

Л. К. АМИНОВ

ТЕОРИЯ СИММЕТРИИ

Конспекты лекций
и задачи



Л. К. АМИНОВ

ТЕОРИЯ СИММЕТРИИ

КОНСПЕКТЫ ЛЕКЦИЙ И ЗАДАЧИ



Москва

2002

Интернет-магазин
MATHESIS

<http://shop.rcd.ru>

- физика
 - математика
 - биология
 - техника
-

АМИНОВ Л.К.

Теория симметрии (конспекты лекций и задачи). Учебное пособие для студентов третьего курса и магистрантов физического факультета. — Москва: Институт компьютерных исследований, 2002, 192 с.

Настоящее пособие составлено на основе курса лекций “Дополнительные главы математики”, которые в течение многих лет читались автором для студентов, специализирующихся по теоретической физике, курса по выбору “Теория симметрии” для студентов третьекурсников и курса “Дополнительные главы математики с приложениями” для магистрантов физического факультета. Содержание лекций в основном представлено в форме краткого конспекта; более подробно изложены темы, по которым выполняются лабораторные задания. Задачи по каждому разделу решаются студентами на практических занятиях и самостоятельно. В целом данное пособие предназначено помочь студентам во внеаудиторной работе с рекомендованной литературой.

Рецензент: член-корр. РАН, доктор ф.-м. наук, профессор К.М.Салихов.

© Институт компьютерных исследований, 2002

© Л.К.Аминов, 2002

<http://rcd.ru>

ОГЛАВЛЕНИЕ

| | |
|--|----|
| Введение | 11 |
| 1. Основные понятия теории групп. Примеры групп | |
| 1.1. <i>Определение группы</i> | 15 |
| Групповые аксиомы. Коммутативные группы. Подгруппы. Конечные и непрерывные группы, смешанные группы. Порядок конечной группы. Компактные непрерывные группы | |
| 1.2. <i>Примеры групп</i> | 15 |
| Векторные пространства, общая линейная группа $GL(n)$, унитарная группа $U(n)$, унитарная унимодулярная группа $SU(n)$, группа вращений O_3^+ , полная ортогональная группа O_3 , группа движений евклидова пространства, группа трансляций кристаллической решетки, симметрическая группа n -ой степени P_n (группа перестановок), точечные группы симметрии | |
| 1.3. <i>Порождающие множества элементов</i> | 17 |
| Циклические подгруппы, порядок элементов группы. Системы образующих группы и определяющие соотношения | |
| 1.4. <i>Теорема Лагранжа</i> | 18 |
| Смежные классы по подгруппе. Индекс подгруппы | |
| 1.5. <i>Классы сопряженных элементов</i> | 18 |
| Сопряженные вращения, перестановки; схемы Юнга. | |
| 1.6. <i>Инвариантные подгруппы. Гомоморфизмы групп</i> | 20 |
| Сопряженные подгруппы. Фактор-группа. Изоморфизм и гомоморфизм групп. Ядро гомоморфизма. Основная теорема о гомоморфизме. | |
| 1.7. <i>Прямое произведение групп</i> | 21 |
| 1.8. <i>Теорема Кэли</i> | 21 |
| Таблица умножения конечной группы | |

