{S}_{n-2} \rightarrow \dots \rightarrow \mathcal{S}_2$  группы  $\mathcal{S}_n$  для построения однозначной системы нумерации базисных векторов неприводимых представлений  $T^{(\alpha_n)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ . Такие же рассуждения для последовательности подгрупп  $U_{N-1} \rightarrow \dots \rightarrow U_{N-2} \rightarrow \dots \rightarrow U_1$ , рассмотренной в § 3, приводят к однозначной системе нумерации базисных векторов представлений  $U^{(\alpha_n)}$  группы  $U_N$ . При такой системе базисные векторы представления  $U^{(\alpha_n)}$  нумеруются последовательностью схем Юнга

$$\alpha_n, \alpha_{n-r_N}, \alpha_{n-r_N-r_{N-1}}, \dots, \alpha_{n-r_N-r_{N-1}-\dots-r_2}, \quad (18.11)$$

где схема  $\alpha_{n-r_N}$  определяет представление подгруппы  $U_{N-1}$ , которому принадлежит вектор, схема  $\alpha_{n-r_N-r_{N-1}}$  относится к подгруппе  $U_{N-2}$  и т. д. Доказательство того, что такая система нумерации однозначна, т. е. что нет двух базисных векторов представления  $U^{(\alpha_n)}$ , которые имели бы одинаковые индексы, совершенно аналогично доказательству, приведенному в гл. 17, § 8. Мы не будем повторять его. В качестве примера шести базисным векторам представления  $U^{[2]}$  группы  $U_3$ , рассмотренного в § 3, можно сопоставить последовательности разбиений, указанные во втором столбце табл. 18.1.

Последовательность схем Юнга, или разбиений, — это громоздкое обозначение. Как и в гл. 17, § 8, более компактная система нумерации получается, если сопоставить каждому базисному вектору одну схему Юнга  $\alpha_n$ , квадратам которой следующим образом приписаны «номера состояний» от 1 до  $N$ . Число  $N$  ставится в те квадраты схемы  $\alpha_n$ , которые отсутствуют в схеме  $\alpha_{n-r_N}$ , число  $N-1$  — в те квадраты схемы  $\alpha_{n-r_N}$ , которые отсутствуют

Таблица 18.1

|                                      |                 |                                              |   |   |
|--------------------------------------|-----------------|----------------------------------------------|---|---|
| $ 11\rangle$                         | $[2], [2], [2]$ | <table><tr><td>1</td><td>1</td></tr></table> | 1 | 1 |
| 1                                    | 1               |                                              |   |   |
| $( 12\rangle +  21\rangle)/\sqrt{2}$ | $[2], [2], [1]$ | <table><tr><td>1</td><td>2</td></tr></table> | 1 | 2 |
| 1                                    | 2               |                                              |   |   |
| $ 22\rangle$                         | $[2], [2], [0]$ | <table><tr><td>2</td><td>2</td></tr></table> | 2 | 2 |
| 2                                    | 2               |                                              |   |   |
| $( 13\rangle +  31\rangle)/\sqrt{2}$ | $[2], [2], [1]$ | <table><tr><td>1</td><td>3</td></tr></table> | 1 | 3 |
| 1                                    | 3               |                                              |   |   |
| $( 23\rangle +  32\rangle)/\sqrt{2}$ | $[2], [1], [0]$ | <table><tr><td>2</td><td>3</td></tr></table> | 2 | 3 |
| 2                                    | 3               |                                              |   |   |
| $ 33\rangle$                         | $[2], [0], [0]$ | <table><tr><td>3</td><td>3</td></tr></table> | 3 | 3 |
| 3                                    | 3               |                                              |   |   |

в схеме  $\alpha_{n-r_N-r_{N-1}}$ , и т. д. Такая система нумерации показана в третьем столбце табл. 18.1. В качестве еще одного примера сопоставим восьми базисным векторам представления  $[21]$  группы  $U_3$  таблицы Юнга

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 2 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 3 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array}
 \begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 3 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array}
 \quad (18.12)$$

Например, первому базисному вектору соответствует последовательность разбиений  $[21] \rightarrow [21] \rightarrow [2]$ , шестому — последовательность  $[21] \rightarrow [11] \rightarrow [1]$ , а восьмому — последовательность  $[21] \rightarrow [1] \rightarrow [0]$ .

Подчеркнем, что для группы  $U_N$  способ приписывания номеров состояний совершенно отличен от того способа приписывания номеров частиц, который мы применяли для группы  $\mathcal{S}_n$  в гл. 17, § 8.

## 5. ПРЯМОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ГРУППЫ $U_N$

Следуя общему определению гл. 4, § 17, для любых двух представлений  $U(\alpha_n)$  и  $U(\alpha'_n)$  группы  $U_N$  можно построить прямое произведение. При этом получается представление, размерность которого равна произведению размерностей двух исходных представлений. Нам нужно разложить такое произведение представлений на неприводимые составляющие. Опять мы сначала просто сфор-



мулируем результат:

$$U^{(\alpha_n)} \otimes U^{(\alpha'_n)} = \sum_{\beta} m(\beta; \alpha_n, \alpha'_n) U^{(\beta)}, \quad (18.13)$$

где суммирование производится по всем схемам Юнга  $\beta$ , составленным из  $n + n'$  квадратов. Коэффициенты  $m(\beta; \alpha_n, \alpha'_n)$  задаются по правилам, которые были сформулированы в гл. 17, § 11 для разложения внешнего произведения представлений групп  $\mathcal{S}_n$  и  $\mathcal{S}_{n'}$ . Схемы  $\beta$  с числом строк, превышающим  $N$ , не рассматриваются, поскольку таких представлений группы  $U_N$  нет (§ 1). И это единственный способ, которым число  $N$  входит в выражение (18.13). Прежде чем доказывать этот результат, мы опять приведем несколько примеров.

В частном случае, когда  $n=2$ ,  $n'=1$  и  $\alpha_n=[2]$ , коэффициенты  $m(\beta; \alpha_n, \alpha'_n)$  определялись формулой (17.26). Разложение (18.13) имеет вид

$$U^{[2]} \otimes U^{[1]} = U^{[3]} \oplus U^{[21]}. \quad (18.14)$$

Как объяснялось ранее, при  $N=1$  второй член должен отсутствовать. Естественно, при  $N=1$  нет никакого разложения, так как неприводимые представления — это одномерные представления  $\exp(-\ln \theta)$ , нумеруемые целым числом  $n$ . При  $N=2$  размерность левой части равенства (18.14) равна  $3 \times 2 = 6$ , а два члена в правой части имеют размерности 4 и 2 (см. § 2, примеры 1 и 3). При  $N=3$  примеры 2 и 4 (§ 2) показывают, что теперь размерность левой части равна  $6 \times 3 = 18$ , а члены в правой части имеют размерности 10 и 8.

В качестве более сложного примера рассмотрим произведение  $U^{[21]} \otimes U^{[21]}$ , для которого разложение внешнего произведения представлений дается выражением (17.29). Не воспроизводя здесь это выражение, мы лишь отметим, что при  $N=2$  произведение представлений имеет размерность 4 и разлагается в сумму представлений  $U^{[421]}$  и  $U^{[33]}$  с размерностями 3 и 1, а для  $N=3$  произведение представлений имеет размерность 64 и разлагается в сумму представлений  $U^{[421]}$ ,  $U^{[4111]}$ ,  $U^{[331]}$ ,  $U^{[321]}$  (дважды) и  $U^{[222]}$  с размерностями 27, 10, 10,  $2 \times 8$  и 1.

Для доказательства разложения (18.13) мы воспользуемся тем, что, как показано в гл. 17, § 12, коэффициенты  $m(\beta; \alpha_n, \alpha'_n)$  входят также в разложение (17.30) представ-

ления  $T^{(\beta)}$  группы  $\mathcal{S}_{n+n'}$  при ограничении его на подгруппу  $\mathcal{S}_n \times \mathcal{S}_{n'}$ . Рассмотрим пространство  $L$ , состоящее из произведений (18.2) для  $n+n'$  частиц. Как говорилось в § 1, такое пространство разлагается на неприводимые представления произведения групп  $\mathcal{S}_{n+n'} \times U_N$  (они нумеруются разбиениями  $\beta$  числа  $n+n'$ ):

$$T = \sum_{\beta} T^{(\beta)} \otimes U^{(\beta)}.$$

Ограничение на подгруппу  $\mathcal{S}_n \otimes \mathcal{S}_{n'} \otimes U_N$  приводит в силу соотношения (17.30) к дальнейшему разложению:

$$T = \sum_{\beta, \alpha_n, \alpha_{n'}} m(\beta; \alpha_n, \alpha_{n'}) T^{(\alpha_n)} \otimes T^{(\alpha_{n'})} \otimes U^{(\beta)}. \quad (18.15)$$

Рассматривая по отдельности первые  $n$  и последние  $n'$  частиц и применяя к каждой из этих групп частиц выражение (18.7), мы также приходим к разложению

$$T = \sum_{\alpha_n, \alpha_{n'}} T^{(\alpha_n)} \otimes U^{(\alpha_n)} \otimes T^{(\alpha_{n'})} \otimes U^{(\alpha_{n'})}. \quad (18.16)$$

Наконец, сравнивая это выражение с предыдущим, мы получаем желаемое разложение произведения представлений группы  $U_N$ :

$$U^{(\alpha_n)} \otimes U^{(\alpha_{n'})} = \sum_{\beta} m(\beta; \alpha_n, \alpha_{n'}) U^{(\beta)}.$$

## 6. ОГРАНИЧЕНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ С ГРУППЫ $U_N$ НА ЕЕ ПОДГРУППУ $SU_N$

Неприводимые представления  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_N$  строились в § 1 из произведений типа (18.2), причем индекс  $\alpha$  означал разбиение числа  $n$ , т. е. разбиение числа сомножителей в произведении. В данном параграфе мы рассмотрим подгруппу, состоящую из всех унитарных  $N \times N$ -матриц, определитель которых равен единице. Она обозначается символом  $SU_N$  и называется «специальной унитарной группой» или «унимодулярной группой». Соотношение между группами  $U_N$  и  $SU_N$  лучше всего характеризуется тем, что группу  $U_N$  можно представить в виде прямого произведения  $U_1 \times SU_N$ , где  $U_1$  — группа  $N \times N$ -матриц, пропо-

рациональных единичной матрице с коэффициентом пропорциональности  $\exp(-i\psi)$ , причем  $\psi$  — действительное число. (Эта группа  $U_1$  не совпадает с рассмотренной в § 3 группой  $U_1$ , действующей лишь на одномерном подпространстве нашего  $N$ -мерного пространства, хотя, конечно, эти группы изоморфны.)

Если  $A$  и  $B$  — квадратные матрицы, то выполняется простое соотношение  $\det AB = (\det A)(\det B)$ . Поэтому из условия унитарности  $UU^\dagger = 1$  матрицы  $U$  следует, что  $|\det U|^2 = 1$ . Следовательно, любую унитарную матрицу  $U$  можно представить в виде  $U = \exp(-i\psi)\bar{U}$ , где  $\det \bar{U} = +1$ . Как нетрудно убедиться, множество всех унитарных  $N \times N$ -матриц  $\bar{U}$  с  $\det \bar{U} = 1$  образует группу. Значит, группа  $U_N$  распадается на группу  $U_1$  множителей вида  $\exp(-i\psi)$  и на группу  $\bar{U}$ , которую мы назвали группой  $SU_N$ .

Из общей теории представлений произведения групп (гл. 4, § 21) мы знаем, что неприводимые представления  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_N$  должны иметь вид прямого произведения неприводимых представлений групп  $U_1$  и  $SU_N$ . Представления группы  $U_1$ , конечно, одномерны и имеют вид  $\exp(-im\psi)$ , где  $m$  — любое целое число. Так как представление  $U^{(\alpha)}$  в § 1 строилось из  $n$  сомножителей, оно имеет вид

$$U^{(\alpha)} = \exp(-in\psi) \otimes U^{(\tilde{\alpha})}, \quad (18.17)$$

где  $n$  — число квадратов в схеме Юнга  $\alpha$ . Значит, неприводимое представление  $U^{(\tilde{\alpha})}$  группы  $SU_N$  имеет ту же размерность, что и представление  $U^{(\alpha)}$ . Иначе говоря, представление  $U^{(\alpha)}$  не разлагается при ограничении его с группы  $U_N$  на подгруппу  $SU_N$ . Поэтому для нумерации неприводимых представлений группы  $SU_N$  мы можем использовать те же разбиения  $(\tilde{\alpha}) = (\alpha) = [n_1 n_2 \dots]$ . Два представления группы  $U_N$ , отвечающие разным  $n$ , очевидно, не эквивалентны. Для группы  $SU_N$ , как сейчас мы докажем, это не так.

Рассмотрим представление  $[11\dots 1]$  группы  $U_N$  при  $n = N$ . Оно должно быть одномерным, так как из произведений (18.2) можно построить единственную полностью антисимметричную комбинацию, а именно

$$\Psi = \sum_P \pi(P) P \varphi_1(1) \varphi_2(2) \dots \varphi_N(N), \quad (18.18)$$

где суммирование идет по всем перестановкам номеров частиц, а  $\pi(\mathbf{P})$ —это четность перестановки  $\mathbf{P}$ . В силу формулы (18.3) унитарное преобразование действует на вектор  $\Psi$  следующим образом:

$$T(\mathbf{U})\Psi = \sum_{ij\dots p} U_{i1}U_{j2}\dots U_{pN} \sum_{\mathbf{P}} \pi(\mathbf{P}) \mathbf{P} \varphi_i(1) \varphi_j(2) \dots \varphi_p(N). \quad (18.19)$$

Из-за наличия оператора антисимметризации ненулевой вклад дают лишь те комбинации  $ij\dots p$ , которые не содержат повторяющихся индексов, т. е. комбинации  $ij\dots p$ , представляющие собой перестановки чисел  $12\dots N$ . Обозначим через  $\left(\begin{smallmatrix} ij\dots p \\ 12\dots N \end{smallmatrix}\right)$  перестановку, которая частицы с номерами  $ij\dots p$  переводит в частицы с номерами  $12\dots N$ . Выражение (18.19) можно переписать в виде

$$T(\mathbf{U})\Psi = \sum_{ij\dots p} U_{i1}U_{j2}\dots U_{pN} \sum_{\mathbf{P}} \pi(\mathbf{P}) \mathbf{P} \times \\ \times \left(\begin{smallmatrix} ij\dots p \\ 12\dots N \end{smallmatrix}\right) \varphi_i(i) \varphi_j(j) \dots \varphi_p(p).$$

Напомним, что перестановка  $\left(\begin{smallmatrix} ij\dots p \\ 12\dots N \end{smallmatrix}\right)$ , как и перестановка  $\mathbf{P}$ , действует лишь на номера частиц. Поскольку порядок сомножителей несуществен, их можно расположить в таком порядке, чтобы множитель  $\varphi_1(1)$  был первым, множитель  $\varphi_2(2)$ —вторым и т. д. Тогда в силу того, что четность произведения перестановок равна произведению четностей перестановок (гл. 17, § 4), получаем

$$T(\mathbf{U})\Psi = \sum_{ij\dots p} U_{i1}U_{j2}\dots U_{pN} \sum_{\mathbf{P}} \pi(\mathbf{P}) \mathbf{P} \left(\begin{smallmatrix} ij\dots p \\ 12\dots N \end{smallmatrix}\right) \varphi_1(1) \times \\ \times \varphi_2(2) \dots \varphi_N(N) = \sum_{ij\dots p} U_{i1}U_{j2}\dots U_{pN} \pi \left(\begin{smallmatrix} 12\dots N \\ ij\dots p \end{smallmatrix}\right) \times \\ \times \sum_{\mathbf{P}'} \pi(\mathbf{P}') \mathbf{P}' \varphi_1(1) \varphi_2(2) \dots \varphi_N(N),$$

где перестановка  $\mathbf{P}'$  определяется как произведение перестановок:  $\mathbf{P}' = \mathbf{P} \left(\begin{smallmatrix} ij\dots p \\ 12\dots N \end{smallmatrix}\right)$ . Мы воспользовались также тем, что, когда перестановки  $\mathbf{P}$  пробегают группу  $\mathcal{S}_N$ , перестановки  $\mathbf{P}'$  тоже пробегают эту группу (т. 1, гл. 2, § 9).

Наконец, заметим, что сумма по перестановкам  $P'$  совпадает с вектором  $\Psi$ , а сумма по индексам  $ij \dots p$  — с определителем матрицы  $U$ . Значит,

$$T(U)\Psi = (\det U)\Psi. \quad (18.20)$$

Смысл равенства (18.20) заключается в том, что вектор  $\Psi$  остается неизменным при преобразовании из группы  $SU_N$ . Таким образом, мы доказали эквивалентность представления, отвечающего разбиению  $[11 \dots 1]$  числа  $n=N$ , тривиальному представлению, отвечающему просто  $n=0$ . Это означает эквивалентность схемы Юнга в виде одного столбца из  $N$  строк тривиальной схеме, в которой нет ни одного квадрата. Теперь на основании результатов § 5 можно доказать эквивалентность и других представлений. Если  $U^{(\alpha)}$  — любое неприводимое представление, то по правилам построения коэффициентов разложения (18.13) имеем  $U^{(\alpha)} \otimes U^{[11 \dots 1]} = U^{(\beta)}$ , где схема Юнга  $\beta$  получается из схемы Юнга  $\alpha$  добавлением слева полного столбца. Так как представление  $U^{[11 \dots 1]}$  эквивалентно тривиальному, можно написать  $U^{(\alpha)} \equiv U^{(\beta)}$ . Значит, добавляя или вычитая один полный столбец (или несколько), получаем эквивалентное представление. Можно показать, что других эквивалентных представлений нет. Неэквивалентные неприводимые представления обычно обозначаются схемами Юнга с минимальным числом квадратов. Они получаются путем вычитания всех полных столбцов длиной  $N$ . Поэтому в случае группы  $SU_N$  нам нужны лишь схемы Юнга с числом строк не более  $N-1$ .

Разложение произведения представлений группы  $SU_N$  можно получить из разложения (18.13) для группы  $U_N$ , учитывая отмеченную выше эквивалентность представлений. Например, для группы  $SU_2$  схемы Юнга представлений имеют лишь одну строку, и, применяя разложение (18.13) к произведению представлений  $U^{[3]} \otimes U^{[2]}$  группы  $SU_2$ , получаем

$$\begin{aligned} \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} &= \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & & & \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} = \\ &= \begin{array}{|c|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}. \end{aligned}$$

В более привычных обозначениях  $D^{(j)}$ , которые в гл. 7 и

10 применялись для представлений группы  $SU_2$ , это соотношение представляет собой пример разложения (7.44):

$$\mathbf{D}^{(3/2)} \otimes \mathbf{D}^{(1)} = \mathbf{D}^{(5/2)} \oplus \mathbf{D}^{(3/2)} \oplus \mathbf{D}^{(1/2)}.$$

Здесь мы использовали эквивалентность представлений  $\mathbf{U}^{[n]}$  и  $\mathbf{D}^{(1/2^n)}$ , о которой будет сказано в следующем параграфе.

## § 7. ЧАСТНЫЕ СЛУЧАИ: ГРУППЫ $SU_2$ , $SU_3$ и $SU_4$

Сопоставим теперь сказанное выше о группе  $SU_N$  с частными описаниями групп  $SU_2$ ,  $SU_3$  и  $SU_4$  в гл. 10—12. В случае группы  $SU_2$  неприводимые представления нумеруются схемами Юнга с одной строкой длиной  $n$ , т. е. они нумеруются одним целым числом  $n$ . Но в гл. 10 мы для неприводимых представлений группы  $SU_2$  применяли обозначение  $\mathbf{D}^{(j)}$ , где  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ , поскольку группа  $SU_2$  гомоморфна группе  $\mathcal{R}_3$  (см. также § 13). Оба подхода объединяются соотношением  $j = 1/2 n$ . Это соотношение можно вывести разными способами. Один из них основан на том, что число  $j$  в представлении  $\mathbf{D}^{(j)}$  соответствует максимальному значению инфинитезимального оператора  $J_z$ , который в исходном двумерном пространстве представляется матрицей  $\begin{pmatrix} 1/2 & 0 \\ 0 & -1/2 \end{pmatrix}$ . На произведении  $\Phi$  типа (18.2) такой инфинитезимальный оператор диагонален, а его значение складывается из вкладов  $+1/2$ , которые дают все частицы в состоянии  $\varphi_1$ , и вкладов  $-1/2$ , которые дают все частицы в состоянии  $\varphi_2$ . Поэтому наибольшее значение инфинитезимальный оператор имеет в том случае, когда максимально возможное число из  $n$  частиц находится в состоянии  $\varphi_1$ . В случае полностью симметричных функций, соответствующих схеме Юнга  $[n]$  с одной строкой, это число, очевидно, равно  $n$ , т. е.  $j = 1/2 n$ . Таким образом, целочисленность числа  $n$  приводит к тому, что число  $j$  либо целое, либо полуцелое.

Путем аналогичных рассуждений можно установить соответствие между индексами  $(\lambda\mu)$ , которыми обозначались в гл. 11 неприводимые представления группы  $SU_3$ , и схемами Юнга  $[n_1 n_2]$  с двумя строками, причем  $n_1 = \lambda + \mu$ ,  $n_2 = \mu$ . Напомним (гл. 11), что число  $1/3 (\lambda + 2\mu)$  — это наибольшее значение инфинитезимального оператора  $Y$ , который в исходном трехмерном пространстве представляется

матрицей

$$\frac{1}{3} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix},$$

и при таком значении оператора  $Y$  число  $^{1/2}\lambda$  совпадает с наибольшим значением инфинитезимального оператора  $T_z$ , который представляется матрицей

$$\frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Значит, оператор  $Y$  имеет на произведении  $\Phi$  наибольшее значение в том случае, когда минимально возможное число частиц находится в состоянии  $\varphi_3$ . Но для построения функции, соответствующей схеме Юнга  $[n_1 n_2]$  с двумя строками, достаточно, чтобы частицы занимали лишь два разных состояния. Поэтому все частицы могут находиться в состояниях  $\varphi_1$  и  $\varphi_2$ , а  $\lambda + 2\mu = n_1 + n_2$ . На таких функциях максимальное значение оператора  $T_z$  достигается в том случае, когда максимально возможное число частиц находится в состоянии  $\varphi_1$ . Для схемы  $[n_1 n_2]$  это число равно  $n_1$ . Тогда  $n_2$  частиц находятся в состоянии  $\varphi_2$  и  $\lambda = n_1 - n_2$ . Сравнивая это число со значением числа  $\lambda + 2\mu$ , получаем  $n_1 = \lambda + \mu$ ,  $n_2 = \mu$ , чем доказывается эквивалентность

$$(\lambda\mu) \equiv \begin{array}{|c|c|} \hline \lambda + \mu & \\ \hline \mu & \\ \hline \end{array}$$

Таким образом, октет (11) соответствует схеме Юнга



а декуплет (30)—схеме Юнга



Данные в гл. 11, § 6 правила умножения представлений группы  $SU_3$  есть частный случай соотношения (18.13),

и с учетом эквивалентностей для группы  $SU_3$  равенство (11.11) является следствием равенства (17.29).

Для группы  $SU_4$ , которая использовалась при обсуждении ядерной структуры в гл. 12, мы также можем связать индексы  $(PP'P'')$  с разбиением. В этом случае достаточно разбиения  $[n_1 n_2 n_3]$  тремя строками. Напомним, что индексы  $P$ ,  $P'$  и  $P''$  связаны с максимальными значениями инфинитезимальных операторов  $S_z$ ,  $T_z$  и  $Y_{zz}$ , которые в исходном четырехмерном пространстве величин  $p^\uparrow, n^\uparrow, p^\downarrow, n^\downarrow$  (см. обозначения в гл. 12, § 1) представляются матрицами

$$S_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T_z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$Y_{zz} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Из вида этих матриц явствует, что линейные комбинации  $S_z + T_z$ ,  $S_z - Y_{zz}$  и  $T_z - Y_{zz}$  — это операторы разности чисел частиц в состояниях  $\varphi_1$  и  $\varphi_4$ ,  $\varphi_2$  и  $\varphi_4$ ,  $\varphi_3$  и  $\varphi_4$ . Так как для построения функции, соответствующей разбиению с тремя строками, не требуется, чтобы какие-либо частицы находились в состоянии  $\varphi_4$ , мы имеем  $P + P' = n_1$ ,  $P - P'' = n_2$  и  $P' - P'' = n_3$ . Обращаясь к примерам, содержащимся в формуле (12.6), получаем соотношения

$$D^{(3/2, 3/2, 3/2)} \equiv U^{[3]}, \quad D^{(3/2, 1/2, 1/2)} \equiv U^{[21]}, \quad D^{(1/2, 1/2, -1/2)} \equiv U^{[111]},$$

которые согласуются с соотношением (12.5).

## § 8. ИНФИНИТЕЗИМАЛЬНЫЕ ОПЕРАТОРЫ ГРУППЫ $U_N$

Возвращаясь к группе  $U_N$ , заметим, что в исходном  $N$ -мерном пространстве существуют  $N^2$  инфинитезимальных операторов, соответствующих  $N^2$  независимым эрмитовым  $N \times N$ -матрицам. Для удобства выберем из них  $N$  диагональных матриц, все матричные элементы которых



равны нулю, кроме одного диагонального матричного элемента, равного  $+1$ . Обозначим такие операторы символом  $H_i$ , где  $i = 1, \dots, N$ . Из оставшихся  $N(N-1)$  операторов можно построить линейные комбинации, подобные операторам  $T_{\pm}$ ,  $U_{\pm}$ ,  $V_{\pm}$  в формуле (11.2); при этом получается  $\frac{1}{2}N(N-1)$  пар повышающих и понижающих операторов  $E_{ij}$  и  $E_{ji}$ , все матричные элементы которых равны нулю, кроме  $ij$ -го в случае операторов  $E_{ij}$  и  $ji$ -го в случае операторов  $E_{ji}$  недиагональных матричных элементов, равных  $+1$ . Такие операторы переводят частицу из состояния  $\varphi_i$  в состояние  $\varphi_j$ , т. е.  $E_{ji}\varphi_k = \delta_{ik}\varphi_j$ .

Найдем матрицы этих операторов в произвольном неприводимом представлении  $U^{(\alpha)}$ . Прежде всего, операторы  $H_i$  коммутируют между собой и являются инфинитезимальными операторами группы  $U_1 \times U_1 \times \dots \times U_1$ , которая состоит из  $N$  подгрупп  $U_1$ , соответствующих каждому измерению. Из результатов § 3 следует, что в базисе векторов § 4 матрицы  $H_i^{(\alpha)}$  операторов  $H_i$  в представлении  $U^{(\alpha)}$  будут диагональными. Собственное значение матрицы  $H_i^{(\alpha)}$  на таком базисном векторе равно  $r_i$  (см. обозначения в § 4). Набор чисел  $(r_1 r_2 \dots r_N)$  называется «весом» базисного вектора. Например, восемь базисных векторов, заданных диаграммами (18.12), имеют следующие веса (записанные в том же порядке):

$$(210)(120)(201)(111)(021)(111)(102)(012). \quad (18.21)$$

Заметим, что в отличие от последовательности схем Юнга, рассмотренной в § 4, веса не дают однозначной системы нумерации. Все возможные веса удобно располагать в таком порядке, чтобы вес  $(r'_1 r'_2 \dots r'_N)$  считался старше веса  $(r_1 r_2 \dots r_N)$ , если  $r'_1 > r_1$ . Если же  $r'_1 = r_1$ , то упорядочение идет по значениям чисел  $r'_2$  и  $r_2$  и т. д. Так, старшим весом в наборе (18.21) будет вес (210). Из определения чисел  $r_i$  видно, что старший вес произвольного неприводимого представления  $U^{(\alpha)}$ , где  $\alpha \equiv [n_1 n_2 \dots]$ , совпадает с самим разбиением, т. е.  $r_1 = n_1$ ,  $r_2 = n_2$  и т. д. Значит, старший вес может служить индексом представления  $U^{(\alpha)}$ . Этот вывод включает в себя как частный случай то обстоятельство, что для нумерации неприводимых представлений  $D^{(\lambda)}$  группы  $\mathfrak{R}_3$  используется максимальное из чисел  $m (= j)$ .

Матрицы повышающего и понижающего операторов можно найти, обобщив метод гл. 4, § 4, п. Б и воспользовавшись также последовательностью подгрупп. Мы не будем на этом останавливаться.

## § 9. КОМПЛЕКСНО-СОПРЯЖЕННЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП $U_N$ И $SU_N$

Каждому представлению  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_N$  соответствует комплексно-сопряженное представление  $U^{(\alpha)*}$ , которое получается путем комплексного сопряжения всех матричных элементов представления  $U^{(\alpha)}$ . В частности, в случае инфинитезимальных операторов это означает, что веса представления  $U^{(\alpha)*}$  противоположны по знаку весам представления  $U^{(\alpha)}$ . Отсюда явствует, что представление  $U^{(\alpha)*}$  не может совпадать с каким-либо представлением  $U^{(\alpha)}$ , определенным в § 1, так как его веса должны быть положительными.

Следовательно, представления  $U^{(\alpha)}$ , описываемые всевозможными разбиениями  $\alpha$  чисел  $n$ , не образуют полной системы. Но можно показать, что полная система неприводимых представлений группы  $U_N$  задается представлениями  $(\det U)^{-l} U^{(\alpha)}$ , где  $l$  — любое положительное целое число. Из сказанного в § 6 вытекает, что добавление простого множителя  $(\det U)^{-l}$  дает другое представление, причем если  $(r_1, r_2, \dots, r_N)$  — вес представления  $U^{(\alpha)}$ , то  $(r_1 - l, r_2 - l, \dots, r_N - l)$  — вес представления  $(\det U)^{-l} U^{(\alpha)}$ . Чтобы убедиться в этом, нужно рассмотреть бесконечно малое преобразование  $U = 1 + ia_i H_i$ , соответствующее инфинитезимальному оператору  $H_i$  и малому параметру  $a_i$ . Тогда  $(\det U)^{-l} = (1 + ia_i)^{-l} \approx 1 - ila_i$ . По определению инфинитезимального оператора  $H_i^{(\alpha)}$  в представлении  $U^{(\alpha)}$  мы имеем  $U^{(\alpha)} = 1 + ia_i H_i^{(\alpha)}$ . Значит, при малом параметре  $a_i$  имеем

$$(\det U)^{-l} U^{(\alpha)} = 1 + ia_i (H_i^{(\alpha)} - l), \quad (18.22)$$

откуда следует желаемый результат.

Применяя эту расширенную систему неприводимых представлений, мы можем для комплексно-сопряженного представления доказать эквивалентность

$$U^{(\alpha)*} \equiv (\det U)^{-n} U^{(\beta)}, \quad (18.23)$$

где индекс  $\alpha$ , как обычно, обозначает разбиение  $\alpha = [n_1 n_2 \dots n_N]$ , а  $\beta = [n_1 - n_N, n_1 - n_{N-1}, \dots, n_1 - n_2, 0]$ . Схема Юнга  $\beta$  сразу получается из схемы Юнга  $\alpha$  путем вычитания схемы  $\alpha$  из четырехугольной схемы с  $n_1$  столбцами и  $N$  строками, как показано на рис. 18.1. (Напомним, что некоторые числа  $n_i$  могут быть равными нулю и первая строка схемы  $\beta$  совпадает с последней строкой рисунка и т. д.)

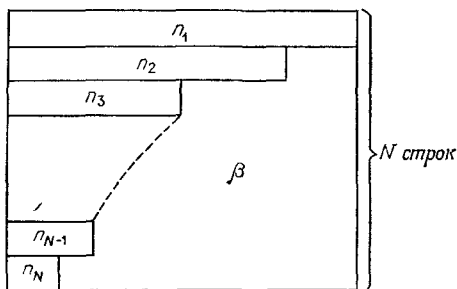


Рис. 18.1.

Прежде чем доказать эту эквивалентность, приведем несколько примеров:

$$N=2 \quad U^{[1]*} \equiv (\det U)^{-1} U^{[1]}, \quad U^{[2]*} \equiv (\det U)^{-2} U^{[2]}, \quad U^{[11]*} \equiv (\det U)^{-1} U^{[0]},$$

$$U^{[21]*} \equiv (\det U)^{-2} U^{[1]},$$

$$N=3 \quad U^{[1]*} \equiv (\det U)^{-1} U^{[11]}, \quad U^{[2]*} \equiv (\det U)^{-2} U^{[22]}, \quad U^{[11]*} \equiv (\det U)^{-1} U^{[1]},$$

$$U^{[111]*} \equiv (\det U)^{-2} U^{[21]}.$$

Выражение (18.23) неоднозначно, так как в силу сказанного в § 6 при добавлении к схеме  $\beta$  полного столбца и одновременном включении в выражение дополнительного множителя  $(\det U)^{-1}$  выражение не меняется. Эквивалентность (18.23) можно доказать, показав, что обе части равенства имеют одинаковую систему весов. Например, старшим весом левой части будет вес  $(-n_N, -n_{N-1}, \dots, -n_2, -n_1)$ . Он соответствует минимальному весу представления  $U^{(\alpha)}$ , а именно весу  $(n_N, n_{N-1}, \dots, n_2, n_1)$ . По построению старшим весом представления  $U^{(\beta)}$  будет вес  $(n_1 - n_N, n_1 - n_{N-1}, \dots, n_1 - n_2, 0)$  [см. определение, следующее за формулой (18.23)]. В завершение доказа-

тельства воспользуемся тем, что системой весов определяется представление.

В случае группы  $SU_N$  свойство  $\det U = 1$  приводит к значительно более простой эквивалентности  $U^{(\alpha)*} \equiv U^{(\beta)}$ , где схемы  $\beta$  и  $\alpha$  связаны между собой так же, как и раньше. Вспоминая также эквивалентности, о которых говорилось в § 6, мы видим, что для группы  $SU_2$  есть эквивалентность  $U^{[n]*} \equiv U^{[n]}$ , т. е. все представления группы  $SU_2$  и, следовательно, группы  $\mathcal{R}_2$  самосопряженные. Приняв для представлений группы  $SU_3$  обозначение  $(\lambda\mu)$ , мы получаем общий результат

$$(\lambda\mu)^* \equiv \begin{array}{|c|} \hline \lambda + \mu \\ \hline \mu \\ \hline \end{array}^* \equiv \begin{array}{|c|} \hline \lambda + \mu \\ \hline \lambda \\ \hline \end{array} \equiv (\mu\lambda),$$

В частности,  $(10)^* = (01)$ , а представление  $(11)$  будет самосопряженным.

## § 10. ПРИМЕНЕНИЕ ГРУППЫ $U_N$ К КЛАССИФИКАЦИИ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ

Представления группы  $U_N$  мы вводили с помощью произведений типа  $\Phi$  в формуле (18.2). Поэтому неудивительно, что группа  $U_N$  играет важную роль при построении волновых функций для системы нескольких валентных электронов в атоме. Рассмотрим  $n$  валентных электронов, которые находятся в одночастичных состояниях  $\phi_{lm}$  с фиксированным индексом  $l$ . Как обычно, индекс  $m$  может принимать значения  $m = l, (l-1), \dots, -l$ . В силу сказанного в § 1 построенные из произведений волновые функции, симметрия которых относительно перестановок описывается разбиением  $\alpha = [n_1, n_2, \dots]$  числа  $n$ , будут также преобразовываться по неприводимому представлению  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_{2l+1}$  всех унитарных преобразований  $(2l+1)$  одночастичных состояний  $\phi_{lm}$ . Принцип Паули требует, чтобы волновая функция была полностью антисимметричной по отношению к перестановкам частиц. Но разбиение  $\alpha$  относится лишь к орбитальным координатам. Поэтому разбиение  $\alpha$  необязательно совпадает с разбиением  $[11\dots 1]$ , но в комбинации со спиновой частью волновой функции оно должно давать такое разбиение. Эта задача уже рассматривалась в гл. 8, § 6.

п. Г, а также в гл. 17, § 10, где было показано, что спиновая часть волновой функции должна преобразовываться по сопряженному, или ассоциированному, представлению  $\bar{\alpha}$  группы  $\mathcal{S}_n$  всех перестановок спиновых координат частиц. (Напомним, что схема  $\bar{\alpha}$  получается из схемы  $\alpha$  путем замены строк столбцами и наоборот.) Но спиновая часть волновой функции сама является произведением типа (18.2) с  $N=2$ , т. е. спиновая часть волновой функции преобразуется по представлению  $U^{(\bar{\alpha})}$  группы  $U_2$ . Поэтому схема Юнга  $\bar{\alpha}$  имеет не более двух строк. Тогда орбитальное разбиение  $\alpha$  имеет не более двух столбцов (и, конечно, не более  $2l+1$  строк).

В § 6 и 7 мы вывели соотношение между представлениями групп  $U_2$ ,  $SU_2$  и  $\mathcal{R}_3$ . В силу этого соотношения разбиением  $\alpha$  определяется спин  $S$  системы из  $n$  частиц. Если  $\bar{\alpha} = [\tilde{n}_1, \tilde{n}_2]$ , то  $S = \frac{1}{2}(\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2)$ . Значит, индекс  $\alpha$  представления  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_{2l+1}$  задается числами  $n$  и  $S$ . Поэтому новый индекс  $\alpha$  является в этом смысле излишним. Следующая задача связана с определением возможных значений полного орбитального углового момента  $L$ , который совместим с заданными числами  $n$  и  $S$ . Но так как  $L$  — индекс представления группы  $\mathcal{R}_3$ , наша задача сводится к разложению представления  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_{2l+1}$  при ограничении на его подгруппу  $\mathcal{R}_3$ :

$$U^{(\alpha)} = \sum_z m_L D^{(L)}. \quad (18.24)$$

(Коэффициенты  $m_L$  не следует путать с индексом состояний  $m$ .) Но это хорошо знакомая нам теоретико-групповая задача, которую можно решить различными способами. В самом деле, мы в гл. 8, § 6, п. Г, совершенно не обращаясь к группе  $U_N$ , нашли метод вычисления коэффициентов  $m_L$  при помощи группы  $\mathcal{S}_n$ . Излагаемый ниже метод основан на системе весов представления  $U^{(\alpha)}$ . Пронумеруем наши  $N$  одночастичных состояний числами  $m = l, l-1, \dots, -l$  в соответствующем порядке. Тогда оператор проекции полного углового момента  $L_z$  следующим образом выражается через введенные в § 8 диагональные операторы  $H_i$ :  $L_z = \sum_{m=-l}^l m H_m$ . Поэтому его зна-

чения  $M$  просто выражаются через веса представления:

$M = \sum_{m=-l}^l m r_m$ . Например, в восьмимерном представлении [21] группы  $U_3$  система весов (18.21) дает следующее множество значений  $M$ : 2, 1, 1, 0, -1, 0, -1, -2. Зная мультиплетную структуру представления  $\mathbf{D}^{(L)}$ , т. е. зная, что  $M = L, L-1, \dots, -L$ , мы заключаем отсюда, что в этом случае разложение (18.24) для группы  $U_3$  имеет вид  $\mathbf{U}^{[21]} = \mathbf{D}^{(2)} \oplus \mathbf{D}^{(1)}$ . Этот метод существенным образом основан на применении характеров группы  $U_N$ , которые мы подробно обсудим в § 11 (см. другой пример разложения в задаче 18.5). Более эффективный при больших числах  $l$  третий метод вычисления коэффициентов  $m_l$  объясняется в задаче 18.6.

В качестве примера такого метода классификации состояний рассмотрим простую задачу о трех  $p$ -электронах, ( $l=1$ ), которую мы обсуждали в гл. 8, § 6, п. Г. В первом столбце табл. 18.2 перечислены возможные разбиения  $\alpha$  числа  $n=3$ , а во втором столбце — сопряженные разбиения  $\tilde{\alpha}$ . Заметим, что разбиение  $\alpha=[3]$  должно быть исключено, так как соответствующее разбиение  $\tilde{\alpha}=[111]$  имеет более двух строк. Спин  $S$  вычисляется непосредственно по формуле  $S = \frac{1}{2}(\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2)$ . Угловой момент  $L$

Таблица 18.2

| Индекс $\alpha$ орбитальной симметрии и представления группы $U_3$ | Индекс $\tilde{\alpha}$ спиновой симметрии и представления группы $U_2$ | $S$                            | $L$       |
|--------------------------------------------------------------------|-------------------------------------------------------------------------|--------------------------------|-----------|
| [111]<br>[21]                                                      | [3]<br>[21]                                                             | $\frac{3}{2}$<br>$\frac{1}{2}$ | 0<br>2, 1 |

для представления  $\alpha=[21]$  был вычислен выше. Тем же способом можно показать, что одномерное представление [111] имеет единственный вес (111). Ему отвечает лишь  $M=0$ , и, следовательно,  $L=0$ .

О применении группы  $U_N$  для описания атомных мультиплетов уже говорилось ранее. Точно так же ее можно применять при изучении ядерных супермультиплетов,

введенных в гл. 12. При этом удобно воспользоваться приведенной в § 8 интерпретацией индексов ( $PP'P''$ ) представлений группы  $SU_4$ . Мы не будем на этом подробно останавливаться. Как отмечалось в гл. 12, § 1, зависимость ядерного взаимодействия от спина столь сильна, что симметрия относительно группы  $SU_4$  сильно нарушена и приближение  $jj$ -связи дает здесь лучшее первое приближение (о  $jj$ -связи в атомах упоминается в гл. 8, § 6, п. А). В этом случае каждая частица имеет определенный полный угловой момент  $j$ , который включает как спиную, так и орбитальную составляющие. Кроме того, она имеет обычный изоспин, равный  $1/2$ . Ясно, что при рассмотрении  $n$  валентных нуклонов группа  $U_{2l+1}$  заменяется группой  $U_{2j+1}$ . При ограничении с группы  $U_{2j+1}$  на группу  $\mathcal{R}_3$  получаются такие же значения углового момента  $J$ , как и при разложении (18.24). Связь между угловым моментом  $J$  и изоспином  $T$  аналогична связи между величинами  $L$  и  $S$  в случае атома. Для заданного представления  $U^{(\alpha)}$  группы  $U_{2j+1}$  составляющая волновой функции, отвечающая изоспину, должна обладать симметрией, соответствующей сопряженному разбиению  $\tilde{\alpha}$ , причем  $T = 1/2 (\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2)$ .

## А. Применение подгрупп группы $U_N$

Введение групп  $U_{2l+1}$  и  $U_{2j+1}$  в такие задачи, связанные с атомной и ядерной структурой, до некоторой степени разочаровывает, так как эти группы не несут какой-либо новой физической информации. Как мы видели, индексы представления  $\alpha$  эквивалентны значениям спина, изоспина или индексам супермультиплета системы. Но эти группы можно использовать как первый шаг для определения новой группы, которая зависит от природы взаимодействия между частицами и поэтому несет полезную физическую информацию. Рассмотрим, например, три электрона на  $f$ -оболочке ( $l=3$ ) атома. В разложении (18.24), соответствующем представлению  $\alpha = [21]$ , имеются следующие ненулевые коэффициенты  $m_L$ :  $m_1 = m_6 = m_7 = m_8 = 1$ ,  $m_2 = m_3 = m_4 = m_5 = 2$ . В отличие от случая, приведенного в табл. 18.2, здесь встречаются значения углового момента  $L$ , для которых  $m_L > 1$ , т. е. квантовых чисел  $S$ ,

$L$ ,  $M_S$  и  $M_L$  теперь не хватает для определения всех возможных состояний. Физически эта задача решается в теории возмущений методом диагонализации кулоновского взаимодействия путем прямого вычисления. При  $L=2, 3, 4$  и  $5$  получается  $2 \times 2$ -матрица. С теоретико-групповой точки зрения можно найти систему нумерации этих пар состояний, если удастся найти новую группу  $\mathcal{G}$ , которая является подгруппой группы  $U_{2l+1}$  и содержит в качестве подгруппы группу  $\mathcal{R}_3$  (см. работу [3]). Тогда ограничение с группы  $U_7$  на подгруппу  $\mathcal{R}_3$  можно провести в два этапа:  $U_7 \rightarrow \mathcal{G} \rightarrow \mathcal{R}_3$ . Таким образом, базисные векторы (волновые функции) получают также индекс представления группы  $\mathcal{G}$ . В некоторых случаях (но не обязательно во всех) вышеупомянутые пары состояний получают различные индексы и, следовательно, будут различаться своими свойствами по отношению к промежуточной группе  $\mathcal{G}$ . Введение такой группы  $\mathcal{G}$  может быть полезно по двум причинам. Во-первых, это может дать удобную, последовательную систему нумерации, включающую матрицу взаимодействия. Во-вторых, введение такой группы может быть важным с физической точки зрения в том случае, когда взаимодействие обладает приближенной инвариантностью по отношению к группе  $\mathcal{G}$ . В этом случае матрица энергии в базисе, нумеруемом неприводимыми представлениями группы  $\mathcal{G}$ , приблизительно диагонализуется, а индексы могут быть связаны с физическими состояниями.

Для нахождения промежуточной группы  $\mathcal{G}$  мы должны наложить на унитарные преобразования такие ограничения, которые не исключали бы никаких преобразований из группы  $\mathcal{R}_3$ . Для этого нужно сначала выписать перестановочные соотношения между инфинитезимальными операторами группы  $U_{2l+1}$ . Затем нужно найти замкнутое относительно коммутации подмножество инфинитезимальных операторов группы  $U_{2l+1}$ , которое содержит инфинитезимальные операторы группы  $\mathcal{R}_3$ . Это означает, что коммутатор любой пары операторов такого подмножества есть линейная комбинация операторов из подмножества. Согласно общим определениям гл. 7, § 2 и, в частности, соотношению (7.7), такое подмножество определяет группу, которая является подгруппой группы  $U_{2l+1}$  и в качестве подгруппы содержит группу  $\mathcal{R}_3$ . Сравнивая структурные



константы группы  $\mathcal{G}$ , [которые получаются таким путем, со структурными константами всех известных групп, мы можем идентифицировать группу  $\mathcal{G}$ . Таким способом можно при произвольном целом числе  $l$  выбрать в качестве группы  $\mathcal{G}$  группу  $\mathcal{R}_{2l+1}$ . В интересном с физической точки зрения случае малых чисел  $l$  других возможностей выбора очень мало. Более прямым путем группу  $\mathcal{R}_{2l+1}$  вводят, налагая на унитарное преобразование  $U$  условие инвариантности двухчастичной функции

$$\Phi = \sum_i \varphi_i(1) \varphi_i(2) \quad (18.25)$$

(см. обозначения в § 1). Тогда

$$\Phi = T(U) \Phi = \sum_{i, j, k} U_{ji} U_{ki} \varphi_j(1) \varphi_k(2),$$

т. е.

$$\sum_i U_{ji} U_{ki} = \delta_{jk}.$$

Иначе говоря,  $U_{ki} = (U^{-1})_{ik}$ . Так как матрица  $U$  унитарна, отсюда следует, что  $U$  — действительная ортогональная матрица. Из таких матриц состоит группа  $\mathcal{R}_{2l+1}$ . Покажем, что физическая группа  $\mathcal{R}_3$  содержится в этой группе  $\mathcal{R}_{2l+1}$ . Мы должны найти такой базис векторов  $\varphi_i$  для  $(2l+1)$  состояний, соответствующих угловому моменту  $l$ , чтобы функция  $\Phi$ , определенная равенством (18.25), была инвариантна относительно вращений. Очевидно, что обычный  $m$ -базис векторов  $\psi_m$  не годится. Но если мы введем новый базис

$$\begin{aligned} \varphi_m^+ &= [\psi_m + (-1)^m \psi_{-m}] / 2^{1/2}, \\ \varphi_m^- &= i [\psi_m - (-1)^m \psi_{-m}] / 2^{1/2}, \quad \varphi_0 = \psi_0, \end{aligned}$$

то получим

$$\begin{aligned} \Phi &= \sum_{m > 0} [\varphi_m^+(1) \varphi_m^+(2) + \varphi_m^-(1) \varphi_m^-(2) + \varphi_0(1) \varphi_0(2)] \psi = \\ &= \sum_{m > 0} (-1)^m [\psi_m(1) \psi_{-m}(2) + \psi_{-m}(1) \psi_m(2)] + \psi_0(1) \psi_0(2) = \\ &= \sum_m (-1)^m \psi_m(1) \psi_{-m}(2). \end{aligned} \quad (18.26)$$

В этом выражении легко узнать  $S$ -состояние ( $L=0$ ) двух частиц. (В нем выбраны обычные знаковые множители;

Таблица 18.3

| $n$ | $U_7$ | $\mathcal{R}_7$ | $\mathcal{R}_3(L)$              |
|-----|-------|-----------------|---------------------------------|
| 1   | [1]   | (100)           | 3                               |
| 2   | [2]   | (000)           | 0                               |
|     |       | (200)           | 2, 4, 6                         |
| 3   | [11]  | (110)           | 1, 3, 5                         |
|     | [21]  | (100)           | 3                               |
|     | [111] | (210)           | 1, 2, 2, 3, 4, 4, 5, 5, 6, 7, 8 |
|     |       | (111)           | 0, 2, 3, 4, 6                   |

см. приложение 4, § 2.) Следовательно, оно инвариантно относительно вращений.