| | |
|---|-----------|
| 1.9. Точечные группы симметрии | 22 |
| Элементы симметрии: оси, зеркально-поворотные оси, плоскости симметрии, центр симметрии. Двусторонние оси. Группы C_n , S_{2n} , C_{nh} , C_{nv} , D_n , D_{nh} , D_{nd} , T , T_d , O , O_h , Y , Y_h , T_h . Понятие об интернациональной системе обозначений | |
| 1.10. Некоторые дополнительные сведения | 24 |
| Полугруппы. Центр группы, нормализатор подмножества группы, p -группы, коммутатор элементов группы, коммутант группы, производный ряд группы. Совершенные, разрешимые группы. Нормальный ряд группы, транзитивные группы, свободные группы, полупрямые произведения, сплетения групп. Группы Ли. Понятие о классификации конечных групп | |
| ЗАДАЧИ | 26 |
| | |
| 2. Линейные представления групп | |
| 2.1. Определение представлений | 29 |
| Линейное представление, размерность представления. Представления точные, унитарные, эквивалентные, приводимые, неприводимые | |
| 2.2. Разложение приводимых унитарных представлений | 30 |
| Полная приводимость унитарных представлений. Унитарность представлений конечных групп | |
| 2.3. Лемма Шура и ее следствия | 30 |
| Первая и вторая леммы Шура. Соотношения ортогональности матричных элементов неприводимых представлений | |
| 2.4. Характер представления | 31 |
| Характер элемента группы, характер представления. Соотношения ортогональности характеров НП. Критерий неприводимости | |
| 2.5. Регулярное представление конечной группы | 32 |
| Соотношения Бернсайда | |
| 2.6. Комплексно-сопряженные представления | 33 |
| Потенциально-вещественные, псевдовещественные представления | |
| 2.7. Прямое произведение представлений группы | 33 |
| Прямое произведение пространств, операторов, матриц, представлений. Тензорные представления | |
| 2.8. Представления прямого произведения групп | 34 |

| | |
|---|-----------|
| 2.9. Метод Бете вычисления характеров НП конечных групп | 35 |
| Структурные коэффициенты группы | |
| 2.10. Другие методы вычисления характеров | 35 |
| Теорема Фробениуса | |
| 2.11. Фактическое разложение приводимого представления | 36 |
| Канонический базис, его неоднозначность. Операторы проектирования, поворотов | |
| 2.12. Элементы групповой алгебры | 38 |
| Матричные алгебры. Групповая алгебра. Коммутаторная алгебра. Идеалы алгебры. Производящие идемпотенты. Примитивные идемпотенты. Центр алгебры. Взаимосвязь групповой алгебры и коммутаторной алгебры произвольного представления группы | |
| ЗАДАЧИ | 39 |
| | |
| 3. Группа вращений | |
| 3.1. Одноосные вращения | 42 |
| Инфинитезимальные операторы представлений. Понятие о многозначных представлениях | |
| 3.2. Группа вращений в трехмерном пространстве | 42 |
| Пространство группы, углы Эйлера. Инвариантный интеграл | |
| 3.3. Неприводимые представления группы вращений | 44 |
| Инфинитезимальные операторы представлений, их свойства. Канонический базис. Вес представления. Характеры неприводимых представлений. Представления сферическими функциями. Двухзначные представления | |
| 3.4. Гомоморфизм двумерной унитарной унимодулярной группы на группу вращений | 46 |
| Параметры Кэли-Клейна. Матрицы Паули | |
| 3.5. Произведения НП группы вращений (или $SU(2)$) и их разложение | 48 |
| Тензорные представления | |
| 3.6. Спиноры и спинорные представления | 49 |
| Ковариантные компоненты спинора. Симметричные спиноры | |
| 3.7. Матрицы неприводимых представлений группы вращений | 50 |
| Обобщенные сферические функции | |