Мы здесь не будем вдаваться в подробности относительно неприводимых представлений группы  $\mathcal{R}_{2l+1}$ . Отметим лишь, что представления нумеруются  $l$  целыми числами  $(r_1 r_2 \dots r_l)$ . В табл. 18.3 приведены несколько примеров разложений для случая  $l=3$ . Нетрудно видеть, что новые индексы, соответствующие группе  $\mathcal{R}_7$ , позволяют различать между собой два состояния с  $L=3$  при  $n=3$  и  $S=1/2$ , но они не позволяют сделать это для пар состояний с  $L=2, 4$  и 5.

В задаче о  $jj$ -связи, где фигурирует группа  $U_{2j+1}$ , таким же образом находится группа  $\mathcal{G}$ , которая содержит группу  $\mathcal{R}_3$  и содержится в группе  $U_{2j+1}$ . В результате приходим к так называемой «симплектической группе»  $Sp_{2j+1}$ . Можно было бы ожидать, что те же самые рассуждения, что и раньше, приведут нас к группе  $\mathcal{R}_{2j+1}$ , но это не верно. При выводе равенства (18.26) на последнем этапе предполагалось, что  $(-1)^m = (-1)^{-m}$ . Это верно лишь при целых числах  $m$  и, значит, при целых числах  $l$ . Как отмечалось ранее, группа  $Sp_{2j+1}$  определяется своими инфинитезимальными операторами. Эту группу можно задать более непосредственно, если заметить, что при  $jj$ -связи существует только одно инвариантное двухчастичное состояние, а именно состояние с  $J=0$ . Оно определяется аналогично выражению (18.26):

$$\begin{aligned}
 \Phi &= \sum_{m=-j}^j (-1)^{j-m} \psi_m(1) \psi_{-m}(2) = \\
 &= \sum_{m>0} (-1)^{j-m} [\psi_m(1) \psi_{-m}(2) - \psi_{-m}(1) \psi_m(2)]. \quad (18.27)
 \end{aligned}$$

Заметим, что это выражение для  $\Phi$  антисимметрично по отношению к перестановке частиц. Значит, ни при каком выборе базиса его нельзя представить в виде (18.25). Теперь симплектическую группу, действующую в  $(2j+1)$ -мерном пространстве, определяют как множество матриц, оставляющих это состояние  $\Phi$  инвариантным. Подобно представлениям группы  $\mathcal{R}_{2l+1}$  ее неприводимые представления нумеруются набором из  $(j+1/2)$  целых чисел. Мы опять не приводим подробности. В табл. 18.4 показано несколько примеров для случая  $j=5/2$ .

Для описания представлений групп  $\mathcal{R}_{2l+1}$  или  $Sp_{2j+1}$  иногда вводится понятие «старшинства». Состояние обладает старшинством  $v$ , если наименьшее число частиц, на

Таблица 18.4

| $n$ | $U_n$ | $Sp_n$ | $\mathcal{R}_3(J)$                        |
|-----|-------|--------|-------------------------------------------|
| 1   | [1]   | (100)  | $5/2$                                     |
| 2   | [2]   | (200)  | 1, 3, 5                                   |
|     | [11]  | (000)  | 0                                         |
|     |       | (110)  | 2, 4                                      |
| 3   | [21]  | (100)  | $5/2$                                     |
|     |       | (210)  | $1/2, 3/2, 5/2, (7/2)^2, 9/2, 11/2, 13/2$ |
|     | [111] | (100)  | $5/2$                                     |
|     |       | (111)  | $3/2, 9/2$                                |

которых реализуется представление, равно  $n=v$ . Так, например, показанные в табл. 18.3 два состояния трех частиц с  $L=3$  и  $S=1/2$  (т. е. состояния из представления [21]) будут иметь старшинство  $v=1$  для представлений (100) и  $v=3$  для представлений (210) группы  $\mathcal{R}_7$ . Из табл. 18.4 видно также, что при нечетных  $n$  и при любом типе симметрии  $U_n$  существует состояние с  $v=1$ , которое обязательно имеет тот же угловой момент  $J=5/2$ , что и одна частица. При четных  $n$  всегда существует состояние со старшинством  $v=0$  и, значит, с  $J=0$ .

С физической точки зрения группа  $\mathcal{R}_{2l+1}$  важна для описания уровней конфигурации  $l^n$  при условии, что возмущение взаимодействия между парами валентных электронов имеет соответствующее группе вырождение. Иначе говоря, в случае  $l=3$ , приведенном в табл. 18.3, энергия

состояний с  $L=2, 4$  и  $6$  при  $n=2$  должна быть одинаковой, а состояния с  $L=1, 3$  и  $5$  должны группироваться вместе на каком-то другом энергетическом уровне. В действительности с кулоновскими силами этого не происходит, так как состояния с большими угловыми моментами  $L$  подавлены (гл. 8, § 6, п. Д). Поэтому для атомов группа  $\mathcal{R}_{2l+1}$  используется лишь как способ систематического описания диагонализации возмущения.

В ядрах сильное спин-орбитальное взаимодействие приводит к  $jj$ -связи и к силам притяжения между валентными нуклонами. Теперь подавляются состояния с низкими значениями углового момента  $J$ . Эта ситуация обратна ситуации в атоме, где между электронами действуют силы отталкивания. Короткодействующие ядерные силы притяжения не только подавляют состояние с  $J=0$ , но и оставляют на близких энергетических уровнях состояния с  $J=2$  и  $4$ , которые в табл. 18.4 имеют индексы  $[11](10)$ . Поэтому в случае ядер группа  $Sp_{2j+1}$  имеет реальный физический смысл. Таким образом, низшие состояния ядер должны описываться неприводимыми представлениями группы  $Sp_{2j+1}$ . Так как для двухчастичной системы инвариантное состояние  $(000)$  лежит на низшем энергетическом уровне, низшее состояние общей  $n$ -частичной системы должно содержать максимально допустимое принципом Паули число пар. Это можно проверить на более сложной модели, где при нечетном  $n$  низшее состояние имеет старшинство  $v=1$  и отвечает представлению  $(100)$ , а при четном числе нейтронов и четном числе протонов низшее состояние имеет старшинство  $v=0$  и отвечает представлению  $(000)$ . Эти выводы согласуются с простой одночастичной оболочечной моделью ядра, где все пары нейтронов и протонов считаются связанными при  $J=0$ , причем спин ядра равен спину последнего нечетного нуклона (см. также гл. 19, § 2).

Группы  $U_{2l+1}$  и  $U_{2j+1}$  не являются группами симметрии гамильтониана, какой была группа  $\mathcal{R}_3$  в гл. 7. Преобразования из группы  $U_{2l+1}$  определены лишь на пространстве конфигураций  $l^n$ . Даже в этом пространстве преобразования из группы  $U_{2l+1}$  не коммутируют с точным взаимодействием между электронами. Правда, в очень грубом приближении можно считать, что они коммутируют. Если принять это, то в случае состояний

двухчастичной конфигурации  $l^2$  все симметричные состояния (т. е. состояния с четным угловым моментом  $L$  и с  $S=0$ ) обладают одинаковой энергией, а все антисимметричные состояния (т. е. состояния с нечетным угловым моментом  $L$  и с  $S=1$ ) имеют одно и то же, но не совпадающее с предыдущим значение энергии. Отсюда следует, что гамильтониан должен быть инвариантным относительно группы  $U_{2l+1}$ . С физической точки зрения этим оправдывается применение группы, хотя на практике энергетическое расстояние между уровнями, соответствующими разным угловым моментам  $L$ , довольно велико. То же самое относится и к упомянутым выше (см. также гл. 12, § 1) задачам о ядерной структуре.

## § 11. ХАРАКТЕРЫ

В двух следующих параграфах данной главы мы опять рассмотрим математические свойства группы  $U_N$ . Мы вычислим характеры неприводимых представлений и изложим процедуру интегрирования по объему группы. Нам эти результаты практически не нужны, но они существенны в некоторых доказательствах, которые мы опустили, и, кроме того, они дают еще одну связь со сказанным о группе  $\mathcal{R}_3$  в гл. 7.

Для отыскания характеров определим сначала классы сопряженных элементов группы  $U_N$ , так как характер неприводимого представления связан с классами сопряженных элементов (гл. 4, § 9). Любую заданную унитарную матрицу  $U$  можно привести к диагональной форме  $W$  путем унитарного преобразования  $V$ :  $VUV^{-1} = W$ . Значит, матрица  $U$  лежит в том же классе сопряженных элементов, что и диагональная матрица  $W$ , и требуется лишь рассмотреть характеры диагональных матриц. Поскольку матрица  $U$  унитарна, диагональные матричные элементы имеют вид  $\exp(-i\theta)$ , т. е. для определения диагональной унитарной матрицы требуется лишь  $N$  действительных параметров  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N$ , которые меняются в интервале от 0 до  $2\pi$ . (В случае  $SU_N$  есть дополнительное условие  $\theta_1 + \theta_2 + \dots + \theta_N = 0$ .) Следовательно, хотя группа  $U_N$  имеет  $N^2$  параметров, ее характер зависит лишь от  $N$  параметров. Этим свойством обладает и рассмотренная в гл. 7 группа  $\mathcal{R}_3$ , характер которой является функцией

лишь угла поворота и не зависит от двух других параметров, определяющих ось вращения.

Рассмотрим теперь представление  $\mathbf{U}^{(\alpha)}$ . В базисе, указанном в § 4, матрица диагонального элемента группы  $U_N$  в представлении  $\mathbf{U}^{(\alpha)}$  будет также диагональна, а матричный элемент, соответствующий базисному вектору с весом  $(r_1 r_2 \dots r_N)$ , будет равен

$$\exp\left(-i \sum_{j=1}^N r_j \theta_j\right).$$

Поэтому характер  $\chi^{(\alpha)}$  представления  $\mathbf{U}^{(\alpha)}$  имеет вид

$$\chi^{(\alpha)} = \sum_{r_1 r_2 \dots r_N} \exp\left(-i \sum_{j=1}^N r_j \theta_j\right), \quad (18.28)$$

где суммирование проводится по всем весам представления  $\alpha$ , о которых говорилось в § 4. Путем алгебраических преобразований эту сумму можно представить в виде отношения двух определителей

$$\chi^{(\alpha)} = \frac{\begin{vmatrix} \varepsilon_1^{n_1+N-1} & \varepsilon_1^{n_2+N-2} & \dots & \varepsilon_1^{n_N} \\ \varepsilon_2^{n_1+N-1} & \varepsilon_2^{n_2+N-2} & \dots & \varepsilon_2^{n_N} \\ \vdots & & & \vdots \\ \varepsilon_N^{n_1+N-1} & & & \varepsilon_N^{n_N} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \varepsilon_1^{N-1} & \varepsilon_1^{N-2} & \dots & 1 \\ \varepsilon_2^{N-1} & \varepsilon_2^{N-2} & \dots & 1 \\ \vdots & & & \vdots \\ \varepsilon_N^{N-1} & & & 1 \end{vmatrix}}, \quad (18.29)$$

где  $\varepsilon_j = \exp(-i\theta_j)$ .

В качестве простой иллюстрации этого общего результата возьмем  $N=2$  и разбиение  $\alpha=[n]$  с одной лишь строкой. Все возможные веса имеют вид  $(n0)$ ,  $(n-1, 1)$ , ...

...,  $(0, n)$ . Тогда из выражения (18.28) получаем

$$\chi^{(n)} = \exp(-in\theta_1) + \exp[-i(n-1)\theta_1 - i\theta_2] + \dots$$

$$\dots + \exp(-in\theta_2) = \exp\left[-\frac{1}{2}in(\theta_1 + \theta_2)\right] \times$$

$$\times \sin\left\{\frac{1}{2}(n+1)(\theta_1 - \theta_2)\right\} / \sin\frac{1}{2}(\theta_1 - \theta_2).$$

Этот результат следует также из формулы (18.29). При ограничении на группу  $SU_2$  полагаем  $\theta_1 + \theta_2 = 0$ . Тогда это выражение сводится к знакомому выражению (7.42) с  $n = 2j$ .

## § 12. ИНТЕГРИРОВАНИЕ ПО ГРУППЕ И ОРТОГОНАЛЬНОСТЬ

Согласно общей теории, изложенной в гл. 4, при интегрировании по групповым параметрам для характеров неприводимых представлений группы  $U_N$  должны получаться соотношения ортогональности. Поскольку характер — это функция на классах сопряженных элементов, необходимо интегрировать лишь по параметрам  $\theta_i$ , которыми различаются классы сопряженных элементов. Тогда в силу формулы (4.25) и сказанного в гл. 7, § 1 должно получиться соотношение типа

$$\int \chi^{(\alpha)*}(\theta) \chi^{(\beta)}(\theta) \rho(\theta) d\theta = \delta_{\alpha\beta} V, \quad (18.30)$$

где  $\theta$  — множество параметров  $\theta_1, \theta_2, \dots, \theta_N$ , а  $d\theta \equiv \equiv d\theta_1 d\theta_2 \dots d\theta_N$ . Областью интегрирования для каждого угла  $\theta_i$  будет интервал от 0 до  $2\pi$ . Объем  $V$  определяется как  $V = \int \rho(\theta) d\theta$ . Осталось, пользуясь результатами приложения 4, § 3, определить подходящий весовой множитель  $\rho(\theta)$ . Прежде чем проводить вычисления, мы приведем результат:  $\rho(\theta) = |\Delta|^2$ , где  $\Delta$  — знаменатель в выражении (18.29).

Доказательство этого результата мы начнем с равенства (П4.15). Нужно вычислить якобиан  $(\partial c / \partial a)_{a=0}$ , где через  $a$  и  $c$  обозначены  $N^2$  параметров унитарных преобразований, и  $U(c) = U(a)U(b)$ . Для произвольной унитарной матрицы  $U$  в качестве  $N$  параметров мы возьмем углы  $\theta_i$ , которые получались в § 11 при диагонализации матрицы  $U$ . Оставшимися  $N^2 - N$  параметрами определяется матрица, которая приводит матрицу  $U$  к диаго-

нальному виду. Без потери общности мы можем считать матрицу  $U(\mathbf{b})$  диагональной (этим определяется базис векторов) с матричными элементами  $U_{ii}(\mathbf{b}) = \varepsilon_i$  (в обозначениях предыдущего параграфа). Поскольку нас интересует лишь предел при  $\mathbf{a} \rightarrow 0$ , достаточно рассмотреть только малые параметры  $\mathbf{a}$ , при которых произвольная матрица  $U$  отличается от единичной матрицы на антиэрмитову матрицу

$$U(\mathbf{a}) = \begin{pmatrix} 1 & -ia_{11} & a_{12} - ia_{21} & \dots \\ -a_{12} + ia_{21} & 1 & -ia_{22} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Здесь  $N^2$  параметров  $a_{ij}$  действительны и независимы. По правилу обычного матричного умножения получаем матрицу  $U(\mathbf{c})$ :

$$U(\mathbf{c}) = \begin{pmatrix} (1 - ia_{11}) \varepsilon_1 & (a_{12} - ia_{21}) \varepsilon_2 & \dots \\ (-a_{12} + ia_{21}) \varepsilon_1 & (1 - ia_{22}) \varepsilon_2 & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Так как матрица  $U(\mathbf{c})$  почти диагональна, ее легко представить в виде  $U = V^{-1} W V$ , где  $W$  — диагональная матрица. Пренебрегая членами второго порядка по параметрам  $a_{ij}$ , получаем

$$V(\mathbf{c}) = \begin{pmatrix} 1 & \frac{a_{12} + ia_{21}}{\varepsilon_1 \varepsilon_2 - 1} & \dots \\ \frac{-a_{12} + ia_{21}}{\varepsilon_2 \varepsilon_1 - 1} & 1 & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$W(\mathbf{c}) = \begin{pmatrix} (1 - ia_{11}) \varepsilon_1 & 0 & \dots \\ 0 & (1 - ia_{22}) \varepsilon_2 & \\ \vdots & & \ddots \end{pmatrix}.$$



Равенством  $U = V^{-1} W V$  матрица  $V$  не определяется однозначно, так как ее можно умножить слева на любую диагональную матрицу. Воспользуемся таким произволом и положим диагональные матричные элементы равными  $+1$ . Возьмем теперь в качестве  $N^2$  параметров матрицы  $U(c)$   $N$  углов  $\theta'_i$ , задаваемых матрицей  $W(c)$ , т. е.  $\theta'_i = \theta_i + a_{ii}$ , а также действительные и мнимые части недиагональных матричных элементов матрицы  $V(c)$ , а именно:

$$\begin{aligned} c_{12} &= a_{12} \operatorname{Re} \{(\varepsilon_1/\varepsilon_2 - 1)^{-1}\} - a_{21} \operatorname{Im} \{(\varepsilon_1/\varepsilon_2 - 1)^{-1}\}, \\ c_{21} &= a_{12} \operatorname{Im} \{(\varepsilon_1/\varepsilon_2 - 1)^{-1}\} + a_{21} \operatorname{Re} \{(\varepsilon_1/\varepsilon_2 - 1)^{-1}\}. \end{aligned}$$

Тогда якобиан  $(\partial c/\partial a)$  легко вычисляется. Поскольку  $\partial \theta'_i/\partial a_{jk} = \delta_{ij} \delta_{jk}$ , первые  $N$  строк и столбцов определителя  $(\partial c/\partial a)$ , соответствующих параметрам  $\theta'_i$  и  $a_{ii}$ , образуют единичную матрицу. Оставшаяся часть определителя равна произведению  $1/2 N(N-1)$  множителей типа

$$\begin{vmatrix} \partial c_{12}/\partial a_{12} & \partial c_{12}/\partial a_{21} \\ \partial c_{21}/\partial a_{12} & \partial c_{21}/\partial a_{21} \end{vmatrix} = |\varepsilon_1 - \varepsilon_2|^{-2}.$$

Поэтому весовой множитель имеет вид

$$\rho(\theta) = \left( \frac{\partial c}{\partial a} \right)_{a=0}^{-1} = \left| \prod_{i < j}^N (\varepsilon_i - \varepsilon_j) \right|^2 = |\Delta|^2,$$

так как произведение совпадает с определителем в знаменателе дроби (18.29).

Соотношение ортогональности (18.30) можно проверить на примере характеров  $\chi^{(\alpha)}$ , определяемых соотношением (18.29). Таким же методом, как и в гл. 4, § 12, при этом можно доказать неприводимость и полноту представлений. Заметим, что весовой множитель  $\rho(\theta)$  сокращается со знаменателями характеров  $\chi^*$  и  $\chi$  в подынтегральном выражении в формуле (18.30).

### § 13. ГРУППЫ $SU_2$ И $\mathcal{R}_3$

Рассмотрим более подробно частный случай, а именно группу  $SU_2$ . Первоначально она была введена в гл. 10, § 1 для описания изоспина. В данном параграфе мы покажем, что группа  $SU_2$  имеет три инфинитезимальных оператора, перестановочные соотношения для которых совпа-

дают с перестановочными соотношениями для группы  $\mathcal{R}_3$ . Следовательно, всю теорию представлений, изложенную в гл. 7 для группы  $\mathcal{R}_3$ , можно перенести на этот случай. Здесь мы подробнее остановимся на связи между параметрами матриц из группы  $SU_2$  и параметрами преобразований вращения. На самом деле эта связь не взаимно однозначна, т. е. можно говорить о гомоморфизме групп, а не изоморфизме, что делает понятной двусмысленность представлений группы  $\mathcal{R}_3$ . Использование группы  $SU_2$  дает также новое множество параметров для описания вращений. Они называются параметрами Кэли—Клейна и очень удобны при вычислении параметров произведения двух вращений.

## А. Параметры группы $SU_2$

Обозначим через  $\mathbf{e}_1$  и  $\mathbf{e}_2$  пару ортонормальных базисных векторов в двумерном пространстве. Они не имеют отношения к осям  $x$  и  $y$  в физическом пространстве. Произвольный элемент группы  $U_2$  задается теперь унитарной  $2 \times 2$ -матрицей. Как нетрудно убедиться, все аксиомы группы выполнены. Например, произведение двух унитарных матриц—также унитарная матрица. Произвольная комплексная  $2 \times 2$ -матрица содержит 8 действительных параметров, но условие унитарности налагает на них четыре соотношения. Для описания общего элемента группы  $U_2$  остается 4 параметра. Общий элемент удобно записать в виде

$$U = \exp(i\psi) \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}, \quad (18.31)$$

где параметры удовлетворяют соотношению  $\alpha\delta - \beta\gamma = 1$ . Из условия унитарности  $UU^\dagger = 1$  следует, что  $|\det U| = 1$ . В формуле (18.31) матрица  $U$  представлена в виде произведения фазового множителя на матрицу с определителем  $+1$ . Из условия унитарности мы получаем соотношения  $\alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$ ,  $\gamma\gamma^* + \delta\delta^* = 1$ ,  $\alpha\gamma^* + \beta\delta^* = 0$ ,  $\gamma\alpha^* + \delta\beta^* = 0$ . Последние два из них можно рассматривать как два действительных уравнения или одно комплексное. Сопоставляя эти уравнения с условием  $\alpha\delta - \beta\gamma = 1$ , находим,

что  $\delta = \alpha^*$ ,  $\gamma = -\beta^*$ , т. е.

$$U = \exp(i\varphi) \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix},$$

где осталось одно условие  $\alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$ .

Множество матриц  $U$  с  $\varphi = 0$  и, значит, с определителем  $+1$  образует подгруппу группы  $U_2$ , которая называется «унимодулярной» или «специальной унитарной» группой и обозначается символом  $SU_2$ . В самом деле, мы можем представить группу  $U_2 = U_1 \times SU_2$  в виде произведения группы  $SU_2$  на абелеву однопараметрическую группу  $U_1$ , преобразования которой состоят в добавлении фазового множителя  $\exp(i\varphi)$ . Очевидно, что она изоморфна группе  $\mathcal{R}_2$ . Поэтому достаточно исследовать лишь группу  $SU_2$ , которая имеет только три параметра. Впредь мы будем рассматривать лишь группу  $SU_2$  с элементами

$$U = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \quad (18.32)$$

при  $\alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$ . Вместо двух комплексных чисел  $\alpha, \beta$ , удовлетворяющих одному действительному условию, мы введем три удобных действительных параметра. Используемые нами обозначения могут показаться довольно странными, но они выбраны так для того, чтобы упростить связь между группами  $SU_2$  и  $\mathcal{R}_3$ , о которой говорится в п. В. Без потери общности мы можем записать параметры в виде

$$\alpha = \cos \frac{1}{2}a - ik_z \sin \frac{1}{2}a, \quad \beta = -(k_y + ik_x) \sin \frac{1}{2}a, \quad (18.33)$$

где  $\mathbf{k} = (k_x, k_y, k_z)$  — некоторый единичный вектор и  $0 \leq a \leq 2\pi$  (задача 18.8). Три действительных параметра — это параметр  $a$  и два угла, необходимые для фиксации единичного вектора  $\mathbf{k}$ . Для дальнейшего упрощения мы введем параметры  $a_x = ak_x$ ,  $a_y = ak_y$  и  $a_z = ak_z$ . Тогда матрица  $U$  будет определяться тремя действительными параметрами  $a_q$ , которые изменяются в области  $\sum_q a_q^2 \leq 4\pi^2$ , т. е. вектор  $\mathbf{a} = (a_x, a_y, a_z)$  лежит внутри шара радиусом  $2\pi$ .

## Б. Инфинитезимальные операторы и неприводимые представления группы $SU_2$

Для нахождения инфинитезимальных операторов, соответствующих трем параметрам  $a_q$ , мы должны рассмотреть матрицы  $U$ , близкие к единичной, т. е. матрицы, отвечающие малым параметрам  $a$ . Тогда  $\alpha = 1 - \frac{1}{2} iak_z = = 1 - \frac{1}{2} ia_z$  и  $\beta = -\frac{1}{2} a_y - \frac{1}{2} ia_x$  и мы получаем

$$U = 1 - \frac{1}{2} a_x \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} a_y \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} a_z \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix},$$

т. е. три инфинитезимальных оператора просто совпадают с матрицами  $-is_q$  [в обозначениях формулы (8.15)], где  $s_q$  — знакомые нам спинорные матрицы при  $s = \frac{1}{2}$ .

Отсюда мы заключаем, что перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов группы  $SU_2$  совпадают с перестановочными соотношениями для инфинитезимальных операторов группы  $\mathcal{R}_3$ , так как спинорные матрицы — это инфинитезимальные операторы группы  $\mathcal{R}_3$  в представлении  $D^{(1/2)}$ . В гл. 7, § 4 мы на основании этих перестановочных соотношений получили неприводимые представления группы  $\mathcal{R}_3$ . Следовательно, неприводимые представления группы  $SU_2$  будут совпадать с неприводимыми представлениями группы  $\mathcal{R}_3$ . Но в п. В мы увидим, что полужелые представления, которые были двузначными представлениями группы  $\mathcal{R}_3$ , будут однозначными представлениями группы  $SU_2$ . В самом деле, представление  $D^{(1/2)}$  — это тождественное представление с помощью самих элементов группы, т. е.  $2 \times 2$ -матриц (18.32).

## В. Связь между группами $\mathcal{R}_3$ и $SU_2$

Тот факт, что инфинитезимальные операторы двух групп, таких, как группы  $\mathcal{R}_3$  и  $SU_2$ , имеют одинаковые перестановочные соотношения, т. е. что две группы имеют одинаковые структурные константы (гл. 7, § 2), еще не означает, что эти группы обязательно изоморфны (т. е. что между элементами групп существует взаимно-однозначное соответствие). Чтобы выяснить этот вопрос, нужно помимо инфинитезимальных операторов рассмотреть сами элементы группы, отвечающие конечным значениям параметров.

Рассмотрим сначала группу  $\mathcal{R}_3$ . Согласно сказанному в гл. 7, § 3 и равенству (7.6), конечное преобразование поворота вокруг оси  $z$  связано с инфинитезимальным оператором экспоненциальным отображением  $R_z(a) = \exp(aX_z)$ . Форма этого соотношения не зависит от оси  $z$ . Поэтому вращение  $R_k(a)$  вокруг произвольной оси  $k$  можно также записать в виде

$$R_k(a) = \exp\left(\sum_q a_q X_q\right) = \exp(ak \cdot X), \quad (18.34)$$

где мы ввели вектор-оператор  $X = (X_x, X_y, X_z)$  и в обозначениях формулы (7.22) параметры  $a_q = ak_q$ , а  $k_q$  — это компоненты вектора  $k$ . Перескакивая здесь от группы  $\mathcal{R}_2$  к группе  $\mathcal{R}_3$ , мы говорим лишь, что произвольное вращение является элементом однопараметрической подгруппы  $\mathcal{R}_2$  вращений вокруг оси  $k$ . Следовательно, оно порождается соответствующим оператором  $\sum_q a_q X_q$  точно так же, как вращение вокруг оси  $z$  порождалось оператором  $aX_z$  в гл. 7, § 2.

Операторное выражение (18.34) справедливо в любом представлении. В двумерном представлении  $D^{(1/2)}$  оно дает очень простой способ точного вычисления матриц конечных поворотов  $D^{(1/2)}(a_x, a_y, a_z)$  на основании уже вычисленных матриц (8.15) для инфинитезимальных операторов. Вспоминая соотношение  $X_q = -iJ_q$  между инфинитезимальными операторами  $X_q$  и операторами углового момента  $J_q$ , мы из формул (8.15) имеем

$$X_x = -\frac{1}{2}i \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad X_z = -\frac{1}{2}i \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (18.35)$$

Отсюда видно, что  $X_q^2 = -1/4$  и  $X_p X_q + X_q X_p = 0$  при  $p \neq q$ . Значит, скалярное произведение в экспоненте выражения (18.34) обладает свойством

$$(k \cdot X)^2 = \sum_{q, p} k_q X_q k_p X_p = -\frac{1}{4} \sum_q k_q^2 = -\frac{1}{4}$$

с учетом нормировки вектора  $k$ . Поэтому матрица вра-

щения в представлении с  $j = 1/2$  такова:

$$\begin{aligned} D^{(1/2)}(\mathbf{k}, a) &= \exp(a\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}) = \\ &= 1 + a(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}) + \frac{1}{2} a^2 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{X})^2 + \frac{1}{6} a^3 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{X})^3 + \frac{1}{24} a^4 (\mathbf{k} \cdot \mathbf{X})^4 + \dots = \\ &= \left\{ 1 - \frac{1}{2} (a^2/4) + \frac{1}{24} (a^4/16) + \dots \right\} + (\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}) \left\{ a - \frac{1}{6} (a^3/4) + \dots \right\} = \\ &= \cos \frac{1}{2} a + 2(\mathbf{k} \cdot \mathbf{X}) \sin \frac{1}{2} a. \end{aligned} \quad (18.36)$$

Подставляя матрицы (18.35) для операторов  $X_q$ , это выражение преобразуем к виду

$$D^{(1/2)}(\mathbf{k}, a) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2} a - ik_z \sin \frac{1}{2} a & (-k_y - ik_x) \sin \frac{1}{2} a \\ (k_y - ik_x) \sin \frac{1}{2} a & \cos \frac{1}{2} a + ik_z \sin \frac{1}{2} a \end{pmatrix}. \quad (18.37)$$

Если мы отождествим параметры вращения  $\mathbf{k}$  и  $a$  с параметрами  $\mathbf{k}$  и  $a$ , введенными для группы  $SU_2$  формулами (18.33), то эта  $2 \times 2$ -матрица совпадает с матрицей (18.32). Однако соответствие не является взаимно-однозначным. Все унитарные матрицы получаются лишь в том случае, когда направление единичного вектора  $\mathbf{k}$  может быть произвольно. Тогда угол  $1/2 a$  должен изменяться в интервале  $0 \leq 1/2 a \leq \pi$ . (Заметим, что не требуется, чтобы угол  $1/2 a$  лежал в интервале между  $\pi$  и  $2\pi$ , т. е. чтобы угол  $a$  лежал в интервале между  $2\pi$  и  $4\pi$ , так как это означает лишь изменение знака у  $\sin 1/2 a$ , что совпадает с изменением знака у вектора  $\mathbf{k}$ .) Но для получения всех вращений достаточно, чтобы угол  $a$  изменялся лишь в интервале  $0 \leq a \leq \pi$ , так как  $R_{\mathbf{k}}(\pi + a) = R_{-\mathbf{k}}(\pi - a)$ . Поэтому два унитарных преобразования, углы  $a$  которых различаются на  $\pi$ , соответствуют одному и тому же повороту. Можно говорить лишь о гомоморфизме группы  $SU_2$  на группу  $\mathcal{R}_3$ . Это соответствие можно сделать взаимно-однозначным, если группу  $\mathcal{R}_3$  расширить и формально включить в нее все повороты на углы от 0 до  $4\pi$ . Такое расширение называют «универсальной накрывающей группой».

Заметим, что удвоенная группа, которую мы ввели в гл. 7, § 6 (ее элементами были вращения  $R_{\mathbf{k}}(a)$  и  $\bar{E}R_{\mathbf{k}}(a)$ ,

где  $0 \leq a \leq \pi$ ), изоморфна группе  $SU_2$ . Соответствие устанавливается следующим образом:  $R_k(a) \leftrightarrow D^{(1/2)}(k, a)$ ,  $\bar{E}R_{-k}(a) \leftrightarrow D^{(1/2)}(k, 2\pi - a)$ .

На примере матрицы (18.37) видно, что полуцелые представления не являются непрерывными представлениями группы  $\mathcal{R}_3$ . При повороте на угол  $a = 2\pi$  физическая система возвращается в исходное положение, а матрица (18.37) умножается на  $-1$ . В случае накрывающей группы, когда угол  $a$  увеличивается до  $4\pi$ , матрица (18.37) возвращается к своей исходной величине и непрерывность восстанавливается. Значит, полуцелые представления непрерывны как представления группы  $SU_2$ .

### Г. Формула для параметров произведения вращений

$$\begin{aligned} \cos \frac{1}{2}c &= \cos \frac{1}{2}a \cos \frac{1}{2}b - k \cdot l \sin \frac{1}{2}a \sin \frac{1}{2}b, \\ \left(\sin \frac{1}{2}c\right) m &= \left(\sin \frac{1}{2}a \cos \frac{1}{2}b\right) k + \left(\sin \frac{1}{2}b \cos \frac{1}{2}a\right) l + \\ &\quad + \left(\sin \frac{1}{2}a \sin \frac{1}{2}b\right) k \times l. \end{aligned} \quad (18.38)$$

Четыре действительных числа  $\cos \frac{1}{2}a$ ,  $k_x \sin \frac{1}{2}a$ ,  $k_y \sin \frac{1}{2}a$  и  $k_z \sin \frac{1}{2}a$  иногда называют параметрами Кэли—Клейна для вращения  $R_k(a)$ . Формулы (18.38) для группы  $\mathcal{R}_3$  соответствуют соотношению  $c = a + b$  для произведения вращений из группы  $\mathcal{R}_2$ .

Для вычисления угла поворота и направления оси вращения, соответствующего произведению двух вращений, можно воспользоваться выражением (18.36). Предположим, что  $R_m(c) = R_k(a) R_l(b)$ . Тогда из формулы (18.36) имеем

$$\begin{aligned} D^{1/2}(m, c) &= \left(\cos \frac{1}{2}a + 2k \cdot X \sin \frac{1}{2}a\right) \times \\ &\quad \times \left(\cos \frac{1}{2}b + 2l \cdot X \sin \frac{1}{2}b\right) = \\ &= \left(\cos \frac{1}{2}a \cos \frac{1}{2}b - k \cdot l \sin \frac{1}{2}a \sin \frac{1}{2}b\right) + \\ &\quad + 2 \left\{ \left(\sin \frac{1}{2}a \cos \frac{1}{2}b\right) k + \left(\sin \frac{1}{2}b \cos \frac{1}{2}a\right) l + \right. \\ &\quad \left. + \left(\sin \frac{1}{2}a \sin \frac{1}{2}b\right) k \times l \right\} \cdot X \end{aligned}$$

Приравнивая это выражение выражению  $(\cos^{1/2}c + 2m \cdot X \sin^{1/2}c)$ , мы из двух уравнений находим угол  $c$  и ось  $m$ .

### Д. Примеры базисных векторов для представлений группы $SU_2$

Введем для произвольного вектора  $e$  в двумерном пространстве, где действует группа  $SU_2$ , координаты  $\xi, \eta$ . Тогда в силу формулы (3.38) преобразование функций определяется равенством  $T(U)\psi(\xi, \eta) = \psi(\bar{\xi}, \bar{\eta})$ , причем, учитывая выражения (3.39) и (18.32), имеем

$$\begin{aligned}\bar{\xi} &= \alpha^* \xi - \beta \eta, \\ \bar{\eta} &= \beta^* \xi + \alpha \eta.\end{aligned}\tag{18.39}$$

Посмотрим, как преобразуются следующие  $2j + 1$  функций:

$$\xi^{2j}, \xi^{2j-1}\eta, \xi^{2j-2}\eta^2, \dots, \xi\eta^{2j-1}, \eta^{2j}.\tag{18.40}$$

Поскольку преобразование (18.39) линейно, это множество функций образует инвариантное пространство и, следовательно,  $(2j + 1)$ -мерное представление группы  $SU_2$ . В случае унитарного преобразования, соответствующего повороту на угол  $a$  вокруг оси  $z$ , параметры  $\alpha$  и  $\beta$  имеют вид  $\alpha = \exp(-^{1/2}ia)$  и  $\beta = 0$ . В этом случае преобразование (18.39) очень простое, а характер представления, задаваемого множеством функций (18.40), имеет вид  $(\alpha^*)^{2j} + (\alpha^*)^{2j-1}\alpha + \dots + \alpha^{2j} = \exp(iaj) + \exp[ia(j-1)] + \dots + \exp(-iaj)$ . Сравнивая с соответствующим выражением (7.42), видим, что наш характер совпадает с характером неприводимого представления  $D^{(j)}$  группы  $\mathcal{R}_3$ . Таким образом, мы приходим к выводу, что множество функций (18.40) образует базис представления  $D^{(j)}$  группы  $SU_2$ . В частности, три функции  $\xi^2, \xi\eta$  и  $\eta^2$  образуют базис векторного представления  $D^{(1)}$ .

### ЛИТЕРАТУРА <sup>1)</sup>

Подробности относительно группы  $U_N$  можно найти в книге Бернера (см. литературу к гл. 4) или в книге Литлвуда (литература к гл. 17, [4]), а также в книге:

<sup>1)</sup> Литература, помеченная звездочкой, добавлена при переводе. — Прим. ред.



1\*. Желобенко Д. П. Компактные группы Ли и их представления. — М.: Наука, 1970.

Более подробное обсуждение приложений к спектроскопии томных структур, которые рассматривались в § 10, можно найти в работе Джадда (литература к гл. 8, [3]). Обзор по приложениям к исследованию ядерной структуры дан в работе:

2. Hecht K. T., Symmetry in Nuclei: Annual reviews of nuclear science, Annual Reviews Inc., Palo Alto, California, 1973.

Значительно более ранние исследования по применению унитарных групп и их подгрупп к спектроскопии были проведены Рака. Одно из них изложено в его работе:

3. Racah G., *Ergebn. exakt. Naturw.*, **37**, 28 (1965).

## ЗАДАЧИ

- 18.1. Постройте произведение функций, принадлежащих представлениям  $[3]$ ,  $[21]$  и  $[111]$  группы  $U_3$ , так, как предлагается в § 2, пример 4.
- 18.2. Методом, изложенным в § 4, установите нумерацию базисных векторов следующих представлений: а)  $[3]$  группы  $U_3$ ; б)  $[21]$  группы  $U_4$ .
- 18.3. Разложите прямое произведение  $[31] \otimes [2]$  представлений группы  $U_3$ . Покажите, как упрощается этот результат, если вместо группы  $U_3$  использовать: а) группу  $SU_3$  [введите обозначение  $(\lambda, \mu)$ ]; б) группу  $SU_2$ .
- 18.4. Вычислите веса базисных векторов для представления из части «а» задачи 2. Покажите, что в этом случае разложение (18.24) имеет вид  $U^{[3]} = D^{(3)} \oplus D^{(1)}$ .
- 18.5. Найдите значения углового момента  $L$  для полностью антисимметричных состояний двух и трех  $d$ -частиц. (Существует лишь одно антисимметричное состояние при каждой комбинации разных значений  $m$  проекций угловых моментов частиц. Найдите число независимых состояний при каждом значении  $M = \sum m$  и вычислите возможные значения углового момента  $L$ .)
- 18.6. Разложите произведение  $[1] \otimes [1]$ ,  $[1] \otimes [11]$  и  $[1] \otimes [2]$  представлений группы  $U_5$ . Затем, зная разложение произведения представлений (7.44) для группы  $\mathcal{R}_3$  и зная ответы предыдущей задачи, вычислите путем вычитания угловой момент  $L$  для представлений  $[2]$ ,  $[3]$  и  $[21]$  двух и трех  $d$ -частиц.
- 18.7. Следуя методам задач 5 и 6, перечислите возможные комбинации значений величин  $J$  и  $T$  для трех нуклонов, находящихся на оболочке с  $j = 5/2$ .
- 18.8. Покажите, что существует взаимно-однозначное соответствие между параметрами  $\mathbf{k}$ ,  $a$  из соотношений (18.33), причем  $0 < a < 2\pi$ , а  $\mathbf{k}$  — единичный вектор, и двумя комплексными параметрами  $\alpha$ ,  $\beta$ , удовлетворяющими условию  $\alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$ .

## ПОТЕНЦИАЛ ГАРМОНИЧЕСКОГО ОСЦИЛЛЯТОРА И КУЛОНОВСКИЙ ПОТЕНЦИАЛ — ДВА ПРИМЕРА «СЛУЧАЙНОГО» ВЫРОЖДЕНИЯ

При анализе роли симметрии в квантовой механике центральное место занимало вырождение энергетических спектров как следствие наличия группы симметрии у гамильтониана, описывающего исследуемую систему. Но, как говорилось в гл. 5, § 3, полностью объяснить вырождение можно лишь на основе полной группы симметрии системы. Всегда может оказаться, что вырождение возникло случайно или привнесено искусственно. Например, изменяя какой-либо числовой параметр гамильтониана, можно добиться, чтобы два уровня энергии слились в один. Такое вырождение обычно называют случайным. Если же «случайное» вырождение проявляется систематически, т. е. затрагивает не один, а много уровней, то, как правило, это указывает на то, что вырождение не случайное, но обусловлено не известным нам преобразованием, относительно которого инвариантна система. Эта новая симметрия расширяет ранее известную группу симметрии системы. В такой ситуации термином «случайное» вырождение, строго говоря, не следовало бы пользоваться. В данной главе мы рассмотрим два примера [1] такого «случайного» вырождения, которое в свете сказанного не случайно, а обязано своим происхождением наличию более широкой, чем кажется на первый взгляд, группы симметрии системы. Оба примера относятся к движению одной частицы в сферически-симметричном потенциале, а потому должно быть обычное  $(2l+1)$ -кратное вырождение, обусловленное сферической симметрией системы (гл. 7, § 5; гл. 8, § 1). В случае потенциалов  $V(r)$  общего вида этим исчерпывается все вырождение, имеющееся в системе. Но в двух частных случаях, когда  $V(r) \sim r^2$  и когда  $V(r) \sim r^{-1}$ , решения уравнения Шредингера обнаруживают дополнительное проявляющееся системати-

чески вырождение. Эти два случая, хорошо известные как потенциал гармонического осциллятора и кулоновский потенциал, играют в физике важную роль. Потенциалом гармонического осциллятора описывают малые отклонения системы от положения равновесия; кроме того, он используется как первое приближение при описании движения нуклонов в ядре относительно центра масс ядра. Кулоновский потенциал применяется для описания движения электрона в атоме водорода. Мы увидим, что для гармонического осциллятора группой симметрии является группа  $U_3$ , а для атома водорода — группа  $\mathcal{R}_4$ . Обе эти группы содержат в качестве подгруппы группу вращений  $\mathcal{R}_3$ . Обобщив полученные результаты, мы покажем, что группой симметрии  $n$ -мерного гармонического осциллятора является группа  $U_n$ .

## § 1. ТРЕХМЕРНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР, ОДНОЧАСТИЧНЫЙ СЛУЧАЙ

Потенциал гармонического осциллятора принято записывать в виде  $V(r) = \frac{1}{2} M \omega^2 r^2$ , где  $\omega/2\pi$  — классическая частота колебаний частицы с массой  $M$ . В квантовой механике нам нужно решать уравнение Шредингера

$$\left( -\hbar^2 \nabla^2 / 2M + \frac{1}{2} M \omega^2 r^2 \right) \psi(r, \theta, \varphi) = E \psi(r, \theta, \varphi).$$

Для удобства будем измерять энергию в единицах  $\hbar\omega$ , а длину — в единицах  $b = (\hbar/M\omega^2)^{1/2}$ ; величину  $b$  назовем параметром длины осциллятора. В этих единицах уравнение Шредингера принимает вид  $\frac{1}{2}(-\nabla^2 + r^2)\psi = E\psi$ , а гамильтониан дается выражением

$$H = \frac{1}{2} (-\nabla^2 + r^2). \quad (19.1)$$

Гамильтониан (19.1), очевидно, сферически-симметричен, что находит выражение в перестановочных соотношениях  $[H, L_q] = 0$ , где  $q = x, y, z$ , а  $L_z = -i(x \partial/\partial y - y \partial/\partial x)$  и т. д. — инфинитезимальные операторы вращений (гл. 5, § 6; гл. 8, § 2). Мы построим набор из десяти операторов, коммутирующих с гамильтонианом (19.1), и покажем, что они являются инфинитезимальными операторами группы  $U_3$ . Начнем с того, что определим три

оператора  $\mathbf{a}_x$ ,  $\mathbf{a}_y$ ,  $\mathbf{a}_z$  и три соответствующих эрмитово-сопряженных оператора  $\mathbf{a}_x^\dagger$ ,  $\mathbf{a}_y^\dagger$ ,  $\mathbf{a}_z^\dagger$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{a}_x &= (x + \partial/\partial x)/\sqrt{2}, & \mathbf{a}_y &= (y + \partial/\partial y)/\sqrt{2}, & \mathbf{a}_z &= (z + \partial/\partial z)/\sqrt{2}, \\ \mathbf{a}_x^\dagger &= (x - \partial/\partial x)/\sqrt{2}, & \mathbf{a}_y^\dagger &= (y - \partial/\partial y)/\sqrt{2}, & \mathbf{a}_z^\dagger &= (z - \partial/\partial z)/\sqrt{2}. \end{aligned} \quad (19.2)$$

(Напомним, что оператор  $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$  эрмитов и, следовательно, оператором, эрмитово-сопряженным по отношению к оператору  $\partial/\partial x$ , является оператор  $-\partial/\partial x$ .) Нетрудно убедиться, что выполняются следующие перестановочные соотношения:

$$[\mathbf{a}_q, \mathbf{a}_{q'}] = [\mathbf{a}_q^\dagger, \mathbf{a}_{q'}^\dagger] = 0, \quad [\mathbf{a}_q, \mathbf{a}_{q'}^\dagger] = \delta_{qq'}, \quad (19.3)$$

$$[\mathbf{a}_q, \mathbf{H}] = \mathbf{a}_q, \quad [\mathbf{a}_q^\dagger, \mathbf{H}] = -\mathbf{a}_q^\dagger. \quad (19.4)$$

[При выводе соотношений (19.4) мы учли явный вид гамильтониана.] Гамильтониан (19.1) можно также записать в виде

$$\mathbf{H} = \sum_q \left( \mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_q + \frac{1}{2} \right). \quad (19.5)$$

Эти алгебраические соотношения часто используются в учебниках квантовой механики при решении уравнения Шредингера для гармонического осциллятора. Дело в том, что из соотношений (19.4) следует, что если  $\psi$  — собственная функция гамильтониана, отвечающая энергии  $E$ , то функции  $\mathbf{a}_q \psi$  тоже собственные и отвечают энергии  $E - 1$ . Другими словами, операторы  $\mathbf{a}_q$  уменьшают, а операторы  $\mathbf{a}_q^\dagger$  увеличивают энергию на единицу. Волновая функция  $\psi_0$  низшего энергетического уровня должна удовлетворять условию  $\mathbf{a}_q \psi_0 = 0$ , так что низшее собственное значение гамильтониана (19.5) равно  $3/2$ . С учетом явного вида операторов  $\mathbf{a}_q$  это условие сводится к простым дифференциальным уравнениям для функции  $\psi_0$ , решение которых, с точностью до нормировки, имеет вид  $\psi_0 = \exp(-1/2 r^2)$ . Возбужденные состояния отвечают целочисленным (с точностью до общего слагаемого  $3/2$ ) энергиям, а волновыми функциями возбужденного уровня с номером  $N$  являются функции вида

$$(\mathbf{a}_x^\dagger)^{N_x} (\mathbf{a}_y^\dagger)^{N_y} (\mathbf{a}_z^\dagger)^{N_z} \psi_0, \quad (19.6)$$

где  $N_x$ ,  $N_y$  и  $N_z$  — целые числа, такие, что  $N_x + N_y + N_z = N$ . В частности, при  $N=1$  имеет место трехкратное вырождение, а при  $N=2$  — шестикратное; в общем случае вырождение имеет кратность  $(N+1)(N+2)/2$ . Возможные значения чисел  $N_x$ ,  $N_y$  и  $N_z$  при малых  $N$  приведены в табл. 19.1. Сразу же видно, что это вырождение не есть ожидаемое  $(2l+1)$ -кратное вырождение. Следовательно, в данном случае вырождение должно быть результатом объединения некоторых  $(2l+1)$ -кратно вырожденных уровней. Соответствующие значения  $l$  приве-

Таблица 19.1

| $N$   | 1     | 2           | 3                   |
|-------|-------|-------------|---------------------|
| $N_x$ | 1 0 0 | 2 0 0 1 1 0 | 3 0 0 2 2 1 1 0 0 1 |
| $N_y$ | 0 1 0 | 0 2 0 1 0 1 | 0 3 0 1 0 2 0 2 1 1 |
| $N_z$ | 0 0 1 | 0 0 2 0 1 1 | 0 0 3 0 1 0 2 1 2 1 |
| $l$   | 1     | 2, 0        | 3, 1                |

дены в последней строке табл. 19.1. Чтобы установить, каким образом получены эти значения величины  $l$ , заметим, что при вращениях операторы  $\mathbf{a}_q$  преобразуются по представлению  $\mathbf{D}^{(1)}$  группы  $\mathcal{R}_3$ . Поэтому, так как состояние  $\psi_0$  сферически-симметрично, возбужденные состояния (19.6) с данным  $N$  будут преобразовываться по симметризованному произведению представлений, содержащему  $N$  сомножителей:  $\mathbf{D}^{(1)} \otimes \mathbf{D}^{(1)} \dots \otimes \mathbf{D}^{(1)}$  (приложение 3, § 1). Появление в данном случае симметризованного произведения вызвано тем, что все операторы  $\mathbf{a}_q^\dagger$  коммутируют между собой. В рассматриваемом нами одночастичном случае антисимметрии неоткуда взяться. Формулы приложения 3, § 1 для характеров симметризованных произведений вместе с формулой (7.42) для характеров представлений группы  $\mathcal{R}_3$  приводят к разложению симметризованных произведений, которым и определяются значения величины  $l$ , приведенные в табл. 19.1.