| | |
|--|----|
| 3.8. Коэффициенты Клебша-Гордона | 52 |
| 3.9. $3j$ -символы и их свойства | 53 |
| Переход к комплексно-сопряженным представлениям. | |
| 3.10. $6j$ - и $9j$ -символы | 54 |
| 3.11. Полная ортогональная группа в трех измерениях | 57 |
| 3.12. Двухзначные представления точечных групп | 57 |
| Двойные точечные группы | |
| 3.13. Группы Ли и алгебры Ли | 59 |
| Алгебры Ли, структурные константы. Представления алгебр Ли, теорема Адо. Связь между группами Ли и алгебрами Ли, экспоненциальное отображение алгебр Ли на группы Ли | |
| ЗАДАЧИ | 62 |
| | |
| 4. Некоторые физические приложения теории групп | |
| 4.1. Влияние симметрии на физические свойства кристаллов | 64 |
| Принцип Неймана. Тензорные инварианты. Тензор модулей упругости | |
| 4.2. Нормальные колебания симметричных молекул | 66 |
| Нормальные координаты, кратные частоты. Типы нормальных колебаний. Нормальные координаты октаэдрической молекулы XU_6 и пирамидальной молекулы XU_3 | |
| 4.3. Классификация уровней энергии и стационарных состояний квантовомеханической системы по НП группы симметрии | 74 |
| Преобразование функции при преобразовании ее аргументов. Группа симметрии гамильтониана. Законы сохранения | |
| 4.4. Применение теории групп к вычислению матричных элементов | 75 |
| Неприводимые тензорные операторы. Приведенные матричные элементы. Коэффициенты Клебша-Гордона. Теорема Вигнера-Экарта | |
| 4.5. Теория возмущений | 76 |
| 4.6. Метод молекулярных орбиталей | 77 |
| Метод МО ЛКАО. Симметричные орбитали октаэдрической и пирамидальной молекул | |
| 4.7. Элементы теории кристаллического поля | 79 |
| 4.8. Метод эквивалентных операторов | 82 |
| ЗАДАЧИ | 83 |

5. Обращение времени

| | |
|--|----|
| <i>5.1. Антиунитарность оператора обращения времени</i> | 85 |
| Оператор комплексного сопряжения. Нормальная форма антиунитарного оператора | |
| <i>5.2. Различные представления оператора обращения времени</i> | 86 |
| Два класса физических величин по отношению к обращению времени | |
| <i>5.3. Определение копредставлений</i> | 87 |
| Перестановочность оператора обращения времени с операторами пространственных преобразований. Типы неприводимых копредставлений | |
| <i>5.4. Теорема Крамерса</i> | 89 |
| <i>5.5. Правила отбора матричных элементов, связанные с обращением времени</i> | 89 |
| <i>5.6. Формализм спиновых гамильтонианов</i> | 89 |
| ЗАДАЧИ | 91 |

6. Пространственные группы и их представления

| | |
|---|-----|
| <i>6.1. Определение пространственной группы</i> | 93 |
| Винтовые вращения, скользящие отражения. Решетка Бравэ. Базисные векторы решетки, элементарная ячейка | |
| <i>6.2. Типы решеток Бравэ</i> | 94 |
| Точечная группа симметрии решетки. Кристаллические сингонии. Однотипные решетки. Параллелепипед Бравэ. Подчинение систем | |
| <i>6.3. Кристаллические классы. Неэлементарные трансляции</i> | 96 |
| Макроскопическая симметрия кристалла. Структура алмаза | |
| <i>6.4. Унитарные НП группы трансляций</i> | 98 |
| Обратная решетка. Зоны Бриллюэна. Ячейка Вигнера-Зейтца | |
| <i>6.5. Теорема Блоха</i> | 99 |
| Блоховские функции | |
| <i>6.6. Представления пространственных групп</i> | 100 |
| Звезда представления. Неприводимость звезд неприводимых представлений. Группа волнового вектора. Малое представление. Построение представления с неприводимой звездой по малому | |

| | |
|---|-----|
| представлению. Связь представлений пространственных групп с проективными представлениями точечных групп. Фактор-системы проективных представлений | |
| 6.7. <i>Некоторые неприводимые представления группы O_n^7</i> | 103 |
| 6.8. <i>Аппроксимация группы трансляций конечной группой</i> | 104 |
| Периодические граничные условия. Критерий вещественности НП | |
| 6.9. <i>Элементы теории проективных представлений</i> | 105 |
| p -эквивалентные представления и фактор-системы. Мультипликатор группы. Группа представлений группы | |
| 6.10. <i>Магнитные и цветные группы</i> | 106 |
| ЗАДАЧИ | 107 |
| | |
| 7. Группа перестановок, полная линейная группа и некоторые ее подгруппы | |
| 7.1. <i>Симметризаторы Юнга и их свойства</i> | 109 |
| Схемы Юнга, таблицы Юнга, симметризаторы Юнга. Комбинаторная лемма | |
| 7.2. <i>Разложение регулярного представления</i> | 112 |
| 7.3. <i>Формулы Фробениуса для характеров групп перестановок</i> | 113 |
| 7.4. <i>Графические методы вычисления характеров НП групп перестановок</i> | 114 |
| Стандартные таблицы, решеточные перестановки. Правила ветвления. Сопряженные разбиения и представления | |
| 7.5. <i>Матрицы НП групп перестановок</i> | 116 |
| Символы Яманучи. Правила построения матриц транспозиций | |
| 7.6. <i>Внешние произведения представлений симметрической группы</i> | 117 |
| Правила разложения внешних произведений | |
| 7.7. <i>Связь между НП групп перестановок и линейных преобразований</i> | 118 |
| Неприводимые тензоры группы $GL(n)$. Размерность НП группы $GL(n)$. НП групп $SL(n)$, $U(n)$, $SU(n)$ | |
| 7.8. <i>Неприводимые представления ортогональной и симплектической групп</i> | 120 |
| Свертка тензоров. Тензоры с нулевым следом | |
| 7.9. <i>Разложение НП группы $U(n)$ по НП группы $O^+(n)$</i> | 123 |

| | |
|--|-----|
| 7.10. <i>Некоторые приложения к теории атомных спектров</i> | 123 |
| Принцип Паули. Атомные спектры в схеме связи Рессела-Саундерса. Старшинство в атомных спектрах | |
| ЗАДАЧИ | 126 |
| 8. Группы Лоренца и Пуанкаре | |
| 8.1. <i>Определение групп Лоренца и Пуанкаре</i> | 128 |
| Общая и специальная (собственная ортохронная) группа Лоренца. Бусты (“чисто лоренцевы” преобразования). Параметризации групп Лоренца и Пуанкаре | |
| 8.2. <i>Элементы специальной теории относительности</i> | 129 |
| Замедление времени, сокращение расстояний, сложение скоростей. Световой конус. Преобразования Галилея, группа Галилея | |
| 8.3. <i>Гомоморфизм двумерной унимодулярной группы на группу Лоренца</i> | 131 |
| Связь между 4-векторами и эрмитовыми матрицами второго порядка | |
| 8.4. <i>Спиноры и спинорные представления группы Лоренца</i> | 133 |
| Спиноры первого и второго рода. Пунктирные индексы. Неприводимые спин-тензорные представления группы $SL(2)$, их неунитарность. Спинорные представления группы Лоренца с пространственной инверсией | |
| 8.5. <i>Инфинитезимальные операторы групп Лоренца и Пуанкаре</i> | 135 |
| Соотношения коммутации инфинитезимальных операторов. Операторы Казимира групп Лоренца и Пуанкаре. Нерелятивистские аналоги инфинитезимальных операторов и коммутационных соотношений | |
| 8.6. <i>Унитарные неприводимые представления группы Пуанкаре</i> | 139 |
| Импульсное представление. “Частицы”, их массы и спины, спиральность. Добавление пространственной инверсии | |
| 8.7. <i>Спиральный и спинорный базисы НП группы Пуанкаре с $m^2 > 0$</i> | 141 |
| Инфинитезимальные операторы в спиральном и спинорном базисах | |
| 8.8. <i>Элементы квантовой теории полей</i> | 145 |
| Правила суперотбора, когерентные пространства. Калибровочные (градиентные первого рода) преобразования. Заряды. Операторы рождения и уничтожения частиц. Функция Паули-Йордана. Уравнения Клейна-Гордона, Вейля. Аксиома асимптотической полноты. Оператор рассеяния, матрица рассеяния. Т-матрица | |