Установив, что гармонический осциллятор обнаруживает большее вырождение, чем должно быть в силу одной

сферической симметрии, обратимся теперь к задаче отыскания большей группы симметрии для гармонического осциллятора. Из перестановочных соотношений (19.4) можно вывести, что при любых  $q$  и  $q'$  выполняется равенство  $[\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}, \mathbf{H}] = 0$ . Его можно также получить, заметив, что оператор  $\mathbf{a}_{q'}$  уменьшает, а оператор  $\mathbf{a}_q^\dagger$  повышает собственное значение гамильтониана на единицу. Поэтому произведение  $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$  не изменяет собственное значение гамильтониана и осуществляет преобразование в пределах векторных пространств, образованных наборами вырожденных собственных функций. Таким образом, мы имеем девять операторов  $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$ , коммутирующих с гамильтонианом. Используя их, мы можем образовать множество унитарных операторов симметрии вида

$$\mathbf{U} = \exp \left( \sum_{q, q'} c_{qq'} \mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'} \right),$$

где коэффициенты  $c_{q'q}$  удовлетворяют условию антиэрмитовости  $c_{q',q}^* = -c_{q,q'}$ . Этим условием ограничивается свобода выбора коэффициентов  $c_{qq'}$ , так что остается лишь произвол в выборе девяти действительных чисел. Таким образом, мы приходим к 9-параметрическому семейству унитарных преобразований, коммутирующих с гамильтонианом  $\mathbf{H}$ . Чтобы показать, что на самом деле мы имеем дело с группой  $U_3$ , рассмотрим действие этих преобразований на операторы  $\mathbf{a}_q^\dagger$ :

$$(\mathbf{a}_s^\dagger)' = \mathbf{U} \mathbf{a}_s^\dagger \mathbf{U}^{-1} = \sum_{s'} (\exp \mathbf{C})_{s's} \mathbf{a}_{s'}^\dagger, \quad (19.7)$$

где через  $\mathbf{C}$  обозначена матрица коэффициентов  $c_{qq'}$ . Чтобы получить этот результат, нужно воспользоваться операторным тождеством

$$e^{\mathbf{A}} \mathbf{B} e^{-\mathbf{A}} = \mathbf{B} + [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \frac{1}{2!} [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] + \frac{1}{3!} [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]]] + \dots$$

и соотношением

$$[\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}, \mathbf{a}_s^\dagger] = \delta_{q's} \mathbf{a}_q^\dagger,$$

следующим из формулы (19.3). Смысл формулы (19.7) в том, что ее правая часть, в которую входит антиэрмитова матрица  $\mathbf{C}$ , представляет собой общий вид унитарного

преобразования в трехмерном пространстве операторов  $\mathbf{a}_q^\dagger$ . Таким образом, операторы  $\mathbf{U}$  находятся во взаимно-однозначном соответствии с матрицами  $\exp(\mathbf{C})$ , образующими группу  $U_3$ . В этом смысле матрица оператора  $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$  задается выражением

$$(\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'})_{ts} = \delta_{q's} \delta_{qt}.$$

Инфинитезимальными операторами преобразований симметрии являются девять независимых антиэрмитовых комбинаций операторов  $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$ , соответствующих девяти антиэрмитовым  $3 \times 3$ -матрицам из гл. 11, § 4. По некоторым причинам оказывается более удобным выбрать комбинации, являющиеся неприводимыми тензорными операторами по отношению к вращениям (гл. 7, § 4, п. Е). Так как операторы  $\mathbf{a}_q^\dagger$  и  $\mathbf{a}_q$  преобразуются при вращениях как векторы, т. е. по представлению  $\mathbf{D}^{(1)}$ , девять операторов  $\mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_{q'}$  преобразуются по произведению представлений  $\mathbf{D}^{(1)} \otimes \mathbf{D}^{(1)} = \mathbf{D}^{(0)} \oplus \mathbf{D}^{(1)} \oplus \mathbf{D}^{(2)}$  [мы воспользовались формулой приведения (7.44)]. Инвариант, соответствующий представлению  $\mathbf{D}^{(0)}$ , по сути дела совпадает с гамильтонианом, так как из (19.5) следует, что  $\sum_q \mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_q = \mathbf{H} - \frac{3}{2}$ . Вектор-

ные операторы, преобразующиеся по представлению  $\mathbf{D}^{(1)}$ , являются операторами углового момента, так как  $\mathbf{L}_z = i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x) = -i(\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_x)$ , и т. д. Остальные пять независимых комбинаций можно представить в виде тензорного оператора второго ранга (квадрупольного), аналогичного сферическим гармоникам  $Y_q^2$ . В обычных обозначениях гл. 7, § 4, п. Е напомним

$$\begin{aligned} Q_0^{(2)} &= 2\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_z - \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y, \\ Q_1^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}} (-\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_y), \\ Q_{-1}^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}} (\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_z - i\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_y), \\ Q_2^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}} (\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y + i\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y + i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_x), \\ Q_{-2}^{(2)} &= \sqrt{\frac{3}{2}} (\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y - i\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_y - i\mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_x). \end{aligned} \quad (19.8)$$

Поскольку гамильтониан  $\mathbf{H}$  имеет в качестве группы симметрии группу  $U_3$ , его собственные функции должны нумероваться соответственно неприводимым представлениям этой группы. Сначала заметим, что  $U_3 = U_1 \times SU_3$  (гл. 10, § 4). В нашем случае инфинитезимальный оператор группы  $U_1$  есть просто инвариант  $\sum_q \mathbf{a}_q^\dagger \mathbf{a}_q = \mathbf{H} - 3/2$ , а остальные восемь операторов с нулевым следом ( $\mathbf{L}_q$  и  $\mathbf{Q}_p^{(2)}$ ) соответствуют группе  $SU_3$ . Таким образом, непри-

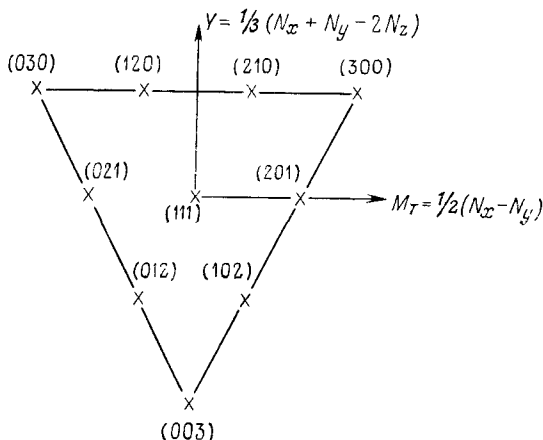


Рис. 19.1.

водимое представление группы  $U_1$  задается величиной  $N$ , и нам остается идентифицировать представления группы  $SU_3$ , соответствующие каждому уровню энергии. Возвращаясь к описанию инфинитезимальных операторов группы  $SU_3$  (гл. 11, § 6), мы видим, что с помощью матриц (11.2) можно связать оператор  $1/3 (\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x + \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y - 2\mathbf{a}_z^\dagger \mathbf{a}_z)$  с оператором  $Y$ , а оператор  $1/2 (\mathbf{a}_x^\dagger \mathbf{a}_x - \mathbf{a}_y^\dagger \mathbf{a}_y)$  — с  $T_z$ . Поэтому мы можем связать числа  $N_x$ ,  $N_y$  и  $N_z$ , введенные выше, с числами  $Y$  и  $M_T$ , использовавшимися в гл. 11, соотношением

$$\frac{1}{3} (N_x + N_y - 2N_z) = Y, \quad \frac{1}{2} (N_x - N_y) = M_T. \quad (19.9)$$

Тогда из рис. 11.6 явствует, что три собственные функции уровня с  $N=1$  принадлежат представлению  $(1\ 0)$ ,



уровня с  $N=2$ —представлению  $(2\ 0)$ , а уровня с  $N=3$ —представлению  $(3\ 0)$ . В качестве иллюстрации мы воспроизвели на рис. 19.1 весовую диаграмму с рис. 11.6 для представления  $D^{(3\ 0)}$ . У каждой точки диаграммы указаны соответствующие значения  $(N_x, N_y, N_z)$ . Так как произведения (19.6) симметричны относительно перестановок  $N$  сомножителей  $a_q^\dagger$  и потому (гл. 18, § 7) принадлежат представлению  $[N]$  группы  $U_3$ , множество собственных функций гамильтониана, отвечающих энергии  $N + \frac{3}{2}$ , преобразуется по представлению  $(N\ 0)$  группы  $SU_3$ .

Вопрос о том, какие значения углового момента возникают при данном  $N$ , с точки зрения теории представлений групп эквивалентен вопросу о редукции неприводимого представления группы  $SU_3$  на ее подгруппу  $\mathcal{R}_3$ . Подчеркнем, что эта редукция отлична от редукции на подгруппу  $SU_2$ , о которой говорилось в гл. 8, § 5. Инфинитезимальными операторами физических вращений, образующих группу  $\mathcal{R}_3$ , являются операторы  $L_q$  [формула (19.7)], а инфинитезимальными операторами подгруппы  $SU_2$ , соответствующей плоскости  $xu$ , являются операторы

$$T_+ = a_x^\dagger a_y, \quad T_- = a_y^\dagger a_x, \quad T_z = \frac{1}{2} (a_x^\dagger a_x - a_y^\dagger a_y). \quad (19.10)$$

Ясно, что, например, оператор  $T_+$  есть «повышающий оператор», который уменьшает величину  $N_y$  на единицу и увеличивает на единицу величину  $N_x$  и тем самым осуществляет сдвиг вправо на один узел решетки на диаграммах, подобных изображенной на рис. 19.1. Пользуясь соотношениями (19.3), легко показать, что операторы (19.10) удовлетворяют обычным перестановочным соотношениям (7.30) группы  $SU_2$ . Операторы (19.10) не имеют, конечно, никакого отношения к изоспину, но мы пользуемся теми же обозначениями, чтобы подчеркнуть математическую связь с изложенным в гл. 11. Оператор углового момента  $L_z$  можно теперь представить в виде

$$\begin{aligned} L_z &= -i (a_x^\dagger a_y - a_y^\dagger a_x) = -i (T_+ - T_-) = \\ &= -i (T_x + iT_y - T_x + iT_y) = \\ &= 2T_y. \end{aligned} \quad (19.11)$$

Поэтому набор собственных значений оператора  $L_z$  в пространстве представления  $(\lambda\mu)$  группы  $SU_3$ —такой же, как

и набор собственных значений оператора  $2T_y$ , который должен совпадать с набором собственных значений оператора  $2T_z$ , т. е. со значениями  $M_T = \frac{1}{2}(N_x - N_y)$ . Последние можно найти по диаграммам, подобным изображенной на рис. 19.1. Зная собственные значения оператора  $L_z$ , можно определить возможные значения величины  $l$ . Например, из рис. 19.1 следует, что в представлении  $(3\ 0)$  оператор  $L_z$  имеет следующие собственные значения:  $-3, -1, 1, 3, -2, 0, 2, -1, 1, 0$ , что приводит к значениям  $l=3$  и  $l=1$ . В общем случае для представления  $(N\ 0)$  имеем  $l=N, N-2, N-4, \dots, 1$  или  $0$  — уже знакомый нам набор значений углового момента  $l$  для  $N$ -го энергетического уровня осциллятора.

## § 2. ТРЕХМЕРНЫЙ ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР, МНОГОЧАСТИЧНЫЙ СЛУЧАЙ

В предыдущем параграфе мы рассмотрели движение одной частицы в сферически-симметричном осцилляторном потенциале. Мы установили, что в такой системе имеется дополнительное вырождение по сравнению с  $(2l+1)$ -кратным вырождением в случае сферически-симметричного потенциала. Рассмотрим теперь систему частиц, движущихся в потенциале гармонического осциллятора и взаимодействующих между собой в соответствии с потенциалом вида  $\sum_{i < j} V(r_{ij})$ , который мы считаем малым возмущением. Такая система аналогична системе электронов в атоме (гл. 8, § 6). В гл. 8 мы пришли к выводу о наличии в многоэлектронном атоме  $LS$ -связи; сейчас же рассматривать спин нет необходимости. С теоретико-групповой точки зрения тот факт, что система обладает полным угловым моментом  $L$ , означает, что волновая функция системы преобразуется по представлению  $D^{(L)}$  группы  $\mathcal{R}_3$  при вращениях системы как целого. Величина  $L$  является характеристикой, дополнительной к угловым моментам  $l$  отдельных частиц, задающим поведение волновой функции при вращениях, затрагивающих координаты отдельной частицы. Гамильтониан, содержащий взаимодействие вида  $\sum_{i < j} V(r_{ij})$ , инвариантен относительно группы  $\mathcal{R}_3$  вращений системы как целого. Рас-

смотрим теперь процедуру перехода от одночастичной системы к системе из многих частиц в случае, когда группой симметрии является группа  $U_3$ . При этом мы будем следовать методу, использованному нами для группы  $\mathcal{R}_3$ . Операторы полного углового момента мы определяли как суммы по частицам. Точно так же мы можем определить девять полных  $U_3$ -операторов — как операторы  $\sum_i \mathbf{a}_q^\dagger(i) \mathbf{a}_q(i)$ . Они, очевидно, удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и одночастичные операторы, поскольку слагаемые, относящиеся к разным частицам, коммутируют друг с другом. Поэтому определенные выше операторы соответствуют группе  $U_3$  одновременных  $U_3$ -преобразований, действующих на все частицы. Эта группа содержит в качестве подгруппы одновременные вращения, которым соответствует полный угловой момент  $L$ . Как и в одночастичном случае, в качестве девяти инфинитезимальных операторов можно взять оператор  $H = \sum_i H(i)$ , где  $H(i)$  — осцилляторный гамильтониан  $i$ -й частицы, оператор полного углового момента  $L_q = \sum_i L_q(i)$  и пять компонент квадрупольного оператора  $Q_p^{(2)} = \sum_i Q_p^{(2)}(i)$ . Из общей теории следует, что если возмущающий потенциал  $\sum_{i < j} V(r_{ij})$  коммутирует с этими девятью инфинитезимальными операторами, то собственные функции системы отвечают неприводимым представлениям группы  $U_3$ . Другими словами, они задаются величиной  $N$ , определяющей невозмущенное значение энергии, и типом неприводимого представления  $(\lambda\mu)$  группы  $SU_3$ . Мы не будем вдаваться в детальное обсуждение того, какие представления  $(\lambda\mu)$  возможны при каждом  $N$ . Заметим лишь, что соответствующие рассуждения подобны выводу возможных значений полного углового момента  $L$  в некоторой атомной конфигурации (гл. 8, § 6, п. Г). В многочастичных системах встречаются представления не только с  $\mu = 0$ , как это имеет место для одной частицы.

Возмущение, инвариантное относительно группы  $SU_3$ , можно построить из операторов Казимира, которые по определению инвариантны. Для группы одновременных

$SU_3$ -преобразований оператор Казимира  $C_2$ , определенный в гл. 11, § 10, содержит как одночастичный, так и двухчастичный вклад. Через операторы  $L_q$  и  $Q_p^{(2)}$  его можно выразить следующим образом:

$$C_2 = \frac{1}{2} (L \cdot L) + \frac{1}{6} (Q^{(2)} \cdot Q^{(2)}) = \\ = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (L(i) \cdot L(j)) + \frac{1}{6} \sum_{i,j} (Q^{(2)}(i) \cdot Q^{(2)}(j)). \quad (19.12)$$

Собственные значения оператора  $C_2$  известны: они даются формулой (11.21). Собственные значения оператора  $(L \cdot L)$  равны  $L(L+1)$ . Отсюда можно получить собственные значения квадрупольного оператора  $(Q^{(2)} \cdot Q^{(2)})$ . Двухчастичная часть этого оператора иногда называется «квадрупольным взаимодействием» и используется при объяснении деформационных и вращательных движений в ядрах (см. книгу [2]).

Интересным с общей точки зрения моментом рассмотренного выше использования группы  $SU_3$  является процедура перехода от одночастичной к многочастичной системе.

### § 3. ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР В $n$ ИЗМЕРЕНИЯХ

В § 1 мы выбрали в качестве объекта изучения трехмерный гармонический осциллятор, исходя из того, что он имеет очевидный физический смысл в реальном трехмерном пространстве. Но с математической точки зрения то, что число измерений равно трем, не играло существенной роли. С тем же успехом мы могли бы начать

с операторов  $\nabla^2 = \sum_{q=1}^n \partial^2 / \partial r_q^2$  и  $r^2 = \sum_{q=1}^n r_q^2$ , задающих  $n$ -мерный осциллятор. Обобщение на  $n$ -мерный случай проводится без принципиальных трудностей и приводит к заключению, что группой симметрии  $n$ -мерного осциллятора является группа  $U_n$ .

В частности, двумерный осциллятор имеет вырожденные уровни, соответствующие неприводимым представлениям группы  $SU_2$ , которые, как мы видели в гл. 18, § 13, совпадают с представлениями группы  $\mathcal{R}_3$ . Следовательно, уровни двумерного осциллятора, энергии кото-

рых равны  $N+1$ , вырождены соответственно величине углового момента  $^{1/2}N$ , т. е. степень вырождения равна  $2(^{1/2}N)+1=N+1$ . Пара операторов  $\mathbf{a}_x^\dagger$  и  $\mathbf{a}_y^\dagger$  преобразуется в этом случае по представлению  $\mathbf{D}^{(1/2)}$  группы  $SU_2$ .

#### § 4. ГРУППА СИММЕТРИИ КУЛОНОВСКОГО ПОТЕНЦИАЛА

Гамильтониан, описывающий движение частицы с зарядом  $-e$  в кулоновском потенциале  $e/r$ , например электрона в атоме водорода, равен (гл. 8, § 5)

$$H = \frac{p^2}{2M} - \frac{e^2}{r} = \hbar^2 \frac{\nabla^2}{2M} - \frac{e^2}{r}. \quad (19.13)$$

Если измерять длину в единицах  $\hbar^2/Me^2$  (боровский радиус), а энергию в единицах  $e^4/2\hbar^2 = Rh$ , где  $R$  — постоянная Ридберга, то гамильтониан (19.13) принимает вид

$$H = - \left( \nabla^2 + \frac{2}{r} \right). \quad (19.14)$$

Уравнение Шредингера, как обычно, имеет вид  $H\psi = E\psi$ , где  $E$  — энергия, а  $\psi$  — волновая функция. Хорошо известно, что в случае гамильтониана (19.14) уровни энергии задаются целыми числами  $n=1, 2, 3, \dots$ ; соответствующие энергии равны  $-n^{-2}$ , и при данном  $n$  угловой момент  $l$  принимает значения  $0, 1, 2, 3, \dots, (n-1)$ . Таким образом, имеется более сильное вырождение, нежели соответствующее сферической симметрии.

Будучи сферически-симметричным, гамильтониан (19.14) коммутирует с тремя инфинитезимальными операторами  $\mathbf{L}_q$  группы  $\mathcal{R}_3$ . Кроме того, путем алгебраических выкладок можно показать, что гамильтониан  $H$  коммутирует также с тремя компонентами векторного оператора

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \{ (\mathbf{v} \times (\mathbf{r} \times \mathbf{v})) - ((\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \times \mathbf{v}) \} + \mathbf{r}/r. \quad (19.15)$$

Перейдя к физическим операторам, данное выражение можно переписать в виде

$$\mathbf{A} = - [ \{ (\mathbf{p} \times \mathbf{L}) - (\mathbf{L} \times \mathbf{p}) \} / 2M - e^2 \mathbf{r}/r ] / e^2.$$

Выражение в квадратных скобках называется вектором Рунге—Ленца. Известно, что в классической задаче

о движении в кулоновском потенциале этот вектор является интегралом движения. Три дополнительных эрмитовых оператора симметрии  $\mathbf{A}_q$  вместе с операторами  $\mathbf{L}_q$  могут, в принципе, составлять набор инфинитезимальных операторов некоторой непрерывной группы, содержащей подгруппу  $\mathcal{R}_3$ . Поэтому мы рассмотрим перестановочные соотношения между шестью операторами  $\mathbf{A}_q$  и  $\mathbf{L}_q$  с целью выяснить, являются ли они соотношениями вида (7.7) и совпадают ли в нашем случае структурные константы со структурными константами какой-либо хорошо известной группы Ли.

Поскольку операторы  $\mathbf{A}_q$  — это компоненты вектора, их перестановочные соотношения с инфинитезимальными операторами вращения имеют вид [(гл. 7, § 4, п. Е, а также формула (7.26)]

$$[\mathbf{L}_x, \mathbf{A}_x] = 0, [\mathbf{L}_x, \mathbf{A}_y] = i\mathbf{A}_z, [\mathbf{L}_x, \mathbf{A}_z] = -i\mathbf{A}_y \text{ и т. д. (19.16)}$$

Перестановочные соотношения между операторами  $\mathbf{A}_q$  и  $\mathbf{A}_{q'}$  можно получить из определения (19.15):

$$[\mathbf{A}_x, \mathbf{A}_y] = \left( \mathbf{V}^2 + \frac{2}{r} \right) \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\mathbf{H}\mathbf{L}_z \text{ и т. д. (19.17)}$$

Таким образом, последний коммутатор не записывается в форме (7.7), т. е. в виде суммы операторов симметрии  $\mathbf{L}_q$  и  $\mathbf{A}_{q'}$ . В выражение (19.17) входит также гамильтониан  $\mathbf{H}$ . Но поскольку  $\mathbf{H}$  коммутирует с  $\mathbf{A}$  и  $\mathbf{L}$ , мы можем включить множитель  $-\mathbf{H}$  в определение этих операторов, положив  $\mathbf{A}' = (-\mathbf{H})^{-1/2}\mathbf{A}$ , так что

$$[\mathbf{A}'_x, \mathbf{A}'_y] = i\mathbf{L}_z \text{ и т. д. (19.17a)}$$

Наличие множителя  $(-\mathbf{H})$ , а не  $\mathbf{H}$  в определении оператора  $\mathbf{A}'$  оказывается удобным при рассмотрении связанных состояний, энергии которых отрицательны. В этом случае оператор  $\mathbf{A}'$  эрмитов. Но при положительных энергиях он становится антиэрмитовым. Таким образом, в случае отрицательных энергий операторы  $\mathbf{L}$  и  $\mathbf{A}'$  задают унитарные преобразования вида  $\exp\{-i(\mathbf{a} \cdot \mathbf{L}) - i(\mathbf{c} \cdot \mathbf{L})\}$ , где  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{c}$  — действительные векторные параметры. Соответствующие шесть инфинитезимальных операторов равны компонентам векторов  $-i\mathbf{L}$  и  $-i\mathbf{A}'$ . Знак минус введен для того, чтобы параметры вращения  $\mathbf{a}$  совпадали с определенными ранее параметрами (гл. 7, § 4, п. А). Теперь

мы покажем, что перестановочные соотношения (19.16) и (19.17) совпадают с перестановочными соотношениями для группы  $\mathcal{R}_4$ .

### А. Группы $\mathcal{R}_4$ и $\mathcal{L}$

Четырехмерная группа вращений определяется как множество действительных ортогональных  $4 \times 4$ -матриц с определителем, равным  $+1$ . Если  $\mathbf{R}$  — такая матрица, то мы можем написать  $\mathbf{R} = \mathbf{1} + \mathbf{M}$ , где элементы матрицы  $\mathbf{M}$  малы в случае, когда матрица  $\mathbf{R}$  близка к единичной. Условие ортогональности  $\mathbf{R}^\dagger \mathbf{R} = \mathbf{1}$  приводит при малых  $\mathbf{M}$  к соотношению  $\mathbf{M}^\dagger + \mathbf{M} = 0$ , т. е. инфинитезимальный оператор  $\mathbf{M}$  является кссимметричным и может быть записан в виде

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} 0 & -a_z & a_y & c_x \\ a_z & 0 & -a_x & c_y \\ -a_y & a_x & 0 & c_z \\ -c_x & -c_y & -c_z & 0 \end{pmatrix} = \sum_q (a_q \mathbf{X}_q + c_q \mathbf{Z}_q). \quad (19.18)$$

Соотношением (19.18) определяются шесть независимых инфинитезимальных операторов  $\mathbf{X}_q, \mathbf{Z}_q$ . Обозначения  $\mathbf{X}_q$  совпадают с обозначениями, использованными в гл. 7, § 4, п. А для группы  $\mathcal{R}_3$ , отражая тот факт, что при  $c_q = 0$  мы приходим к подгруппе  $\mathcal{R}_3$  группы  $\mathcal{R}_4$ . Перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов (19.18) следуют из их определения:

$$\begin{aligned} [\mathbf{X}_x, \mathbf{X}_y] &= \mathbf{X}_z \text{ и т. д.} \\ [\mathbf{X}_x, \mathbf{Z}_x] &= 0, [\mathbf{X}_x, \mathbf{Z}_y] = \mathbf{Z}_z, [\mathbf{X}_x, \mathbf{Z}_z] = -\mathbf{Z}_y \text{ и т. д.,} \\ [\mathbf{Z}_x, \mathbf{Z}_y] &= \mathbf{X}_z \text{ и т. д.} \end{aligned} \quad (19.19)$$

(остальные коммутаторы получаются путем циклической перестановки индексов). Как показывает сравнение с формулами (19.16) и (19.17а), операторы  $\mathbf{X}$  и  $\mathbf{Z}$  удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и инфинитезимальные операторы симметрии  $-i\mathbf{L}$  и  $-i\mathbf{A}'$ .

Итак, на уровне инфинитезимальных операторов мы можем отождествить группу симметрии для связанных состояний нашей системы с группой  $\mathcal{R}_4$ . Чтобы показать, что и конечные операторы симметрии можно привести во взаимно-однозначное соответствие с элементами группы

$\mathcal{R}_4$  (установить изоморфизм групп), необходимо более детальное изучение области изменения параметров. ( $\mathcal{R}_4$ -инвариантность гамильтониана  $\mathbf{H}$  можно доказать, отобразив вектор импульса  $\mathbf{p}$  в точку, лежащую на единичной сфере в четырехмерном пространстве, с координатами

$$\xi = 2p_0 p_x / (p_0^2 + p^2), \quad \eta = 2p_0 p_y / (p_0^2 + p^2), \\ \zeta = 2p_0 p_z / (p_0^2 + p^2), \quad \chi = (p_0^2 - p^2) / (p_0^2 + p^2),$$

где  $p_0 = (-E)^{-1/2}$ . Если уравнение Шредингера записать как интегральное уравнение в импульсном пространстве, то оно будет инвариантным по отношению к вращениям в четырехмерном пространстве с координатами  $\xi, \eta, \zeta, \chi$ .)

Для состояний с положительной энергией удобнее ввести вместо оператора  $\mathbf{A}'$  оператор  $\mathbf{A}'' = (\mathbf{H})^{-1/2} \mathbf{A}$ . Оператор  $\mathbf{A}''$  эрмитов, а перестановочные соотношения (19.17a) принимают для него вид

$$[\mathbf{A}_x'', \mathbf{A}_y''] = -i\mathbf{L}_z \quad \text{и т. д.} \quad (19.17б)$$

Перестановочные соотношения между инфинитезимальными операторами симметрии  $-i\mathbf{L}$  и  $-i\mathbf{A}''$  теперь отличаются от перестановочных соотношений (19.19) для группы  $\mathcal{R}_4$ . Но они совпадают с перестановочными соотношениями для группы Лоренца  $\mathcal{L}$ . Это и понятно, поскольку группа Лоренца является четырехмерной группой вращений для метрики с измененным знаком одного из слагаемых—в нашем случае это соответствует изменению знака  $\mathbf{H}$ .

## Б. Классификация состояний в кулоновском потенциале

Из общей теории следует, что, имея в своем распоряжении группу симметрии, мы можем классифицировать уровни энергии по неприводимым представлениям этой группы. Таким образом, мы приходим к задаче классификации неприводимых представлений группы  $\mathcal{R}_4$ . Эта задача решается очень просто, нужно лишь воспользоваться наличием локального изоморфизма между группами  $\mathcal{R}_4$  и  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$ . В самом деле, введем новые инфинитезимальные операторы  $\mathbf{F}$  и  $\mathbf{G}$ :  $\mathbf{F} = 1/2 (\mathbf{X} + \mathbf{Z})$ ,  $\mathbf{G} = 1/2 (\mathbf{X} - \mathbf{Z})$ , что эквивалентно переходу в формуле (19.18) к параметрам  $(\mathbf{a} + \mathbf{c})$  и  $(\mathbf{a} - \mathbf{c})$ . Тогда в силу соотношений (19.19)



имеем

$$[F_x, F_y] = F_z, [G_x, G_y] = G_z \text{ и т. д.} \quad (19.20)$$

Коммутаторы же операторов  $\mathbf{F}$  с операторами  $\mathbf{G}$  равны нулю. Это означает, что операторы  $\mathbf{F}$  и  $\mathbf{G}$  по отдельности удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и операторы  $\mathbf{X}$ , и, следовательно, задают две группы  $\mathcal{R}_3$ . Поскольку операторы  $\mathbf{F}$  и  $\mathbf{G}$  коммутируют между собой, вместе они задают группу  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$ . Таким образом, мы установили изоморфизм групп  $\mathcal{R}_4$  и  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$  на уровне инфинитезимальных операторов. Поэтому, зная, что представления группы  $\mathcal{R}_3$ , обозначаемые через  $D^{(j)}$ , определяются индексом  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ , мы можем заключить, что неприводимые представления группы  $\mathcal{R}_4$  нумеруются парами индексов  $j_1 j_2$  (относительно представлений прямого произведения групп см. гл. 4, § 21). Таким образом, неприводимые представления группы  $\mathcal{R}_4$  обозначаются через  $D^{(i_1, i_2)}$ , где индексы  $j_1$  и  $j_2$  относятся к двум  $\mathcal{R}_3$ -подгруппам. Операторы  $(\mathbf{F} \cdot \mathbf{F})$  и  $(\mathbf{G} \cdot \mathbf{G})$  — это операторы Казимира с собственными значениями —  $j_1(j_1 + 1)$  и —  $j_2(j_2 + 1)$  (гл. 7, § 5). Размерность представления  $D^{(i_1, i_2)}$  равна  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ .

При изучении в § 1 гармонического осциллятора мы видели, что в одночастичном случае могут быть реализованы лишь некоторые из представлений группы  $SU_3$ . Подобная ситуация возникает и в кулоновской задаче. Причиной такого ограничения возможных типов представлений является равенство  $(\mathbf{A}' \cdot \mathbf{L}) = (\mathbf{L} \cdot \mathbf{A}') = 0$ , которое после алгебраических выкладок получается из определений операторов  $\mathbf{A}'$  и  $\mathbf{L}$ . Это равенство приводит к тому, что операторы Казимира, построенные из операторов —  $1/2 i (\mathbf{L} \pm \mathbf{A}')$ , соответствующих операторам  $\mathbf{F}$  и  $\mathbf{G}$ , совпадают с оператором —  $1/4 \{(\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}) + (\mathbf{A}' \cdot \mathbf{A}')\}$ . Следовательно, единственно возможными представлениями являются представления с  $j_1 = j_2$ , т. е. представления  $D^{(j)}$ , где  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ . Дальнейшие вычисления показывают, что операторы Казимира можно привести к еще более простому виду:

$$(\mathbf{F} \cdot \mathbf{F}) = (\mathbf{G} \cdot \mathbf{G}) = -1/4 \{(\mathbf{L} \cdot \mathbf{L}) + (\mathbf{A}' \cdot \mathbf{A}')\} = 1/4 (1 + H^{-1}).$$

В представлении  $D^{(j)}$  этот оператор равен —  $j(j + 1)$ , так что соответствующее значение энергии равно

$$E = \langle H \rangle = - (2j + 1)^{-2} \quad (19.21)$$

и этот уровень  $(2j+1)^2$ -кратно вырожден. В обычном изложении теории атома водорода принято, конечно, для обозначения энергетических уровней пользоваться целым числом  $n = (2j+1)$ . Значения  $j=0, 1/2, 1, 3/2, \dots$  соответствуют значениям  $n=1, 2, 3, 4, \dots$ , и формула (19.21) сводится к более привычному выражению  $E = -n^{-2}$  (в единицах энергии, введенных в начале § 4).

Чтобы определить, какие значения углового момента  $l$  соответствуют каждому уровню энергии, нам понадобится формула разложения представления  $D^{(j,j)}$  группы  $\mathcal{R}_4$  на неприводимые при редукции на подгруппу физических вращений  $\mathcal{R}_3$ :

$$D^{(j,j)} = \sum_l c_l D^{(l)}. \quad (19.22)$$

Заметим, что физическим вращениям соответствует оператор  $\mathbf{X} = \mathbf{F} + \mathbf{G}$ . Поэтому задача отыскания ненулевых коэффициентов ряда (19.22) сводится к задаче векторного сложения двух угловых моментов:  $l = j + j$  (гл. 7, § 4, п. Г). Из формулы (7.44) следует, что  $l = 0, 1, 2, \dots, 2j (=n-1)$ ; это известный результат теории атома водорода.

Относительно положительных энергий заметим, что, как мы видели в гл. 15, § 2, п. Д, группа Лоренца не имеет конечномерных унитарных представлений. Это согласуется с тем хорошо известным фактом, что положительным энергиям соответствует континуум состояний.

Методом, которым в § 2 было в случае группы симметрии  $U_3$  осуществлено обобщение на многочастичные системы, можно воспользоваться также и в случае кулоновского потенциала и группы симметрии  $U_3$ . Но такое обобщение, по-видимому, не дает ничего существенного ни в одной из известных физических проблем.

## ЛИТЕРАТУРА

Симметриям осцилляторного и кулоновского потенциалов в одночастичном случае посвящена работа:

1. *Jauch J. M., Hill E. L.*, Phys. Rev., 57, 641 (1940).

Обзор по вопросам использования симметрии гармонического осциллятора в многочастичных задачах ядерной физики дан в работе:

2. *Harvey M.*, Advances in Nuclear Physics, vol. 1, Plenum Press, New York, 1968.

Работы более позднего времени по симметрии кулоновской задачи рассматриваются в книге:

3. *Englefield M. J.*, Group Theory and Coulomb Problem, Wiley-Interscience, New York, 1972.

## ЗАДАЧИ

- 19.1. Покажите, что функция, удовлетворяющая условиям  $a_q \psi_0 = 0$ , где  $a_q$  — операторы, определенные формулой (19.2), имеет вид  $\psi_0 = A \exp(-1/2 r^2)$ .
- 19.2. Докажите, что (как говорилось в § 1) при ограничении на подгруппу  $\mathcal{R}_3$  полностью симметричное представление  $[N]$  группы  $SU_3$  разлагается в сумму неприводимых представлений  $D^{(l)}$ , где  $l = N, N-2, N-4, \dots, 1$  или  $0$ . (Воспользуйтесь методом задачи 18.5, рассмотрев симметризованные произведения множителей, для каждого из которых  $m = 1, 0$  или  $-1$ . Затем покажите, что имеются: только одно произведение с  $\sum m = N$  или  $\sum m = N-1$ , два произведения с  $\sum m = N-2$  и  $\sum m = N-3$ , три произведения с  $N-4$  и  $N-5$  и т. д.

## ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ (ОТДЕЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ)

В предыдущих главах мы последовательно изложили теорию симметрии и ее приложения к широкому кругу физических систем. Но остался ряд вопросов, которые, хотя они имеют прямое отношение к изложенным темам, мы в свое время опустили, чтобы не отвлекать читателей от основной линии изложения. Теперь мы остановимся на некоторых из них. Большинство этих тем никак не связано между собой; поэтому все параграфы данной главы вполне самостоятельны, а порядок следования тем произволен. Материал первых двух параграфов имеет прямое отношение к физике, а в остальных речь идет о математических проблемах.

### § 1. НЕИНВАРИАНТНЫЕ ГРУППЫ

До сих пор мы говорили исключительно о группах симметрии  $\mathcal{G}$ , которые по определению не изменяют гамильтониана. Теперь рассмотрим некоторые группы, не обладающие таким свойством, но представляющие известный интерес. Это группы, которые называются неинвариантными или динамическими. Их значение состоит в том, что они сводят в одно представление собственные функции, соответствующие разным энергиям, так что спектр и вероятности перехода могут быть выражены через операторы группы. Поэтому такие динамические величины могут быть вычислены на основе теории групп. Приложения подобного рода пока что ограничиваются простыми системами.

В качестве иллюстрации рассмотрим одномерный гармонический осциллятор. Используя обозначения гл. 19, § 1, его гамильтониан можно записать в виде

$$H = \frac{1}{2} (x^2 - d^2/dx^2) = a^\dagger a + \frac{1}{2}, \quad (20.1)$$

а уровни энергии, как хорошо известно, даются значениями  $n + \frac{1}{2}$  (в единицах  $\hbar\omega$ ), где  $n = 0, 1, 2, \dots$ . Построим теперь три эрмитовых оператора

$$K_1 = \frac{1}{4} (a^2 + a^{\dagger 2}), \quad K_2 = \frac{1}{4} i (a^2 - a^{\dagger 2}), \quad K_3 = \frac{1}{2} H. \quad (20.2)$$

С помощью перестановочных соотношений (19.3) находим

$$[K_1, K_2] = -iK_3, \quad [K_3, K_1] = iK_2, \quad [K_3, K_2] = -iK_1. \quad (20.3)$$

Нетрудно видеть, что соотношения (20.3) в точности совпадают с перестановочными соотношениями группы Лоренца  $\mathcal{L}_3$  в трех измерениях. Такая группа может быть построена исключением одной пространственной переменной ( $z$ ) из обычной группы Лоренца (гл. 15, § 2). Инфинитезимальными операторами для новой группы являются  $X_z$ ,  $Y_x$  и  $Y_y$ , причем перестановочные соотношения для них даются формулами (15.32):

$$[Y_x, Y_y] = -X_z, \quad [X_z, Y_x] = Y_y, \quad [X_z, Y_y] = -Y_x. \quad (20.4)$$

Соотношения (20.4) совпадают с (20.3), если взять вместо  $K_1$ ,  $K_2$  и  $K_3$  операторы  $iY_x$ ,  $iY_y$  и  $iX_z$ . Множители  $i$  необходимы здесь, как обычно (гл. 7, § 2) для инфинитезимальных операторов унитарных преобразований, порождаемых эрмитовыми операторами. Поэтому перестановочные соотношения для неинвариантной группы, определенной операторами (20.2), точно такие же, как и для группы  $\mathcal{L}_3$ , и, следовательно, она локально изоморфна последней. Мы не будем заниматься здесь вопросом глобальных преобразований, т. е. вопросом о полном диапазоне значений параметров группы. Инфинитезимальные свойства достаточны для нахождения представлений, если только не ставить вопроса об однозначности.

Исследуем теперь так же, как в гл. 7, § 4, п. Б в случае группы  $\mathcal{R}_3$ , унитарные неприводимые представления группы  $\mathcal{L}_3$ . Прежде всего выберем базис, в котором оператор  $K_3$ , а следовательно, и энергия диагональны. Напишем  $K_3 \varphi_n = \frac{1}{2} (n + \frac{1}{2}) \varphi_n$ , выразив для удобства собственные значения в знакомой форме энергий осциллятора. Это можно сделать без потери общности, поскольку при столь общем анализе представлений группы  $\mathcal{L}_3$  числа  $n$  пока еще не обязаны быть целыми числами и могут быть произвольными. Тогда два других оператора

группы  $K_1$  и  $K_2$  связывают между собой собственные функции с разными энергиями. Очевидно, что если ввести операторы  $K_{\pm} = K_1 \pm K_2$ , то для них будут выполняться соотношения

$$[K_3, K_{\pm}] = \pm K_{\pm}, [K_+, K_-] = -2K_3, \quad (20.5)$$

откуда видно, что  $K_+$  и  $K_-$  — это повышающий и понижающий операторы для энергии. Точнее, если  $H\varphi_n = (n + 1/2)\varphi_n$ , то

$$H(K_{\pm}\varphi_n) = 2K_3K_{\pm}\varphi_n = 2K_{\pm}(K_3 \pm 1)\varphi_n = \left(n + \frac{1}{2} \pm 2\right)(K_{\pm}\varphi_n), \quad (20.6)$$

т. е. операторы  $K_{\pm}$  повышают и понижают энергию на две единицы  $\hbar\omega$ . Оператор Казимира  $C$  для группы  $\mathcal{L}_3$ , соответствующий оператору  $J^2$  для группы  $\mathcal{R}_3$ , дается теперь выражением

$$C = K_1^2 + K_2^2 - K_3^2 = \frac{1}{2}(K_+K_- + K_-K_+) - K_3^2, \quad (20.7)$$

где существенно изменение знака перед 3-й компонентой.

Если повторить теперь все шаги, сделанные в гл. 7, § 4, п. Б при построении конечномерных унитарных неприводимых представлений группы  $\mathcal{R}_3$ , то мы приходим к противоречию, так как для нормировочного множителя  $A_n$ , определяемого соотношением

$$\varphi_{n+2} = A_n K_+ \varphi_n, \quad (20.8)$$

получается условие  $|A_n|^2 < 0$ . Отсюда следует, что для группы  $\mathcal{L}_3$  нет конечных унитарных неприводимых представлений (если не считать тривиального единичного представления). (Такой же вывод был сделан в гл. 15, § 2, п. Г в случае группы  $\mathcal{L}$ .) Поэтому мы исследуем возможность бесконечномерных представлений. Это означает, что отсутствует ограничение чисел  $n$  сверху или снизу.

Посмотрим сначала, к чему приводит отсутствие ограничений сверху. Предположим, что существует наименьшее значение  $n = n_0$ , при котором

$$K_- \varphi_{n_0} = 0. \quad (20.9)$$

Собственные значения оператора Казимира в этом представлении можно найти, написав выражение (20.7) в виде

$C = K_+ K_- + K_3 - K_3^2$  и подействовав оператором  $C$  на функцию  $\varphi_{n_0}$ ; получим

$$C = \frac{1}{16} (1 + 2n_0) (3 - 2n_0). \quad (20.10)$$

Это выражение остается тем же для всех базисных векторов  $\varphi_n$  в данном представлении. Взяв в качестве исходного состояния  $\varphi_{n_0}$ , используем далее повышающий оператор  $K_+$  для построения набора всех  $\varphi_n$ , где  $n = n_0 + 2t$  ( $t$  — целое число). [Напомним, что, согласно формуле (20.5), оператор  $K_+$  увеличивает собственное значение оператора  $K_3$  на 1 и, следовательно, увеличивает число  $n$  на 2.] Чтобы обеспечивалась унитарность представления, матрицы инфинитезимальных операторов  $K_1$ ,  $K_2$  и  $K_3$  должны быть эрмитовыми. Отсюда следует, что числа  $n$  и  $n_0$  должны быть действительными. Условие эрмитовости означает также, что  $K_+^\dagger = K_-$ . Поэтому из соотношения (20.8) находим

$$\begin{aligned} |A_n|^{-2} &= (\varphi_n, K_- K_+ \varphi_n) = (\varphi_n, (C + K_3^2 - K_3) \varphi_n) = \\ &= \frac{1}{16} \{ (1 + 2n_0) (3 - 2n_0) + (1 + 2n) (5 + n) \} = \\ &= \frac{1}{4} (n + n_0 + 1) (n - n_0 + 2). \end{aligned} \quad (20.11)$$

Чтобы не было противоречия, это выражение должно быть неотрицательным при  $n \geq n_0$ , что приводит к условию  $n_0 \geq -1/2$ , причем значению  $n_0 = -1/2$  соответствует единичное представление. При  $n_0 = -1/2$  и  $n > n_0$  величина (20.10) не равна нулю, а поэтому при каждом  $n_0$  существует бесконечномерное унитарное неприводимое представление  $\Gamma^{(n_0)}$ . Правда, не все такие представления могут быть реализованы в задаче об осцилляторе, ибо при учете явного вида (20.2) операторов группы и перестановочных соотношений (19.3) оператор Казимира (20.7) сведется к константе  $C = 3/16$ . Подстановка этого значения в выражение (20.10) приводит к двум возможностям:  $n_0 = 0$  или  $n_0 = 1$ . Тогда собственные функции должны принадлежать представлению  $\Gamma^{(0)}$  с  $n = 0, 2, 4, \dots$  или представлению  $\Gamma^{(1)}$  с  $n = 1, 3, 5, \dots$ . Таким путем мы перебираем весь спектр одномерного осциллятора в рамках двух неприводимых представлений неинвариантной группы  $\mathcal{L}_3$ . Каким образом собственными значениями

оператора Казимира ограничиваются возможные представления, мы уже видели в гл. 19, § 4, п. Б.

Найденные выше представления  $T^{(n_0)}$  — не единственные унитарные неприводимые представления группы  $\mathcal{L}_3$ . Можно было бы сохранить верхний предел возможных значений  $K_3$  в этих представлениях. Это привело бы к своего рода «зеркальному отражению» представлений  $T^{(n_0)}$  с собственными значениями оператора  $K_3$ , идущими до  $-\infty$ . Можно также построить представления, в которых отсутствуют как верхний, так и нижний пределы для  $K_3$ . Но эти представления не имеют отношения к задаче об осцилляторе, поскольку содержат состояния с неограниченной (и отрицательной) энергией.

Использованный здесь метод построения неинвариантной группы  $\mathcal{L}_3$  одномерного осциллятора может быть применен в более сложных трехмерных задачах для осцилляторного и кулоновского потенциалов. В последнем случае все собственные функции относятся к единственному представлению группы  $\mathcal{L}_5$ , которая аналогична пятимерной группе вращений, но отличается от нее знаком одной из компонент метрики. Группа симметрии  $\mathcal{H}_4$  содержится в качестве подгруппы в инвариантной (динамической) группе  $\mathcal{L}_5$ .

Выбор динамической группы для данной системы не является, однако, единственным. Подобная группа должна включать в себя группу симметрии и, следовательно, описывать имеющееся вырождение, а также содержать операторы, связывающие собственные функции. Спектр энергий должен был бы возникнуть как допустимые собственные значения одного из операторов группы. С этой точки зрения понятие динамической группы представляет интерес в теории элементарных частиц. Здесь массы разных частиц составляют спектр, значения которого на первый взгляд не связаны друг с другом. Представляет интерес найти динамическую группу, объединяющую эти значения в рамках одного представления и, стало быть, соотносящую массу с некоторыми операторами группы.

На уровне, более близком к практике, неинвариантные группы могут быть использованы для вывода простых формул для матричных элементов перехода между собственными функциями. Например, в случае простого одно-



мерного осциллятора, согласно определениям операторов  $H$  и  $K_1$ , имеем тождество вида  $x^2 \equiv H + 2K_1$ . Матричные элементы оператора  $x^2$  могут быть вычислены по матричным элементам операторов группы  $H$  и  $K_1$ , которые даются формулами (20.8) и (20.11) для неприводимых представлений. Заметим, что  $x^2$  — это один из операторов, определяющих электромагнитные переходы квадрупольного типа.

## § 2. ЭФФЕКТ ЯНА — ТЕЛЛЕРА И СПОНТАННОЕ НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ

Эффект Яна — Теллера связан с симметриями, рассматриваемыми при приближенном разбиении гамильтониана. Поскольку разбиение является лишь приближенным, имеются члены, нарушающие симметрию. Чтобы отличить этот эффект от нарушения симметрии, связанного с добавлением внешнего возмущения (гл. 5, § 8), иногда пользуются термином «спонтанное нарушение». Хотя это понятие носит весьма общий характер, впервые эффект Яна — Теллера был рассмотрен в теории строения молекул, где он проявляется наиболее четко. Позже он нашел приложение в теории элементарных частиц. Для большей наглядности мы, рассматривая эффект Яна — Теллера, будем говорить о строении молекул, но общность выводов будет очевидна. В конце параграфа мы кратко коснемся приложения к элементарным частицам.

### А. Адиабатическое приближение

Молекула состоит из ядер и электронов, взаимодействующих за счет обычных электрических сил; обозначим координаты ядер через  $R$ , а электронов — через  $r$ . Поскольку масса ядра более чем в 1000 раз превышает массу электрона, а силы взаимодействия одни и те же, ядра должны двигаться значительно медленнее электронов. Основное приближение состоит в том, чтобы сначала рассчитать орбитальное движение электронов, считая ядра неподвижными, а затем вычислить равновесные положения, рассчитать вращательное и колебательное движения ядер и оценить их влияние на энергии электронов. Такое приближение называется адиабатическим, но в случае

молекул его часто называют приближением Борна—Оппенгеймера.

Рассмотрим это приближение более детально. Запишем полный гамильтониан в виде

$$H(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = T_N(\mathbf{R}) + T_e(\mathbf{r}) + V(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (20.12)$$

где  $T_N$  и  $T_e$  — кинетические энергии ядер и электронов, а  $V$  — потенциальная энергия взаимодействия трех видов: ядер с ядрами, электронов с электронами и электронов с ядрами. В адиабатическом приближении прежде всего решается уравнение Шредингера для электронов

$$\{T_e(\mathbf{r}) + V(\mathbf{R}, \mathbf{r})\} \psi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = E_n(\mathbf{R}) \psi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}), \quad (20.13)$$

в котором вектор  $\mathbf{R}$  фиксирован. Мы нумеруем собственные значения индексом  $n$ , хотя на практике индекс должен быть составным ввиду многомерности координат электронов  $\mathbf{r}$ . Затем находят приближенную собственную функцию  $\Psi$  гамильтониана (20.12), записывая ее в виде  $\Psi(\mathbf{R}, \mathbf{r}) = \psi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \Phi_n(\mathbf{R})$ . Подстановка этой функции в уравнение Шредингера  $H(\mathbf{R}, \mathbf{r}) \Psi = E \Psi$  приводит к уравнению

$$\{T_N(\mathbf{R}) + E_n(\mathbf{R})\} \Phi_n(\mathbf{R}) = E \Phi_n(\mathbf{R}), \quad (20.14)$$

если пренебречь производными функций  $\psi_n(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  по  $\mathbf{R}$ . В этом пренебрежении и состоит адиабатическое приближение в своей простейшей форме. Зная энергии электронов  $E_n(\mathbf{R})$ , даваемые при любом фиксированном  $\mathbf{R}$  уравнением (20.13), мы можем в принципе решить уравнение (20.14) и тем самым найти полное решение.

Практически решение уравнения (20.14) находят, развивая далее мысль о медленном движении ядер. Для определения низшей энергии сначала пренебрегают кинетической энергией  $T_N(\mathbf{R})$  и просто минимизируют функцию  $E_0(\mathbf{R})$ , например для каждой компоненты  $R_i$  вектора  $\mathbf{R}$  полагают

$$\partial E_0(\mathbf{R}) / \partial R_i = 0. \quad (20.15)$$

Отсюда находят равновесные положения ядер  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$ . Разумеется, при этом лишь фиксируется их относительное расположение, и включение  $T_N(\mathbf{R})$  приводит к учету вращательной энергии. Разлагая в ряд потенциальную функцию  $E_0(\mathbf{R})$  вблизи  $\mathbf{R}_0$ , можно учесть колебания

относительно положений равновесия (гл. 6). В данной главе мы ограничимся статическими положениями равновесия.

## Б. Роль симметрии

Полный гамильтониан  $H(\mathbf{R}, \mathbf{r})$  должен быть инвариантным относительно всех совместных вращений ядер и электронов, поскольку взаимодействия зависят только от относительных расстояний. Отсюда следует известный вывод о том, что полная волновая функция  $\Psi$  характеризуется определенным угловым моментом  $J$ , который в данной задаче будет связан с вращательным движением. В этом нет ничего нового по сравнению с рассмотренным ранее общим результатом.

В этой задаче интересна симметрия потенциала  $V(\mathbf{R}, \mathbf{r})$ , которым при заданном  $\mathbf{R}$  определяется движение электронов. Если рассматривать этот потенциал как функцию координат электронов  $\mathbf{r}$ , то он не будет инвариантным относительно всех вращений векторов  $\mathbf{r}$ , поскольку координаты ядер  $\mathbf{R}$  фиксированы (их равновесные значения  $\mathbf{R}_0$ ). Но если в равновесном расположении ядер имеется симметрия по отношению к точечной группе  $\mathcal{G}$ , то потенциал  $V(\mathbf{R}_0, \mathbf{r})$  должен обладать той же симметрией. Когда в молекулу входят несколько одинаковых атомов, как в примере, рассмотренном в гл. 6, есть основания надеяться найти подобную симметрию. Наличие симметрии проявится как в колебательном спектре (примеры в гл. 6), так и в уровнях энергии электронов  $E_n$ , которые приобретут характерные вырождения, соответствующие неприводимым представлениям  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{G}$  (гл. 14, § 4).

Рассмотрим теперь более внимательно уравнения (20.13) и (20.15) в случае симметричной равновесной конфигурации. Мы обнаружим, что во многих случаях распределение электронов достаточно асимметрично — настолько, что равновесные положения ядер сдвигаются относительно симметричных положений; это и есть эффект Яна — Теллера. Дифференцируя уравнение Шредингера (20.13) по  $R_i$ , получаем

$$\partial E_0(\mathbf{R})/\partial R_i = \langle \psi_0 | \partial V(\mathbf{R}, \mathbf{r})/\partial R_i | \psi_0 \rangle. \quad (20.16)$$

Согласно формуле (20.15), эти матричные элементы должны быть равны нулю в равновесных положениях  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$ . Посмотрим, что значит равенство нулю этих матричных элементов, пользуясь методом правил отбора (гл. 5, § 4). Как было показано в гл. 6, набор  $3N$  координат  $R_i$  можно определить так, чтобы они принадлежали некоторым неприводимым представлениям  $\Gamma^{(\gamma)}$  группы  $\mathcal{G}$ . Если  $R_i$  — симметричная координата, принадлежащая тождественному представлению  $\Gamma^{(1)}$ , то ввиду инвариантности потенциала  $\mathbf{V}$  тем же свойством обладает и  $\partial \mathbf{V} / \partial R_i$ . Следовательно, какому бы представлению ни принадлежала волновая функция  $\psi_0$ , нет никаких требований симметрии, в силу которых матричные элементы должны были бы обращаться в нуль. Но любую симметричную координату можно изменять до бесконечности, не нарушая симметрии, и таким путем можно добиться, что матричный элемент будет равен нулю; это будет означать лишь наличие определенных размеров и других свободных параметров симметричной системы. Для остальных, несимметричных координат такая свобода выбора отсутствует, поскольку нулевые значения любой из них означают отклонение от симметрии. Следовательно, если матричные элементы (20.16) должны обращаться в нуль, это должно быть в силу симметрии. Поскольку функция  $\mathbf{V}$  инвариантна, набор представлений  $\Gamma^{(\gamma)}$ , которому принадлежат производные  $\partial \mathbf{V} / \partial R_i$ , совпадает с набором, которому принадлежат сами координаты. Таким образом, мы требуем равенства нулю величины (20.16) для всех  $\Gamma^{(\gamma)}$ , отличных от  $\Gamma^{(1)}$ , что имеет место для координат  $\mathbf{R}$ . [Здесь следует исключить вращательные и колебательные координаты (гл. 6, § 5), поскольку потенциал  $\mathbf{V}$  не зависит от них.] В соответствии с правилами отбора (гл. 5, § 4) это означает, что представление  $\Gamma^{(\alpha)}$  не должно появляться в разложении произведения  $\Gamma^{(\alpha)} \otimes \Gamma^{(\gamma)}$ ; для характеров групп это эквивалентно условию

$$\sum_{G_a} \chi^{(\alpha)*}(G_a) \chi^{(\gamma)}(G_a) \chi^{(\alpha)}(G_a) = 0, \quad (20.17)$$

$$\sum_{G_a} |\chi^{(\alpha)}(G_a)|^2 \chi^{(\gamma)}(G_a) = 0.$$

В случае любого одномерного (унитарного) представления  $\Gamma^{(\alpha)}$  мы имеем  $|\chi^{(\alpha)}(G_a)|^2 = 1$  для каждого элемента  $G_a$ , так что условие (20.17) всегда выполняется ввиду орто-

гональности  $\chi^{(\gamma)}$  с тождественным представлением. В случае же представлений, размерность которых превышает единицу, можно показать, что (если не рассматривать линейных молекул) существует по крайней мере одно представление  $T^{(\gamma)}$ , для которого условие (20.17) не выполняется. Поэтому если в электронном основном состоянии имеется вырождение, то условие минимума энергии (20.15) не выполняется в симметричном положении, и низшее значение энергии достигается в несимметричном положении равновесия (в последнем, как правило, отсутствуют вырождения). Интересно, что в случае одномерного представления  $T^{(\alpha)}$  электронная плотность  $|\psi_0|^2$  инвариантна, поскольку  $|\chi^{(\alpha)}(G_a)|^2 = 1$  (это верно даже в том случае, когда  $T^{(\alpha)}$  не является тождественным представлением, а функция  $\Psi_0$  сама по себе не является инвариантом). Интуиция подсказывает нам, что в такой ситуации симметрия не должна нарушаться, тогда как к представлениям большей размерности это, вообще говоря, не относится.

Рассмотрим в качестве примера молекулу аммиака (гл. 6, § 5). Шесть ее внутренних координат принадлежат представлениям  $A_1$  и  $E$ , причем каждое из них входит дважды. Предположим, что электронная волновая функция принадлежит двумерному представлению  $E$  и содержит вырождение. Тогда матричные элементы (20.16), соответствующие двум симметричным координатам типа  $A_1$ , не будут обращаться в нуль в силу симметрии. Но можно добиться этого, выбрав соответствующим образом угол связи  $\phi$  и длину связи  $NH$ . В случае координат типа  $E$ , взяв известные характеры, мы увидим, что условие (20.17) не выполняется при  $T^{(\alpha)} = T^{(\gamma)} = E$  и, следовательно, симметричное положение не является положением равновесия.

Экспериментально наблюдать эффект Яна—Теллера не очень просто. Это объясняется тем, что основные электронные состояния молекул обычно симметричны и потому невырождены. Но данный эффект должен проявляться в возбужденных состояниях; самый лучший пример—это, по-видимому, спектр фотоэлектронов из метана (см. книгу [2]). Он показывает, что в конечном ионизованном состоянии метана его молекула деформирована и отличается от правильного тетраэдра.

Выше мы не учитывали спина. Можно показать, что, хотя в принципе любое спиновое вырождение (кроме двукратного вырождения по отношению к обращению времени при нечетном числе электронов) приводит к ян-теллеровскому нарушению симметрии, эффект очень мал.

## В. Спонтанное нарушение симметрии

В приближении Борна—Оппенгеймера существует очень интересный эффект, относящийся к симметрии и возможный во многих других физических системах: спонтанное нарушение симметрии. Полный гамильтониан обладает полной группой симметрии  $\mathcal{R}_3$ , поскольку он зависит только от относительных взаимодействий между ядрами и электронами, входящими в систему. Но при нахождении приближенного решения мы использовали подгруппу группы  $\mathcal{R}_3$  — точечную группу  $\mathcal{G}$ , соответствующую равновесному расположению ядер. В этом смысле можно говорить о том, что произошло нарушение (понижение) симметрии от  $\mathcal{R}_3$  до  $\mathcal{G}$ ; симметрию можно восстановить, только если учесть вращательное движение молекулы, т. е. если в дополнение к движению электронов и колебаниям ядер допустить и вращение всей системы. В макроскопическом кристалле же группа симметрии  $\mathcal{G}$  приобретает большое значение, поскольку кристалл обладает макроскопическим моментом инерции и потому квант энергии вращательного движения очень мал.

В случае одной молекулы ограничение симметрии от группы  $\mathcal{R}_3$  до точечной группы  $\mathcal{G}$  представляется, может быть, вполне естественным ввиду различия между электронами и ядрами. Но такое же ограничение встречаем и в других физических системах. Например, все нуклоны, входящие в состав ядра, одинаковы, но есть данные, убедительно свидетельствующие о том, что ядро имеет несферическую равновесную форму и вращается. Число нуклонов в ядре достаточно велико ( $\sim 100$ ), для того чтобы подгруппа симметрии была не точечной, а непрерывной группой  $\mathcal{R}_2$ . Другими элементами симметрии являются все вращения вокруг осей второго порядка, перпендикулярных оси  $\mathcal{R}_2$ ; соответствующая группа обозначается через  $D_\infty$  и является предельной для  $D_n$ . Макроскопическая система ядер, подобная кристаллу,

в которой проявлялась бы симметрия  $D_\infty$ , не существует, но наличие такой симметрии находит отражение во вращательных уровнях энергии ядер.

Еще один более сложный пример нам дает теория сверхпроводимости. Здесь мы имеем дело не с вращательной симметрией, а с сохранением числа электронов. Такая симметрия столь очевидна в случае нерелятивистской системы, что о ней обычно вообще не упоминают. Группа, соответствующая этой симметрии, является унитарной одномерной; она описывается единственным параметром  $\alpha$ , причем операторы группы имеют вид  $\exp(i\alpha N)$ , где  $N$  — оператор числа частиц. Основу теории составляет построение возможно более простой формы пробной волновой функции, нарушающей указанную симметрию и не сохраняющей числа частиц — в виде суперпозиции состояний с разными числами частиц. Для системы с большим числом электронов, в которой взаимодействие осуществляется преимущественно через пары одночастичных состояний, различающихся обращением времени, такое приближение оказывается достаточно хорошим. В случае же системы с малым числом частиц нужно вернуться к состоянию с определенным числом частиц (величиной, аналогичной угловому моменту молекулы в предыдущем примере), и этого можно достичь, подействовав проекционным оператором числа частиц на пробную волновую функцию, нарушающую симметрию. Здесь опять в макроскопической системе решение с нарушением симметрии приобретает смысл и позволяет объяснить явление сверхпроводимости, при которой сопротивление электрическому току равно нулю. (Возбуждения из состояния с нарушенной симметрией возможны лишь тогда, когда энергия превышает определенную энергетическую щель, в то время как в системе свободных электронов возможны возбуждения со сколь угодно малой энергией.)

В качестве последнего примера мы кратко остановимся на спонтанном нарушении симметрии в релятивистской теории поля, описывающей элементарные частицы. Оно возникает при попытке объединить теории электромагнитных и слабых ( $\beta$ -распадных) взаимодействий. Ввиду малого радиуса слабых взаимодействий соответствующие кванты поля (векторные мезоны) должны в отличие от фотонов обладать конечной массой. Это обстоятельство

вносит в теорию поля расходимости, на первый взгляд неустранимые. В случае квантов поля с нулевой массой покоя такие трудности не возникают и удастся построить объединенный лагранжиан, инвариантный относительно набора калибровочных преобразований (гл. 16, § 3, п. Д) и позволяющий надеяться на то, что можно будет установить соотношение между константами связи слабого и электромагнитного взаимодействий. Решающий шаг введения конечной массы покоя для векторных мезонов делается на основе предположения о нарушенной симметрии. Предполагается, что вакуум не является инвариантом полной группы калибровочной симметрии (и даже не принадлежит никакому неприводимому представлению этой группы), но инвариантен относительно некоторой ее подгруппы. Тем самым в лагранжиан вводятся члены, эквивалентные наличию конечной массы у некоторых векторных мезонов. При подходящем выборе калибровочной группы и ее подгруппы, относительно которой вакуум остается инвариантным, можно добиться, чтобы фотон сохранил свою нулевую массу покоя, а векторные мезоны приобрели массу, отличную от нуля. Такой способ введения массы позволяет избежать расходимостей, о которых упоминалось выше. Механизм, которым обусловлена нарушенная симметрия вакуума, не вполне ясен, но, по-видимому, он требует введения дополнительного поля скалярных частиц, «конспирация» которых и дает третью компоненту, необходимую мезонам для приобретения массы. (Напомним, что, как говорилось в гл. 16, § 3, п. Ж, фотон имеет лишь два состояния с  $m = \pm 1$ , тогда как частица с конечной массой и спином  $s = 1$  должна иметь состояния с  $m = \pm 1$  и  $m = 0$ .)

### § 3. НОРМАЛЬНЫЕ ПОДГРУППЫ, ПОЛУПРЯМЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ И МАЛЫЕ ГРУППЫ

В начале книги мы ограничились в изложении теории групп теми свойствами, которые необходимы для понимания физических приложений. Но имеется ряд очень интересных свойств (даже конечных групп), о которых мы совсем не упоминали. Мы введем здесь понятие нормальной подгруппы и покажем, как им пользоваться для



нахождения представлений. Это будет общей основой для введения понятия малой группы, которое мы использовали как некий искусственный прием при отыскании представлений пространственных групп в гл. 14, а также групп Евклида и Пуанкаре в гл. 15.

Для прямого произведения групп, определение которого было дано в гл. 2, § 5, характеры и представления весьма просто вычислить, зная соответствующие величины для каждой из групп (гл. 4, § 21). Напомним, что в прямом произведении  $\mathcal{G} = \mathcal{H} \times \mathcal{K}$  элементы группы  $\mathcal{H}$  должны коммутировать с элементами группы  $\mathcal{K}$ . Введем теперь так называемое полупрямое произведение  $\mathcal{G} = \mathcal{H} \rtimes \mathcal{K}$ . В этом случае элементами группы  $\mathcal{G}$  служат произведения  $G_{ia} = H_i K_a$ , где  $H_i$  — элемент подгруппы  $\mathcal{H}$ , а  $K_a$  — элемент подгруппы  $\mathcal{K}$ , причем элементы  $H_i$  не обязательно должны коммутировать с элементами  $K_a$ , но должно выполняться соотношение

$$K_a H_i K_a^{-1} = H_j, \quad (20.18)$$

где  $H_j$  — другой элемент группы  $\mathcal{H}$ .

Можно дать еще более общее определение нормальной подгруппы:  $\mathcal{H}$  есть просто подгруппа  $\mathcal{G}$ , и ее элементы удовлетворяют соотношению  $G_a H_i G_a^{-1} = H_j$  для всех элементов  $G_a$ , входящих в  $\mathcal{G}$ . Факторизация  $\mathcal{G} = \mathcal{H} \mathcal{K}$  элементов группы  $\mathcal{G}$  при этом не обязательно происходит, и, хотя в этом случае еще можно определить фактор-группу, она уже не будет обязательно подгруппой группы  $\mathcal{G}$ .

Такое определение означает, что все элементы, сопряженные любому  $H_i$  относительно любого элемента группы  $\mathcal{G}$ , принадлежат группе  $\mathcal{H}$ . Заметим, что определение (20.18) несимметрично относительно двух подгрупп  $\mathcal{H}$  и  $\mathcal{K}$ . Группа  $\mathcal{H}$  называется нормальной (или инвариантной, или самосопряженной) подгруппой группы  $\mathcal{G}$ . Группа  $\mathcal{K}$  называется фактор-группой группы  $\mathcal{G}$  по отношению к группе  $\mathcal{H}$ , и эту связь часто выражают формулой  $\mathcal{K} = \mathcal{G}/\mathcal{H}$ . Если обозначить через  $g$ ,  $h$  и  $k$  порядок (число элементов) групп  $\mathcal{G}$ ,  $\mathcal{H}$  и  $\mathcal{K}$ , то очевидно, что  $g = hk$ , причем  $k$  называют индексом нормальной группы  $\mathcal{H}$  в группе  $\mathcal{G}$ .

Примером полупрямых произведений среди конечных групп может служить группа тетраэдра (гл. 9, § 3), которую можно записать в виде  $T = D \rtimes C_3$ , а также более простая группа  $D_4 = C_4 \rtimes C_2$ . Чтобы убедиться в этом,

нужно внимательно просмотреть элементы группы  $T$  (или  $D_4$ ) и таблицу умножения для них. Пространственные группы, рассмотренные в гл. 14, § 9, образованные путем объединения группы дискретных трансляций  $\mathcal{T}$  с точечной группой  $\mathcal{G}$ , являются полупрямыми произведениями  $\mathcal{T} \wedge \mathcal{G}$ , причем трансляции в силу формулы (14.72) образуют нормальную подгруппу. Аналогичным образом группа Евклида (гл. 15, § 1) может быть записана в виде  $\mathcal{E}_3 = \mathcal{T}_3 \wedge \mathcal{R}_3$ , а группа Пуанкаре (гл. 15, § 4) — в виде  $\mathcal{P} = \mathcal{T}_4 \wedge \mathcal{L}$ , где  $\mathcal{T}_3$  — группа трансляций в трехмерном пространстве, а  $\mathcal{T}_4$  — в пространстве-времени.

Посмотрим теперь, каким образом знание структуры группы как полупрямого произведения помогает найти ее неприводимые представления. Для простоты ограничимся случаем, когда нормальная подгруппа  $\mathcal{H}$  абелева (обобщение будет очевидно); все неприводимые представления такой группы одномерны и обозначаются через  $T^{(\lambda)}$ .

Поскольку  $\mathcal{H}$  есть подгруппа группы  $\mathcal{G}$ , базисные векторы неприводимого представления  $T$  группы  $\mathcal{G}$  можно выбрать так, что они будут принадлежать определенным неприводимым представлениям группы  $\mathcal{H}$ . Обозначая такие векторы символом  $|\lambda\rangle$ , для любого элемента  $H$  группы  $\mathcal{H}$  имеем

$$T(H) |\lambda\rangle = T^{(\lambda)}(H) |\lambda\rangle. \quad (20.19)$$

Возьмем какой-то определенный набор векторов  $|\lambda\rangle$  и, используя элементы  $K_a$  группы  $\mathcal{K}$ , образуем из них новый набор векторов  $|\lambda a\rangle$ :

$$|\lambda a\rangle = T(K_a) |\lambda\rangle. \quad (20.20)$$

Каждый такой новый вектор должен принадлежать одному из представлений группы  $\mathcal{H}$ , поскольку из соотношений (20.18) — (20.20) следует равенство

$$T(H) |\lambda a\rangle = T(H) T(K_a) |\lambda\rangle = T(K_a) T(H') |\lambda\rangle = T^{(\lambda)}(H') |\lambda a\rangle, \quad (20.21)$$

где  $H' = K_a^{-1} H K_a$ . Заметим, однако, что представление группы  $\mathcal{H}$ , определенное этим соотношением, не обязательно будет представлением  $T^{(\lambda)}$ , так как соотношение (20.21) связывает элемент  $H$  с матричным элементом  $T^{(\lambda)}(H')$  другого элемента  $H'$ . Поэтому мы обозначим такое представление группы  $\mathcal{H}$  символом  $T^{(\lambda a)}$ . Рассмотрим прежде всего

простейший случай, когда все представления  $T^{(\lambda_a)}$ , возникающие при пробегании элементом  $G_a$  всей группы  $\mathcal{K}$ , не эквивалентны. В этом случае векторы  $|\lambda a\rangle$  должны быть линейно-независимыми и образуют базис  $k$ -мерного неприводимого представления группы  $\mathcal{G}$ . Явный вид представления нетрудно найти, действуя на вектор  $|\lambda a\rangle$  общим элементом группы  $G = \text{HK}$ :

$$\begin{aligned} T(\text{HK})|\lambda a\rangle &= T(\text{H})T(\text{K})T(K_a)|\lambda\rangle = T(\text{H})T(K_b)|\lambda\rangle = \\ &= T(K_b)T(\text{H}')|\lambda\rangle = T^{(\lambda)}(\text{H}')|\lambda b\rangle. \end{aligned} \quad (20.22)$$

Здесь введены обозначения  $K_b = \text{KK}_a$  и  $\text{H}' = K_b^{-1}\text{HK}_b$ . Таким образом, все матричные элементы оператора  $T(\text{HK})$  равны нулю, кроме тех значений  $T^{(\lambda)}(\text{H}')$ , которые связывают строки  $a$  с соответствующими столбцами  $b$ . Эти значения находятся по неприводимым представлениям  $T^{(\lambda)}$  подгруппы  $\mathcal{H}$ .

В том случае, когда какие-либо представления  $T^{(\lambda_a)}$  эквивалентны представлениям  $T^{(\lambda)}$ , необходимы некоторые изменения. Обозначим при данном  $\lambda$  через  $\tilde{K}_a$  набор элементов  $\mathcal{K}$ , для которого имеет место указанная эквивалентность. Покажем теперь, что этот набор образует подгруппу группы  $\mathcal{K}$ , которую мы обозначим через  $\tilde{\mathcal{K}}$ . Ее называют обычно малой группой по отношению к  $\mathcal{G}$ ,  $\mathcal{H}$  и  $\lambda$ . Мы не будем доказывать выполнение всех групповых постулатов для набора  $\tilde{K}_a$ ; ограничимся лишь законом умножения. Пусть  $\tilde{K}_a$  и  $\tilde{K}_b$  принадлежат данному набору, так что

$$T^{(\lambda)}(\tilde{K}_a^{-1}\text{H}\tilde{K}_a) = ST^{(\lambda)}(\text{H})S^{-1},$$

$$T^{(\lambda)}(\tilde{K}_b^{-1}\text{H}\tilde{K}_b) = RT^{(\lambda)}(\text{H})R^{-1},$$

где  $S$  и  $R$  — некоторые фиксированные элементы, не зависящие от  $\text{H}$ . Тогда для произведения  $\tilde{K}_b\tilde{K}_a$  имеем

$$\begin{aligned} T^{(\lambda)}(\tilde{K}_a^{-1}\tilde{K}_b^{-1}\text{H}\tilde{K}_b\tilde{K}_a) &= T^{(\lambda)}(\tilde{K}_a^{-1}\text{H}'\tilde{K}_a) = \\ &= ST^{(\lambda)}(\text{H}')S^{-1} = SRT^{(\lambda)}(\text{H})R^{-1}S^{-1}, \end{aligned}$$

где, как и ранее,  $\text{H}' = \tilde{K}_b^{-1}\text{H}\tilde{K}_b$ . Таким образом, закон группового умножения выполняется. Следовательно, набор векторов  $|\lambda a\rangle$ , преобразующихся при данном  $\lambda$  эквивалентно, должен образовывать инвариантное пространство по отношению к малой группе  $\tilde{\mathcal{K}}$ . Поэтому мы можем вы-

брать эти векторы так, чтобы они преобразовывались согласно определенному представлению  $T^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{K}$ . Тогда базисные векторы будут характеризоваться одновременно индексами  $\lambda$  и  $\alpha$ , а также номером строки  $i$ , если размерность представления  $T^{(\alpha)}$  больше единицы. Для построения неприводимых представлений группы  $\mathcal{G}$  начнем с одного из таких наборов векторов  $|\lambda\alpha i\rangle$  с фиксированными значениями  $\lambda$  и  $\alpha$ . Общее свойство любой группы  $\mathcal{K}$  порядка  $k$  состоит в том, что если задана подгруппа  $\tilde{\mathcal{K}}$  порядка  $\tilde{k}$ , то любой элемент группы  $\mathcal{K}$  можно записать в виде  $K = M_c \tilde{K}$ , где  $M_c$  — один из  $k/\tilde{k}$  элементов группы  $\mathcal{K}$  (теорема Лагранжа, см. задачу 2.4). В силу этого представление  $T$  группы  $\mathcal{G}$  может быть построено действием набора  $k/\tilde{k}$  элементов  $M_c$  на векторы  $|\lambda\alpha i\rangle$ , т. е.  $T(M_c)|\lambda\alpha i\rangle = |\lambda\alpha i, c\rangle$ . Полученное представление обозначается через  $T^{(\lambda\alpha)}$  и имеет размерность  $s_\alpha k/\tilde{k}$ ; его матричные элементы могут быть найдены так, как это делалось при выводе формулы (20.22):

$$\begin{aligned} T(HK)|\lambda\alpha i, c\rangle &= T(H)T(K)T(M_c)|\lambda\alpha i\rangle = \\ &= T(H)T(K')|\lambda\alpha i\rangle = T(K')T(H')|\lambda\alpha i\rangle = T(K')T^{(\lambda)}(H')|\lambda\alpha i\rangle = \\ &= T^{(\lambda)}(H')T(M_d)T(\tilde{K}')|\lambda\alpha i\rangle = T^{(\lambda)}(H')\sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(\tilde{K}')T(M_d)|\lambda\alpha j\rangle = \\ &= T^{(\lambda)}(H')\sum_j T_{ji}^{(\alpha)}(\tilde{K}')|\lambda\alpha j, d\rangle. \end{aligned} \quad (20.23)$$

Здесь новые символы  $K'$ ,  $H'$ ,  $M_d$ ,  $\tilde{K}'$  и  $d$  определены соотношениями  $K' = KM_c$ ,  $H' = K'^{-1}HK$ ,  $K' = M_d K'$ . Таким образом, представление выражено через матричные элементы представлений подгрупп  $\mathcal{H}$  и  $\tilde{\mathcal{K}}$ .

Возникает вопрос: будем ли мы при каждом новом выборе  $\lambda$  получать новое неприводимое представление группы  $\mathcal{G}$ ? Вообще говоря, нет, так как если некоторые из представлений  $T^{(\lambda\alpha)}$  неэквивалентны представлениям  $T^{(\lambda)}$ , то мы получим одно и то же представление группы  $\mathcal{G}$ , исходя из любого  $T^{(\lambda\alpha)}$  вместо  $T^{(\lambda)}$ . Набор представлений  $T^{(\lambda\alpha)}$  называют принадлежащим одной орбите. При построении всех неприводимых представлений группы  $\mathcal{G}$  следует выбрать лишь одно значение  $\lambda$  для каждой орбиты.

Понятие орбиты тесно связано с понятием звезды векторов  $k$  (гл. 14, § 9, п. А), так как вектор  $k$  соответствует вектору  $\lambda$ . Пред-

ставления  $T^{(k_i)}$  группы трансляций, где  $k_i$  принадлежит звезде векторов  $k$ , будут принадлежать одной орбите.

В качестве простого примера найдем представления полупрямого представления — группы  $D_4 = C_4 \wedge C_2$ . Сначала заметим, что по геометрическим соображениям ось  $C_2$  должна быть перпендикулярна оси  $C_4$ , а элементы произведения распадаются на пять классов группы  $D_4$ :  $E$ ;  $C_4^2$ ;  $C_4$ ,  $C_4^3$ ;  $C_2$ ,  $C_4^2 C_2$ ;  $C_4 C_2$ ;  $C_4^3 C_2$ . Имеются четыре неприводимых представления  $T^{(\lambda)}$  группы  $C_4$ , с которых можно начинать построение представлений (прилож. 1, табл. П.1). Выбрав в качестве исходного единичное представление  $A$  группы  $C_4$ , мы получаем, очевидно, в качестве малой группы саму фактор-группу  $C_2$ , так как для единичного представления все матричные элементы  $T^{(\lambda)}(H) = 1$  одинаковы для всех  $H$ . Таким образом, для каждого неприводимого представления  $T^{(\alpha)}$  группы  $C_2$ , а их имеется два ( $A$  и  $B$  в обозначениях табл. П.1), мы получаем одномерное представление группы  $D_4$ . Из формулы (20.23) с использованием таблицы характеров для  $C_2$  можно видеть, что при этом получаются представления группы  $D_4$ , обозначенные в табл. П.1 через  $A_1$  и  $A_2$ . Обратимся теперь к следующему представлению  $B$  группы  $C_4$ ; очевидно, что малой группой здесь вновь является группа  $C_2$ , причем возникают еще два представления  $B_1$  и  $B_2$  группы  $D_4$ . Наконец, если взять первое из пары представлений группы  $C_4$  (обозначаемое через  $E$ ), то малая группа уже не может содержать элемент  $C_2$ , поскольку  $C_2^{-1} C_4 C_2 = C_4^3$  и матричные элементы для  $C_4$  и  $C_4^3$  уже не совпадают для представления  $E$  группы  $C_4$ . Поэтому малая группа сводится к тривиальной единичной, и мы имеем двумерное представление  $(k/\tilde{k} = 2)$  группы  $D_4$ , описываемое формулой (20.22) и обозначаемое через  $E$  в табл. П.1. Взяв второе представление из пары, соответствующей представлению  $E$  группы  $C_4$ , мы получим то же представление группы  $D_4$ , поскольку указанная пара представлений принадлежит одной орбите.

#### § 4. КЛАССИФИКАЦИЯ ГРУПП ЛИ

В гл. 9 мы последовательно рассмотрели конечные точечные группы, но что касается непрерывных групп Ли, введенных в гл. 7, то пока были приведены лишь неко-

торые примеры, существенные для отдельных физических проблем. В данном параграфе мы дадим последовательное описание групп Ли, чтобы читатель смог разобраться в групповом аспекте любой новой проблемы симметрии.

Начнем с нескольких новых определений. Если у группы отсутствуют инвариантные подгруппы, то она называется простой. Если у группы отсутствуют лишь абелевы инвариантные подгруппы, то она называется полупростой; таким образом, простые группы образуют подмножество полупростых. Иногда для группы, имеющей абелеву инвариантную подгруппу, пользуются термином «неполупростая». В силу сказанного в предыдущем параграфе неполупростые группы можно рассматривать как полупрямые произведения, а потому можно сосредоточить внимание лишь на полупростых группах. Более того, можно показать, что если группа Ли является полупростой, но не простой, то ее можно записать в виде прямого произведения простых групп. Поэтому в дальнейшем мы ограничимся классификацией только простых групп Ли.

Начнем с того, что введем  $r$  инфинитезимальных операторов  $X_p$ , перестановочные соотношения для которых (гл. 7, § 2) таковы:

$$[X_q, X_p] = \sum_t c_{qp}^t X_t. \quad (20.24)$$

Набор операторов с таким законом умножения часто называют алгеброй Ли. Если составить матрицу

$$g_{qs} = \sum_{p,t} c_{qp}^t c_{st}^p \quad (20.25)$$

из структурных констант  $c_{qp}^t$ , то группа будет полупростой, если  $\det g \neq 0$ . Это так называемый критерий Картана, который нетрудно вывести, если заметить, что из существования абелевой инвариантной подгруппы следует существование подмножества  $X_i$ , операторов  $X_i$ , удовлетворяющих соотношениям

$$[X_{q'}, X_{p'}] = 0, [X_{q'}, X_t] = \sum_{s'} c_{q'}^{s'} X_{s'},$$

где штрихом отмечены операторы, входящие в подмножество.

Для любой данной группы имеется большая свобода в определении операторов  $X_p$ , поскольку любая действительная линейная комбинация  $X_p$  сама является инфинитезимальным оператором. Строя классификацию различ-

ных групп Ли, мы, разумеется, будем выбирать наиболее удобный набор. Найдем прежде всего максимальный набор коммутирующих друг с другом инфинитезимальных операторов и обозначим его через  $H_i$ . Число операторов в наборе  $H_i$  называется рангом группы и обозначается через  $l$ . Для  $l$  выполняется неравенство  $1 \leq l \leq r$ , поскольку любой оператор коммутирует сам с собой. Оставшиеся операторы  $E_\alpha$  можно выбрать так, чтобы они были «собственными операторами» набора  $H_i$  в том смысле, что

$$[H_i, E_\alpha] = \alpha_i E_\alpha^i \quad (20.26)$$

для некоторого набора «собственных значений»  $\{\alpha_i\}$ . Тот факт, что операторы  $E_\alpha$  можно выбрать таким образом, чтобы они были собственными векторами всех операторов  $H_i$ , следует из перестановочности операторов  $H_i$ ; это доказывается в обычной теории собственных векторов. Если известны структурные константы для любого набора  $X_p$ , то можно найти  $H_i$ , а затем построить  $E_\alpha$ . Набор  $l$  собственных значений  $\alpha_i$  будем рассматривать как  $l$ -мерный вектор  $\alpha = (\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_l)$ ; его называют корневым вектором, причем можно показать, что для полупростых групп отсутствует вырождение, т. е. ни одна пара операторов  $E$  не имеет одинаковых нулевых корневых векторов. (Разумеется, можно рассматривать  $H_i$  тоже как собственные векторы с  $\alpha = 0$ , и в этом особом случае имеется вырождение порядка  $l$ .) Таким образом, корневого вектора  $\alpha$  достаточно, чтобы полностью характеризовать представление  $E_\alpha$ .

Чтобы найти полную систему перестановочных соотношений между новыми наборами операторов  $H_i$  и  $E_\alpha$ , нужно вычислить коммутатор  $[E_\alpha, E_\beta]$ , но на основании тождества Якоби для дейоного коммутатора мы имеем

$$[H_i, [E_\alpha, E_\beta]] = [[H_i, E_\alpha], E_\beta] + [E_\alpha, [H_i, E_\beta]] = = (\alpha_i + \beta_i) [E_\alpha, E_\beta].$$

Таким образом, коммутатор  $[E_\alpha, E_\beta]$  сам является собственным оператором набора  $H_i$  с корневым вектором  $\alpha + \beta$ . Поэтому если  $\alpha + \beta \neq 0$ , то можно написать

$$[E_\alpha, E_\beta] = N_{\alpha\beta} E_{\alpha+\beta} \quad (20.27)$$

с некоторым нормировочным множителем, который зависит от определения  $E_\alpha$ . Если  $\alpha + \beta = 0$ , то коммутатор  $[E_\alpha, E_\beta]$  коммутирует с операторами  $H_i$  и, следовательно, должен быть их линейной комбинацией, так что можно написать

$$[E_\alpha, E_{-\alpha}] = \sum_i \alpha^i H_i. \quad (20.28)$$

Множители  $\alpha^i$  тоже зависят от выбора операторов  $H_i$  и нормировки оператора  $E_\alpha$ ; для удобства можно положить  $\alpha^i = \alpha_i$ .

В этом случае нужно сначала выбрать  $H_i$  так, чтобы выполнялось условие  $g_{ij} = \delta_{ij}$ , используя процесс Шмидта, поскольку величина  $g_{ik} = \sum_\alpha \alpha_i \alpha_k$  имеет вид скалярного произведения. Затем следует ввести величину  $c_{pqs} = \sum_t g_{pt} c_{qs}^t$  и показать, что она антисимметрична по трем индексам. Тогда мы находим

$$c_{k\alpha-\alpha} = \sum_t g_{kt} c_{\alpha-\alpha}^t = c_{\alpha-\alpha}^k = \alpha^k,$$

$$c_{k\alpha-\alpha} = c_{-\alpha k\alpha} = \sum_t g_{-\alpha t} c_{k\alpha}^t = g_{-\alpha} \alpha c_{k\alpha}^\alpha = \alpha_k g_{\alpha-\alpha}.$$

Таким образом, величина  $\alpha^k$  пропорциональна величине  $\alpha_k$  и при соответствующем выборе нормировки оператора  $E_\alpha$  они будут равны.

Можно сначала классифицировать группы Ли по их рангу  $l$ , а затем при каждом значении  $l$  найти возможные наборы корневых векторов  $\alpha$  в  $l$ -мерном пространстве. Как мы увидим, эти векторы должны удовлетворять весьма жестким условиям, так что может существовать лишь небольшое число решений. Первое свойство корневых векторов состоит в том, что если  $\alpha$  — корневой вектор, то  $-\alpha$  — тоже корневой вектор.

Это можно показать, построив матричные элементы  $g_{\alpha\beta}$  по определению (20.25) с учетом равенства нулю некоторых структурных констант в силу формул (20.26) — (20.28). Тогда при данном  $\alpha$  все матричные элементы обращаются в нуль, если только не выполняется условие  $\beta = -\alpha$ . Если не существует корневого вектора  $-\alpha$ , то вся строка  $\alpha$  матрицы  $g$  обращается в нуль, откуда следует равенство  $\det g = 0$  и нарушение критерия полупростоты Картана

Указанное свойство позволяет нам разделить корневые векторы на положительные и отрицательные соответственно знаку первой компоненты  $\alpha_1 > 0$  или  $\alpha_1 < 0$ . Если



$\alpha_1 = 0$ , то положительность или отрицательность корневого вектора определяется знаком второй компоненты и т. д. Упорядочение операторов  $H_i$ , а значит, и компонент  $\alpha_i$  может быть произвольным. Число  $1/2(r-l)$  положительных корневых векторов, вообще говоря, больше  $l$ , так что они не являются линейно-независимыми. В качестве базиса можно по-прежнему использовать  $l$  векторов  $(1, 0, 0, \dots)$ ,  $(0, 1, 0, \dots)$  и т. д., но удобнее пользоваться базисом, построенным на корневых векторах, в частности базисом из так называемых простых положительных корневых векторов. Последние определяются так, чтобы их нельзя было записать в виде суммы двух других положительных корневых векторов. Можно показать, что существует ровно  $l$  простых положительных корневых векторов и что они линейно-независимы. Следующее свойство состоит в том, что если  $\alpha$  и  $\beta$  — два простых положительных корневых вектора, то вектор  $\beta - \alpha$  вообще не может быть корневым.

Пусть  $\beta - \alpha = \gamma$ , где  $\gamma$  — положительный корневой вектор; тогда  $\beta = \gamma + \alpha$ , что противоречит определению вектора  $\beta$  как простого корневого. Так же доказывается, что  $\gamma$  не может быть отрицательным корневым вектором.

Однако могут существовать корневые векторы вида  $\beta + \alpha$ , и, вообще говоря, будут существовать последовательности корневых векторов  $\beta + \alpha, \beta + 2\alpha, \dots, \beta + n\alpha$ , обрывающиеся на некотором целом числе  $n$ ; точнее, вектор  $\beta + (n+1)\alpha$  уже не является корневым. Число  $n$  можно связать с самими корневыми векторами соотношением

$$n = -2(\alpha \cdot \beta)/(\alpha \cdot \alpha), \quad (20.29)$$

где скалярное произведение определено как  $\alpha \cdot \beta = \sum_i \alpha_i \beta_i$ . Этот общий результат можно следующим образом вывести из рекуррентного соотношения. Пусть  $m$  — целое число и  $m \leq n$ ; тогда в силу тождества Якоби имеем

$$\begin{aligned} [E_{\beta+m\alpha}, [E_\alpha, E_{-\alpha}]] &= [[E_{\beta+m\alpha}, E_\alpha], E_{-\alpha}] + [E_\alpha, [E_{\beta+m\alpha}, E_{-\alpha}]], \\ \text{т. е. } \sum_i \alpha_i [E_{\beta+m\alpha}, H_i] &= N_{\beta+m\alpha, \alpha} [E_{\beta+m\alpha+\alpha}, E_{-\alpha}] + \\ &+ N_{\beta+m\alpha, -\alpha} [E_\alpha, E_{\beta+m\alpha-\alpha}], \end{aligned}$$

так что окончательно

$$-\sum_i \alpha_i (\beta_i + m\alpha_i) E_{\beta+m\alpha} = (N_{\beta+m\alpha}, \alpha N_{\beta+m\alpha+\alpha}, -\alpha - \\ - N_{\beta+m\alpha}, -\alpha N_{\beta+m\alpha-\alpha}, \alpha) E_{\beta+m\alpha}.$$

Если для краткости ввести обозначение  $A_m = N_{\beta+m\alpha}, \alpha \times N_{\beta+m\alpha}, -\alpha, \alpha$ , то получим

$$\alpha \cdot \beta + m\alpha \cdot \alpha = -A_m + A_{m-1}. \quad (20.30)$$

Поскольку, как показано выше, разность  $\beta - \alpha$  не является корневым вектором, имеем  $N_{\beta-\alpha} = 0$ , откуда  $A_{-1} = 0$ . Тогда из рекуррентного соотношения (20.30) следует, что

$$-A_m = (m+1)\alpha \cdot \beta + \frac{1}{2}m(m+1)\alpha \cdot \alpha. \quad (20.31)$$

Если  $n$  — последний номер последовательности (см. выше) то  $N_{\beta+n\alpha}, \alpha = 0$  и  $A_n = 0$ ; отсюда с учетом равенства (20.31) приходим к соотношению (20.29).

Из данного нами определения скалярного произведения следует неравенство Шварца  $(\alpha \cdot \beta)^2 \leq (\alpha \cdot \alpha)(\beta \cdot \beta)$ , и, стало быть, из равенства (20.29) и соответствующего равенства  $p = -2(\alpha \cdot \beta)/(\beta \cdot \beta)$  для  $\beta$ -последовательности  $\alpha + \beta$ ,  $\alpha + 2\beta$ , ...,  $\alpha + p\beta$  ( $p$  — целое число) имеем

$$-(\alpha \cdot \beta)/(\alpha \cdot \alpha)^{1/2}(\beta \cdot \beta)^{1/2} = + \left( \frac{1}{4} np \right)^{1/2} \leq 1. \quad (20.32)$$

Можно считать, что последним соотношением определяется угол между векторами  $\alpha$  и  $\beta$ . Из тех же двух равенств можно найти отношение длин векторов

$$(\beta \cdot \beta)/(\alpha \cdot \alpha) = n/p. \quad (20.33)$$

Значения числа  $n$  (и числа  $p$ ) строго ограничены равенством (20.32), в силу которого  $np = 0, 1, 2, 3$ . (Значение 4 не допускается, так как тогда мы имели бы  $\alpha = -\beta$ , что противоречит определению величин  $\alpha$  и  $\beta$  как двух положительных корневых векторов.) В итоге мы получаем возможность перечислить все возможные наборы простых положительных корневых векторов и на этой основе всех корневых векторов вообще с помощью всех возможных последовательностей. В некоторых случаях удастся построить  $\beta$ -последовательность на корневых векторах  $\beta + m\alpha$ ,

хотя векторы, кратные  $\beta + \alpha$  [например,  $m(\beta + \alpha)$  при  $m > 1$ ], недопустимы.