| | |
|--|-----|
| 8.9. <i>Пространственно-временные отражения. CPT – теорема</i> | 149 |
| Комплексная группа Лоренца. 4-инверсия. CPT-преобразования одно- и многочастичных состояний. Внутренняя четность частиц | |
| ЗАДАЧИ | 151 |
| 9. Унитарные симметрии | |
| 9.1. <i>Внутренняя симметрия элементарных частиц. Изоспин</i> | 153 |
| Калибровочные симметрии, изоспиновая (изотопическая) симметрия. Зарядовые (изоспиновые) мультиплеты. Гиперзаряд. Унитарные мультиплеты | |
| 9.2. <i>Группы SU(n). Инфинитезимальные операторы групп</i> | 155 |
| Фундаментальные представления. Структурные постоянные. Операторы Казимира. | |
| 9.3. <i>Неприводимые представления группы SU(3)</i> | 157 |
| Комбинаторное построение НП по методике главы 7. Инфинитезимальный подход к построению НП. I-, U- и V- “спины” (диаграммная техника). Разложение произведения двух НП группы SU(3) | |
| 9.4. <i>Классификация адронов по SU(3) -мультиплетам. Нарушение SU(3) -симметрии</i> | 164 |
| Адроны — барионы и мезоны. Расщепление SU(3)-мультиплетов на изомультиплеты (массовая формула Гелл-Мана - Окубо) | |
| 9.5. <i>Кварковые модели</i> | 166 |
| SU(6) - ароматосимметрия. Ароматы частиц. Цвет кварков | |
| ЗАДАЧИ | 169 |
| ЛИТЕРАТУРА | 170 |
| ПРИЛОЖЕНИЯ | |
| 1. Сферические гармоники порядков 1 — 6 | 172 |
| 2. Справочные данные по группам O_h (октаэдра) и D_{6h} | 173 |
| ОТВЕТЫ И УКАЗАНИЯ К РЕШЕНИЮ ЗАДАЧ | 182 |

ВВЕДЕНИЕ

“Симметрия является той идеей, посредством которой человек на протяжении веков пытался постичь и создать порядок, красоту и совершенство”.

“Насколько я могу судить, все априорные утверждения физики имеют своим источником симметрию”.

Герман Вейль

Симметрия, гармония — это наиболее общие понятия, идеи, выработанные в процессе познания человечеством окружающего мира и своего места в нем. Они включают повторяемость событий во времени и в пространстве, сохранение свойств объектов при различных преобразованиях, движениях и, в конечном счете, сами законы природы. Эти идеи и понятия нашли воплощение в самых разных сторонах деятельности людей — науке, искусстве, ремеслах. Достаточно отметить математические формулировки множества единообразных объектов, повторяемость узоров орнаментов при трансляциях, поворотах, отражениях, ритмичность работы машин и т.п. Наиболее четким математическим отображением идеи симметрии служит теория групп, имеющая дело с самыми различными множествами преобразований. Подробно о развитии идеи симметрии и ее математическом оформлении, различных проявлениях симметрии и ее нарушениях в природе и искусстве рассказал выдающийся математик Г.Вейль в своем последнем труде — лекциях о симметрии (Г.Вейль, 1968).

Самым известным приложением теории групп в доквантовой физике является описание симметрии кристаллов. Интересно, что к 1830 году, когда возник математический термин “группа”, относится и вывод Гесселем 32-х кристаллографических классов. Вывод Федоровым и Шенфлисом в 1891 г. 230 пространственных групп считается шедевром анализа. Но в XIX-м веке физическая и математическая ветви теории групп развивались практически независимо друг от друга. Широкое внедрение группового аппарата в физику началось вскоре после создания квантовой механики и связано оно с именами Г.Вейля, Е.Вигнера, Г.Бете, Ю.Рака и многих других известных математиков и физиков.