Перечисление корневых векторов выполняется очень наглядно методом так называемых схем (диаграмм) Дынкина. На них простой положительный корневой вектор изображается точкой. Для каждой пары таких векторов величина  $nr$  (определяющая угол между векторами) изображается  $nr$  прямыми линиями, соединяющими соответствующие точки. Относительную длину двух корневых векторов, соединенных такими прямыми, указывают иногда, помещая над точками значения скалярного произведения  $\alpha \cdot \alpha$ . Число таких значений здесь очень ограничено: при  $nr=1$  мы имеем  $n=r=1$  и, согласно формуле (20.33), длины векторов одинаковы; при  $nr=2$  один из векторов вдвое, а при  $nr=3$  — втрое длиннее другого. Задача определения всех возможных диаграмм Дынкина значительно облегчается, если руководствоваться следующими правилами, вытекающими из написанных выше соотношений.

1. Следует рассматривать лишь связанные диаграммы, так как если диаграмма распадается на две не связанные между собой части, т. е. не соединенные линиями, то это означает, что корневые векторы в обеих частях диаграммы взаимно ортогональны ( $\alpha \cdot \beta = 0$ ); следовательно, группа представляет собой прямое произведение и не является простой.

2. Среди диаграмм отсутствуют замкнутые петли. Пусть, например, векторы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  образуют замкнутый треугольник из одиночных линий. Тогда, согласно формуле (20.32), при  $nr=1$  имеем  $\tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta} = \tilde{\beta} \cdot \tilde{\gamma} = \tilde{\gamma} \cdot \tilde{\alpha} = -1/2$ , где для краткости мы ввели обозначения  $\tilde{\alpha} = \alpha/(\alpha \cdot \alpha)^{1/2}$  и т. д. Далее, поскольку векторы  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  должны быть линейно-независимы, должна быть возможна запись  $\tilde{\alpha} = b\tilde{\beta} + c\tilde{\gamma} + \xi$ , где  $\xi$  — вектор, ортогональный векторам  $\beta$  и  $\gamma$  и при этом отличный от нуля. Такая запись означает проектирование вектора  $\tilde{\alpha}$  на подпространство, определенное векторами  $\beta$  и  $\gamma$ , причем вектор  $\xi$  лежит в ортогональном дополнительном пространстве. Коэффициенты  $b$  и  $c$  даются в этом случае соотношениями  $\tilde{\beta} \cdot \tilde{\alpha} = b + c\tilde{\beta} \cdot \tilde{\gamma}$  и  $\tilde{\gamma} \cdot \tilde{\alpha} = b\tilde{\gamma} \cdot \tilde{\beta} + c$ . Учитывая, что каждое входящее в них скалярное произведение равно  $(-1/2)$ , получаем  $\xi \cdot \xi = 0$ , т. е. приходим к противоречию. Замкнутые петли с большим числом сто-

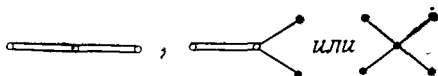
рон исключаются по тем же соображениям, а использование двойных линий только усиливает противоречие, так как приводит к результату  $\xi \cdot \xi < 0$ .

3. Максимальное число линий, исходящих из одной точки диаграммы, не может быть больше трех. Пусть имеются корневые векторы  $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_p$  и все они соединены с одним корневым вектором  $\beta$ . Тогда никакие два вектора  $\alpha_i$  не могут быть соединены друг с другом без нарушения правила 2; таким образом, корневые векторы  $\alpha_i$  должны быть попарно взаимно ортогональными:  $\alpha_i \cdot \alpha_j = 0$  ( $i \neq j$ ). Поэтому если бы мы, как и при доказательстве свойства 2, написали  $\tilde{\beta} = \sum_{i=1}^p a_i \tilde{\alpha}_i + \xi$ , где  $\xi \cdot \tilde{\alpha}_i = 0$  при всех  $i$ , то коэффициенты этого разложения давались бы соотношением  $a_i = \tilde{\beta} \cdot \tilde{\alpha}_i$ , причем

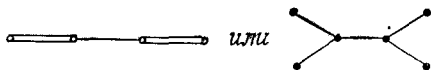
$$\xi \cdot \xi = 1 - \sum_{i=1}^p a_i^2 < 1 - \frac{1}{4} p.$$

Очевидно, что для того, чтобы выполнялось условие  $\xi \cdot \xi < 0$ , должно выполняться неравенство  $p \leq 3$ .

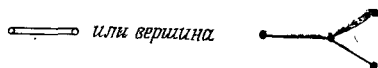
4. Правилем 3 исключаются диаграммы, содержащие элементы



Рассуждения, приводящие к правилу 3, можно обобщить и показать, что если в эти элементы вставить любое число однократных линий, например



то возникает аналогичное противоречие. Отсюда следует вывод, что ни одна из диаграмм Дынкина не может содержать более одного двойного соединения



и ни в одной диаграмме не могут содержаться одновременно двойная линия и вершина.

Таким образом, возможны лишь четыре типа диаграмм Дынкина.

1. Цепочка из одинарных линий

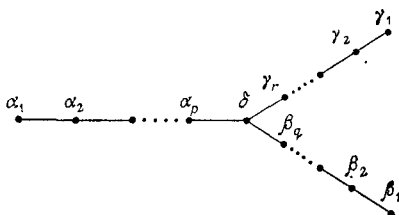


2. Цепочка с одной двойной линией, причем  $p + q + 2l = l$ :



(Несимметричные обозначения будут удобны далее при построении алгебры.)

3. Цепочка с одной вершиной, от которой в трех направлениях отходит соответственно  $p$ ,  $q$  и  $r$  корневых векторов, причем  $p + q + r + 1 = l$ :



(Углы между направлениями произвольны и не имеют значения.)

4. Одна тройная линия



На диаграммах типа 1 все простые корни имеют одинаковую длину и соответствующую группу можно отождествить со специальной унитарной группой  $SU_{l+1}$ . Чтобы показать это, нужно построить с помощью диаграммы перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов, а затем сравнить их с перестановочными соотношениями для группы  $SU_{l+1}$  (гл. 18, § 8); при этом ранг  $l$  может принимать любые целые значения. В случае диаграмм типа 4 нельзя добавить ни одного корня, так как в противном случае в одной вершине встречалось бы

более трех линий. Поэтому для диаграммы типа 4 существует только одна группа, имеющая ранг 2—она обычно обозначается через  $G_2$ ; длины корней относятся в этом случае как  $\sqrt{3}:1$ .

В случае диаграммы типа 2 необходимо уточнить, в каком месте цепочки находится двойная линия, т. е. чему равны  $p$  и  $q$  (без ограничения общности можно выбрать  $p \geq q$ ). Как и ранее, напомним

$$\tilde{\gamma} = \sum_i^p a_i \tilde{\alpha}_i + \sum_i^{q+1} b_i \tilde{\beta}_i + \xi,$$

где  $\xi \cdot \tilde{\alpha}_1 = \xi \cdot \tilde{\beta}_l = 0$ , откуда

$$\tilde{\alpha}_j \cdot \tilde{\gamma} = \sum_i a_i (\tilde{\alpha}_i \cdot \tilde{\alpha}_j) = a_j - \frac{1}{2} (a_{j+1} + a_{j-1}),$$

что приводит к аналогичному результату для  $\tilde{\beta}_j \cdot \tilde{\gamma}$ . Но  $\tilde{\alpha}_j \cdot \tilde{\gamma} = 0$  всегда, кроме случая, когда  $\tilde{\alpha}_p \cdot \tilde{\gamma} = -1/2$ , откуда можно получить  $a_p = -p/(p+1)$  и аналогично  $b_q = -\sqrt{2}q/(q+1)$ . Подставив эти значения в выражение  $\xi \cdot \xi = 1 - \sum_j a_j \tilde{\alpha}_j \cdot \tilde{\gamma} - \sum_i b_i \tilde{\beta}_i \cdot \gamma = 1 - a_p \tilde{\alpha}_p \cdot \gamma - b_{q+1} \tilde{\beta}_{q+1} \cdot \tilde{\gamma} =$   
 $= 1 + \frac{1}{2} a_p + b_{q+1} / \sqrt{2},$

нетрудно получить условие  $p \cdot q < 2$  как следствие условия  $\xi \cdot \xi > 0$ . Таким образом, либо  $q=0$  при любом  $p$ , либо  $q=p=1$ . Следовательно, диаграммы типа 2 могут иметь общий вид



при любом  $l$ , или, в частном случае, когда  $l=4$ , вида



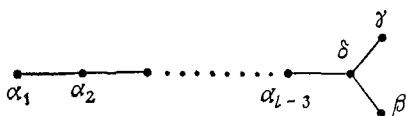
В первом случае имеется две различные диаграммы Дынкина, поскольку, хотя  $\alpha_i$  и  $\gamma$  имеют одинаковую длину (они соединены одинарными линиями), отношение квадратов длин векторов  $\beta$  и  $\gamma$  должно быть равно 2. Таким образом, длина корневого вектора  $\beta$  либо в  $\sqrt{2}$  раз меньше, либо в  $\sqrt{2}$  раз больше длины других векторов. Первой

из этих двух возможностей соответствуют группы вращений нечетного порядка  $\mathcal{R}_{2l+1}$ , а второй — симплектическая группа  $Sp_{2l}$  (о приложениях этих групп см. гл. 18, § 10). Особая диаграмма с  $p=q=1$  соответствует группе  $F_4$ .

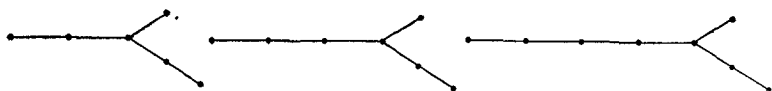
Ограничения, налагаемые на значения  $p$ ,  $q$  и  $r$  в диаграммах типа 3, выводятся так же: величину  $\delta$  представляют в виде суммы по всем  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$  и  $\gamma_i$ , причем вектор  $\xi$  берется ортогональным пространству  $\alpha_i$ ,  $\beta_i$ ,  $\gamma_i$ . В этом случае вновь  $a_p = -p/(p+1)$  с соответствующими выражениями для других коэффициентов, причем  $\xi \cdot \xi = 1 + 1/2 (a_p + b_q + c_r)$ . Тогда условие  $\xi \cdot \xi > 0$  эквивалентно условию

$$p/(p+1) + q/(q+1) + r/(r+1) < 2. \quad (20.34)$$

В силу симметрии диаграмм можно без ограничения общности выбрать  $p \geq q \geq r$ , причем  $r \geq 1$  (иначе диаграмма сводится к типу 1). Если начать с низших значений  $q = r = 1$ , то из условия (20.34) следует условие  $p/(p+1) = 1$ , которое выполняется при всех  $p$  и приводит к диаграмм общего вида



Такая диаграмма соответствует группам вращений четного порядка  $\mathcal{R}_{2l}$ . При следующем значении  $q$ , а именно при  $q=2$  и  $r=1$ , условие (20.34) приводит к неравенству  $p/(p+1) < 5/6$ , которое выполняется только при  $p=2, 3$  или 4. При больших значениях  $q$  и  $r$  вообще нет никаких решений. Таким образом, имеются еще три особые группы  $E_6$ ,  $E_7$  и  $E_8$ , соответствующие диаграммам Дынкина



Интересно отметить совпадение решения неравенства (20.34) (иногда называемого диофантовым) при  $r=1$  с решением уравнения (9.3), возникавшего при классификации точечных групп.

Если две группы являются изоморфными или гомеоморфными и, таким образом, имеют одинаковые структурные константы, то это можно выявить по одинаковым диаграммам Дынкина. Так, например, группы  $\mathcal{R}_6$  и  $SU_4$  имеют одну и ту же диаграмму



Группы  $\mathcal{R}_3$  и  $SU_2$  представляются почти тривиальной диаграммой — одной точкой. В проведенной выше классификации нет группы  $\mathcal{R}_4$ , поскольку она имеет структурные константы, одинаковые с прямым произведением  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$ , и, значит, не является простой группой. Такая структура по существу предполагается уже тем, что, положив  $l=2$  в диаграмме, соответствующей группе  $\mathcal{R}_{2l}$ , мы получим две отдельные (несвязанные) точки (вершины), а именно такая диаграмма и должна соответствовать группе  $\mathcal{R}_3 \times \mathcal{R}_3$ .

Чтобы найти все корневые векторы, а следовательно, и перестановочные соотношения по данной диаграмме Дынкина, нужно построить соответствующую звезду, как говорилось выше в данном параграфе. Возьмем для примера группу  $SU_3$  (гл. 11, § 6 и гл. 18, § 7). Диаграмма Дынкина для нее имеет вид



что означает  $l=2$  при наличии двух одинаковых корней, удовлетворяющих условию  $\tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta} = -1/2$ . Следовательно, согласно формуле (20.29), звезда содержит еще лишь сумму  $\alpha + \beta$  (и, разумеется, соответствующие три отрицательных корневых вектора); таким образом, всего имеется шесть корней. Поскольку в этом случае  $l=2$ , можно изобразить все корни в двух измерениях; при этом, поскольку скалярное произведение  $\tilde{\alpha} \cdot \tilde{\beta}$  равно  $-1/2$ , угол между корневыми векторами равен  $120^\circ$  (рис. 20.1). Поскольку же угол равен  $120^\circ$ , длины векторов  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\alpha + \beta$  одинаковы. Разумеется, полученный результат согласуется с рис. 11.3 для шести инфинитезимальных операторов  $T_\pm$ ,  $U_\pm$ ,  $V_\pm$  (в обозначениях гл. 11). (Отношение масштабов по двум осям на указанных рисунках различается в  $\sqrt{3}/2$  раз; см. гл. 11, § 6.) Наконец, чтобы получить перестановочные соотношения (20.26) — (20.28), нужно выбрать базис



и, следовательно, определить  $H_1$  и  $H_2$ . Направим ось 2 вдоль вектора  $\alpha$ , а ось 1 — перпендикулярно оси 2 (это согласуется с тем, что векторы  $\alpha$  и  $\beta$  — простые положительные корни). Образуя векторы единичной длины,

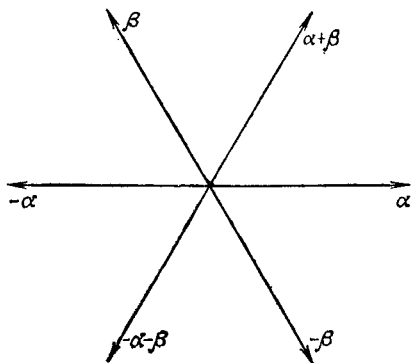


Рис. 20.1.

получаем

$$\begin{aligned}
 [H_2, E_\alpha] &= E_\alpha, \quad [H_2, E_\beta] = -\frac{1}{2} E_\beta, \quad [H_2, E_{\alpha+\beta}] = \frac{1}{2} E_{\alpha+\beta}, \\
 [H_1, E_\alpha] &= 0, \quad [H_1, E_\beta] = \frac{1}{2} 3^{1/2} E_\beta, \quad [H_1, E_{\alpha+\beta}] = \frac{1}{2} 3^{1/2} E_{\alpha+\beta}, \\
 [E_\alpha, E_{-\alpha}] &= H_2, \quad [E_\beta, E_{-\beta}] = -\frac{1}{2} H_2 + \frac{1}{2} 3^{1/2} H_1, \\
 [E_{\alpha+\beta}, E_{-\alpha-\beta}] &= \frac{1}{2} H_2 + \frac{1}{2} 3^{1/2} H_1.
 \end{aligned}$$

Остающиеся перестановочные соотношения даются формулой (20.27), но имеется неоднозначность в выборе нормировочных множителей, поскольку относительные величины операторов  $E$  еще не определены. Вообще говоря, это можно сделать так, чтобы операторы  $H$  были эрмитовы, а для операторов  $E$  выполнялось соотношение  $E_\alpha^\dagger = -E_{-\alpha}$ , причем постоянные величины  $N$  были бы действительными. Это позволяет вывести общее условие  $N_{-\alpha-\beta} = -N_{\alpha\beta}$  и, далее, из выражения для двойного коммутатора  $[[E_\alpha, E_\beta], E_{-\alpha-\beta}]$  еще одно условие  $N_{\alpha\beta} = N_{\beta, -\alpha-\beta}$ . Используя также тривиальное соотношение  $N_{\alpha\beta} = -N_{\beta\alpha}$ , можно

определить постоянные  $N_{\alpha\beta}$  из формулы (20.31) (с точностью до фазового множителя). В примере с группой  $SU_3$  это дает  $N_{\alpha\beta} = \sqrt{1/2}$ , откуда имеем

$$[E_\alpha, E_\beta] = \sqrt{1/2} E_{\alpha+\beta}, \quad [E_{\alpha+\beta}, E_{-\beta}] = \sqrt{1/2} E_\alpha, \\ [E_{\alpha+\beta}, E_{-\alpha}] = -\sqrt{1/2} E_\beta.$$

Как нетрудно убедиться, все эти перестановочные соотношения согласуются с соотношениями (11.3), если положить

$$H_2 = T_z, \quad H_1 = 1/2 \sqrt{3} Y, \quad E_\alpha = T_+ / \sqrt{2}, \\ E_\beta = U_+ / \sqrt{2}, \quad E_{\alpha+\beta} = V_- / \sqrt{2}.$$

В большей части данного параграфа рассматривались инфинитезимальные операторы  $X_p$  или более удобные линейные комбинации  $H_i$  и  $E_\alpha$ . Конечные элементы группы образуются также (гл. 7, § 2) в виде экспоненциальных функций действительных линейных комбинаций операторов  $X_p$ ; правда, можно определить и так называемое комплексное расширение группы Ли, допустив комплексные значения коэффициентов в линейных комбинациях, содержащих  $X_p$ . В унитарном представлении операторы  $X_p$  должны быть антиэрмитовыми (гл. 7, § 2), так что из всякого эрмитова оператора  $H_i$  можно получить инфинитезимальный оператор, умножив его на  $\sqrt{-1}$ . Для каждой пары  $E_{\pm\alpha}$  имеется соответствующая пара антиэрмитовых инфинитезимальных операторов  $i(E_\alpha + E_{-\alpha})$  и  $(E_\alpha - E_{-\alpha})$ . Заметим, что, строго говоря,  $E_\alpha$  не является инфинитезимальным оператором. Простейшим примером может служить группа  $\mathcal{R}_3$ , где (гл. 7) три инфинитезимальных оператора таковы:

$$X_x = -iJ_x = -\frac{1}{2}i(J_+ + J_-), \quad X_y = -iJ_y = -\frac{1}{2}(J_+ - J_-) \\ \text{и } X_z = -iJ_z.$$

Здесь  $J_z$  играет роль единственного оператора  $H$ , а повышающий и понижающий операторы  $J_\pm$  соответствуют операторам  $E_{\pm\alpha}$ , как и должно быть в случае группы ранга  $l=1$ .

По простым положительным корням и диаграммам Дынкина можно находить также неприводимые представления групп Ли, что является обобщением метода, которым мы пользовались ранее в гл. 7, § 4, п. Б и гл. 18, § 8.

## § 5. МАТРИЦЫ ВРАЩЕНИЙ

Матрицы неприводимых представлений  $\{D_{m'm}^{(j)}(\mathbf{R})\}$  для элемента  $\mathbf{R}$  группы  $\mathcal{R}_3$  были определены в гл. 7 в основных выражениях (7.39) и (7.40) для матричных элементов инфинитезимального оператора  $\mathbf{J}$  и соотношением

$$\mathbf{T}(\mathbf{R}) = \exp \mathbf{a} \cdot \mathbf{X} = \exp (-i \mathbf{a} \cdot \mathbf{J}) \quad (20.35)$$

между оператором конечных вращений и инфинитезимальными операторами. Здесь, как и в гл. 7, § 4, вращение

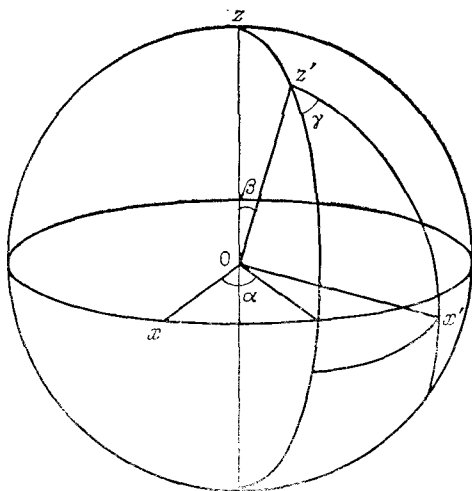


Рис. 20.2.

параметризуется вектором  $\mathbf{a}$ . Матрицы  $D_{m'm}^{(j)}(\mathbf{R})$  часто называют матрицами вращений. Хотя мы иногда использовали свойства этих матриц, мы еще не пытались представить их как функции параметров  $\mathbf{a}$ ; единственное исключение — частный случай  $j = 1/2$  в гл. 18, § 13, п. В. Как видно из этого примера, параметры  $\mathbf{a}$  не очень

удобны, и принято параметризовать вращения тремя углами Эйлера  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ . [Углы Эйлера  $\alpha$ ,  $\beta$  и  $\gamma$  не следует смешивать с матричными элементами  $\alpha$  и  $\beta$  матрицы  $SU_2$  (18.32), для которой, к сожалению, приняты такие же обозначения.] При такой параметризации произвольное вращение определяется положением «новых» осей координат  $x'$ ,  $y'$ ,  $z'$ , полученных в результате поворота «старых» осей  $x$ ,  $y$ ,  $z$ . Введем обычные полярные углы (подобно углам  $\theta$  и  $\varphi$  для точки  $\mathbf{r}$ ), определяющие положение оси  $z'$  относительно исходных осей, и обозначим их, как это принято, через  $\beta$  и  $\alpha$ ; их области изменения таковы:  $0 \leq \beta \leq \pi$ ,  $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ . Другими словами,  $\beta$  — это угол между осями  $z$  и  $z'$ , а  $\alpha$  — между осью  $x$  и проекцией оси  $z'$  на плоскость  $xy$  (рис. 20.2). Остается лишь определить положение оси  $x'$  (а тем самым и оси  $y'$ ), для чего достаточно указать угол  $\gamma$  между плоскостями  $Ozz'$  и  $Oz'x'$ . Произвольное вращение удобно выражается в виде произведения трех простых вращений вокруг исходных осей. Заметим, что если  $\gamma = 0$ , то вращение представляется в виде произведения  $R_z(\alpha)R_y(\beta)$ . При этом поворот на угол  $\beta$  перемещает ось  $x$  по широте в направлении к «югу», а поворот на угол  $\alpha$  перемещает ту же ось по долготе, если употребить названия географических координат. [Последовательность этих вращений существенна, поскольку при обратном их порядке поворот на угол  $\beta$  проводился бы вокруг оси, получаемой из  $Oy$  в результате вращения  $R_z(\alpha)$ .] В общем случае, когда  $\gamma \neq 0$ , нужно сначала выполнить поворот на угол  $\gamma$  вокруг оси  $z$ ; тогда оператор общего вращения примет вид

$$R = R_z(\alpha) R_y(\beta) R_z(\gamma). \quad (20.36)$$

[С тем же основанием можно было бы выполнять поворот на угол  $\gamma$  вокруг оси  $z'$ , но мы вскоре увидим преимущество, которое дается проведением всех вращений в (20.36) вокруг осей из одного и того же исходного набора.]

Факторизация элемента (20.36) обеспечивает факторизацию и оператора представления (20.35):

$$T(R) = \exp(-i\alpha J_z) \exp(-i\beta J_y) \exp(-i\gamma J_z);$$

напомним, что по определению матрицы вращения выпол-

няется соотношение

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \langle jm' | T(R) | jm \rangle,$$

где через  $|jm\rangle$  обозначены базисные векторы. Отсюда с учетом диагональности оператора  $J_z$  в этом базисе сразу же получаем упрощение

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp[-i(\alpha m' + \gamma m)] \langle jm' | \exp(-i\beta J_y) | jm \rangle. \quad (20.37)$$

Оставшиеся матричные элементы можно найти, используя соотношение  $J_y = (J_+ - J_-)/2i$  и формулу (7.40) для матричных элементов операторов  $J_{\pm}$ . В качестве первого шага при выводе общего выражения для матричного элемента получим его выражение при  $j = 1/2$ . Для этого частного случая выражение для матрицы  $J_y$  было дано в формуле (8.15):

$$J_y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix},$$

откуда, очевидно,  $J_y^2 = 1/4$  и (как в гл. 18, § 13, п. В) ряд для  $\exp(-i\beta J_y)$  упрощается:

$$\begin{aligned} \exp(-i\beta J_y) &= \left(1 - \frac{1}{4}\beta^2 + \dots\right) - iJ_y \left(\beta - \frac{1}{24}\beta^3 + \dots\right) = \\ &= \cos \frac{1}{2}\beta - 2iJ_y \sin \frac{1}{2}\beta. \end{aligned}$$

Таким образом, полная матрица дается выражением

$$\begin{aligned} D_{\alpha, \beta, \gamma}^{1/2} &= \\ &= \begin{pmatrix} \exp[-\frac{1}{2}i(\alpha + \gamma)] \cos \frac{1}{2}\beta & -\exp[\frac{1}{2}i(\gamma - \alpha)] \sin \frac{1}{2}\beta \\ \exp[\frac{1}{2}i(\alpha - \gamma)] \sin \frac{1}{2}\beta & \exp[\frac{1}{2}i(\alpha + \gamma)] \cos \frac{1}{2}\beta \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (20.38)$$

Приравняв это выражение матрице (18.37), можно найти соотношение между углами Эйлера и прежними параметрами  $\mathbf{a}$ . Тогда можно показать, что весовая функция при интегрировании по группе (приложение 4, § 3) имеет вид  $\rho(\alpha, \beta, \gamma) = \sin \beta$ .

Общее выражение для матричного элемента можно вывести из выражения (20.38), рассматривая вектор

$$|jj\rangle = \left|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle_1 \left|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle_2 \cdots \left|\frac{1}{2} \frac{1}{2}\right\rangle_j$$

как произведение  $2j$  множителей, подобно волновой функции  $2j$  частиц со спинс  $j = 1/2$  и с  $m = 1/2$ . Тогда в состоянии  $|jm\rangle$  будет  $j+m$  спинов, направленных вверх, и  $j-m$  спинов, направленных вниз, и мы должны просуммировать по всем различным способам приписывания спина частицам. Число таких способов дается биномиальным коэффициентом  $C_{j-m}^{2j}$ . Вводя нормировочный множитель, с учетом выражения (20.37) получаем

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp[-i(\alpha m' + \gamma m)] \binom{2j}{j-m'}^{-1/2} \times \\ \times \binom{2j}{j-m}^{-1/2} \sum_{m'_i, m_i} \langle m'_1 m'_2 \dots | \exp(-i\beta J_y) | m_1 m_2 \dots \rangle.$$

Здесь  $m_i$  — проекция спина  $\pm 1/2$  частицы  $i$ , а сумма ограничена условиями  $\sum_i m_i = m$ ,  $\sum_i m'_i = m'$ . В силу симметрии оператора и волновых функций можно оставить только одно слагаемое, умножив его на число членов. Тогда получим

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \\ = \exp[-i(\alpha m' + \gamma m)] \binom{2j}{j-m'}^{-1/2} \binom{2j}{j-m}^{-1/2} \times \\ \times \sum_{m'_i} \langle m'_1 m'_2 \dots | \exp(-i\beta J_y) | \overbrace{++ \dots +}^{j+m} \overbrace{-- \dots -}^{j-m} \rangle. \quad (20.39)$$

Здесь у первых  $j+m$  частиц  $m = \pm 1/2$ . Поскольку оператор представляет собой произведение соответствующих операторов для каждой частицы, каждый матричный элемент в выражении (20.39) равен произведению  $2j$  матричных элементов  $\exp(-i\beta J_y)$ , взятых для матрицы  $D^{(1/2)}$  из (20.38). Для каждой частицы с одинаковыми проекциями спина слева и справа сюда входит множитель  $\cos \beta/2$ , а для каждой частицы с разными проекциями — множитель  $\pm \sin \beta/2$  соответственно случаям  $\langle - || + \rangle$  и  $\langle + || - \rangle$ . Единственным существенным параметром в сумме по  $m'_i$  является число  $x$  частиц на первых  $j+m$  местах, имеющих спин  $1/2$ . В итоге, учитывая множители  $c_x^{j+m}$  и  $c_{j+m'-x}^{j-m}$ , оп-

ределяющие число способов ориентации спинов, получаем

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) = \\ = \exp[-i(\alpha m' + \gamma m)] \begin{pmatrix} 2j \\ j-m' \end{pmatrix}^{-1/2} \begin{pmatrix} 2j \\ j-m \end{pmatrix}^{1/2} \times \\ \times \sum_x \begin{pmatrix} j+m \\ x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j-m \\ j+m'-x \end{pmatrix} \times \\ \times (-1)^{j+m'-x} (\cos^{1/2} \beta)^{2x-m-m'} (\sin^{1/2} \beta)^{2j-2x+m+m'}. \quad (20.40)$$

Этот результат несколько упрощается при подстановке выражений для биномиальных коэффициентов.

## ЛИТЕРАТУРА<sup>1)</sup>

Дополнительные сведения о динамических группах можно найти в книге Энгфилда из литературы к гл. 19, а также в книге:

1. *Wybourne B. G.*, Classical Groups for Physicists, Wiley-Interscience, New York, 1974.

Эффект Яна—Теллера подробно рассматривается в книге:

2. *Sturge M. D.*, Jahn-Teller Effects in Solids, Solid State Physics, vol. 20, Academic Press, New York, 1967.

См. также обзор:

3\*. *Хомский Д. И.* и др.—УФН, 1982, т. 39, в. 5.

Экспериментальное подтверждение эффекта Яна—Теллера см. в работе:

4. *Dixon R. N.*, Molec. Phys., 20, 113 (1971).

Спонтанному нарушению симметрии посвящена монография:

5. *Guralnik G. S., Hagen C. R., Kibble T. W. B.*, Broken Symmetries and the Goldstone Theorem, Advances in Particle Physics, vol 2, Wiley-Interscience, New York, 1968.

Хотя основное внимание в ней уделяется теории элементарных частиц, имеется раздел по нерелятивистским системам. См. также обзор по калибровочным теориям слабых взаимодействий:

6. *Beg M. B., Sirlin A.*, A. Rev. nucl. Sci., 24.

7\*. *Тейлор Дж.* Калибровочные теории слабых взаимодействий.—М.: Мир, 1978.

Более строго вопрос об использовании нормальных подгрупп при построении неприводимых представлений рассмотрен в книге Ломонта из литературы к гл. 15.

Структура групп Ли и их классификация математически строго изложены в книге:

8. *Gilmore R.*, Lie Groups, Lie Algebras and Some of their Applications, Wiley-Interscience, New York, 1974.

По представлениям групп Ли можно рекомендовать книги Бернера из литературы к гл. 4, Литтлвуда из литературы к гл. 17 и Вайбурна (см. выше — [1]).

<sup>1)</sup> Литература со звездочкой добавлена при переводе.—Прим. ред.

9.\* Постников М. М. Группы Ли и алгебры Ли.— М.: Наука, 1982. В литературе к гл. 7 (особенно в книге Бринка и Сэтчлера) можно найти указания по дальнейшему чтению относительно матриц вращений.

## ЗАДАЧИ

- 20.1. Покажите, что группа  $D_3$  является полупрямым произведением групп  $C_3 \wedge C_2$ . Исходя из этого, найдите таблицу характеров для группы  $D_3$ , следуя методу § 3.
- 20.2. Постройте диаграмму корней для группы  $G_2$ , введенной в § 4.



# ТАБЛИЦЫ ХАРАКТЕРОВ НЕПРИВОДИ- МЫХ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ТОЧЕЧНЫХ ГРУПП

Классы обозначают символом типичного элемента (гл. 9, § 1) с поставленным перед ним числом элементов в классе. Операторы вращения и отражения иногда снабжают нижним индексом, указывающим ось вращения или зеркальную плоскость. Ось  $z$  всегда направлена вдоль главной оси вращения.

Для неприводимых представлений применяется химическая система обозначений (Маликена). Одномерные представления обозначают буквами  $A$  или  $B$ : буквой  $A$ , если характер операции вращения на наименьший возможный угол (собственного или несобственного) относительно главной оси равен  $+1$ , и буквой  $B$ , если он равен  $-1$ . Двумерные представления обозначаются через  $E$ , трехмерные — через  $T$  и четырехмерные — через  $U$ . (Пары комплексно-сопряженных представлений обозначаются тоже символом  $E$ , поскольку соответствующие состояния обычно вырождены, см. гл. 5, § 10.) Если в число групповых элементов входит инверсия, верхним индексом плюс или минус указывают четность.

В табл. П.1 даны характеры одиннадцати собственных точечных групп, входящих в первую строку табл. 9.2 (гл. 9, § 6). Изоморфные группы, находящиеся в третьей и четвертой строках табл. 9.2, естественно, имеют такие же характеры; поэтому каждая из таблиц характеров соответствует нескольким наборам символов классов и неприводимых представлений, используемых в изоморфных группах. Таблицы характеров несобственных точечных групп, содержащих операцию инверсии, могут быть получены с использованием табл. 9.2; поэтому они здесь приводятся только в тех случаях, когда соответствующая группа изоморфна одной из собственных точечных групп.

Однако группы, являющиеся прямым произведением, указаны в таблице.

Таблицы характеров двузначных представлений точечных групп представлены в табл. П.2 для одиннадцати двузначных групп, соответствующих первой строке табл. 9.2. Характеры представлений остальных групп можно вывести из соотношений, указанных в табл. 9.2.

Для групп  $\bar{C}_n$  здесь приведены только характеры элементов с символом без черты; для элементов  $\bar{G}_a$  характер равен  $-\chi(G_a)$ . В остальных таблицах приведены все существующие классы. Для классов применены два обозначения: первое из них — обычно используемое в литературе, а второе мы приводим, чтобы показать, какие именно элементы попадают в каждый из классов. Например, в группе  $\bar{D}_4$ , рассмотренной в гл. 9, § 7, имеются два класса:  $2C_4$  и  $2\bar{C}_4$ . Но, хотя элемент  $C_4$  находится в первом из них, элемент  $C_4^3$  в этот класс уже не входит, как это было в простой группе, поскольку в данном случае поворот на  $2\pi$  не является тождественной операцией. Элемент  $C_4$  находится в одном классе с элементом  $C_4^{-1} \approx \bar{E}C_4^3 = \bar{C}_4^3$ . Следует также помнить, что двойная группа  $\bar{\mathcal{G}}$ , кроме того, содержит однозначные представления, характеры которых совпадают с характерами обычной группы  $\mathcal{G}$ , составленной из элементов  $G_a$ , причем  $\chi(\bar{G}_a) = \chi(G_a)$ .

Таблица П.1

|       |       |       |   |          |
|-------|-------|-------|---|----------|
| $C_1$ |       |       | E |          |
| A     |       |       | 1 |          |
| $C_2$ |       |       | E | $C_2$    |
| $S_1$ |       |       | E | $\sigma$ |
| $S_2$ |       |       | E | I        |
| A     | $A_1$ | $A^+$ | 1 | 1        |
| B     | $A_2$ | $A^-$ | 1 | -1       |

Группы  $S_1$  и  $S_2$  часто обозначаются через  $C_s$  и  $C_i$ .

$C_{2h} \equiv C_2 \times S_2$ .

Продолжение

| $C_3$ |   | E | $C_3$           | $C_3^2$         |
|-------|---|---|-----------------|-----------------|
| A     |   | 1 | 1               | 1               |
| E     | { | 1 | $\varepsilon$   | $\varepsilon^2$ |
|       |   | 1 | $\varepsilon^2$ | $\varepsilon$   |

$$\varepsilon = \exp(2\pi i/3).$$

$$S_6 = C_3 \times S_2 \text{ (также изоморфна группе } C_6).$$

$$C_{3h} = C_3 \times S_1 \text{ (также изоморфна группе } C_6).$$

| $C_4$ |       | E | $C_4$ | $C_2$ | $C_4^3$ |
|-------|-------|---|-------|-------|---------|
|       | $S_4$ | E | $S_4$ | $C_2$ | $S_4^3$ |
| A     | A     | 1 | 1     | 1     | 1       |
| B     | B     | 1 | -1    | 1     | -1      |
| E     | E {   | 1 | $i$   | -1    | $-i$    |
|       |       | 1 | $-i$  | -1    | $i$     |

$$C_{4h} = C_4 \times S_2.$$

| $C_6$ |          | E       | $C_6$ | $C_3$            | $C_2$           | $C_3^2$ | $C_6^5$          |
|-------|----------|---------|-------|------------------|-----------------|---------|------------------|
|       | $C_{3h}$ | E       | $S_3$ | $C_3$            | $\sigma_h$      | $C_3^2$ | $S_3^5$          |
|       | $S_6$    | E       | $S_6$ | $C_3$            | 1               | $C_3^2$ | $S_6^5$          |
| A     | $A_1$    | A       | 1     | 1                | 1               | 1       | 1                |
| B     | $A_2$    | B       | 1     | -1               | 1               | 1       | -1               |
| $E_1$ | $E_1$    | $E_1$ { | 1     | $\varepsilon$    | $\varepsilon^2$ | 1       | $\varepsilon$    |
|       |          |         | 1     | $\varepsilon^2$  | $\varepsilon$   | 1       | $\varepsilon^2$  |
| $E_2$ | $E_2$    | $E_2$ { | 1     | $-\varepsilon^2$ | $\varepsilon$   | -1      | $-\varepsilon$   |
|       |          |         | 1     | $-\varepsilon$   | $\varepsilon^2$ | -1      | $-\varepsilon^2$ |

$$\varepsilon = \exp(2\pi i/3).$$

$$C_{6h} = C_6 \times S_2.$$

| $D_2$ |          |          | E | $C_{2z}$ | $C_{2y}$   | $C_{2x}$   |
|-------|----------|----------|---|----------|------------|------------|
|       |          |          | E | $C_2$    | $\sigma_y$ | $\sigma_x$ |
|       | $C_{2v}$ | $C_{2h}$ | E | $C_2$    | $\sigma_h$ | I          |
| $A$   | $A_1$    | $A^+$    | 1 | 1        | 1          | 1          |
| $B_3$ | $B_1$    | $B^+$    | 1 | -1       | -1         | 1          |
| $B_1$ | $A_2$    | $A^-$    | 1 | 1        | -1         | -1         |
| $B_2$ | $B_2$    | $B^-$    | 1 | -1       | 1          | -1         |

$$D_{2h} = D_2 \times S_2.$$

| $D_3$ |       |  | E | $2C_3$ | $3C_2$      |
|-------|-------|--|---|--------|-------------|
|       |       |  | E | $2C_3$ | $3\sigma_v$ |
| $A_1$ | $A_1$ |  | 1 | 1      | 1           |
| $A_2$ | $A_2$ |  | 1 | 1      | -1          |
| $E$   | $E$   |  | 2 | -1     | 0           |

$$D_{3d} = D_3 \times S_2 \text{ (также изоморфна группе } D_6).$$

$$D_{3h} = D_3 \times S_1 \text{ (также изоморфна группе } D_6).$$

| $D_4$ |          |          | E | $C_4^2$ | $2C_4$ | $2C_2$      | $2C_2'$     |
|-------|----------|----------|---|---------|--------|-------------|-------------|
|       |          |          | E | $C_2$   | $2C_4$ | $2\sigma_v$ | $2\sigma_d$ |
|       | $C_{4v}$ | $D_{2d}$ | E | $C_2$   | $2S_4$ | $2C_2'$     | $2\sigma_d$ |
| $A_1$ | $A_1$    | $A_1$    | 1 | 1       | 1      | 1           | 1           |
| $A_2$ | $A_2$    | $A_2$    | 1 | 1       | 1      | -1          | -1          |
| $B_1$ | $B_1$    | $B_1$    | 1 | 1       | -1     | 1           | -1          |
| $B_2$ | $B_2$    | $B_2$    | 1 | 1       | -1     | -1          | 1           |
| $E$   | $E$      | $E$      | 2 | -2      | 0      | 0           | 0           |

$$D_{4h} = D_4 \times S_2.$$

Продолжение

| $D_6$ | $C_{6v}$ | $D_{3h}$ | $D_{3d}$ | E | $C_2$      | $2C_3$ | $2C_6$ | $3C'_2$     | $3C''_2$     |
|-------|----------|----------|----------|---|------------|--------|--------|-------------|--------------|
|       |          |          |          | E | $C_2$      | $2C_3$ | $2C_6$ | $3\sigma_v$ | $3\sigma'_v$ |
|       |          |          |          | E | $\sigma_h$ | $2C_3$ | $2S_3$ | $3C_2$      | $3\sigma'_v$ |
|       |          |          |          | E | I          | $2C_3$ | $2S_6$ | $3C_2$      | $3\sigma_v$  |
| $A_1$ | $A_1$    | $A_1$    | $A_1^+$  | 1 | 1          | 1      | 1      | 1           | 1            |
| $A_2$ | $A_2$    | $A_2$    | $A_2^+$  | 1 | 1          | 1      | 1      | -1          | -1           |
| $B_1$ | $B_1$    | $A_3$    | $A_1^-$  | 1 | -1         | 1      | -1     | 1           | -1           |
| $B_2$ | $B_2$    | $A_4$    | $A_2^-$  | 1 | -1         | 1      | -1     | -1          | 1            |
| $E_1$ | $E_1$    | $E_1$    | $E^-$    | 2 | -2         | -1     | 1      | 0           | 0            |
| $E_2$ | $E_2$    | $E_2$    | $E^+$    | 2 | 2          | -1     | -1     | 0           | 0            |

$$D_{6h} = D_6 \times S_2.$$

| $T$ | E | $3C_2$ | $4C_3$          | $4C_3^2$        |
|-----|---|--------|-----------------|-----------------|
| $A$ | 1 | 1      | 1               | 1               |
| $E$ | 1 | 1      | $\varepsilon$   | $\varepsilon^2$ |
|     | 1 | 1      | $\varepsilon^2$ | $\varepsilon$   |
| $T$ | 3 | -1     | 0               | 0               |

$$T_h = T \times S_2.$$

| $O$   | $T_d$ | E | $8C_3$ | $3C_2$ | $6C_2$      | $6C_4$ |
|-------|-------|---|--------|--------|-------------|--------|
|       |       | E | $8C_3$ | $3C_2$ | $6\sigma_d$ | $6S_4$ |
| $A_1$ | $A_1$ | 1 | 1      | 1      | 1           | 1      |
| $A_2$ | $A_2$ | 1 | 1      | 1      | -1          | -1     |
| $E$   | $E$   | 2 | -1     | 2      | 0           | 0      |
| $T_1$ | $T_1$ | 3 | 0      | -1     | -1          | 1      |
| $T_2$ | $T_2$ | 3 | 0      | -1     | 1           | -1     |

$$O_h = O \times S_2.$$

Таблица П.2

| $\overline{C}_1$ | E |
|------------------|---|
| $\overline{A}$   | 1 |

| $\overline{C}_2$ | E | $C_2$ |
|------------------|---|-------|
| $\overline{A}_1$ | 1 | $-i$  |
| $\overline{A}_2$ | 1 | $i$   |

| $\overline{C}_3$ | E | $C_3$         | $C_3^2$       |
|------------------|---|---------------|---------------|
| $\overline{E}$   | 1 | $\gamma$      | $\gamma^2$    |
| $\overline{B}$   | 1 | $\gamma^{-1}$ | $\gamma^{-2}$ |
| $\overline{B}$   | 1 | $-1$          | 1             |

$$\gamma = \exp(\pi i/3).$$

| $\overline{C}_4$ | E | $C_4$         | $C_2$ | $C_4^3$       |
|------------------|---|---------------|-------|---------------|
| $\overline{E}_1$ | 1 | $\delta$      | $i$   | $\delta^3$    |
| $\overline{E}_1$ | 1 | $\delta^{-1}$ | $-i$  | $\delta^{-3}$ |
| $\overline{E}_2$ | 1 | $\delta^3$    | $-i$  | $\delta$      |
| $\overline{E}_2$ | 1 | $\delta^{-3}$ | $i$   | $\delta^{-1}$ |

$$\delta = \exp(\pi i/4).$$

| $\overline{C}_6$ | E | $C_6$         | $C_3$          | $C_2$ | $C_3^2$        | $C_6^5$       |
|------------------|---|---------------|----------------|-------|----------------|---------------|
| $\overline{E}_1$ | 1 | $\omega$      | $\omega^2$     | $i$   | $\omega^4$     | $\omega^5$    |
| $\overline{E}_1$ | 1 | $\omega^{-1}$ | $\omega^{-2}$  | $-i$  | $\omega^{-4}$  | $\omega^{-5}$ |
| $\overline{E}_2$ | 1 | $i$           | $-1$           | $-i$  | 1              | $i$           |
| $\overline{E}_2$ | 1 | $-i$          | $-1$           | $i$   | 1              | $-i$          |
| $\overline{E}_2$ | 1 | $\omega^5$    | $-\omega^4$    | $i$   | $-\omega^2$    | $\omega$      |
| $\overline{E}_2$ | 1 | $\omega^{-5}$ | $-\omega^{-4}$ | $-i$  | $-\omega^{-2}$ | $\omega^{-1}$ |

$$\omega = \exp(\pi i/6).$$

Продолжение.

| $\bar{D}_2$ | E | $\bar{E}$ | $2C_{2z}$              | $2C_{2y}$              | $2C_{2x}$              |
|-------------|---|-----------|------------------------|------------------------|------------------------|
|             | E | $\bar{E}$ | $C_{2z}, \bar{C}_{2z}$ | $C_{2y}, \bar{C}_{2y}$ | $C_{2x}, \bar{C}_{2x}$ |
| $\bar{E}$   | 2 | -2        | 0                      | 0                      | 0                      |

| $\bar{D}_3$ | E | $\bar{E}$ | $2C_3$             | $2\bar{C}_3$       | $3C_2$ | $3\bar{C}_2$ |
|-------------|---|-----------|--------------------|--------------------|--------|--------------|
|             | E | $\bar{E}$ | $C_3, \bar{C}_3^2$ | $\bar{C}_3, C_3^2$ | $3C_2$ | $3\bar{C}_2$ |
| $\bar{E}_1$ | 1 | -1        | -1                 | 1                  | $i$    | $-i$         |
| $\bar{E}_2$ | 1 | -1        | -1                 | 1                  | $-i$   | $i$          |
| $\bar{E}_2$ | 2 | -2        | 1                  | -1                 | 0      | 0            |

| $\bar{D}_4$ | E | $\bar{E}$ | $2C_4^2$             | $2C_4$             | $2\bar{C}_4$       | $4C_2$             | $4C_2'$              |
|-------------|---|-----------|----------------------|--------------------|--------------------|--------------------|----------------------|
|             | E | $\bar{E}$ | $C_4^2, \bar{C}_4^2$ | $C_4, \bar{C}_4^3$ | $\bar{C}_4, C_4^3$ | $2C_2, 2\bar{C}_2$ | $2C_2', 2\bar{C}_2'$ |
| $\bar{E}_1$ | 2 | -2        | 0                    | $\sqrt{2}$         | $-\sqrt{2}$        | 0                  | 0                    |
| $\bar{E}_2$ | 2 | -2        | 0                    | $-\sqrt{2}$        | $\sqrt{2}$         | 0                  | 0                    |

| $\bar{D}_6$ | E | $\bar{E}$ | $2C_2$           | $2C_3$             | $2\bar{C}_3$       | $2C_6$             | $2\bar{C}_6$       | $6C_2'$              | $6C_2''$               |
|-------------|---|-----------|------------------|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|----------------------|------------------------|
|             | E | $\bar{E}$ | $C_2, \bar{C}_2$ | $C_3, \bar{C}_3^2$ | $\bar{C}_3, C_3^2$ | $C_6, \bar{C}_6^5$ | $\bar{C}_6, C_6^5$ | $3C_2', 3\bar{C}_2'$ | $3C_2'', 3\bar{C}_2''$ |
| $\bar{E}_1$ | 2 | -2        | 0                | 1                  | -1                 | $\sqrt{3}$         | $-\sqrt{3}$        | 0                    | 0                      |
| $\bar{E}_2$ | 2 | -2        | 0                | 1                  | -1                 | $-\sqrt{3}$        | $\sqrt{3}$         | 0                    | 0                      |
| $\bar{E}_3$ | 2 | -2        | 0                | -2                 | 2                  | 0                  | 0                  | 0                    | 0                      |

| $\bar{T}$ | E | $\bar{E}$ | $6C_2$             | $4C_3$          | $4\bar{C}_3$     | $4C_3^2$         | $4\bar{C}_3^2$  |
|-----------|---|-----------|--------------------|-----------------|------------------|------------------|-----------------|
|           | E | $\bar{E}$ | $3C_2, 3\bar{C}_2$ | $4C_3$          | $4\bar{C}_3$     | $4C_3^2$         | $4\bar{C}_3^2$  |
| $\bar{E}$ | 2 | -2        | 0                  | 1               | -1               | -1               | 1               |
| $\bar{U}$ | 2 | -2        | 0                  | $\varepsilon$   | $-\varepsilon$   | $-\varepsilon^2$ | $\varepsilon^2$ |
|           | 2 | -2        | 0                  | $\varepsilon^2$ | $-\varepsilon^2$ | $-\varepsilon$   | $\varepsilon$   |

$\varepsilon = \exp(2\pi i/3)$ .

| $\bar{O}$   | E | $\bar{E}$ | $8C_3$               | $8\bar{C}_3$         | $6C_4^2$               | $3C_4$               | $3\bar{C}_4$         | $12C_2$            |
|-------------|---|-----------|----------------------|----------------------|------------------------|----------------------|----------------------|--------------------|
|             | E | $\bar{E}$ | $4C_3, 4\bar{C}_3^2$ | $4\bar{C}_3, 4C_3^2$ | $3C_4^2, 3\bar{C}_4^2$ | $3C_4, 3\bar{C}_4^3$ | $3\bar{C}_4, 3C_4^3$ | $6C_2, 6\bar{C}_2$ |
| $\bar{E}_1$ | 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                  |

### Интернациональные обозначения

Как отмечалось в гл. 9, кроме обозначений Шёнфлиса, которыми мы пользовались в своей книге, существуют также интернациональные обозначения точечных групп. Ось вращения  $n$ -го порядка  $C_n$  обозначают символом  $n$ , а плоскость зеркального отражения — символом  $m$ . Наличие плоскости симметрии ( $\sigma_h$ ), перпендикулярной оси вращения  $n$ -го порядка  $C_n$ , выражается символом  $\frac{n}{m}$ , а наличие плоскости симметрии, в которой лежит ось  $C_n$ , — символом  $nm$ . Несобственный элемент в общем виде есть произведение инверсии на вращение. Он называется вращением с инверсией и обозначается через  $\bar{n} = iC_n$ . Зеркальный поворот  $S_n = C_n\sigma_h$  (гл. 9) можно выразить через  $\bar{n}$ , пользуясь соотношением  $\sigma_h = C_2i$ . Например,

$$\bar{4} = iC_4 = \sigma_h C_2 C_4 = C_4^{-1} \sigma_h = S_4^{-1}.$$



Полный символ группы в интернациональной системе — это набор неэквивалентных независимых операций, но обычно используют более короткие обозначения. В табл. П.3 приведены как полный, так и короткий символы, если они различаются.

Таблица П.3

| Обозначения по Шёнфлису          | Полные интернациональные обозначения | Сокращенные интернациональные обозначения | Обозначения по Шёнфлису | Полные интернациональные обозначения  | Сокращенные интернациональные обозначения |
|----------------------------------|--------------------------------------|-------------------------------------------|-------------------------|---------------------------------------|-------------------------------------------|
| $C_n$                            | $n$                                  |                                           | $D_4$                   | 422                                   |                                           |
| $S_1$ , или $C_{1h}$ , или $C_s$ | $m$                                  |                                           | $D_6$                   | 622                                   |                                           |
| $S_2$ или $C_i$                  | $\bar{1}$                            |                                           | $D_{2h}$                | $\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ | $mmm$                                     |
| $S_4$                            | $\bar{4}$                            |                                           | $D_{3h}$                | $\bar{6}m2$                           |                                           |
| $S_6$                            | $\bar{3}$                            |                                           | $D_{4h}$                | $\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ | $1/mmm$                                   |
| $C_{2h}$                         | $\frac{2}{m}$                        | $2/m$                                     | $D_{6h}$                | $\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$ | $6/mmm$                                   |
| $C_{3h}$                         | $\frac{6}{m}$                        |                                           | $D_{2d}$                | $\bar{4}2m$                           |                                           |
| $C_{4h}$                         | $\frac{4}{m}$                        | $4/m$                                     | $D_{3d}$                | $\bar{3} \frac{2}{m}$                 | $\bar{3}m$                                |
| $C_{6h}$                         | $\frac{6}{m}$                        | $6/m$                                     | $T$                     | 23                                    |                                           |
| $C_{2v}$                         | $2mm$                                |                                           | $T_h$                   | $\frac{2}{m} \bar{3}$                 | $m\bar{3}$                                |
| $C_{3v}$                         | $3m$                                 |                                           | $T_d$                   | $\bar{4}3m$                           |                                           |
| $C_{4v}$                         | $4mm$                                |                                           | $O$                     | 432                                   |                                           |
| $C_{6v}$                         | $6mm$                                |                                           | $O_h$                   | $\frac{4}{m} \bar{3} \frac{2}{m}$     | $m\bar{3}m$                               |
| $D_2$ или $V$                    | 222                                  |                                           |                         |                                       |                                           |
| $D_3$                            | 32                                   |                                           |                         |                                       |                                           |

# РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ТОМА 1

## Глава 2

### 2.3.

|          | E     | $C_4$   | $C_4^2$ | $C_4^3$ | $C_2$ | $C_2'$  | $C_2''$ | $C_2'''$ |
|----------|-------|---------|---------|---------|-------|---------|---------|----------|
| E        | E     | $C_4$   | $C_4^2$ | $C_4^3$ | $C_2$ | $C_2'$  | $C_2''$ | $C_2'''$ |
| $C_4$    | $C_4$ | $C_4^2$ | $C_4^3$ | E       | $C_2$ | $C_2''$ | $C_2'$  | $C_2'''$ |
| $C_4^2$  | $C_4$ | $C_4^2$ | E       | $C_4$   | $C_2$ | $C_2'$  | $C_2''$ | $C_2'''$ |
| $C_4^3$  | $C_4$ | $C_4^3$ | E       | $C_4$   | $C_2$ | $C_2'$  | $C_2''$ | $C_2'''$ |
| $C_4$    | $C_4$ | $C_4$   | $C_4$   | $C_4$   | $C_2$ | $C_2'$  | $C_2''$ | $C_2'''$ |
| $C_2$    | $C_2$ | $C_2''$ | $C_2$   | $C_2$   | E     | $C_4$   | $C_4$   | $C_4$    |
| $C_2'$   | $C_2$ | $C_2$   | $C_2$   | $C_2$   | $C_4$ | E       | $C_4$   | $C_4$    |
| $C_2''$  | $C_2$ | $C_2$   | $C_2$   | $C_2$   | $C_4$ | $C_4$   | E       | $C_4$    |
| $C_2'''$ | $C_2$ | $C_2$   | $C_2$   | $C_2$   | $C_4$ | $C_4$   | $C_4$   | E        |

Классы E;  $C_4^2$ ;  $\{C_4, C_4^3\}$ ;  $\{C_2, C_2'\}$ ;  $\{C_2'', C_2'''\}$ . ( $C_2$  и  $C_2'$ —это вращения вокруг осей, перпендикулярных сторонам [квадрата, а оси вращений  $C_2''$  и  $C_2'''$  совпадают с его диагоналями.)

2.5. E;  $\{P_{12}, P_{13}, P_{23}\}$ ;  $\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} \right\}$ .

### 2.6.

|          | E        | R        | $\sigma$ | $I = R\sigma$ |
|----------|----------|----------|----------|---------------|
| E        | E        | R        | $\sigma$ | I             |
| R        | R        | E        | I        | $\sigma$      |
| $\sigma$ | $\sigma$ | I        | E        | R             |
| I        | I        | $\sigma$ | R        | E             |

Эта группа, обозначаемая через  $C_{2h}$ , может быть представлена в виде прямого произведения  $\{E, R\} \times \{E, \sigma\}$ , или  $\{E, I\} \times \{E, R\}$ , или  $\{E, I\} \times \{E, \sigma\}$ .

2.7. Имеются шесть классов: E;  $C_2$ ;  $\{C_3, C_3^2\}$ ;  $\{C_6, C_6^5\}$ ;

$\{C_2', C_2'', C_2'''\}; \{C_2''''', C_2''''', C_2''''''\}$ . (В данном случае  $C_2 = C_6^3$ ; оси, отмеченные штрихами, лежат в плоскости  $xy$ .)

## Глава 3

3.2.  $(\frac{3}{2}, \frac{3}{2}, 0) + (-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 3)$ .

3.3.  $f_2(x) = (\frac{45}{8})^{1/2}(x^2 - \frac{1}{3})$ ,  $f_3(x) = (\frac{175}{8})^{1/2}(x^3 - \frac{3}{5}x)$ .

3.4.  $T_{01} = 0$ ,  $T_{11} = \frac{2}{5}$ ,  $T_{02} = (\frac{4}{45})^{1/2}$ .

3.5. Периодические,  $f(-1) = \exp(i\alpha)f(1)$ .

3.6.  $e_1' = Re_1 = e_2$ ,  $e_2' = -e_1$ ,  $e_3' = e_3$ .  $T(R)x = \bar{x} = y$ ,  $T(R)y = -x$ ,  $T(R)x^2 = y^2$ ,  $T(R)xy = -yx$ . Для поворота на  $45^\circ$   $e_1' = (e_1 + e_2)/2^{1/2}$ ,  $e_2' = (-e_1 + e_2)/2^{1/2}$ ,  $e_3' = e_3$ ,  $\bar{x} = (x + y)/2^{1/2}$ ,  $\bar{y} = (-x + y)/2^{1/2}$ .

3.7.  $f_1 = (\frac{5}{4})^{1/2}x^2$ ,  $f_2 = (\frac{405}{224})^{1/2}(y^2 - \frac{5}{9}x^2)$ ,  $f_3 = \frac{3}{2}xy$ .  $T_{11} = \frac{5}{9}$ ,  $T_{22} = -\frac{5}{9}$ ,  $T_{33} = -1$ ,  $T_{12} = T_{21} = 56^{1/2}/9$ ,  $T_{13} = T_{31} = T_{23} = T_{32} = 0$ . Собственные значения 1 и  $-1$  (появляется дважды), их собственные векторы  $(x^2 + y^2)$ ,  $(x^2 - y^2)$  и  $xy$ .

## Глава 4

## 4.2.

$$T(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T(C_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$T(C_2') = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T(C_2'') = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

$$T(C_2''') = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad T(C_4^2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$T(C_4^3) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad T(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

4.4.  $yz$  и  $xz$ .

4.5.  $\chi = (3, 1, -1, -1, -1)$ . Приводится к  $A_2 \oplus E$ .

4.6. См. приложение 1.

4.9.  $\chi = (6, 0, 2)$ .

4.10. См. приложение 1.

- 4.11.  $x^2 + y^2$ ,  $z$ ,  $x^2 - y^2$ ,  $xy$ ,  $(x \text{ и } y)$  или  $(xz \text{ и } yz)$ .  
 4.12.  $\chi = (4, 0, 4, 0, 0) = A_1 \oplus A_2 \oplus B_1 \oplus B_2$ .  
 4.13.  $(x_1 x_2 + y_1 y_2)$ ,  $(x_1 y_2 - y_1 x_2)$ ,  $(x_1 x_2 - y_1 y_2)$ ,  $(x_1 y_2 + y_1 x_2)$ .  
 4.14.  $A_1 \rightarrow A$ ,  $A_2 \rightarrow A$ ,  $B_1 \rightarrow B$ ,  $B_2 \rightarrow B$ ,  $E \rightarrow E$ .  
 4.15.  $y^3$ .

## Глава 5

- 5.2. Имеется двукратное вырождение. Разрешены переходы  $A_1 \rightarrow E$  или  $A_2$ ;  $A_2 \rightarrow A_1$  или  $E$ ;  $B_1 \rightarrow B_2$  или  $E$ ;  $B_2 \rightarrow B_1$  или  $E$ ;  $E \rightarrow E$ ,  $A_1$ ,  $A_2$ ,  $B_1$ ,  $B_2$ .  
 5.5.  $x$  и  $y$  составляют  $E$ -дублет,  $z$  дает  $A_2$ -синглет.

## Глава 6

- 6.1. Нормальные колебания  $A^-$ ,  $B_1^+$ ,  $B_2^-$  и  $B_3^-$  появляются по одному разу, колебание  $A^+$  — дважды. Вырождения нет. См. рис. П.1.

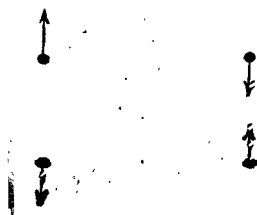


Рис. П.1.

- 6.2. Имеются [по одному колебанию]  $A_1$  и  $A_4$ , а также два  $E_2$ -колебания. Каждое из  $E_2$ -колебаний дважды вырождено.  
 6.3. Фундаментальные частоты  $B_2^-$  и  $B_3^-$  возбуждаются в результате инфракрасных, а  $A^+$  и  $B_1^+$  — в результате комбинационных переходов.

## Глава 7

- 7.1. Функции  $(x + iy)^2$ ,  $(x - iy)^2$ ,  $(x^2 + y^2)$ ,  $z^2$ ,  $(x + iy)z$  и  $(x - iy)z$  преобразуются по  $\Gamma^{(m)}$  с  $m = 2, -2, 0, 0, 1$  и  $-1$ .  
 7.2. Операция идентичности отсутствует.  
 7.6.  $D^{(2)} = 2\Gamma^{(3)} \oplus \Gamma^{(1)}$ .  
 7.7. Оба коэффициента равны  $2^{-1/2}$ .

- 7.8.  $C(121, 000) = -(\frac{2}{5})^{1/2}$ ,  $C(121, 1 -10) = (\frac{3}{10})^{1/2}$ ,  
 $C(121, -1, 1, 0) = (\frac{3}{10})^{1/2}$ .
- 7.14. Инвариант  $\sum_m (-1)^m Y_m^{(2)} Y_{-m}^{(2)}$ .

## Глава 8

- 8.1. Мультиполярности равны  $2^k$ , где  $k=2, 3, 4, 5$  или  $6$ .
- 8.2. Минимальное значение  $j=1$ .
- 8.3.  $C(2^{1/2} 3/2, 1/2 -1/2 3/2) = (\frac{4}{5})^{1/2}$ ,  $C(2^{1/2} 3/2, 1^{1/2} 3/2) = -(\frac{1}{5})^{1/2}$ .

## Глава 9

- 9.2. а)  $D_3$ , б)  $D_4$ .
- 9.3. а)  $A_1 \rightarrow A_1$ ,  $T_1 \rightarrow A_2 \oplus E$ ,  $T_2 \rightarrow A_1 \oplus E$ ,  $E \rightarrow E$ ;  
 б)  $A_1 \rightarrow A_1$ ,  $A_2 \rightarrow B_1$ ,  $E \rightarrow A_1 \oplus B_1$ ,  $T_1 \rightarrow A_2 \oplus E$ ,  
 $T_2 \rightarrow B_2 \oplus E$ .
- 9.6.  $A_1$ :  $x^2 + y^2 + z^2$ .  $E$ :  $x^2 - y^2$  и  $3z^2 - r^2$ .  $T_2$ :  $xy$ ,  $yz$  и  $zx$ .
- 9.7.  $D^{(3)} = A_1 \oplus T_1 \oplus T_2$ . Состояние  $f$  расщепляется на два триплета и синглет.
- 9.8. а) Да. б) Нет.
- 9.9.  $A_1 \rightarrow B_1, B_2, B_3$ .  $B_1 \rightarrow A_1, B_2, B_3$ .  $B_2 \rightarrow A_1, B_1, B_3$ .  
 $B_3 \rightarrow A_1, B_1, B_2$ . Этим исчерпываются все разрешенные переходы для электрического диполя, если меняется четность, и для магнитного диполя, если четность не изменяется.
- 9.11. а) Группа  $T_d$ . Моды  $A_1, E$  (дублет) и  $T_2$  (триплет).  
 б) Группа  $T_d$ . Один синглет  $A_1$ , один дублет  $E$  и два триплета  $T_2$ .  
 в) Группа  $D_{2h}$ . Все двенадцать мод невырождены: три  $A^+$ , одна  $A^-$ , две  $B_2^+$ , одна  $B_3^+$ , две  $B_1^-$ , одна  $B_2^-$  и две  $B_3^-$ .
- 9.12. Расщепляется на триплет  $T_2$  и дублет  $E$ .
- 9.13. Состояние с  $j=5/2$  расщепляется на квартет  $U'$  и дублет  $E'$ , а состояние с  $j=3/2$  остается в качестве квартета  $U'$ .
- 9.14. а) Разрешены переходы  $A_1 \rightarrow A_2, E$ ;  $A_2 \rightarrow A_1, E$ ;  
 $E \rightarrow A_1, A_2, E$ ;  
 б)  $A_1 \rightarrow A_2, E$ ;  $A_2 \rightarrow A_1, E$ ;  $B_1 \rightarrow B_2, E$ ;  $B_2 \rightarrow B_1, E$ ;  
 $E \rightarrow A_1, A_2, B_1, B_2, E$ .

## Глава 10

10.1. Для состояний ядер  $^{18}\text{O}$  и  $^{18}\text{Ne}$  с  $T \geq 1$  имеются аналоги в ядре  $^{18}\text{F}$ , в котором, кроме того, существуют состояния с  $T=0$ .

10.4.  $T=0$ .

10.5.  $1/2$ .

## Глава 11

11.2.  $a_2 = -2$  (действительная компонента элемента  $X_{12}$ ),  $a = -2$  (мнимая компонента элемента  $X_{12}$ ),  $a_3 = i(X_{11} - X_{22})$ .

11.5. См. рис. П.2.  $Y = \pm 2$  с  $T=1$ ,  $Y = \pm 1$  с  $T=3/2$  или  $1/2$  и  $Y=0$  с  $T=2$ , 1 или 0.

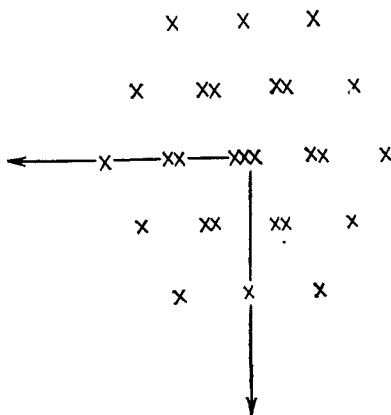


Рис. П.2.

11.9. В решении задачи 11.5 положите  $Q = M_T + 1/2 Y$ .

11.10.  $(3/8)^{1/2} |(30) 1^{3/2} 3/2, (11) 010\rangle - (2/8)^{1/2} |(30) 1^{3/2} 1/2, (11) 011\rangle - (1/8)^{1/2} |(30) 1^{3/2} 3/2, (11) 000\rangle +$   
 $+ (2/8)^{1/2} |(30) 011, (11) 1^{1/2} 1/2\rangle$ . (Фаза здесь произвольна.)

12.1. Например,

$$2t_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad 2\gamma_{00} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$$2(1/2 + s_z)t_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

$$2(1/2 + s_z)t_y = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

12.7.  $|\Sigma^+\rangle = (2/3)^{1/2} |u^\uparrow u^\uparrow s^\downarrow\rangle - (1/3)^{1/2} |u^\uparrow u^\downarrow s^\uparrow\rangle,$   
 $|\Lambda\rangle = (1/2)^{1/2} |u^\uparrow u^\uparrow d^\downarrow\rangle - (1/2)^{1/2} |d^\uparrow s^\uparrow u^\downarrow\rangle.$

## ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ ПО ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Здесь (в дополнение к изложенному в т. 1, гл. 4) собраны некоторые полезные, но более специальные сведения о представлениях групп.

### § 1. СИММЕТРИЗОВАННЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

В гл. 4, § 17 мы определили прямое произведение  $T^{(\alpha)} \otimes T^{(\beta)}$  двух представлений группы  $\mathcal{G}$  и вывели простую формулу (4.43) для характера такого представления. Это определение естественным образом обобщается на произведение  $n$  представлений:  $T = T^{(\alpha)} \otimes T^{(\beta)} \otimes \dots$ . В данном параграфе мы рассмотрим частный случай такого произведения, когда все сомножители эквивалентны (т. е.  $\alpha = \beta = \dots$ ). При этом для удобства введем семейство базисных векторов в виде произведений функций, как в гл. 4, § 17. Обозначим через  $\varphi_i$ , где  $i = 1, 2, \dots, s_\alpha$ , семейство функций, преобразующихся по неприводимому представлению  $T^{(\alpha)}$ . Тогда множество  $(s_\alpha)^n$  произведений типа  $\varphi_i(1) \varphi_j(2) \dots \varphi_k(n)$  дает базис для представления  $T$ :

$$T\varphi_i(1) \varphi_j(2) \dots \varphi_k(n) = \sum_{i', j', \dots, k'} T_{i'i}^{(\alpha)} T_{j'j}^{(\alpha)} \dots \\ \dots T_{k'k}^{(\alpha)} \varphi_{i'}(1) \varphi_{j'}(2) \dots \varphi_{k'}(n).$$

Индекс  $p$  у функции  $\varphi_i(p)$  нужен для нумерации сомножителей; он фигурирует также в определении скалярного произведения:

$$(\varphi_{i'}(1) \varphi_{j'}(2) \dots \varphi_{k'}(n), \varphi_i(1) \varphi_j(2) \dots \varphi_k(n)) = \\ = (\varphi_{i'}(1), \varphi_i(1)) (\varphi_{j'}(2), \varphi_j(2)) \dots (\varphi_{k'}(n), \varphi_k(n)) = \\ = \delta_{i'i} \delta_{j'j} \dots \delta_{k'k}.$$

Значит, в случае ортонормальных функций  $\varphi_i$  множество их произведений также ортонормально. (В физических



приложениях  $p$  — индекс [частиц системы, а  $i$  — индекс возможных состояний частицы.]. Введем удобное и компактное обозначение  $|ij\dots k\rangle \equiv \varphi_i(1)\varphi_j(2)\dots\varphi_k'(n)$ . Здесь индекс  $p$  не пишется, но он определяется порядком расположения индексов вектора  $|ij\dots k\rangle$ . Скалярное произведение теперь записывается в виде  $\langle i'j'\dots k'|ij\dots k\rangle$ . (В квантовой механике это обычное обозначение.)

Рассмотрим перестановки  $P$  набора из  $n$  индексов  $p$ . Например,

$$P_{12}|ij\dots k\rangle = \varphi_i(2)\varphi_j(1)\dots\varphi_k(n) = |ji\dots k\rangle. \quad (\text{ПЗ.1})$$

Множество всех таких перестановок образует группу перестановок  $\mathcal{S}_n$  (гл. 17). Из равенства (ПЗ.1) следует, что векторное пространство  $L$  всевозможных произведений вида  $|ij\dots k\rangle$  будет инвариантно относительно действия группы  $\mathcal{S}_n$ . В самом деле, перестановки коммутируют с преобразованиями из группы  $\mathcal{G}$ , и множество  $L$  порождает базис представления  $W$  произведения групп  $\mathcal{G} \times \mathcal{S}_n$ . Если обозначить неприводимые представления групп  $\mathcal{G}$ ,  $\mathcal{S}_n$  и  $\mathcal{G} \times \mathcal{S}_n$  через  $T^{(\gamma)}$ ,  $V^{(\lambda)}$  и  $T^{(\gamma)} \otimes V^{(\lambda)}$ , то разложение представления  $W$  можно записать в виде

$$W = \sum_{\gamma, \lambda} m_{\gamma\lambda} T^{(\gamma)} \otimes V^{(\lambda)}. \quad (\text{ПЗ.2})$$

Поэтому можно выбрать базис пространства  $L$ , в котором базисные векторы несут индексы  $\gamma$  и  $\lambda$ , соответствующие трансформационным свойствам этих векторов по отношению к обеим группам  $\mathcal{G}$  и  $\mathcal{S}_n$ . Если обозначить произвольные элементы групп  $\mathcal{G}$ ,  $\mathcal{S}_n$  и  $\mathcal{G} \times \mathcal{S}_n$  через  $G_a$ ,  $P$  и  $G_a P$ , то на основании формулы (4.66) соотношение между характеристиками, соответствующее разложению (ПЗ.2), можно записать в виде

$$\chi(G_a P) = \sum_{\gamma, \lambda} m_{\gamma\lambda} \chi^{(\gamma)}(G_a) \chi^{(\lambda)}(P). \quad (\text{ПЗ.3})$$

В действительности нам часто будет нужно лишь одно из подпространств, входящих в разложение  $L = \sum_{\lambda} L_{\lambda}$ , где  $L_{\lambda}$  — подпространство, содержащее все базисные векторы пространства  $L$ , которые преобразуются по определенному неприводимому представлению  $V^{(\lambda)}$  группы  $\mathcal{S}_n$ . На таком пространстве  $L_{\lambda}$  действует представление  $T_{\lambda}$

группы  $\mathcal{G}$ , которое, согласно формуле (ПЗ.2), разлагается на неприводимые представления группы  $\mathcal{G}$ :

$$T_\lambda = \sum_{\gamma} m_{\gamma\lambda} T^{(\gamma)}.$$

Следовательно, его характер дается выражением

$$\chi_\lambda(G_a) = \sum_{\gamma} m_{\gamma\lambda} \chi^{(\gamma)}(G_a).$$

Пользуясь соотношением ортогональности характеров группы  $\mathcal{S}_n$  [формула (4.25а)], этот характер можно найти также из равенства (ПЗ.3):

$$\chi_\lambda(G_a) = \sum_{\gamma} m_{\gamma\lambda} \chi^{(\gamma)}(G_a) = \frac{1}{n!} \sum_P \chi^{(\lambda)*}(P) \chi(G_a P), \quad (\text{ПЗ.4})$$

где суммирование идет по всем  $n!$  перестановкам  $P$  группы  $\mathcal{S}_n$ . Таким образом, чтобы найти характер  $\chi_\lambda$ , нужно сначала вычислить характер  $\chi(G_a P)$ , а затем воспользоваться равенством (ПЗ.4), подставляя в него характеры  $\chi^{(\lambda)}$  из таблицы характеров группы перестановок. Если характер  $\chi_\lambda$  найден, то целые числа  $m_{\gamma\lambda}$  находятся из обычного соотношения ортогональности характеров группы  $\mathcal{G}$ :

$$m_{\gamma\lambda} = \frac{1}{g} \sum_a \chi^{(\gamma)*}(G_a) \chi_\lambda(G_a), \quad (\text{ПЗ.5})$$

где  $g$  — число элементов группы  $\mathcal{G}$ .

Характер  $\chi(G_a P)$  мы вычислим лишь для нескольких довольно простых перестановок, а вывод общей формулы отложим до конца данного параграфа. Рассмотрим сначала тождественную перестановку  $P = E$ . По определению характера имеем

$$\begin{aligned} \chi(G_a E) &= \sum_{i, j, \dots, k} \langle ij \dots k | T(G_a) | ij \dots k \rangle = \\ &= \sum_{i, j, \dots, k} T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) T_{jj}^{(\alpha)}(G_a) \dots T_{kk}^{(\alpha)}(G_a) = \\ &= \left\{ \sum_i T_{ii}^{(\alpha)}(G_a) \right\}^n = \{ \chi^{(\alpha)}(G_a) \}^n. \end{aligned} \quad (\text{ПЗ.6})$$

Значит, характер  $\chi(G_a E)$  выражается через известные характеры неприводимых представлений группы  $\mathcal{G}$ . Аналогично для перестановки  $P_{12}$  мы, пользуясь равенством

(ПЗ.1), получаем

$$\begin{aligned}
 \chi(G_a P_{12}) &= \sum_{i, j, \dots, k} \langle ij \dots k | T(G_a) | ji \dots k \rangle = \\
 &= \sum_{i, j, \dots, k} T_{ij}^{(\alpha)}(G_a) T_{ji}^{(\alpha)}(G_a) \dots T_{kk}^{(\alpha)}(G_a) = \\
 &= \sum_{i, \dots, k} T_{ii}^{(\alpha)}(G_a^2) \dots T_{kk}^{(\alpha)}(G_a) = \\
 &= \chi^{(\alpha)}(G_a^2) \{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^{n-2}.
 \end{aligned} \tag{ПЗ.7}$$

Это выражение снова содержит лишь характеры неприводимых представлений, так как  $G_a^2$  — это просто другой элемент группы  $\mathcal{G}$ . Для более сложной перестановки трех объектов  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$  (в обозначениях примера 10 гл. 2, § 2) подобные рассуждения приводят к следующему выражению:

$$\chi\left(G_a \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}\right) = \chi^{(\alpha)}(G_a^3) \{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^{n-3}. \tag{ПЗ.8}$$

Теперь мы в состоянии вычислить все характеры  $\chi_\lambda(G_a)$ , например при  $n=2$  и  $n=3$ . При  $n=2$  имеются лишь два элемента группы  $E$  и  $P_{12}$  и лишь два неприводимых представления, соответствующих симметричному и антисимметричному базисным векторам. Взяв характеры из табл. 4.5, на основании формул (ПЗ.4) — (ПЗ.7) получаем

$$\begin{aligned}
 \chi_{\text{симм}}(G_a) &= \frac{1}{2} [\{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^2 + \chi^{(\alpha)}(G_a^2)], \\
 \chi_{\text{антисимм}}(G_a) &= \frac{1}{2} [\{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^2 - \chi^{(\alpha)}(G_a^2)].
 \end{aligned} \tag{ПЗ.9}$$

Характеры для  $n=3$  мы можем взять из табл. 4.2, так как группы  $\mathcal{S}_3$  и  $D_3$  изоморфны (гл. 2, § 3). Имеются три класса сопряженных элементов:  $E$ ;  $P_{12}$ ,  $P_{23}$ ,  $P_{31}$ ;  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}$ ; и три неприводимых представления, которые обычно называются: 1) полностью симметричным, 2) полностью антисимметричным и 3) представлением со смешанной симметрией (оно двумерно). В этом случае

мы аналогично предыдущему получаем

$$\begin{aligned}\chi_{\text{симм}}(G_a) &= \frac{1}{6} [\{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^3 + 3\chi^{(\alpha)}(G_a^2)\chi^{(\alpha)}(G_a) + \\ &\quad + 2\chi^{(\alpha)}(G_a^3)]; \\ \chi_{\text{антисимм}}(G_a) &= \frac{1}{6} [\{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^3 - 3\chi^{(\alpha)}(G_a^2)\chi^{(\alpha)}(G_a) + \\ &\quad + 2\chi^{(\alpha)}(G_a^3)], \\ \chi_{\text{смеш}}(G_a) &= \frac{1}{6} [2\{\chi^{(\alpha)}(G_a)\}^3 - 2\chi^{(\alpha)}(G_a^3)].\end{aligned}\quad (\text{ПЗ.10})$$

Заметим, что нам не потребовался конкретный вид группы  $\mathcal{G}$ , хотя, конечно, для получения численных выражений нужны значения характеров  $\chi^{(\alpha)}$  неприводимых представлений группы  $\mathcal{G}$ .

Исходя из того что любую перестановку можно представить в виде произведения циклов разной длины (гл. 17, § 1), нетрудно вывести общую формулу для характеров  $\chi(G_a P)$ . Если перестановка  $P$  содержит  $n_1$  циклов длиной 1,  $n_2$  циклов длиной 2 и т. д., то, действуя аналогично рассмотренным выше случаям несложных перестановок, находим

$$\chi(G_a P) = \prod_i \{\chi^{(\alpha)}(G_a^i)\}^{n_i}. \quad (\text{ПЗ.11})$$

## § 2. РАЗЛОЖЕНИЕ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ С ПОМОЩЬЮ ПОДГРУППЫ

В гл. 4, § 17 было показано, как произведение двух представлений группы  $\mathcal{G}$  разлагается на неприводимые составляющие. В частности, целочисленные коэффициенты  $m_\gamma$  в разложении [формула (4.44)]

$$T^{(\alpha)} \otimes T^{(\beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} T^{(\gamma)}$$

вычислялись по формуле (4.45) на основании таблицы характеров. Эти коэффициенты можно найти и другим способом, если известны соответствующие коэффициенты для подгруппы  $\mathcal{H}$  группы  $\mathcal{G}$ . Неприводимые представления группы  $\mathcal{H}$  обозначим через  $T^{(\tilde{\alpha})}$ ,  $T^{(\tilde{\beta})}$  и т. д. Предположим,

что известны коэффициенты  $m_{\tilde{\gamma}}^{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}}$  в разложении

$$\Gamma^{(\tilde{\alpha})} \otimes \Gamma^{(\tilde{\beta})} = \sum_{\tilde{\gamma}} m_{\tilde{\gamma}}^{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}} \Gamma^{(\tilde{\gamma})}. \quad (\text{ПЗ.12})$$

Предположим также, что известны коэффициенты  $n_{\alpha\tilde{\alpha}}$  в разложении (4.49) ограничения представления  $\Gamma^{(\alpha)}$  с группы  $\mathcal{G}$  на ее подгруппу  $\mathcal{H}$ :

$$\Gamma^{(\alpha)} = \sum_{\tilde{\alpha}} n_{\alpha\tilde{\alpha}} \Gamma^{(\tilde{\alpha})}.$$

Комбинируя эти три соотношения, получаем

$$\begin{aligned} \Gamma^{(\alpha)} \otimes \Gamma^{(\beta)} &= \sum_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} n_{\alpha\tilde{\alpha}} n_{\beta\tilde{\beta}} \Gamma^{(\tilde{\alpha})} \otimes \Gamma^{(\tilde{\beta})} = \\ &= \sum_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}, \tilde{\gamma}} n_{\alpha\tilde{\alpha}} n_{\beta\tilde{\beta}} m_{\tilde{\gamma}}^{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}} \Gamma^{(\tilde{\gamma})}. \end{aligned} \quad (\text{ПЗ.13})$$

Кроме того,

$$\Gamma^{(\alpha)} \otimes \Gamma^{(\beta)} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} \Gamma^{(\gamma)} = \sum_{\tilde{\gamma}} m_{\gamma} n_{\gamma\tilde{\gamma}} \Gamma^{(\tilde{\gamma})}. \quad (\text{ПЗ.14})$$

Поэтому, приравнивая выражения (ПЗ.13) и (ПЗ.14), мы при любом  $\tilde{\gamma}$  получаем соотношение

$$\sum_{\tilde{\alpha}, \tilde{\beta}} n_{\alpha\tilde{\alpha}} n_{\beta\tilde{\beta}} m_{\tilde{\gamma}}^{\tilde{\alpha}\tilde{\beta}} = \sum_{\gamma} m_{\gamma} n_{\gamma\tilde{\gamma}}. \quad (\text{ПЗ.15})$$

Здесь неизвестны лишь коэффициенты  $m_{\gamma}$ , и во многих случаях эта система уравнений позволяет их вычислять.

В качестве иллюстрации рассмотрим тот же пример, что и в гл. 4, § 17, а именно произведение представлений  $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)}$  группы  $D_3$ . Теперь мы воспользуемся подгруппой  $C_3$  (гл. 4, § 18). Тогда выражение (ПЗ.13) примет вид  $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)} = (\tau^{(2)} \oplus \tau^{(3)}) \otimes (\tau^{(2)} \oplus \tau^{(3)}) = 2\tau^{(1)} \oplus \tau^{(2)} \oplus \tau^{(3)}$ . Сравнив это разложение с известными разложениями  $\Gamma^{(3)} = \tau^{(2)} \oplus \tau^{(3)}$ ,  $\Gamma^{(1)} = \Gamma^{(2)} = \tau^{(1)}$  (гл. 4, § 18), мы приходим к заключению, что  $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)} = \Gamma^{(3)} \oplus m_1 \Gamma^{(1)} \oplus m_2 \Gamma^{(2)}$ , где  $m_1 + m_2 = 2$ . Этот пример показывает также недостаток метода: метод не всегда дает полное решение. В этом примере он не позволяет доказать, что  $m_1 = m_2 = 1$ . Можно

доказать лишь, что  $m_1 + m_2 = 2$ . Тем не менее данный метод очень удобен в случае непрерывных групп, когда с характерами большой группы  $\mathcal{G}$  труднее работать, чем с характерами подгруппы  $\mathcal{H}$ .

### § 3. УМНОЖЕНИЕ КЛАССОВ СОПРЯЖЕННЫХ ЭЛЕМЕНТОВ

Методы, которыми мы находили неприводимые характеры в гл. 4, § 15, были вполне пригодны в случае групп с малым числом классов сопряженных элементов. В данном параграфе мы выведем дополнительные соотношения между характерами, которые позволяют определить характеры любой конечной группы. Введем сначала сумму по всем элементам группы из класса сопряженных элементов  $\mathcal{C}_i$ . Мы обозначим ее тем же символом  $\mathcal{C}_i$ :

$$\mathcal{C}_i = \sum_{G_a \text{ из } \mathcal{C}_i} G_a \quad (\text{ПЗ.16})$$

и назовем оператором класса сопряженных элементов. Докажем, что в произведении двух таких сумм все элементы любого заданного класса сопряженных элементов должны входить одинаковое число раз, т. е.

$$\mathcal{C}_i \mathcal{C}_j = \sum_{\substack{G_a \text{ из } \mathcal{C}_i \\ G_b \text{ из } \mathcal{C}_j}} G_a G_b = \sum_k c_{ijk} \mathcal{C}_k. \quad (\text{ПЗ.17})$$

В самом деле, представим произведение в виде

$$\mathcal{C}_i \mathcal{C}_j = n_b G_b + n_c G_c + \dots, \quad (\text{ПЗ.18})$$

где  $G_b$  и  $G_c$  — два элемента из одного класса сопряженных элементов  $\mathcal{C}_i$ . Для любого элемента  $G_a$  мы имеем

$$G_a \mathcal{C}_i G_a^{-1} = \mathcal{C}_i, \quad (\text{ПЗ.19})$$

так как для любого элемента  $G$  из класса сопряженных элементов  $\mathcal{C}_i$  элемент  $G_a G G_a^{-1}$  тоже лежит в классе  $\mathcal{C}_i$  и в случае разных  $G$  эти элементы различны. Следовательно,

$$\begin{aligned} \mathcal{C}_i \mathcal{C}_j &= G_a \mathcal{C}_i G_a^{-1} G_a \mathcal{C}_j G_a^{-1} = G_a \mathcal{C}_i \mathcal{C}_j G_a^{-1} = \\ &= n_b G_a G_b G_a^{-1} + n_c G_a G_c G_a^{-1} + \dots \end{aligned} \quad (\text{ПЗ.20})$$

Выбирая теперь такой элемент  $G_a$ , для которого  $G_a G_b G_a^{-1} = G_c$ , и сравнивая выражения (ПЗ.20) и (ПЗ.18),

видим, что  $n_b = n_c$ . Тем самым соотношение (ПЗ.17) доказано.

Выберем теперь какое-либо неприводимое представление  $\Gamma^{(\alpha)}$  группы  $\mathcal{G}$  и определим сумму матриц

$$\Gamma_i^{(\alpha)} = \sum_{G_a \in \mathcal{G}_i} \Gamma^{(\alpha)}(G_a). \quad (\text{ПЗ.21})$$

Если равенство (ПЗ.19) записать в виде  $G_a \mathcal{G}_i = \mathcal{G}_i G_a$ , то в матричном представлении  $\Gamma^{(\alpha)}$  будем иметь  $\Gamma^{(\alpha)}(G_a) \Gamma_i^{(\alpha)} = \Gamma_i^{(\alpha)} \Gamma^{(\alpha)}(G_a)$ . Так как это равенство справедливо для всех элементов  $G_a$  группы  $\mathcal{G}$ , по первой лемме Шура оператор  $\Gamma_i^{(\alpha)}$  должен быть пропорционален единичной матрице:  $\Gamma_i^{(\alpha)} = \lambda_i^{(\alpha)} 1$ .

Сравнивая теперь следы матриц в обеих частях равенства (ПЗ.21), получаем  $s_\alpha \lambda_i^{(\alpha)} = c_i \chi_i^{(\alpha)}$ , т. е.

$$\Gamma_i^{(\alpha)} = \frac{c_i}{s_\alpha} \chi_i^{(\alpha)} 1, \quad (\text{ПЗ.22})$$

где  $c_i$  — число элементов в классе сопряженных элементов  $\mathcal{G}_i$ . Записав равенство (ПЗ.17) в матричном виде, получаем

$$\Gamma_i^{(\alpha)} \Gamma_j^{(\alpha)} = \sum_k c_{ijk} \Gamma_k^{(\alpha)}.$$

Подставляя сюда выражение (ПЗ.22), приходим к соотношению между характерами

$$c_i c_j \chi_i^{(\alpha)} \chi_j^{(\alpha)} = s_\alpha \sum_k c_{ijk} c_k \chi_k^{(\alpha)}. \quad (\text{ПЗ.23})$$

Заметим, что коэффициенты  $c_{ijk}$ , фигурирующие в соотношении (ПЗ.23), находятся из таблицы умножения группы с помощью соотношения (ПЗ.17). Таким образом, мы вывели систему уравнений (ПЗ.23) (для всех индексов  $i$  и  $j$ ), которая позволяет вычислять характеры.

# НЕКОТОРЫЕ ФОРМУЛЫ, ОТНОСЯЩИЕСЯ К ГРУППЕ $\mathcal{R}_3$

В первых двух параграфах этого приложения (§1 и 2) выводятся некоторые полезные формулы для сферических гармоник, прямо следующие из изложенного нами в гл. 7 для группы  $\mathcal{R}_3$ . В § 3 сначала рассматривается общий случай интегрирования на группе, а затем выводятся выражения для соответствующих весовых функций в интегралах на группе  $\mathcal{R}_3$ .

## § 1. ИНТЕГРАЛ ОТ ПРОИЗВЕДЕНИЯ ТРЕХ СФЕРИЧЕСКИХ ГАРМОНИК

На основании теоремы Вигнера—Эккарта можно взять один полезный интеграл. Рассматривая функцию  $Y_{m_1}^{(l_1)}(\theta, \varphi)$  как оператор, входящий в формулу (7.53), получаем

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_m^{(l)*}(\theta, \varphi) Y_{m_1}^{(l_1)}(\theta, \varphi) Y_{m_2}^{(l_2)}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \\ = C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) \langle l \| \mathbf{Y}^{(l_1)} \| l_2 \rangle. \quad (\text{П4.1})$$

(Мы воспользовались тем, что группа  $\mathcal{R}_3$  просто приводима и поэтому индекс  $t$  не нужен, а также тем, что коэффициенты Клебша—Гордана действительны.) Равенство (П4.1) с учетом формулы (7.50) можно использовать для разложения произведения  $Y_{m_1}^{(l_1)} Y_{m_2}^{(l_2)}$ , рассматриваемого как единая функция, в виде (7.49):

$$Y_{m_1}^{(l_1)}(\theta, \varphi) Y_{m_2}^{(l_2)}(\theta, \varphi) = \\ = \sum_{lm} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) \langle l \| \mathbf{Y}^{(l_1)} \| l_2 \rangle Y_m^{(l)}(\theta, \varphi). \quad (\text{П4.2})$$



Чтобы найти приведенный матричный элемент, обратим сначала равенство (П4.2), основываясь на ортогональности коэффициентов Клебша—Гордана (гл. 7, § 17):

$$\begin{aligned} \langle l \| \mathbf{Y}^{(l_1)} \| l_2 \rangle Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) &= \\ &= \sum_{m_1 m_2} C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m) Y_{m_1}^{(l_1)}(\theta, \varphi) Y_{m_2}^{(l_2)}(\theta, \varphi). \end{aligned} \quad (\text{П4.3})$$

Затем, поскольку приведенный матричный элемент  $\langle l \| \mathbf{Y}^{(l_1)} \| l_2 \rangle$  не зависит от углов  $\theta$  и  $\varphi$ , мы можем подставить в выражение (П4.3) любые удобные нам значения этих переменных. При  $\theta=0$  сферические гармоники становятся независимыми от переменной  $\varphi$ :

$$Y_m^{(l)}(0, \varphi) = \delta_{m,0} \left( \frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_l(\cos 0) = \left( \frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} \delta_{m,0}, \quad (\text{П4.4})$$

так что

$$\langle l \| \mathbf{Y}^{(l_1)} \| l_2 \rangle = \left( \frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)} \right)^{1/2} C(l_1 l_2 l, 000). \quad (\text{П4.5})$$

Окончательно интеграл (П4.1) дается выражением

$$\begin{aligned} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_m^{(l)*}(\theta, \varphi) Y_{m_1}^{(l_1)}(\theta, \varphi) Y_{m_2}^{(l_2)}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi &= \\ &= \left( \frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)} \right)^{1/2} C(l_1 l_2 l, 000) C(l_1 l_2 l, m_1 m_2 m). \end{aligned} \quad (\text{П4.6})$$

Отметим, что этот интеграл равен нулю, если величины  $l_1$ ,  $l_2$  и  $l$  не удовлетворяют условию треугольника (гл. 7, § 4, п. Г), а также если сумма  $l_1 + l_2 + l$  — нечетное число.

## § 2. ТЕОРЕМА СЛОЖЕНИЯ СФЕРИЧЕСКИХ ГАРМОНИК

Рассмотрим произведение двух сферических гармоник, зависящих от координат двух частиц,  $Y_{m_1}^{(l_1)}(\theta_1, \varphi_1) Y_{m_2}^{(l_2)}(\theta_2, \varphi_2)$ . Образовав сумму таких произведений с  $l_1 = l_2$ , можно (гл. 4, § 17 и гл. 7, § 4, п. Г) на основании формулы (4.46) получить инвариант, поскольку в формуле (7.44) возможно значение  $J=0$ . С учетом того что инвариантность относительно подгруппы  $\mathcal{R}_2$  влечет условие  $m_1 + m_2 = 0$ , этот инвариант записывается следующим образом:

$$f_0^{(0)} = \sum_{m_1} C(l_1 l_1 0, m_1 - m_1 0) Y_{m_1}^{(l_1)}(\theta_1, \varphi_1) Y_{-m_1}^{(l_1)}(\theta_2, \varphi_2). \quad (\text{П4.7})$$

Заметим, что, хотя величина  $f_0^{(0)}$  инвариантна относительно вращений системы, она зависит от взаимного расположения двух частиц. Как мы сейчас покажем, функция  $f_0^{(0)}$  есть полином Лежандра, зависящий от угла  $\theta_{12}$  между радиус-векторами частиц. В самом деле, поскольку величина  $f_0^{(0)}$  инвариантна относительно вращений, мы можем путем подходящего поворота добиться того, чтобы частица 1 находилась на оси  $z$ . В этом положении  $\theta_1 = 0$ ,  $\theta_2 = \theta_{12}$ , и на основании формулы (П4.4) выражение (П4.7) приводится к виду

$$f_0^{(0)} = C(l_1 l_1 0, 000) \left( \frac{2l+1}{4\pi} \right)^{1/2} P_{l_1}(\cos \theta_{12}),$$

если учесть, что при  $m=0$  сферические гармоники сводятся к полиномам Лежандра. Коэффициенты Клебша — Гордана в формуле (П4.7) имеют простой вид (задача 7.14):  $C(l_1 l_1 0, m_1 - m_1 0) = (-1)^{l_1 - m_1} / (2l_1 + 1)^{1/2}$ . В результате выражение (П4.7) принимает вид

$$\sum_m (-1)^m Y_m^{(l)}(\theta_1, \varphi_1) Y_{-m}^{(l)}(\theta_2, \varphi_2) = \left( \frac{2l+1}{4\pi} \right) P_l(\cos \theta_{12}). \quad (\text{П4.8})$$

Эта формула известна под названием теоремы сложения для сферических гармоник и применяется, например, при анализе потенциала взаимодействия двух электронов, когда его надо представить в виде, допускающем разложение на множители, зависящие от координат отдельных электронов (приложение 5, § 1).