Возможности применения теории групп сильно расширились в связи с тем, что состояния в квантовой механике, в отличие от классической, задаются векторами в абстрактном гильбертовом пространстве, а преобразования симметрии представляются унитарными (или антиунитарными) преобразованиями этого пространства. Было выявлено, что группа симметрии квантовомеханической системы и ее неприводимые представления могут быть использованы для классификации энергетического спектра и стационарных состояний системы, вычислений матричных элементов и расчетов по теории возмущений. Представление гамильтониана в виде суммы последовательно убывающих членов, учитывающих все более тонкие взаимодействия в системе, на языке теории групп означает постепенное понижение симметрии, переход от исходной группы высокой симметрии к ее подгруппам. При таком подходе оказывается возможным проследить за генеалогией уровней энергии системы и ее стационарных состояний, и он широко используется в теории атомных и ядерных спектров, спектров молекул и твердых тел. Без больших изменений его можно использовать для рассмотрения спектров других наблюдаемых величин. В теории спектров элементарных частиц решается скорее обратная задача: по имеющимся спектрам (или их кусочкам) угадать симметрию, объединяющую различные частицы. Потребности физики стимулировали развитие целого ряда крупных направлений математической теории групп, таких как канонические формы неприводимых представлений различных групп, теория коэффициентов Клебша-Гордона, унитарные представления некомпактных групп Ли, различные расширения групп Пуанкаре. Первые значительные результаты в этих направлениях были получены как раз физиками.

Как видно, для успешного применения идей симметрии помимо знакомства с общими понятиями теории групп и их представлений необходимо достаточно подробно знать часто встречающиеся в физике конкретные группы симметрии. В число последних входят группы, описывающие “геометрию” систем: группа вращений в трехмерном пространстве, лежащая в основе атомной спектроскопии, различные ее конечные подгруппы (“точечные группы симметрии”), описывающие внешнюю симметрию молекул и кристаллов, группа перестановок одинаковых частиц. Особое место в этом ряду занимает симметрия относительно обращения времени, привносящая в физику антиунитарные преобразования. Унитарные группы разных порядков используются в теории элементарных частиц и в теории атомных спектров (при рассмотрении термов выделенной конфигурации). Группа Лоренца определяет

структуру пространства-времени в специальной теории относительности; в общей теории относительности для описания полей тяготения используются и другие группы Ли.

Схема практического использования теории групп во многих задачах довольно проста: описание симметрии системы, составление приводимого представления на множестве состояний системы, рассматриваемых в данной задаче, разложение его на неприводимые составляющие с помощью операторов проектирования и, при необходимости, расчеты матричных элементов на полученных проектированием симметричных состояниях.

Указанная обширная программа “симметричного” образования физиков в Казанском университете в настоящее время реализуется в несколько приемов. Это, во-первых, вводный курс “Теория симметрии” для студентов третьего курса, включающий основы теории групп и их представлений, знакомство с точечными группами симметрии и группой вращений. Студентам, специализирующимся по теоретической физике, читаются “Дополнительные главы математики”, где эти же вопросы рассматриваются подробнее, решаются задачи и выполняются лабораторные задания. Наконец, будущим магистрам физического факультета читается курс “Дополнительных глав математики с физическими приложениями”, в начале которого детально рассматриваются различные приложения точечных групп и группы вращений и, кроме того, излагается теория пространственных групп, групп Лоренца и Пуанкаре, унитарных симметрий.

Настоящее пособие представляет собой краткое содержание лекций по указанным разделам теории групп. Более подробно изложены расчеты компонент тензоров, инвариантных относительно некоторых групп, расчеты нормальных координат и молекулярных орбиталей симметричных молекул. Эти параграфы можно рассматривать как образцы выполнения аналогичных лабораторных заданий. Справочные сведения, приведенные в приложениях, также призваны способствовать выполнению лабораторных заданий. По каждому разделу курса приведены задачи, которые либо дополняют и иллюстрируют теоретическую часть, либо помогают овладеть стандартными приемами, встречающимися в приложениях. Расширенное содержание книги является программой курса.