### § 3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ НА ГРУППЕ

В гл. 7, § 1 мы отмечали, что сумму по группе  $\sum_{a=1}^g$ , входящую в соотношения ортогональности для неприводимых представлений конечной группы, в случае непрерывной группы следует заменить интегралом по параметрам группы  $a_1, a_2, \dots, a_r$ , взятым с некоторой весовой функцией  $\rho(a_1, a_2, \dots, a_r)$ . В частном случае группы  $\mathcal{R}_2$  мы видели, что соотношения ортогональности выполняются при выборе весовой функции  $\rho(a) = 1$ . Чтобы найти весовую функцию для группы  $\mathcal{R}_3$ , необходимо более подробно исследовать свойства, которыми должна обладать

такая функция. Мы сначала рассмотрим общий случай, а затем выведем выражение для весовой функции для группы  $\mathcal{R}_3$ . Это позволит нам написать соотношения ортогональности для неприводимых представлений и характеров группы  $\mathcal{R}_3$ .

Существенным свойством конечной суммы

$$\sum_{a=1}^g f(G_a), \quad (\text{П4.9})$$

где  $f$  — некоторая функция на группе, является ее инвариантность относительно замены всех  $a$  элементов группы  $G_a$  элементами  $G_c = G_a G_b$ , причем  $G_b$  — некоторый фиксированный элемент группы. Этим свойством мы неоднократно пользовались в гл. 4, и его доказательство несложно (гл. 2, § 9). Из свойств групп следует, что если  $G_a$  пробегает все элементы группы, то это же верно и для  $G_c$  при фиксированном  $G_b$ . Поэтому в сумму (П4.9) входят те же, что и ранее, слагаемые, но в другом порядке. Именно этим свойством инвариантности следует воспользоваться в случае непрерывных групп. Другими словами, функцию  $\rho(\mathbf{a})$  следует выбрать таким образом, чтобы для любой функции  $f(\mathbf{a})$ , зависящей от элементов группы  $G(\mathbf{a})$ , выполнялось равенство

$$\int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{a}) \rho(\mathbf{a}) d\mathbf{a} = \int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{c}) \rho(\mathbf{a}) d\mathbf{a}, \quad (\text{П4.10})$$

где  $\mathbf{c}$  — параметры элемента группы

$$G(\mathbf{c}) = G(\mathbf{a}) G(\mathbf{b}) \quad (\text{П4.11})$$

при некотором фиксированном  $\mathbf{b}$ . Здесь через  $\mathbf{a}$  обозначен набор параметров  $a_1, a_2, \dots, a_r$ , а через  $d\mathbf{a}$  — элемент объема  $da_1 da_2 \dots da_r$ . Равенство

$$\int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{a}) \rho(\mathbf{a}) d\mathbf{a} = \int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{c}) \rho(\mathbf{c}) d\mathbf{c} \quad (\text{П4.12})$$

тривиально. Но в силу условия (П4.11) с фиксированным  $\mathbf{b}$  переменная  $\mathbf{c}$  является функцией параметров  $\mathbf{a}$  и  $\mathbf{b}$ , и

с помощью якобиана

$$\frac{\partial c}{\partial a} = \begin{vmatrix} \frac{\partial c_1}{\partial a_1} & \frac{\partial c_1}{\partial a_2} & \cdots & \frac{\partial c_1}{\partial a_r} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \frac{\partial c_r}{\partial a_1} & \cdots & \cdots & \frac{\partial c_r}{\partial a_r} \end{vmatrix} \quad (\text{П4.13})$$

мы можем перейти от интегрирования по переменной  $c$  к интегрированию по  $a$ . Отметим, что если параметр  $b$  фиксирован и  $c$  пробегает всю группу  $\mathcal{G}$ , то это же верно и для  $a$ . Поэтому тождество (П4.12) переходит в соотношение

$$\int_{\mathcal{G}} f(a) \rho(a) da = \int_{\mathcal{G}} f(c) \rho(c) \frac{\partial c}{\partial a} da.$$

Сравнивая его с исходным равенством (П4.10), приходим к заключению, что весовая функция  $\rho$  должна при любых  $a$  удовлетворять условию

$$\rho(c) \frac{\partial c}{\partial a} = \rho(a). \quad (\text{П4.14})$$

Предполагая существование такой функции  $\rho$ , мы можем выбрать любое удобное для нас значение переменной  $a$ , чтобы определить величину  $\rho(c)$ . Полагая  $a=0$ , имеем

$$\rho(c) = \rho(0) \left\| \left( \frac{\partial c}{\partial a} \right)_{a=0} \right\|. \quad (\text{П4.15})$$

Величина постоянной  $\rho(0)$  несущественна. Обычно выбирают значение  $\rho(0)=1$ . Доказать, что функция (П4.15) удовлетворяет условию (П4.14), оставляем читателю в качестве упражнения.

В случае конечных групп сумма по группе всегда возникает в виде

$$\frac{1}{g} \sum_{a=1}^g f(G_a), \quad (\text{П4.16})$$

где  $g$  — число элементов группы. Множитель  $g^{-1}$  обеспечивает равенство суммы (П4.16) единице при  $f(G_a)=1$ . В случае непрерывной группы число  $g$  следует заменить

объемом группы, определяемым как

$$V = \int_{\mathcal{G}} \rho(a) da.$$

Очевидно, что при таком определении интеграл

$$\frac{1}{V} \int_{\mathcal{G}} f(a) \rho(a) da \quad (\text{П4.17})$$

равен единице, если  $f(a) = 1$ . Таким образом, оба выражения (П4.16) и (П4.17) можно рассматривать как определения усреднения по группе. Теперь можно убедиться, что доказательства из гл. 4 остаются в силе при замене конечного усреднения (П4.16) непрерывным усреднением (П4.17). Естественно, при этом предполагается, что объем группы конечен. Группы, для которых это условие выполнено (к ним, в частности, относятся группы вращений и унитарные группы), называются «компактными». Хотя большинство групп, представляющих интерес с точки зрения физики, являются компактными, имеются группы, такие, как группа Лоренца, группа трансляций (гл. 15), которые не относятся к этой категории.

В случае группы  $\mathcal{R}_2$  функциональное соотношение между параметрами  $a$ ,  $b$  и  $c$ , входящими в формулу (П4.11), есть просто  $c = a + b$ , так что  $dc/da = 1$ . Следовательно, объем группы равен

$$\int_0^{2\pi} da = 2\pi,$$

чем обусловлены соотношения ортогональности (7.14), понимаемые как частный случай формулы (4.25).

В случае группы  $\mathcal{R}_3$  соотношения между параметрами  $a$ ,  $b$  и  $c$  не столь просты. Воспользуемся векторным представлением для вращений, соответствующих этим параметрам. Направим ось  $z$  вдоль оси вращения  $R(b)$ . В этом случае матрица  $R(b)$  имеет простой вид

$$R(b) = \begin{pmatrix} \cos b & -\sin b & 0 \\ \sin b & \cos b & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ось вращения  $\mathbf{R}(\mathbf{a})$  может иметь любое направление, но поскольку нас интересует значение якобиана при  $\mathbf{a} = 0$ , мы можем считать угол вращения малым и представить матрицу  $\mathbf{R}(\mathbf{a})$  в виде суммы единичной матрицы и матрицы инфинитезимального оператора (7.24):

$$\mathbf{R}(\mathbf{a}) \approx \begin{pmatrix} 1 & -a_z & a_y \\ a_z & 1 & -a_x \\ -a_y & a_x & 1 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, произведение  $\mathbf{R}(\mathbf{a})\mathbf{R}(\mathbf{b})$  равно

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\mathbf{c}) = \mathbf{R}(\mathbf{a})\mathbf{R}(\mathbf{b}) = \\ = \begin{pmatrix} \cos b - a_z \sin b & -\sin b - a_z \cos b & a_y \\ a_z \cos b + \sin b & -a_z \sin b + \cos b & -a_x \\ -a_y \cos b + a_x \sin b & a_y \sin b + a_x \cos b & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{П4.18})$$

Нам остается, исходя из этой матрицы, найти параметры  $\mathbf{c}$ . Угол  $c$  можно найти, приравняв след матрицы  $\mathbf{R}(\mathbf{c})$  следу матрицы поворота на угол  $c$ , т. е. величине  $(1 + 2 \cos c)$ . Отсюда получаем  $\cos c = \cos b - a_z \sin b$ . Поэтому с учетом малости  $a_z$  имеем  $c = b + a_z$ . Чтобы найти направление вектора  $\mathbf{c}$ , воспользуемся тем, что он инвариантен относительно вращения  $\mathbf{R}(\mathbf{c})$ :

$$\mathbf{R}(\mathbf{c})\mathbf{c} = \mathbf{c}. \quad (\text{П4.19})$$

Используя равенство (П4.19), нужно соблюдать известную осторожность и помнить о том, что приближение (П4.18) для матрицы  $\mathbf{R}(\mathbf{c})$  справедливо лишь с точностью до членов первого порядка по  $\mathbf{a}$ . Однако из (П4.19) и унитарности преобразований вращения следует, что и  $\mathbf{R}^\dagger(\mathbf{c})\mathbf{c} = \mathbf{c}$ , так что  $\{\mathbf{R}(\mathbf{c}) - \mathbf{R}^\dagger(\mathbf{c})\}\mathbf{c} = 0$ . Это условие выражается тремя уравнениями

$$\begin{aligned} -2(\sin b + a_z \cos b)c_y + [a_y(1 + \cos b) - a_x \sin b]c_z &= 0, \\ 2(\sin b + a_z \cos b)c_x - [a_x(1 + \cos b) + a_y \sin b]c_z &= 0, \\ [-a_y(1 + \cos b) + a_x \sin b]c_x + [a_y \sin b + a_x(1 + \cos b)]c_y &= 0. \end{aligned}$$

Следовательно, отношение компонент  $c_x$ ,  $c_y$  и  $c_z$  вектора  $\mathbf{c}$  равно

$$\{a_y \sin b + a_x(1 + \cos b)\} : \{-a_x \sin b + a_y(1 + \cos b)\} :$$

$2\{\sin b + a_z \cos b\}$  или, с точностью до членов первого порядка по  $a$ ,

$$\frac{1}{2}\{a_y + a_x(1 + \cos b)/\sin b\} : \frac{1}{2}\{-a_x + a_y(1 - \cos b)/\sin b\} : 1.$$

Ранее мы видели, что  $c = b + a_z$ . Поэтому окончательно с точностью до членов первого порядка по  $a$  имеем

$$c_x = \frac{1}{2}b\{a_y + a_x(1 + \cos b)/\sin b\},$$

$$c_y = \frac{1}{2}b\{-a_x + a_y(1 + \cos b)/\sin b\},$$

$$c_z = b + a_z.$$

Теперь вычисляем искомый якобиан

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial a} = \begin{vmatrix} \frac{1}{2}b(1 + \cos b)/\sin b & \frac{1}{2}b & 0 \\ -\frac{1}{2}b & \frac{1}{2}b(1 + \cos b)/\sin b & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \\ = \frac{1}{2}b^2(1 + \cos b)/\sin^2 b. \end{aligned}$$

В пределе при  $a \rightarrow 0$  можно положить  $b = c$ , и мы получим выражение для весовой функции

$$\rho(c) = \frac{2 \sin^2 c}{c^2(1 + \cos c)} = \frac{2(1 - \cos c)}{c^2}. \quad (\text{П4.20})$$

Объем группы, определенный выше, равен

$$V = \int_{\mathcal{G}} \frac{2(1 - \cos a)}{a^2} da_x da_y da_z.$$

Переходя к сферическим координатам для вектора  $a$ , получаем

$$V = \int_{a=0}^{\pi} \frac{2(1 - \cos a)}{a^2} a^2 da \iint d\Omega = 8\pi^2.$$

Тогда среднее по группе (П4.17) принимает вид

$$\frac{1}{4\pi^2} \int_a f(a)(1 - \cos a) da d\Omega. \quad (\text{П4.21})$$

В случае функции  $f(a)$ , не зависящей от направления вектора  $a$  (этому условию удовлетворяет любая функция

классов сопряженности, например характер представления), среднее принимает вид

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} f(a)(1 - \cos a) da. \quad (\text{П4.22})$$

Заменяв конечную сумму в формуле (4.25а) средним (П4.22), получим соотношение ортогональности для характеров представлений группы  $\mathcal{R}_3$ .

$$\frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} \chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} (1 - \cos a) da = \delta_{j_1 j_2} \quad (\text{П4.23})$$

В правильности этого соотношения можно убедиться воспользовавшись формулой (7.42) для характеров. Следует, однако, отметить, что соотношение ортогональности не выполняется для двузначных представлений, т. е. при полуцелых значениях параметра  $j$ . Ортогональность характеров этих представлений можно восстановить, расширив область изменения угла до  $2\pi$ . В этой области представления с полуцелыми  $j$  однозначны. Далее о таком расширении группы  $\mathcal{R}_3$  см. гл. 7, § 6 и гл. 18, § 13, п. В.

Если вместо  $a_1, a_2$  и  $a_3$  взять в качестве параметров вращения углы Эйлера  $\alpha, \beta$  и  $\gamma$ , то можно показать (гл. 20, § 5), что весовая функция равна  $\rho(\alpha, \beta, \gamma) = \sin \beta$ , так что среднее по группе принимает вид

$$\frac{1}{8\pi^2} \int_{\gamma=0}^{2\pi} \int_{\beta=0}^{\pi} \int_{\alpha=0}^{2\pi} f(\alpha, \beta, \gamma) \sin \beta d\alpha d\beta d\gamma. \quad (\text{П4.24})$$

Соотношение ортогональности для матричных элементов неприводимых представлений принимает с учетом формулы (4.23) вид

$$\begin{aligned} \frac{1}{8\pi^2} \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} D_{m_1 m_1}^{(j_1)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{m_2 m_2}^{(j_2)}(\alpha, \beta, \gamma) \sin \beta d\alpha d\beta d\gamma = \\ = \delta_{j_1 j_2} \delta_{m_1 m_1} \delta_{m_2 m_2} (2j_1 + 1)^{-1}. \end{aligned} \quad (\text{П4.25})$$

При полуцелых значениях  $j$  нужно опять удвоить область изменения параметров. Этого можно добиться разными способами, например увеличив область изменения угла  $\alpha$  до  $4\pi$ .



# МЕТОДЫ РАСЧЕТА АТОМНОЙ СТРУКТУРЫ

В § 1 проводится ряд подробных вычислений уровней энергии атома для конфигураций  $p^2$  и  $p^3$  в подкрепление качественных результатов, полученных в гл. 8. В § 2 мы возвращаемся к теории углового момента и группы  $\mathcal{R}_3$ ; здесь рассматриваются более сложные задачи, которые возникают при связывании более двух угловых моментов. Некоторые из сделанных выводов используются в § 3 для вычисления интенсивностей атомных переходов. В последних двух параграфах (§ 4 и 5) приводятся дополнительные сведения о влиянии симметрии кристаллического поля — кроме тех, которые приводились в т. 1, гл. 9, § 9.

## § 1. ЭНЕРГИИ ТЕРМОВ ДЛЯ КОНФИГУРАЦИЙ $p^2$ И $p^3$

Два валентных  $p$ -электрона

Сначала вычислим энергии трех термов  $^3P$ ,  $^1S$  и  $^1D$  для двух электронов, находящихся в оболочке с  $l=1$  (гл. 8, § 6, п. Г), пользуясь простейшим методом «диагональной суммы». Более сложный метод, требующий знания табличных коэффициентов, излагается в § 2. Мы воспользуемся тем обстоятельством, что, поскольку кулоновское отталкивание  $e^2/r_{12}$  инвариантно относительно вращений всех частиц, энергии независимы от  $M_L$  и диагональны по  $L$ . Это дает нам возможность выбрать любое удобное значение  $M_L$ . Матричные элементы кулоновского отталкивания проще всего вычислить в мультипликативном базисе  $m_1 m_2$  (а не в связанном базисе  $LM_L$ ). Далее, нам известно, что след матрицы не зависит от базиса. Обозначим искомые энергии термов через  $E_L$ , а диагональные матричные элементы в мультипликативном базисе — через  $E(m_1 m_2)$ . Тогда, рассматривая матрицу от-

дельно при каждом значении  $M$ , мы сможем вывести систему уравнений, связывающих  $E_L$  с  $E(m_1 m_2)$ .

Сначала возьмем максимальное значение  $M=2$ , при котором имеется единственное базисное состояние; тогда мы получим непосредственно  $E_D = E(11)$ . При значении  $M=1$  имеются два базисных состояния, так что  $E_P + E_D = E(10) = E(01)$ . При  $M=0$  имеются три базисных состояния, что дает  $E_S + E_P + E_D = E(1-1) + E(00) + E(-11)$ . Остается вычислить диагональные матричные элементы

$$E(m_1 m_2) = \\ = \iint dr_1 dr_2 u_{nl}^2(r_1) u_{nl}^2(r_2) Y_{m_1}^{(l)*}(\theta_1 \varphi_1) Y_{m_2}^{(l)*}(\theta_2 \varphi_2) Y_{m_1}^{(l)}(\theta_1 \varphi_1) \times \\ \times Y_{m_2}^{(l)}(\theta_2 \varphi_2) (e^2/r_{12}).$$

Это можно сделать без дополнительных усилий при любом  $l$ . Взаимодействие  $1/r_{12}$  разделяется на части, зависящие от каждого электрона; для этого нужно разложить данное взаимодействие по полиномам Лежандра с аргументом  $\cos \theta_{12}$  (где  $\theta_{12}$  — угол между векторами  $\mathbf{r}_1$  и  $\mathbf{r}_2$ ) и затем воспользоваться теоремой сложения сферических гармоник [формула (П4.8)]. Далее, интегралы по угловым переменным вычисляются с привлечением формулы (П4.6). Таким образом, выполнив разложение

$$e^2/r_{12} = \sum_{k=0}^{\infty} v_k(r_1, r_2) P_k(\cos \theta_{12})$$

и записав радиальный интеграл в виде

$$F^{(k)} = \iint r_1^2 r_2^2 dr_1 dr_2 u_{nl}^2(r_1) u_{nl}^2(r_2) v_k(r_1, r_2),$$

получаем

$$E(m_1 m_2) = \\ = \sum_{k \text{ (четное)}=0}^{2l} F^{(k)} C^2(kll, 000) C(kll, 0m_1 m_1) C(kll, 0m_2 m_2). \quad (\text{П5.1})$$

Верхний предел в сумме по  $k$  появился из-за векторного сложения величин  $k$ ,  $l$  и  $l$ ; при больших  $k$  коэффициенты  $C$  равны нулю. Ограничение четными  $k$  вытекает из учета четности в одночастичном интеграле (П4.6). При

$k=0$  все коэффициенты векторного сложения  $C$  принимают значение, равное единице, так что при  $l=1$  мы получаем простую формулу

$$E(m_1 m_2) = F^{(0)} + F^{(2)} C(211, 000) C(211, 0m_1 m_1) C(211, 0m_2 m_2).$$

Взяв известные значения коэффициентов связи (т. 1, задача 7.8), можно выразить  $E(m_1 m_2)$ , а следовательно, и  $E_L$  через два радиальных интеграла  $F^{(0)}$  и  $F^{(2)}$ :

$$E_P = F^{(0)} - \frac{1}{5} F^{(2)}, \quad E_D = F^{(0)} + \frac{1}{25} F^{(2)}, \quad E_S = F^{(0)} + \frac{2}{5} F^{(2)}. \quad (\text{П5.2})$$

Из определения интеграла  $F^{(k)}$  явствует, что он положителен, поскольку функция  $v_k(r_1, r_2)$  имеет вид  $v_k(r_1, r_2) = r_{<}^k / r_{>}^{k+1}$ , где  $r_{<}$  — наименьшее, а  $r_{>}$  — наибольшее из значений  $r_1$  и  $r_2$ . Не вычисляя в явной форме величину  $F^{(2)}$ , что потребовало бы знания радиальных волновых функций  $u_{nl}(r)$ , можно видеть, что энергии термов удовлетворяют правилу Хунда. Можно вычислить отношение  $(E_S - E_P) / (E_D - E_P)$  энергий возбуждения термов  $^1S$  и  $^1D$  (над энергией основного состояния, терм  $^3P$ ), и оно оказывается равным 2,5. Экспериментальное значение этого отношения в атоме углерода ( $Z=6$ ), где имеются два валентных электрона в  $2p$ -оболочке, равно 2,1. Небольшое расхождение обусловлено примесью высших состояний, например состояния, получаемого при помещении одного валентного электрона в  $3p$ -оболочку. В конце концов мы использовали всего лишь первое приближение теории возмущений.

### Три валентных $p$ -электрона

Энергии трех возможных термов  $^4S$ ,  $^2P$  и  $^2D$  (гл. 8, § 6, п. Г) можно вычислить, естественным образом обобщив метод, применявшийся в случае двух частиц, с использованием мультипликативного базиса  $m_1 m_2 m_3$ . Но такой метод становится очень трудоемким, когда число электронов больше трех; поэтому обычно пользуются более сложным методом, известным под названием метода генеалогических коэффициентов. Основная идея этого метода проста.

Любая антисимметричная функция  $\Psi_{SL}(1\ 2\ 3)$  трех частиц с одинаковыми  $nl$  обязательно должна быть антисимметричной относительно частиц 1 и 2. Следовательно, можно написать

$$\Psi_{SL}(1\ 2\ 3) = \sum_{\Phi} a_{\Phi} \{ \Phi(1\ 2) \psi(3) \}_{SLM_S M_L}, \quad (\text{П5.3})$$

где  $\Phi$  пробегает по всем термам двух валентных электронов, а фигурная скобка соответствует векторной связи функции  $\Phi$  с одночастичной волновой функцией третьего электрона 3 (таким способом получают полные  $S$  и  $L$ ).

Нам нужно вычислить энергии термов

$$F_{SL} = \left( \Psi_{SL}(1\ 2\ 3) \left| \sum_{i < j}^3 e^2 / r_{ij} \right| \Psi_{SL}(1\ 2\ 3) \right),$$

но ввиду антисимметрии функции  $\Psi$  вклад каждой пары электронов одинаков и сумма равна утроенному вкладу любой из пар, например электронов 1 и 2. Тогда с учетом выражения (П5.3) имеем

$$F_{SL} = 3 \sum_{\Phi} |a_{\Phi}|^2 (\Phi(1\ 2) | e^2 / r_{12} | \Phi(1\ 2)) = 3 \sum_{\Phi} |a_{\Phi}|^2 E_{\Phi}, \quad (\text{П5.4})$$

где  $E_{\Phi}$  — энергии термов двухчастичной системы. При выводе выражения (П5.4) мы взяли интеграл по координатам частицы 3, который тривиален и дает в силу нормировки множитель единицу, так как оператор теперь не зависит от частицы 3. Мы ввели также коэффициенты связи, входящие в выражение (П5.3), и выполнили суммирование по всем значениям  $M_S$  и  $M_L$ , допустимым для  $\Phi$ . Эти суммы вновь приводят к единичному множителю в силу нормировки коэффициентов связи, а также вследствие того, что  $E_{\Phi}$  не зависит от значений  $M$ .

Поскольку энергии термов для двух электронов мы вычислили ранее, нам остается вычислить лишь генеалогические коэффициенты  $a_{\Phi}$ , которые позволяют найти энергии термов  $F_{SL}$  для трех электронов. Для этого был разработан ряд сложных методов, которыми были рассчитаны обширные таблицы. Мы вычислим эти коэффициенты элементарным методом. В силу нормировки функции  $\Psi$  коэффициенты  $a_{\Phi}$  должны быть нормированы

Таблица П.4

| $\Psi \backslash \Phi$ | $^3P$    | $^1D$    | $^1S$         |
|------------------------|----------|----------|---------------|
| $^4S$                  | 1        | 0        | 0             |
| $^2D$                  | $\alpha$ | $\beta$  | 0             |
| $^2P$                  | $\gamma$ | $\delta$ | $\varepsilon$ |

В соответствии с равенством  $\sum_{\Phi} |a_{\Phi}|^2 = 1$ , причем для того, чтобы использовать (П5.4), знать фазу величины  $a_{\Phi}$  не требуется. Коэффициенты удобно представить в виде табл. П.4. Нулевые значения некоторых элементов таблицы прямо следуют из правила векторного сложения угловых моментов; например, полное значение  $S = 3/2$  нельзя получить связыванием одночастичного спина электрона 3 с «родительским» спином  $S = 0$ , а полное значение  $L = 2$  нельзя получить, связывая  $l = 1$  с «родительским» значением  $^1S$ . Из условия нормировки находим значения первой строки (значения энергии основного состояния):

$$[F(^4S) = 3E_P = 3F^{(0)} - (^3/5) F^{(2)}] \quad (\text{П5.5a})$$

с учетом выражений (П5.2). Чтобы найти элементы второй строки, воспользуемся формулой (8.44), заметив, что выражение (П5.4) справедливо при любом инвариантном двухчастичном взаимодействии, а следовательно, и при  $\mathcal{M}$  в (8.44). Поскольку  $P'_{ij} = -1$  в терме  $^3P$  и  $P'_{ij} = +1$  в терме  $^1D$ , находим  $3(-\alpha^2 + \beta^2) = 3 - 9/4 - 1/2 \cdot 3/2 = 0$ . В сочетании с условием нормировки  $\alpha^2 + \beta^2 = 1$  этот результат дает  $\alpha^2 = \beta^2 = 1/2$ . Взяв эти значения для  $\alpha^2$  и  $\beta^2$ , мы получаем энергию терма  $^2D$  в виде

$$F(^2D) = \frac{3}{2} E_P + \frac{3}{2} E_D = 3F^{(0)} - \frac{6}{25} F^{(2)}. \quad (\text{П5.5б})$$

Аналогичные выкладки дают для третьей строки  $3(-\gamma^2 + \delta^2 + \varepsilon^2) = 3 - 9/4 - 1/2 \cdot 3/2$ , что совместно с условием нормировки дает  $j^2 = 1/2$ ,  $\delta^2 + \varepsilon^2 = 1/2$ . Чтобы найти  $\delta^2$  и  $\varepsilon^2$ , возьмем двухчастичный оператор  $\sum_{i < j} [I(i) + I(j)]^2$  точно так же, как мы брали соответствующий спиновый

оператор при выводе формулы (8.43). Оператор имеет вид

$$\sum_{i < j} [l(i) + l(j)]^2 = L^2 - t(2-t)l(l+1).$$

Применяя его к терму  ${}^2P$ , с учетом выражения (П5.4) получаем  $3(2\gamma^2 + 6\delta^2) = 2 + 6$ . Зная, что  $\gamma^2 = 1/2$ , находим отсюда  $\delta^2 = 5/18$ ,  $\epsilon^2 = 4/18$  и, таким образом, завершаем заполнение третьей строки таблицы; для энергии терма  ${}^2P$  получаем выражение

$$F({}^2P) = 3/2 E_P + 5/6 E_D + 4/6 E_S = 3F^0. \quad (\text{П5.5в})$$

Исходя из выражений (П5.5) для энергий трех термов, можно вновь вычислить отношение энергий возбуждения:  $[F({}^2P) - F({}^4S)]/[F({}^2D) - F({}^4S)] = 1,67$ . Экспериментальное значение этого отношения в атоме азота ( $Z=7$ ) с тремя валентными  $2p$ -электронами равно 1,5.

Данный пример показывает, как применяется метод генеалогических коэффициентов в случае более сложных атомов, а также в ядерной физике. Существуют и более последовательные способы нахождения генеалогических коэффициентов, основанные на использовании других групп — прежде всего группы  $U_{2l+1}$  унитарных преобразований в  $(2l+1)$ -мерном пространстве волновых функций  $\psi_{lm}$  для одной частицы, а также ее различных подгрупп (гл. 18, § 10).

## § 2. КОЭФФИЦИЕНТЫ СВЯЗИ (6J- И 9J-СИМВОЛЫ)

Как было показано, коэффициенты Клебша — Гордана (коэффициенты векторной связи) играют существенную роль при построении волновых функций и вычислении матричных элементов. Эти коэффициенты вычисляются на основе только групповых свойств  $\mathcal{R}_3$  и не зависят ни от каких других свойств физической системы, кроме ее симметрии. При сложении более чем двух угловых моментов возникают произведения коэффициентов Клебша — Гордана. При этом некоторые суммы таких произведений встречаются достаточно часто, и целесообразно ввести для них специальные обозначения и составить таблицу их численных значений (подробнее см. в книгах Бринка и Сэтклера, а также Ротенберга и др. из литературы к гл. 7). Очевидно, что с увеличением числа складываемых угловых

моментов сложность задачи возрастает неограниченно; но практический интерес представляют лишь первые шаги на этом пути. Методы, излагаемые в данном параграфе, применимы к большинству групп, но полностью описаны лишь для группы  $\mathcal{R}_3$ . Для абелевой группы  $\mathcal{R}_2$  эти методы становятся тривиальными.

Представление произведения  $\mathbf{D}^{(j_1)} \otimes \mathbf{D}^{(j_2)}$ , как видно из формулы (7.44), допускает простое разложение; при этом существует единственный базисный вектор, который преобразуется неприводимым образом при данных  $jm$  и при условии  $|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2$ . Коэффициенты Клебша — Гордана  $C(j_1 j_2, m_1 m_2 m)$  определяются как коэффициенты разложения этой функции в мультипликативном базисе  $m_1 m_2$ . Представление более сложного произведения  $\mathbf{D}^{(j_1)} \otimes \mathbf{D}^{(j_2)} \otimes \mathbf{D}^{(j_3)} \otimes \mathbf{D}^{(j_4)}$  не будет иметь столь простого разложения, и, вообще говоря, данное неприводимое представление  $\mathbf{D}^{(j)}$  может появляться в его разложении несколько раз. Поэтому такое разложение не является единственным и одним лишь индексом  $jm$  не будут однозначно определяться базисные функции разложенного представления. Разложение можно провести в два этапа: сначала нужно по отдельности разложить два произведения

$$\mathbf{D}^{(j_1)} \otimes \mathbf{D}^{(j_2)} = \sum_{j_{12}=|j_1-j_2|}^{(j_1+j_2)} \mathbf{D}^{(j_{12})}, \quad (\text{П5.6})$$

$$\mathbf{D}^{(j_3)} \otimes \mathbf{D}^{(j_4)} = \sum_{j_{34}=|j_3-j_4|}^{(j_3+j_4)} \mathbf{D}^{(j_{34})},$$

а затем — произведение

$$\mathbf{D}^{(j_{12})} \otimes \mathbf{D}^{(j_{34})} = \sum_{j=|j_{12}-j_{34}|}^{j_{12}+j_{34}} \mathbf{D}^{(j)}. \quad (\text{П5.7})$$

Каждая из этих операций выполняется однозначно и дает набор базисных векторов, который мы обозначим символом  $|j_{12} j_{34}, jm\rangle$ . Другой набор базисных векторов можно получить, взяв множители в исходном произведении в другом порядке; например, если взять  $\mathbf{D}^{(j_1)} \otimes \mathbf{D}^{(j_3)}$  и  $\mathbf{D}^{(j_2)} \otimes \mathbf{D}^{(j_4)}$ , а затем  $\mathbf{D}^{(j_{13})} \otimes \mathbf{D}^{(j_{24})}$ , то мы получим базисные векторы  $|j_{13} j_{24}, jm\rangle$ . Преобразование, связывающее указанные два набора базисных векторов, обычно запи-

сывают в виде

$$j_{12}j_{34}, jm\rangle = \sum_{i_1, i_{24}} [(2j_{12}+1)(2j_{34}+1)(2j_{13}+1)(2j_{24}+1)]^{1/2} \times \\ \times \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix} |j_{13}j_{24}, jm\rangle, \quad (\text{П5.8})$$

причем набор значений  $j$  в больших фигурных скобках называется  $9j$ -символом. Поскольку функции с разными  $j$  или  $m$  взаимно ортогональны, в сумме (П5.8) значения  $j$  и  $m$  фиксированы; применив повышающий оператор  $J_+$ , нетрудно показать, что эти коэффициенты не зависят от  $m$ . Из способа их построения явствует, что любой из базисных векторов в обеих частях равенства (П5.8) может быть записан в виде суммы векторов  $|m_1 m_2 m_3 m_4\rangle$  в простом мультипликативном базисе с коэффициентами, равными произведениям трех коэффициентов Клебша—Гордана. Поэтому в силу их ортогональности можно из выражения (П5.8) получить выражение для  $9j$ -символа в виде суммы по произведениям шести коэффициентов Клебша—Гордана. Но это не требуется, так как существуют таблицы  $9j$ -символов. Нормировочный множитель с квадратным корнем введен в формулу (П5.8) потому, что при таком определении  $9j$ -символ обладает большим числом свойств симметрии. Отражение относительно любой из диагоналей не изменяет его, тогда как перестановка любой пары строк или столбцов вводит множитель  $(-1)^p$ , где  $p$ —сумма всех девяти значений  $j$  в  $9j$ -символе.

Как некое обобщение теоремы Вигнера—Экарта (7.53) можно рассматривать то, что матричные элементы связанных операторов в связанной системе тоже выражаются через  $9j$ -символы. Рассмотрим систему из двух компонент, например две частицы или орбитальный и спиновый угловые моменты одной частицы. Будем различать компоненты индексами 1 и 2 и запишем связанную волновую функцию в виде  $|j_1 j_2 j_m\rangle$ . Выберем неприводимые наборы  $R_{q_1}^{(k_1)}$  и  $S_{q_2}^{(k_2)}$  операторов в каждой компоненте системы (гл. 7, § 4, п. Е) и свяжем их друг с другом, образовав тем самым неприводимый набор по отношению к одно-



временным вращениям:

$$T_Q^{(K)} = \sum_{q_1 q_2} C(k_1 k_2 K, q_1 q_2 Q) R_{q_1}^{(k_1)} S_{q_2}^{(k_2)}. \quad (\text{П5.9})$$

Оператор  $R_{q_1}^{(k_1)}$  является единичным, если речь идет о второй подсистеме, и, наоборот, оператор  $S_{q_2}^{(k_2)}$  — единичный по отношению к первой. На основании теоремы Вигнера—Эккарта и определения  $9j$ -символа [формула (П5.8)] находим

$$\begin{aligned} \langle j_1 j_2 j m | T_Q^{(K)} | j'_1 j'_2 j' m' \rangle &= \\ &= (-1)^{2K} C(j' K j, m' Q m) \langle j_1 j_2 j | T^{(K)} | j'_1 j'_2 j' \rangle = \\ &= (-1)^{2K} C(j' K j, m' Q m) [(2j' + 1)(2K + 1) \times \\ &\quad \times (2j_2 + 1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ j'_1 & j'_2 & j' \\ k_1 & k_2 & K \end{Bmatrix} \langle j_1 j_2 | R^{(k_1)} S^{(k_2)} | j'_1 j'_2 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{П5.10})$$

Эту формулу можно получить, подставив все коэффициенты Клебша—Гордана, которые фигурируют в левой части равенства (5.10), «размыкая» различные связи и применяя теорему Вигнера—Эккарта для каждой подсистемы в отдельности. Получающаяся сумма будет тогда тождественна сумме, стоящей в формуле (П5.8). В этом нет ничего неожиданного, поскольку разделение двух компонент в (П5.10) во многом сходно с преобразованием (П5.8), если учесть соответствие  $(j_1 j_2 j_3 j_4 j_{12} j_{34} j_{13} j_{24} j) \rightarrow (j_1 j_2 j'_1 j'_2 j' j' k_1 k_2 K)$ . Важное значение формулы (П5.10) состоит в том, что в ней зависимость матричного элемента от  $K$ ,  $j$  и  $j'$  дается в явном виде известными функциями, причем не требуется детального определения операторов. Если в мультипликативном базисе  $|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$  волновая функция разделяется, то разделяется и приведенный матричный элемент:

$$\langle j_1 j_2 | R^{(k_1)} S^{(k_2)} | j'_1 j'_2 \rangle = \langle j_1 | R^{(k_1)} | j'_1 \rangle \langle j_2 | S^{(k_2)} | j'_2 \rangle. \quad (\text{П5.11})$$

Имеется ряд частных случаев этих формул, и они чаще всего встречаются при расчетах. Если один из элементов  $9j$ -символа равен нулю, то две другие пары должны быть равны друг другу в силу условия треугольности, оставляющего только шесть независимых значений  $j$ . В этом

случае записывают

$$\begin{Bmatrix} a & b & e \\ c & d & e \\ f & f & 0 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{b+c+e+f}}{[(2e+1)(2f+1)]^{1/2}} \begin{Bmatrix} a & b & e \\ d & c & f \end{Bmatrix} \quad (\text{П5.12})$$

и набор значений  $a, b, c, d, e, f$  в правой части называют  $6j$ -символом. Как и ранее, численный множитель в (П5.12) выделяют, чтобы наделить большей симметрией  $6j$ -символ. В частности, последний не изменяется при перестановке любой пары столбцов или при обмене любой пары значений в верхней строке со стоящими непосредственно под ними в нижней строке. В силу симметрии  $9j$ -символа соотношение вида (П5.12) существует для любого  $9j$ -символа, один из элементов которого равен нулю.

Положив  $j_4=0$ , получим из уравнения (П5.8) преобразование, связывающее два набора неприводимых базисных функций для системы с тремя значениями  $j$ :

$$\begin{aligned} |j_{12}j_3, jm\rangle &= \sum_{j_{13}} (-1)^{j_{12}+j_{13}+j_2+j_3} [(2j_{12}+1)(2j_{13}+1)]^{1/2} \times \\ &\times \begin{Bmatrix} j_1 & j_{12} & j_2 \\ j & j_{13} & j_3 \end{Bmatrix} |j_{13}j_2, jm\rangle. \end{aligned} \quad (\text{П5.13})$$

Из формулы (П5.10) можно получить два частных результата. Во-первых, полагая  $S_{q_2}^{(k_2)}=1$ , т. е. считая этот оператор единичным с  $k_2=0$ , мы получаем

$$\begin{aligned} \langle j_1j_2jm | \mathbf{R}_{q_1}^{(k_1)} | j'_1j'_2j'm' \rangle &= (-1)^{j_1+j_2+j'-k_1} C(j'k_1j, m'q_1m) \delta_{j_2j'_2} \times \\ &\times [(2j'+1)(2j_1+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} j & j' & k_1 \\ j'_1 & j_1 & j_2 \end{Bmatrix} \langle j_1 \| \mathbf{R}^{(k_1)} \| j'_1 \rangle, \end{aligned} \quad (\text{П5.14})$$

где зависимость от полных угловых моментов  $j$  и  $j'$  полностью дается известными функциями.

Второй частный случай получим, положив  $K=0$ , так что  $k_1=k_2$ ; тогда оператор  $T_0^{(0)}$  становится инвариантным и мы получаем

$$\begin{aligned} \langle j_1j_2jm | T_0^{(0)} | j'_1j'_2j'm' \rangle &= \delta_{jj'} \delta_{mm'} (-1)^{j'_1+j_2+j-k_1} \times \\ &\times \left( \frac{(2j_1+1)(2j_2+1)}{(2k_1+1)} \right)^{1/2} \begin{Bmatrix} j_1 & j'_1 & k_1 \\ j'_2 & j_2 & j \end{Bmatrix} \langle j_1j_2 \| \mathbf{R}^{(k_1)} \mathbf{S}^{(k_1)} \| j'_1j'_2 \rangle. \end{aligned} \quad (\text{П5.15})$$

В этой формуле зависимость от  $j$  матричного элемента инварианта  $T_0^{(0)}$  выражается через  $6j$ -символ.

Явный вид инвариантного оператора находим из формулы (П5.9):

$$T_0^{(0)} = \sum_{q_1} (-1)^{k_1 - q_1} (2k_1 + 1)^{-1/2} R_{q_1}^{(k_1)} S_{-q_1}^{(k_1)},$$

если подставить в нее известные коэффициенты Клебша — Гордана. Но обычно пишут

$$R^{(k_1)} \cdot S^{(k_1)} = (-1)^{k_1} (2k_1 + 1)^{1/2} T_0^{(0)} = \sum_{q_1} (-1)^{q_1} R_{q_1}^{(k_1)} S_{-q_1}^{(k_1)}$$

и называют  $(R^{(k_1)} \cdot S^{(k_1)})$  скалярным произведением двух неприводимых наборов операторов  $R_{q_1}^{(k_1)}$  и  $S_{q_1}^{(k_1)}$ . В частности, для операторов углового момента с  $k=1$  имеем

$$J \cdot J = -J_{+1}J_{-1} - J_{-1}J_{+1} + J_0J_0 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2,$$

что согласуется с обычным определением скалярного произведения двух векторов. Нужно помнить, что эти два способа определения инварианта  $T_0^{(0)}$  различаются множителем  $(-1)^{k_1} (2k_1 + 1)^{1/2}$ .

Некоторые из полученных выше формул можно было бы вывести и непосредственно из известных ранее формул без применения эквивалентных операторов. Например, формулы (8.28) и (8.39) — это частные случаи формулы (П5.15), а на основании формулы (П5.14) мы в следующем параграфе выведем выражения для относительных интенсивностей переходов.

### § 3. ИНТЕНСИВНОСТИ ПЕРЕХОДОВ

Мы уже говорили о правилах отбора для испускания и поглощения электрического дипольного излучения в гл. 5, § 4 и гл. 8, § 1. В случае  $LS$ -связи для многоэлектронного атома они таковы:

$$S' = S, \quad J' = J, J \pm 1, \quad L' = L \pm 1, \quad (\text{П5.16})$$

причем, как обычно, исключаются переходы вида  $0 \rightarrow 0$  по  $L$  и  $J$ . Здесь мы обозначили начальные состояния через  $SLJ$ , а конечные — через  $S'L'J'$ . Эти правила следуют непосредственно из того, что дипольный оператор инвариантен в спиновом пространстве и является вектор-

ным оператором в координатном пространстве. Теперь можно на основании теоремы Вигнера—Эккарта вычислить отношения интенсивностей перехода между двумя термами при разных  $J$  и  $J'$ . Фактически нам необходимо обобщение этой теоремы, которое дается формулой (П5.14). Установив соответствие  $(j_1 j_2 j'_1 j'_2 j j' m m' k_1) \rightarrow (LS L' S J J' M M' 1)$  и обозначив дипольный оператор через  $V_q^{(1)}$ , имеем

$$\langle LSJM | V_q^{(1)} | L'SJ'M' \rangle = (-1)^{L+S+J'-1} C(J' 1 J, M' q M) \times \\ \times [(2L+1)(2J'+1)]^{1/2} \begin{Bmatrix} J & J' & 1 \\ L & L & S \end{Bmatrix} \langle LS || V^{(1)} || L'S \rangle.$$

Интенсивности переходов обычно определяются как суммы квадратов матричных элементов оператора  $V_q^{(1)}$ , просуммированных по всем возможным проекциям  $M$  и  $M'$  начальных и конечных состояний. Нормировка коэффициентов Клебша—Гордана дает

$$\sum_{M'} C^2(J' 1 J, M' q M) = 1,$$

так что интенсивность перехода имеет вид

$$S(J, J') = (2J+1)(2L+1)(2J'+1) \begin{Bmatrix} J & J' & 1 \\ L & L & S \end{Bmatrix}^2 \times \\ \times \langle LS || V^{(1)} || L'S \rangle^2. \quad (\text{П5.17})$$

Таким образом, не имея никаких детальных сведений о волновой функции, можно сказать, что при данных  $L$  и  $L'$  зависимость от  $J$  и  $J'$  дается формулой

$$S(J, J') \sim (2J+1)(2J'+1) \begin{Bmatrix} J & J' & 1 \\ L & L & S \end{Bmatrix}^2.$$

Это соотношение называется правилом интенсивностей Хёня—Кронига. Простое правило сумм можно получить, если просуммировать интенсивности по всем конечным состояниям. Согласно формуле (П5.13),  $6j$ -символы должны удовлетворять условию нормировки

$$\sum_{j_{12}} (2j_{12}+1)(2j_{13}+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_{12} & j_2 \\ j & j_{13} & j_3 \end{Bmatrix}^2 = 1.$$

Просуммировав по  $J'$ , получим для зависимости полной интенсивности от  $J$  формулу

$$\sum_{J'} S(J, J') \sim (2J + 1),$$

которая эквивалентна другому хорошо известному эмпирическому правилу.

Для квадрупольных переходов интенсивности можно вычислить точно так же по формуле вида (П5.17), но с  $k_1 = 2$  вместо  $k_1 = 1$ .

Если уровень энергии с угловым моментом  $J$  расщепляется на  $2J + 1$  подуровня за счет магнитного поля (гл. 8, § 5, случай атома водорода и рис. 8.1, в), относительные интенсивности переходов между состояниями с разными  $M$  можно найти, пользуясь вышеприведенными формулами. В качестве примера рассмотрим излучение, поляризованное в плоскости  $xu$ , так что для дипольного оператора  $\zeta = \pm 1$  и, следовательно,  $M' = M \mp 1$ . Тогда, опуская суммирование, приводящее к выражению (П5.17), получаем для интенсивностей формулу

$$S(J, J', M, M') = C^2(J' 1 J, M' \pm 1 M) (2L + 1) (2J' + 1) \times \\ \times \left\{ \begin{matrix} J & J' & 1 \\ L' & L & S \end{matrix} \right\}^2 \langle LS \| \mathbf{V}^{(1)} \| L'S \rangle^2.$$

Так, например, отношение интенсивностей для двух переходов  $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{3/2}$  и  $1s_{1/2} \rightarrow 2p_{1/2}$ , показанных на рис. 8.1, в (для обоих переходов  $M = -1/2$  и  $M' = +1/2$ ), равно

$$\frac{C^2(3/2 1 1/2, 1/2 -1 -1/2) \times 4 \times \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 3/2 & 1 \\ 1 & 0 & 1/2 \end{matrix} \right\}^2}{C^2(1/2 1 1/2, 1/2 -1 -1/2) \times 2 \times \left\{ \begin{matrix} 1/2 & 1/2 & 1 \\ 1 & 0 & 1/2 \end{matrix} \right\}^2} = \frac{1}{2}.$$

Значения коэффициентов берутся из книги Ротенберга и др. (см. литературу к гл. 7). Из-за наличия здесь коэффициентов Клебша—Гордана это отношение отличается от значения 2, даваемого формулой (П5.17) для отношения полных интенсивностей переходов из  $1s_{1/2}$  в  $2p_{3/2}$  и  $2p_{1/2}$ .

#### § 4. ПОТЕНЦИАЛ КРИСТАЛЛИЧЕСКОГО ПОЛЯ

Результаты, изложенные в гл. 9, § 9, п. Б, не зависят от детального вида потенциала кристаллического поля, а зависят лишь от его симметрии, определяемой кристаллической структурой. Но мы установили там только характер расщепления мультиплетов и ничего не знаем о порядке следования расщепленных подуровней или о разностях энергии между ними. Если мы хотим выяснить эти детали состояний в кристаллическом поле, то нам понадобится вычислить матричные элементы потенциала кристаллического поля в состояниях, найденных путем анализа симметрии. В данном параграфе мы исследуем потенциал кристаллического поля, а в следующем изложим методы вычисления матричных элементов.

Потенциал, создаваемый окружающими атомами или ионами, должен иметь форму, инвариантную относительно всех операций симметрии точечной группы, и, следовательно, преобразовываться по единичному представлению. В интересующей нас области этот потенциал будет также решением уравнения Лапласа и поэтому может быть разложен по сферическим гармоникам в виде

$$V_c = \sum_{kq} A_q^{(k)} r^k Y_q^{(k)}(\theta, \varphi). \quad (\text{П5.18})$$

Поскольку вращения могут лишь смешивать сферические гармоники с одинаковыми  $k$ , вклад в  $V_c$  каждого  $k$  должен также преобразовываться по единичному представлению точечной группы. Это налагает очень строгие ограничения на коэффициенты  $A_q^{(k)}$ . Мы проиллюстрируем эти ограничения на примере группы симметрии  $O$ .

Используя формулу (7.42) для характера представления  $\mathbf{D}^{(k)}$  и табл. 9.5, мы быстро находим, что при  $k=1, 2, 3$  и  $5$  представление  $\mathbf{D}^{(k)}$  не содержит ни одного инварианта относительно группы  $O$ , а при  $k=4$  содержит один такой инвариант.

Пусть ось  $z$ —ось максимальной симметрии; тогда можно также ограничить возможные значения  $q$ , встречающиеся в выражении (П5.18). Например, в случае группы  $O$  вращательная симметрия четвертого порядка относительно оси  $z$  означает, что значения  $q$  должны иметь вид  $q=4n$ , где  $n$ —целое число. Поэтому из коэф-

коэффициентов с  $k < 6$  возможны только  $A_0^{(0)}$ ,  $A_0^{(4)}$ ,  $A_4^{(4)}$  и  $A_{-4}^{(4)}$ . Далее, ввиду наличия только одного инварианта 4-го порядка коэффициенты  $A_0^{(4)}$ ,  $A_4^{(4)}$  и  $A_{-4}^{(4)}$  должны быть связаны между собой. Чтобы потенциал был инвариантным относительно вращений вокруг оси 4-го порядка  $x$  или  $y$ , должно выполняться соотношение  $A_{-4}^{(4)} = A_4^{(4)} = \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} A_0^{(4)}$  (задача П.8). Следовательно, потенциал поля кубической симметрии имеет вид

$$V_c = A_0^{(0)} + A_0^{(4)} r^4 \left\{ Y_0^{(4)} + \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} (Y_4^{(4)} + Y_{-4}^{(4)}) \right\} + \text{Члены с } k \geq 6. \quad (\text{П5.19})$$

В этом частном случае столь же просто выразить  $V$  через степени координат  $x$ ,  $y$  и  $z$  так, чтобы выражение имело требуемую симметрию. Отдельные слагаемые должны быть четными по  $x$ ,  $y$  и  $z$  и симметричными относительно перестановок  $x$ ,  $y$  и  $z$ . Следовательно, разложение должно иметь вид

$$V_c = A_0^{(0)} + \alpha (x^2 + y^2 + z^2) + \beta (x^4 + y^4 + z^4) + \gamma (x^2 y^2 + y^2 z^2 + z^2 x^2) + \text{Степени } \geq 6.$$

Потенциал должен также удовлетворять уравнению Лапласа  $\nabla^2 V_c = 0$ , что дает  $\alpha = 0$ ,  $\gamma = -3\beta$ . Этот результат тождествен выражению (П5.19), в чем нетрудно убедиться, подставив выражения (7.48) для сферических гармоник.

Можно найти численные значения отличных от нуля коэффициентов  $A_q^{(k)}$  для той или иной частной модели, например в случае потенциала, обусловленного точечными зарядами, расположенными в соседних узлах решетки. Но в таких моделях не учитываются поляризация ионов и обменные эффекты. Поэтому коэффициенты  $A_q^{(k)}$  обычно рассматривают как неопределенные параметры, которые нужно находить путем сравнения с экспериментом. Такой подход допустим, поскольку в силу ограничения (8.3), вытекающего из правила векторного сложения, отличные от нуля матричные элементы для электронных состояний с определенным угловым моментом дает лишь небольшое число членов в разложении (П5.18). Это означает, что можно, пользуясь лишь несколькими подгоночными параметрами  $A_q^{(k)}$ , удовлетворительно аппроксимировать все экспериментальные данные по теплоемкости, магнитной восприимчивости, оптическому поглощению и ЭПР.

В случае кубически-симметричного поля, действующего на ион ванадия в бромате ванадия, потенциал дается выражением (П5.19). Слагаемые с  $k > 4$  не требуется учитывать, поскольку мы рассматриваем  $d$ -электроны и одночастичные матричные элементы, имеющие вид  $\langle d | Y_q^{(k)} | d \rangle$ , в силу правила векторного сложения угловых моментов равны нулю при  $k > 4$ . Поскольку константа  $A_0^{(3)}$  дает одинаковый вклад во всех состояниях, расщепление кристаллического поля в бромате ванадия описывается одним параметром  $A_0^{(4)}$ .

## §5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ОТНОСИТЕЛЬНЫХ РАСЩЕПЛЕНИЙ НА ОСНОВЕ СИММЕТРИИ

Расчет расщепления в кристаллическом поле, основанный на параметрах  $A_q^{(k)}$ , — это, вообще говоря, сложная численная задача, требующая знания радиальных волновых функций электронов и точной формы многоэлектронных волновых функций. Но соотношения между некоторыми расщеплениями можно найти, руководствуясь только соображениями симметрии. Для этого пользуются теоремой Вигнера—Эккарта или, что по существу то же, эквивалентными операторами [формулы (4.62), (7.53); гл. 7, § 4, п. Ж].

Для примера мы вычислим отношение разностей энергии между тремя расщепленными компонентами  $A_2$ ,  $T_2$  и  $T_1$  уровня  $F$  во втором столбце на рис. 9.9. Потенциал в этом случае дается формулой (П5.19), и, как показано выше, слагаемые с  $k \geq 6$  не дают вклада. Далее, член  $A_0^{(0)}$ , инвариантный относительно группы  $\mathcal{R}_3$ , дает одинаковый вклад во все компоненты, и потому его можно не учитывать при вычислении разностей энергии. Таким образом, обе разности пропорциональны  $A_0^{(4)}$ , и свойство симметрии оператора определяется как  $k=4$  по отношению к группе  $\mathcal{R}_3$  и (инвариантность)  $A_1$  относительно группы  $O$ . Обозначим эту часть потенциала  $V_c$  через  $V(k=4, A_1)$ . Нам нужно найти матричные элементы  $\langle L=3, \Gamma^{(\alpha)} | V(k=4, A_1) | L=3, \Gamma^{(\alpha)} \rangle$  при  $\Gamma^{(\alpha)} = A_2, T_2$  и  $T_1$ . По виду эти матричные элементы весьма сходны с выражением (7.53), полученным на основе теоремы Вигнера—Эккарта для группы  $\mathcal{R}_3$ . Различие состоит лишь в том, что здесь для индексирования строк представлений



группы  $\mathcal{R}_3$  используется группа  $O$ , а не  $\mathcal{R}_2$ . Другими словами, операторы и волновые функции характеризуются теперь величинами  $L$  и  $T^{(\alpha)}$ , а не  $L$  и  $M$ .

Коэффициенты связи, которые необходимо использовать в теореме Вигнера—Эккарта в этом базисе, вообще говоря, неизвестны, а потому принято представлять операторы и волновые функции [в обычном  $M$ -базисе. Для оператора это уже сделано в формуле (П5.19), и можно написать

$$V(k=4, A_1) = V_0^{(4)} + \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} (V_4^{(4)} + V_{-4}^{(4)}). \quad (\text{П5.20})$$

Мы умышленно использовали обозначение  $V_q^{(4)}$  вместо  $Y_q^{(4)}$ , чтобы подчеркнуть, что истинный потенциал получается суммированием по всем электронам. Таким образом, величина  $Y_q^{(4)}$  относится к конкретному электрону, а величина  $V_q^{(4)}$  есть сумма таких слагаемых. Разумеется,  $V_q^{(4)}$  обладает теми же вращательными свойствами, а это все, что нас интересует в данный момент. Нетрудно вывести выражения для типичной волновой функции в  $M$ -базисе

$$|L=3, T_{\Sigma}^{(\alpha)}\rangle = \sum_M c_M^{(\alpha)} |L=3, M\rangle,$$

причем для практических вычислений составлены таблицы коэффициентов  $c_M^{(\alpha)}$ . В данном примере мы выведем их, рассматривая матрицу  $7 \times 7$  для оператора (П5.20) в  $M$ -базисе при  $L=3$  и затем диагонализуя ее. Из разложения  $D^{(3)} = A_2 \oplus T_1 \oplus T_2$  нам известно, что собственные значения должны содержать два вырождения третьего порядка.

Зависимость оператора (П5.20) от  $m$  ясно указывает на то, что слагаемое  $V_0^{(4)}$  дает вклад только в диагональные элементы матрицы, тогда как другие два слагаемых изменяют  $M$  на четыре единицы. Таким образом, очевидно, что матрица  $7 \times 7$  распадается на три матрицы  $2 \times 2$ : одну с  $M = \pm 2$ , другую с  $M = +1$  и  $-3$  и третью с  $M = -1$  и  $+3$ . При этом значение  $M=0$  отщепляется и соответствует собственному вектору. В итоге нам необходимо вычислить лишь несколько матричных элементов вида  $\langle L=3, M' | V_q^{(4)} | L=3, M \rangle$ , которые по теореме Вигнера—Эккарта связаны друг с другом соотношением

$$\langle L=3, M' | V_q^{(4)} | L=3, M \rangle = C(343, MqM') \langle L=3 || V^{(4)} || L=3 \rangle.$$

Поскольку нас интересуют лишь отношения, приведенный матричный элемент  $\langle L=3 \| V^4 \| L=3 \rangle$  можно не рассматривать, а коэффициенты связи  $C(343, MqM')$  можно найти в таблице. Таким способом найдены собственные

Таблица П.5

| Представление группы $O$ | Волновая функция                                                                                                                        | Энергетический сдвиг |
|--------------------------|-----------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|----------------------|
| $A_2$                    | $\{ L=3, M=2\rangle -  L=3, M=-2\rangle\} 2^{-1/2}$                                                                                     | -6                   |
| $T_1$                    | $\{ L=3, M=2\rangle +  L=3, M=-2\rangle\} 2^{-1/2}$<br>$\{3^{1/2}  L=3, M=\pm 3\rangle -$<br>$-5^{1/2}  L=3, M=\mp 1\rangle\} 8^{-1/4}$ | -1                   |
| $T_2$                    | $\{5^{1/2}  L=3, M=\pm 3\rangle +$<br>$+3^{1/2}  L=3, M=\mp 1\rangle\} 8^{-1/2}  L=3, M=0\rangle$                                       | +3                   |

векторы, указанные в табл. П.5, и собственные значения (без постоянного множителя) в ее последнем столбце. (Нас интересуют здесь лишь отношения.) Кристаллическое поле в рассматриваемом химическом соединении имеет тот знак величины  $A_0^{(4)}$ , который приводит к самому низкому представлению  $A_2$ . Отношения расщеплений, вычисленные на основании данных табл. П.5, указаны на рис. 9.9.

Можно обойтись без коэффициентов связи  $C(343, MqM')$ , если построить эквивалентные операторы  $L_q^{(4)}$  из произведений  $L \otimes L \otimes L \otimes L$  операторов углового момента. Поскольку при  $q = \pm 4$  имеется лишь один такой оператор, можно выбрать  $L_{\pm 4}^{(4)} = (L_{\pm})^4$  в качестве четвертой степени повышающего или понижающего оператора. Оставшийся оператор  $L_0^{(4)}$  можно найти либо путем последовательного применения формулы (7.52):

$$L_0^{(4)} = 24(70)^{1/2} [L_-, [L_-, [L_-, [L_-, (L_+)^4]]]],$$

либо различными упрощенными методами (задача П.9).

Окончательно эквивалентный оператор будет равен

$$\mathbf{L}_0^{(4)} + \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} (\mathbf{L}_4^{(4)} + \mathbf{L}_{-4}^{(4)}) = \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} \{ 14\mathbf{L}_z^4 - 12\mathbf{L}^2\mathbf{L}_z^2 + \frac{6}{5}(\mathbf{L}^2)^2 - \\ - \frac{12}{5}\mathbf{L}^2 + 10\mathbf{L}_z^2 + \mathbf{L}_+^4 + \mathbf{L}_-^4 \}. \quad (\text{П5.21})$$

Для состояний с  $\mathbf{L}=3$  мы можем написать  $\langle \mathbf{L}^2 \rangle = 12$ , и тогда получим

$$\mathbf{L}_0^{(4)} + \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} (\mathbf{L}_4^{(4)} + \mathbf{L}_{-4}^{(4)}) = \left(\frac{5}{14}\right)^{1/2} \{ 14\mathbf{L}_z^4 - 134\mathbf{L}_z^2 + 144 + \mathbf{L}_+^4 + \mathbf{L}_-^4 \}.$$

В  $M$ -базисе этот оператор можно вычислить непосредственно, пользуясь формулой (7.40) и равенством  $\langle \mathbf{L}_z \rangle = M$  и не отыскивая значений коэффициентов связи. Разумеется, это приводит к тому же результату, что и в табл. П.5.

Наконец, заметим, что по формуле (П5.21) можно также вычислить расщепление каждого  $J$ -мультиплета, показанное в третьем столбце на рис. 9.8. Нужно лишь написать  $\mathbf{J}^2$  вместо  $\mathbf{L}^2$  и  $\mathbf{J}_z$  вместо  $\mathbf{L}_z$ . Относительные интенсивности расщеплений в различных  $J$ -мультиплетах могут быть вычислены по формуле (П5.14).

## ЗАДАЧИ К ПРИЛОЖЕНИЯМ 4 И 5

П.1. Покажите, что выбор  $\rho(\mathbf{c}) = \rho(0)/(\partial \mathbf{c}/\partial \mathbf{a})_{\mathbf{a}=0}$  достаточен для того, чтобы обеспечить справедливость формулы (П4.14).

П.2. Исходя из соотношения ортогональности (П4.25), покажите, что обобщенный проекционный оператор (оператор перехода) для группы  $\mathcal{R}_3$  можно записать в виде

$$\mathbf{P}_{m',m}^{(j)} = (2j+1) \int D_{m',m}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) \mathbf{T}(\alpha, \beta, \gamma) \sin \beta \, d\alpha \, d\beta \, d\gamma / 8\pi^2,$$

где  $\mathbf{T}(\alpha, \beta, \gamma)$  — оператор вращения.

П.3. Путем элементарных рассуждений покажите, что альтернативная форма записи простого проекционного оператора  $\mathbf{P}^{(j)}$  такова:

$$\mathbf{P}^{(j)} = \prod_{j' \neq j} \{ \mathbf{J}^2 - j'(j'+1) \} / \prod_{j' \neq j} \{ j(j+1) - j'(j'+1) \},$$

где через  $\prod$  обозначено бесконечное произведение по индексу  $j' = 0, 1/2, 1, \dots$  с условием  $j' \neq j$ .

- П.4.** Вычислите коэффициенты связи, требуемые для получения уравнения (П5.2). (Воспользуйтесь методом задачи 7.8.)
- П.5.** В задаче (7.12) отношения между матричными элементами тензорного оператора второго ранга по состояниям с  $l=1$  вычислялись на основании теоремы Вигнера—Эккарта. Вычислите те же отношения методом эквивалентного оператора (гл. 7, § 4, п. Ж). [Начните с эквивалентного оператора  $L_2^{(2)} = L_+ L_+$  и постройте другие компоненты на основании формулы (7.52) с учетом формул (7.28) и (7.30). Затем, пользуясь формулой (7.40), найдите матричные элементы.]
- П.6.** Пользуясь формулой (П5.14), покажите, что матричные элементы дипольного оператора  $L_0 + gS_0$  в схеме  $LS$ -связи даются выражением

$$\langle L S J' M | L_0 + gS_0 | L S J M \rangle = gM\delta_{J'J} + (1-g)(-1)^{L+S+J+1} \times \\ \times C_2(J1J', M0M) \left\{ \begin{matrix} J' & J & 1 \\ L & L & S \end{matrix} \right\} [L(L+1)(2L+1)(2J+1)]^{1/2}.$$

(Напишите  $S_0 = J_0 - L_0$  и воспользуйтесь ответом задачи 7.13 относительно приведенного матричного элемента оператора углового момента.)

- П.7.** На основании формулы (П5.15) выведите формулу (П5.2). Рассматривая  $P_k(\cos \theta_{12})$  как скалярное произведение  $Y^{(k)}(1) \cdot Y^{(k)}(2)$  в силу теоремы сложения (П4.8), возьмите приведенные матричные элементы оператора  $Y^{(k)}$  из формулы (П4.5). При расчете понадобятся следующие коэффициенты:

$$C(211, 000) = -\left(\frac{1}{3}\right)^{1/2}, \quad \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 0 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{3}, \quad \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 1 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{6}, \quad \left\{ \begin{matrix} 1 & 1 & 2 \\ 1 & 1 & 2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{20}.$$

- П.8.** Покажите, что для того, чтобы потенциал  $V_c$  в формуле (П5.18) был инвариантным относительно группы  $O$ , для коэффициентов должно выполняться соотношение  $A_{-4}^4 = A_4^4 = (5/14)^{1/2} A_0^4$ . [Рассмотрите вращение вокруг оси  $x$  второго и четвертого порядков, учитывая, что  $Y_{\pm 4}^4 = N(x \pm iy)^4$ ,  $Y_4^4 = N(2/35)^{1/2}(35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4)$ .]
- П.9.** В приложении 5, § 5 было выведено выражение (П5.21) для оператора, эквивалентного оператору  $V(k=4, A_1)$ . Предлагаем упрощенный метод получения того же результата. Искомый оператор должен быть полиномом четвертого порядка по операторам  $L_x, L_y, L_z$ . Но, как известно,  $L_+^{(4)} = L_+^4$ , а также, поскольку для  $L_0^{(4)}$  мы имеем  $q=0$ , оператор  $L_0^{(4)}$  должен иметь вид  $L_0^{(4)} = C(L^4 + \alpha^2 L^2 L_z^2 + \beta L_z^4 + \gamma L_z^2 + \delta L_z^2)$ . Коэффициенты  $\alpha, \beta, \gamma$  и  $\delta$  можно найти, потребовав, чтобы оператор  $L_0^{(4)}$  имел нулевые матричные элементы во всех состояниях с  $L < 2$ . Это необходимое условие для тензорного оператора четвертого ранга  $k=4$ . Выбор состояний  $L=1, M=0; L=1, M=1; L=3/2, M=1/2, L=3/2, M=1/2$  достаточен для того, чтобы получить все четыре коэф-

фициента. Чтобы найти правильные относительные величины операторов  $L_0^{(4)}$  и  $L_4^{(4)}$ , необходимо использовать группу симметрии  $O$  и выбрать  $C$  так, чтобы в полном выражении  $L_0^{(4)} + (5/15)^{1/2} (L_4^{(4)} + L_{-4}^{(4)})$  коэффициенты при  $L_2^4$  и  $L_x^4$  были одинаковы.

**П.10.** Вычислите относительные расщепления при данном  $J$  в третьем столбце на рис. 9.8 с помощью эквивалентного оператора, аналогичного оператору (П5.21) для кристаллического поля.

**П.11.** Методом, указанным в задаче П.10, нельзя вычислить относительное расщепление, вызванное кристаллическим полем, в состояниях с разными значениями  $J$ . Вычислите это относительное расщепление, пользуясь формулой (П5.14) и таблицей коэффициентов из книги Ротенберга и др. (т. 1, гл. 7, литература).

## РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ К ТОМУ 2

## Глава 14

14.4. Зона Бриллюэна изображена на рис. П.3. Малыми группами являются: группа  $C_{4v}$  в точках  $\Gamma$  и  $M$ , группа  $C_{2v}$  в точке  $X$  и группа  $C_{1h}$  в точках  $\Delta$ ,  $\Sigma$

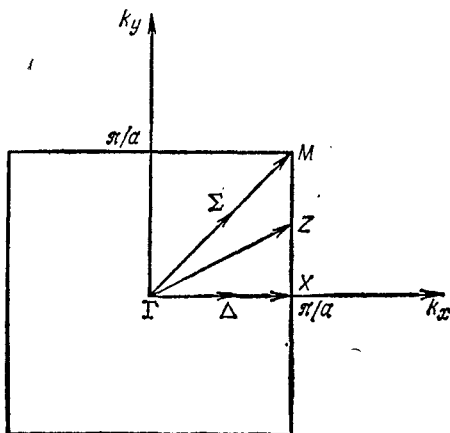


Рис. П.3.

и  $Z$ . При  $k \rightarrow 0$  представление  $\Delta_i$  совместимо с представлениями  $\Gamma_1$ ,  $\Gamma_3$  и  $\Gamma_5$ , а представление  $\Delta_2$  — с представлениями  $\Gamma_2$ ,  $\Gamma_4$  и  $\Gamma_5$ . При  $k \rightarrow \pi/a$  представление  $\Delta_1$  совместимо с представлениями  $X_1$  и  $X_4$ , а представление  $\Delta_2$  — с представлениями  $X_2$  и  $X_3$ . (Неприводимые представления малой группы  $C_{4v}$  в точке  $\Gamma$  обозначены через  $\Gamma_i$ , где индекс  $i = 1, \dots, 5$  соответствует порядковому номеру, с которым представ-

ление входит в таблицу характеров из приложения 1. То же относится и к другим точкам.)

- 14.5. Собственные состояния имеют вид  $\Phi^{(A)} = \psi_1 + \psi_2 + \psi_3 + \psi_4$ ,  $\Phi^{(B_2)} = \psi_1 + \psi_4 - \psi_3 - \psi_2$ ,  $\Phi^{(E)} = \psi_1 - \psi_4$ ,  $\Phi^{(E)} = \psi_2 - \psi_3$ . Последние два состояния вырождены. Энергии всех состояний содержат постоянную  $\hbar^2 \pi^2 / 2Ma^2 + V_{00}$ , они получаются путем прибавления к этой постоянной следующих величин:  $V_{11} + 2V_{01}$  для  $A_1$ ,  $V_{11} - 2V_{01}$  для  $B_2$  и  $-V_{11}$  для  $E$ -дуплета, причем

$$V_{pq} = v_c^{-1} \int V(x, y) \exp\{(px + qy) i\pi/a\} dx dy,$$

$$\psi_1 = \exp\{(x+y) i\pi/a\}, \quad \psi_2 = \exp\{(x-y) i\pi/a\},$$

$$\psi_3 = \exp\{(-x+y) i\pi/a\}, \quad \psi_4 = \exp\{(-x-y) i\pi/a\}.$$

## Глава 17

- 17.1. (124) (36) (5).

- 17.4. Размерность равна пяти: (22111), (21211), (21121), (12211), (12121).

- 17.5.

$$P_{12} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad P_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2} & \sqrt{\frac{3}{4}} \\ 0 & \sqrt{\frac{3}{4}} & \frac{1}{2} \end{pmatrix},$$

$$P_{34} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{3} & \sqrt{\frac{8}{9}} & 0 \\ \sqrt{\frac{8}{9}} & \frac{1}{3} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

## Глава 18

- 18.1. Для пространства  $L^{[3]}$ :  $|111\rangle$ ,  $|222\rangle$ ,  $|333\rangle$  и симметризованные произведения, построенные из  $|112\rangle$ ,  $|113\rangle$ ,  $|221\rangle$ ,  $|223\rangle$ ,  $|331\rangle$ ,  $|332\rangle$ , и  $|123\rangle$ . Для пространства  $L^{[111]}$ : антисимметризованное произведение, построенное из  $|123\rangle$ . Тогда ортогональное дополнение принадлежит пространству  $L^{[21]}$ . (Можно

также воспользоваться проекционными операторами  $P_i^{[21]}$  для группы  $\mathcal{S}_3$ .)

18.2. а)

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 1 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 2 & 2 & 2 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 1 & 3 \\ \hline \end{array}$$

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 2 & 2 & 3 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 1 & 3 & 3 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 2 & 3 & 3 \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|c|} \hline 3 & 3 & 3 \\ \hline \end{array}$$

б) Имеется восемь таблиц (18.12), шесть таблиц типа

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 1 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array}$$

(их первая строка задается табл. 18.1) и, наконец,

$$\begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 2 & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 4 \\ \hline 3 & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 1 & 4 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 2 & 4 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array} \quad \begin{array}{|c|c|} \hline 3 & 4 \\ \hline 4 & \\ \hline \end{array}$$

18.3.

$$\begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline & \\ \hline & \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline & & & \\ \hline & & & \\ \hline & & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline & & \\ \hline & & \\ \hline & & \\ \hline \end{array}$$

а)  $(11) \otimes (20) = (31) \oplus (12) \oplus (20) \oplus (01).$

б)  $D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)} = D^{(3/2)} \oplus D^{(1/2)}.$

18.4. (300) (210) (120) (030) (201) (111) (021) (102) (012) (003).

Поэтому  $M = 3, 2, 1, 0, 1, 0, -1, -1, -2, -3$  и, значит,  $L = 3$  или  $L = 1$ .

18.5.  $L = 3$  и  $L = 1$  в обоих случаях.

18.6. Для  $[2]$  имеем  $L = 4, 2$  или  $0$ . Для  $[3]$  имеем  $L = 6, 4, 3, 2$  или  $0$ . Для  $[21]$  имеем  $L = 5, 4, 3, 2$  (дважды) и  $1$ .

18.7.  $T = 3/2$  с  $J = 9/2, 5/2, 3/2$ .  $T = 1/2$  с  $J = 13/2, 11/2, 9/2, 7/2$  (дважды),  $5/2$  (дважды),  $3/2, 1/2$ .



## Глава 20

20.2. См. рис. П.4.

Приложения 4 и 5

П.10. См. П.11.

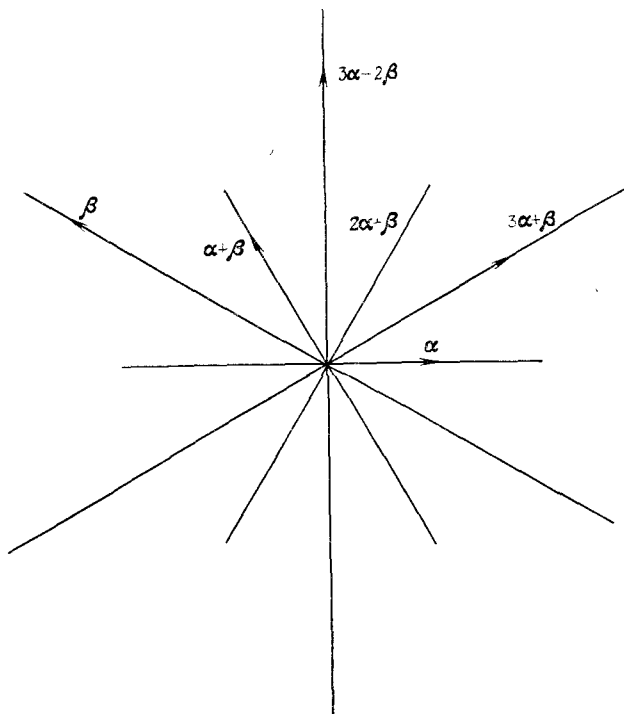


Рис. П.4.

П.11. Относительные сдвиги девяти уровней, изображенных в третьем столбце рис. 9.8, таковы: 0,  $-66$ ,  $132$ ,  $-28$ ,  $-4,36$ ,  $(-49 \pm 5\sqrt{721})$ ,  $196$  (рисунок выполнен приблизительно в масштабе).

# ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ<sup>1)</sup>

Абелева группа 1—22  
 Адиабатическое приближение 2—313  
 Адрон 1—302  
 Алгебра  $Ли$  2—326  
 Античастица 1—309, 2—186  
 Аромат 1—359  
 Ассоциированное представление см. Сопряженное представление  
 Атомная орбиталь 2—8

Барионный заряд 1—314  
 Бесконечная группа 1—22  
 Блоховское состояние 2—24  
 Бозон 1—44  
 Боровский радиус 2—301  
 Буст 2—82

Валентный электрон 1—235  
 Вектор Рунге — Ленца 2—301  
     — старшего веса 1—188  
 Векторный потенциал 2—168  
 Вес базисного вектора 2—265  
 Весовая функция 1—173  
 Внешнее произведение представлений 2—230  
 Внутреннее произведение см. Скалярное произведение  
 Внутренний угловой момент см. Спин

Внутренняя четность частицы 2—127, 189  
 Времениподобный вектор, отрицательный 2—84  
 — — положительный 2—84  
 Выбор калибровки 2—170

Галилеева инвариантность 2—89  
 Гамильтониан 2—166  
 Гейзенберговская картина 2—180  
 Гиперзаряд 1—309, 313  
 Глюон 1—359  
 Гомоморфные группы 1—31  
 Группа 1—21  
     — вращений  $\mathcal{R}_2$  1—28  
     — —  $\mathcal{R}_3$  1—28  
     — диэдра  $D_n$  1—253, 254  
     — икосаэдра  $Y$  1—257  
     — Лоренца  $\mathcal{L}$  2—81  
     — — расширенная  $\mathcal{L}_s$  2—81  
     — —  $\mathcal{L}_t$  2—81  
     — —  $\mathcal{L}_{st}$  2—81  
     —  $Ли$  1—173  
     — октаэдра  $O$  1—256  
     — — полная  $O_h$  1—259, 260  
     — ортогональная полная  $O_s$  1—33, 185  
     — перестановок  $\mathcal{S}_n$  2—208  
     — Пуанкаре  $\mathcal{P}$  2—101  
     — — расширенная  $\mathcal{P}_s$  2—115  
     — — —  $\mathcal{P}_t$  2—118  
     — — —  $\mathcal{P}_{st}$  2—138

<sup>1)</sup> Первая цифра — номер тома, а следующие — номер страницы. — Прим. ред.

- *Пьера Кюри* см. Предельная группа
- симплектическая  $Sp_{2j+1}$  2—274
- тетраэдра  $T$  1—255, 256
- — полная  $T_d$  1—259
- трансляций 2—66
- — пространственная 2—18, 19
- унитарная  $U_N$  2—246
- — специальная  $SU_N$  2—258
- $C_2$  1—25
- $C_3$  1—25
- $C_n$  1—253
- $C_{2h}$  1—32
- $C_{nh}$  1—258
- $C_{nv}$  1—258
- $D$  1—25
- $D_{3h}$  1—27
- $D_{nd}$  1—259
- $D_{nh}$  1—258
- $S_2$  1—25
- $S_{2n}$  1—258
- $SU_2$  1—291
- $SU_3$  1—315
- $T_h$  1—259
- $U_2$  1—291
- $U_3$  1—315
- $Y_h$  1—260

- Детерминант *Слэтера* 1—233
- Диаграмма *Дынкина* 2—331
- *Минковского* 2—85
- Динамическая группа см.
- Неинвариантная группа
- Диофантово неравенство 2—335

- Евклидова группа 2—65

- Закон ветвления 2—254
- сохранения заряда 2—188
- Запрещенные переходы 1—128
- Зарядовая независимость 1—293
- Зарядовое сопряжение 2—189
- Звезда вектора 2—54
- Зеркальный поворот 1—250
- Зона *Бриллюэна* 2—22

- Изобарический спин см. Изоспин
- Изоморфные группы 1—30

- Изоспин 1—289, 290
- Изоспиновый мультиплет 1—308
- Изотопический спин. см. Изоспин
- Изотропный вектор, отрицательный 2—84
- — положительный 2—84
- Инвариантная подгруппа см.
- Нормальная подгруппа
- Инвариантное подпространство 1—71, 72
- Индекс нормальной подгруппы 2—321
- Индукированное преобразование функций 1—56
- Инфинитезимальный оператор представления 1—175

- Калибровка излучения см.
- Кулоновская калибровка
- Квадрупольное взаимодействие 2—300
- Квант поля 2—175
- Кварки 1—351
- Класс сопряженных элементов 1—34
- Комбинационный уровень 1—163
- Компактная группа 1—173
- Комплексно-сопряженное представление 1—208, 2—266
- Конечная группа 1—22
- Корневой вектор 2—327
- Коэффициенты *Клебша—Гордана* 1—103
- Кристаллографическая точечная группа 1—265
- Критерий *Картана* 2—326
- Кулоновская калибровка 2—205

- Лагранжиан 2—165
- Легко приводимая группа 1—103
- Леммы *Шура* 1—81
- Лептонный заряд 1—315
- Линейное векторное пространство 1—41
- Линейный оператор 1—48
- Лоренцева инвариантность 2—89

- Магнетон *Бора* 1—219  
 Магнитная пространственная группа 2—53  
 Магнотон 2—48  
 Малая группа 2—55, 323  
 Матричное представление группы 1—66  
 Микроскопическая причинность 2—184  
 Многозначное представление 1—205  
 Модель почти свободных электронов 2—25  
 Молекулярная орбиталь 2—8  
 — — ЛКАО 2—8  
 Мультипликативность терма 1—240
- Неинвариантная группа 2—2  
 Неполупростая группа 2—3  
 Непрерывная группа 1—23  
 Неприводимое представление группы 1—75  
 Неравенство *Шварца* 2—330  
 Несимметричная группа 2—52  
 Неэквивалентные представления группы 1—80  
 Нормальная мода 1—152  
 — подгруппа 2—321  
 Нормальные координаты 1—152  
 Нормированный вектор 1—43  
 Нуклон 1—290  
 Нуклонное число 1—290  
 Нулевой вектор 2—84
- Обертонный уровень 1—163  
 Обобщенный импульс 2—166  
 Обозначения *Маликена* 2—345  
 — *Шенфлиса* 1—249  
 Обратный оператор 1—52  
 Оператор:  
 гиперзаряда 2—187  
*Казимира* 1—204  
 квадрата массы 2—121  
 класса сопряженных элементов 2—366  
 магнитного момента 1—219  
 магнотона 2—49
- обращения времени 1—145, 273; 2—129  
 поля 2—178  
 рождения 2—177  
 уничтожения 2—177  
 электрического заряда 2—187  
 Орбита 2—324  
 Орбитальный угловой момент 1—214  
 Ортогонализация *Шмидта* 1—44  
 Ортогональная матрица 1—54  
 Ортогональное дополнение 1—44  
 Ортонормированный набор векторов 1—43  
 Ортажение времени 2—118  
 Очарование 1—358
- Параметры *Кэли—Клейна* 2—287  
 Партон 1—359  
 Перестановочные соотношения 1—176  
 Плотность:  
 гамильтониана 2—173  
 импульса 2—173  
 лагранжиана 2—172  
 Повышающий оператор 1—187  
 Подгруппа 1—31  
 Подпространство 1—44  
 Полная ортогональная группа см. Группа ортогональная полная  
 Полуупростая группа 2—326  
 Полупрямое произведение групп 2—321  
 Понижающий оператор 1—187  
 Порядок группы 1—22  
 Постоянная *Ридберга* 2—301  
 Правила отбора 1—128  
 Правило:  
 интенсивностей *Хёня—Кронига* 2—388  
 интервалов *Ланде* 1—238, 239  
*Хунда* 1—247 }  
 Предельная группа 1—268  
 Представление группы 1—65  
 Преобразование:  
 инверсии 1—185, 2—95

- Лоренца 2—78  
 Приближение Борна—Оппенгеймера 2—314  
 — слабой связи см. Модель почти свободных электронов  
 Приводимое представление группы 1—75  
 Принцип Паули 1—144, 234  
 Проекционный оператор 1—107  
 Простая группа 2—326  
 — перестановка 2—210  
 Просто приводимая группа см. Легко приводимая группа  
 Пространственная группа 2—51  
 Пространственно-подобный вектор 2—84  
 Прямое произведение групп 1—32  
 — — представлений 1—101  
 Размерность:  
 группы 1—172  
 представления 1—65  
 пространства 1—42  
 Ранг группы 2—327  
 Регулярное представление группы 1—93  
 Самосопряженная подгруппа см. Нормальная подгруппа  
 Самосопряженное представление 2—228  
 Самосопряженный оператор см. Эрмитов оператор  
 Сила Лоренца 2—169  
 Символ Яманучи 2—225  
 Симметрическая группа 1—29  
 См. также Группа перестановок  $\mathcal{P}_n$   
 Симметрия 1—11  
 Симморфная группа 2—52  
 Симплектическая группа см. Группа симплектическая  $Sp_{2j+1}$   
 Система неприводимых представлений группы  $U_N$  2—266  
 — нумерации базисных векторов представлений группы  $U_N$  2—255  
 Скалярное поле 2—170  
 — произведение 1—42  
 Смежная перестановка 2—210  
 Собственное значение 1—55  
 Собственный вектор 1—55  
 Соотношение ортогональности характеров 1—90, 97  
 Сопряженное представление 2—228  
 Сопряженные элементы группы 1—34  
 Сопряженный оператор 1—53  
 Сохраняющийся ток 2—188  
 Специальная унитарная группа см. Группа унитарная специальная  $SU_N$   
 Спин 1—218  
 Спиральность 2—126  
 Спонтанное нарушение симметрии 2—313  
 Статистика:  
 Бозе—Эйнштейна 1—144  
 Ферми—Дирака 1—144  
 Странность 1—314  
 Структурные константы 1—176  
 Супермультиплет 1—344  
 Сферическая функция 1—198  
 Схема Дынкина см. Диаграмма Дынкина  
 — Юнга 2—220  
 Таблица Юнга 2—224  
 Тахион 2—89  
 Тензорное поле 2—171  
 Теорема:  
 Блоха 2—24  
 Вигнера—Эккарта 1—114  
 Крамерса 2—136  
 Лагранжа 1—39  
 Машке 1—79  
 о перечислении 1—39  
 о спине и статистике 2—186  
 РСТ 2—189  
 сложения для сферических гармоник 2—370  
 Терм 1—237  
 Тождественное представление группы 1—66  
 Тождество Якоби 2—327  
 Точечная группа 1—249

- Тривиальное представление группы см. Тождественное представление группы
- Углы Эйлера 2—340
- Удвоенная группа 1—206
- Универсальная накрывающая группа 1—206
- Унимодулярная группа см. Группа унитарная специальная  $SU_N$
- Унитарная группа см. Группа унитарная  $U_N$
- Унитарное представление 1—79
- Унитарный оператор 1—54
- Уравнение: :  
*Вейля* 2—157  
*Дирака* 2—150  
*Клейна—Гордона* 2—145 поля 2—172  
*Шредингера* 1—121
- Уравнения:  
*Гамильтона* 2—166  
*Лагранжа* 2—165  
*Максвелла* 2—161, 174
- Условие Кондона—Шортли 1—192
- Усреднение по группе 1—84
- Фактор Ланде 1—239
- Фермион 1—144
- Фонон 2—45
- Формулы расщепления масс 1—334
- Характер представления 1—88
- Хромодинамика 1—359
- Цветная группа 1—273, 274
- Цветовые состояния кварка 1—356
- Цикл 2—209
- Циклические группы 1—23
- Четность перестановки 2—21
- Чисто лоренцевское преобразование см. Буст
- Шредингеровская картина 2—18
- Шубниковская группа 1—273, 274
- Эквивалентные представления группы 1—78
- Эквивалентный оператор 1—202
- Экситон 2—50
- Электромагнитное поле 2—169
- Эрмитов оператор 1—54
- Эффект:  
*Зеемана* 1—219  
*Яна—Теллера* 2—313, 315
- $g$ -фактор см. Фактор Ланде
- $SU_3$ -мультиплет 1—330, 331
- $SU_6$ -мультиплет 1—348
- $T$ -спин 1—319
- $U$ -спин 1—319
- $V$ -спин 1—319
- $6j$ -символ 2—386
- $9j$ -символ 2—384

# ОГЛАВЛЕНИЕ

|                                                                                        |     |
|----------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| Предисловие ко второму тому . . . . .                                                  | 5   |
| Глава 13. Электронные состояния в молекулах . . . . .                                  | 7   |
| § 1. Линейные комбинации атомных орбиталей (метод ЛКАО) . . . . .                      | 8   |
| § 2. Примеры . . . . .                                                                 | 11  |
| § 3. Правила отбора для электронных возбуждений в молекулах . . . . .                  | 15  |
| Литература . . . . .                                                                   | 16  |
| Задача . . . . .                                                                       | 16  |
| Глава 14. Симметрия в кристаллических твердых телах . . . .                            | 17  |
| § 1. Трансляционная симметрия в кристаллах . . . .                                     | 17  |
| § 2. Группа трансляций $\mathcal{T}(a_1, a_2, a_3)$ . . . . .                          | 19  |
| § 3. Зона Бреллюэна и некоторые примеры . . . . .                                      | 21  |
| § 4. Электронные состояния в периодическом потенциале . . . . .                        | 23  |
| § 5. Колебания решетки . . . . .                                                       | 39  |
| § 6. Спиновые волны в ферромагнетиках . . . . .                                        | 46  |
| § 7. Экситоны в диэлектриках (экситоны Френкеля) . . . . .                             | 49  |
| § 8. Правила отбора при рассеянии . . . . .                                            | 50  |
| § 9. Пространственные группы . . . . .                                                 | 51  |
| Литература . . . . .                                                                   | 62  |
| Задачи . . . . .                                                                       | 63  |
| Глава 15. Пространство и время . . . . .                                               | 64  |
| § 1. Евклидова группа $\mathcal{E}_3$ . . . . .                                        | 65  |
| § 2. Группа Лоренца $\mathcal{L}$ . . . . .                                            | 78  |
| § 3. Группа Лоренца с пространственными отражениями — группа $\mathcal{L}_s$ . . . . . | 94  |
| § 4. Трансляции и группа Пуанкаре $\mathcal{P}$ . . . . .                              | 98  |
| § 5. Группа Пуанкаре с пространственной инверсией $\mathcal{P}_s$ . . . . .            | 115 |
| § 6. Группа Пуанкаре с отражением времени $\mathcal{P}_t$ . . . .                      | 118 |

|                                                                         |     |
|-------------------------------------------------------------------------|-----|
| § 7. Интерпретация неприводимых представлений группы Пуанкаре . . . . . | 119 |
| § 8. Одночастичные волновые функции и волновые уравнения . . . . .      | 139 |
| Литература . . . . .                                                    | 161 |
| Задачи . . . . .                                                        | 162 |

|                                                        |            |
|--------------------------------------------------------|------------|
| <b>Глава 16. Частицы, поля и античастицы . . . . .</b> | <b>164</b> |
| § 1. Классическая механика частиц . . . . .            | 165        |
| § 2. Классическая механика полей . . . . .             | 170        |
| § 3. Квантованные поля . . . . .                       | 175        |
| Литература . . . . .                                   | 205        |
| Задачи . . . . .                                       | 206        |

|                                                                                                      |            |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Глава 17. Группа перестановок <math>\mathcal{S}_n</math> . . . . .</b>                            | <b>208</b> |
| § 1. Циклы . . . . .                                                                                 | 209        |
| § 2. Четность перестановки . . . . .                                                                 | 211        |
| § 3. Классы сопряженных элементов . . . . .                                                          | 212        |
| § 4. Тривиальное и антисимметричное представление, симметричные и антисимметричные функции . . . . . | 214        |
| § 5. Таблица характеров неприводимых представлений . . . . .                                         | 216        |
| § 6. Схемы Юнга . . . . .                                                                            | 220        |
| § 7. Ограничение с группы $\mathcal{S}_n$ на подгруппу $\mathcal{S}_{n-1}$ . . . . .                 | 221        |
| § 8. Базисные векторы неприводимых представлений . . . . .                                           | 222        |
| § 9. Примеры базисных векторов и матриц представления . . . . .                                      | 225        |
| § 10. Прямое произведение двух представлений . . . . .                                               | 227        |
| § 11. Внешнее произведение двух неприводимых представлений . . . . .                                 | 229        |
| § 12. Ограничение на подгруппу и внешнее произведение . . . . .                                      | 233        |
| § 13. Канонический вид матриц неприводимых представлений . . . . .                                   | 236        |
| § 14. Оператор $\sum_{i < j} T(P_{ij})$ класса сопряженных элементов . . . . .                       | 242        |
| Литература . . . . .                                                                                 | 243        |
| Задачи . . . . .                                                                                     | 243        |

|                                                                                                                        |            |
|------------------------------------------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Глава 18. Унитарная группа <math>U_N</math> . . . . .</b>                                                           | <b>245</b> |
| § 1. Неприводимые представления группы $U_N$ . . . . .                                                                 | 246        |
| § 2. Некоторые примеры . . . . .                                                                                       | 260        |
| § 3. Последовательность подгрупп $U_N \rightarrow U_{N-1} \rightarrow \dots \rightarrow U_2 \rightarrow U_1$ . . . . . | 252        |
| § 4. Система нумерации базисных векторов . . . . .                                                                     | 255        |
| § 5. Прямое произведение представлений группы $U_N$ . . . . .                                                          | 256        |



|                                                                                         |     |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|-----|
| § 6. Ограничение представлений с группы $U_N$ на ее подгруппу $SU_N$ . . . . .          | 258 |
| § 7. Частные случаи: группы $SU_2$ , $SU_3$ , и $SU_4$ . . . . .                        | 262 |
| § 8. Инфинитезимальные операторы группы $U_N$ . . . . .                                 | 264 |
| § 9. Комплексно-сопряженные представления групп $U_N$ и $SU_N$ . . . . .                | 266 |
| § 10. Применение группы $U_N$ к классификации многочастичных волновых функций . . . . . | 268 |
| § 11. Характеры . . . . .                                                               | 277 |
| § 12. Интегрирование по группе и ортогональность . . . . .                              | 279 |
| § 13. Группы $SU_2$ $\mathcal{R}_3$ . . . . .                                           | 281 |
| Литература . . . . .                                                                    | 288 |
| Задачи . . . . .                                                                        | 289 |

## Глава 19. Потенциал гармонического осциллятора и кулоновский потенциал—два примера «случайного» вырождения . . . . . 290

|                                                                           |     |
|---------------------------------------------------------------------------|-----|
| § 1. Трехмерный гармонический осциллятор, одночастичный случай . . . . .  | 291 |
| § 2. Трехмерный гармонический осциллятор, многочастичный случай . . . . . | 298 |
| § 3. Гармонический осциллятор в $n$ измерениях . . . . .                  | 300 |
| § 4. Группа симметрии кулоновского потенциала . . . . .                   | 301 |
| Литература . . . . .                                                      | 306 |
| Задачи . . . . .                                                          | 307 |

## Глава 20. Дополнительные сведения (отдельные вопросы) . . . . . 308

|                                                                             |     |
|-----------------------------------------------------------------------------|-----|
| § 1. Неинвариантные группы . . . . .                                        | 308 |
| § 2. Эффект Яна—Теллера и спонтанное нарушение симметрии . . . . .          | 313 |
| § 3. Нормальные подгруппы, полупрямые произведения и малые группы . . . . . | 320 |
| § 4. Классификация групп Ли . . . . .                                       | 325 |
| § 5. Матрицы вращений . . . . .                                             | 339 |
| Литература . . . . .                                                        | 343 |
| Задачи . . . . .                                                            | 344 |

## Приложение 1. Таблицы характеров неприводимых представлений точечных групп . . . . . 345

## Приложение 2. Решения задач тома 1 . . . . . 354

## Приложение 3. Дополнительные сведения по теории представлений . . . . . 360

|                                                                          |     |
|--------------------------------------------------------------------------|-----|
| § 1. Симметризованные произведения представлений . . . . .               | 360 |
| § 2. Разложение произведения представлений с помощью подгруппы . . . . . | 364 |
| § 3. Умножение классов сопряженных элементов . . . . .                   | 366 |

|                                                                                         |            |
|-----------------------------------------------------------------------------------------|------------|
| <b>Приложение 4. Некоторые формулы, относящиеся к группе <math>\mathcal{R}_3</math></b> | <b>368</b> |
| § 1. Интеграл от произведения трех сферических гармоник . . . . .                       | 368        |
| § 2. Теорема сложения сферических гармоник                                              | 369        |
| § 3. Интегрирование на группе . . . . .                                                 | 370        |
| <b>Приложение 5. Методы расчета атомной структуры . . . . .</b>                         | <b>377</b> |
| § 1. Энергии термов для конфигураций $p^2$ и $p^3$                                      | 377        |
| § 2. Коэффициенты связи ( $6j$ - и $9j$ -символы) .                                     | 382        |
| § 3. Интенсивности переходов . . . . .                                                  | 387        |
| § 4. Потенциал кристаллического поля . . . .                                            | 390        |
| § 5. Вычисление относительных расщеплений на основе симметрии . . . . .                 | 392        |
| Задачи к приложениям 4 и 5 . . . . .                                                    | 395        |
| <b>Приложение 6. Решения задач к тому 2 . . . . .</b>                                   | <b>397</b> |
| <b>Предметный указатель . . . . .</b>                                                   | <b>402</b> |