В пособие включен также ряд дополнительных сведений, сравнительно редко встречающихся в учебниках по теории групп для физиков. Нам представляется

целесообразным хотя бы кратко познакомить студентов с некоторыми выдающимися результатами абстрактной математической теории групп – классификацией конечных групп, алгебр Ли, изоморфизмом алгебр Ли и матричных алгебр. Эти вопросы лишь частично излагаются на лекциях и рассчитаны, скорее, на пробуждение интереса к чтению дополнительной литературы. Несколько подробнее рассматриваются групповая алгебра и коммутаторные алгебры представлений. Эти понятия придают внутреннее единство всей теории представлений и ее приложениям. Гамильтониан квантовомеханической системы является элементом коммутаторной алгебры представления соответствующей группы симметрии, и вид матрицы его в подходящей системе координат определяется леммой Шура. На указанных понятиях основан и фундаментальный вывод Шура о связи полной линейной группы и группы перестановок.

Предполагается, что читатель знаком с основами линейной алгебры, в частности, свойствами унитарных и эрмитовых операторов и матриц, а также элементами квантовой механики. Для понимания двух последних глав желательно знакомство с основами квантовой теории поля.

1. Основные понятия теории групп. Примеры групп

1.1. Определение группы

Группа – множество G , на котором определена бинарная групповая операция (“умножение”), сопоставляющая каждой паре элементов $a, b \in G$ определенный элемент $c \in G$, $ab = c$. Умножение подчиняется аксиомам (1) **ассоциативности** $(ab)c = a(bc)$; (2) в группе имеется **единичный элемент** $e \in G$, $ae = ea = a$; (3) для каждого элемента $a \in G$ существует **обратный** ему элемент $a^{-1} \in G$, $aa^{-1} = a^{-1}a = e$. Группа называется **абелевой (коммутативной)**, если для любых $a, b \in G$ имеет место $ab = ba$. Множество $H \subset G$ называется **подгруппой** группы G , если оно замкнуто относительно заданной на G операции умножения.

В зависимости от числа элементов множества G (точнее, от его мощности) различают группы конечные, бесконечные дискретные, непрерывные и смешанные непрерывные. Число элементов конечной группы называют ее **порядком**. Элементы бесконечной дискретной группы можно перенумеровать с помощью натурального ряда чисел или любого счетного множества символов. Элементы непрерывной группы задаются посредством конечного числа непрерывно меняющихся параметров. Группа называется **компактной**, если ее параметры пробегает ограниченные интервалы значений. В **смешанных группах** некоторые параметры пробегают дискретный (в частности, конечный) набор значений.

1.2. Примеры групп

Группой является совокупность элементов линейного пространства L_n со сложением векторов в качестве групповой операции (в частности, множество всех вещественных чисел, комплексных чисел). Роль единицы группы играет нулевой вектор, обратный элемент для вектора a – противоположный вектор $-a$. Группа абелева, непрерывная n -параметрическая ($2n$ в комплексном случае), некомпактная.

$GL(n, R)$ [$GL(n, C)$] – группа всех неособенных линейных операторов (матриц) в вещественном (R) или комплексном (C) пространстве L_n с умножением операторов в качестве групповой операции. Группа некоммутативна (если $n \neq 1$), непрерывная n^2 -параметрическая ($2n^2$ в комплексном случае), некомпактная. **Унитарная группа** $U(n)$ –

подгруппа $GL(n, C)$ — определяется n^2 независимыми параметрами; группа компактная. **Унитарная унимодулярная группа** $SU(n) \subset U(n)$ (матрицы с определителем 1) — n^2-1 - параметрическая.

Группа вращений в трехмерном евклидовом пространстве $SO(3, R)$ (другие обозначения O_3^+, R_3) — непрерывная трехпараметрическая компактная группа; одна из возможных параметризаций — с помощью трех углов Эйлера. Полная ортогональная группа в трех измерениях $O(3, R)$ (или O_3) служит примером смешанной группы — три непрерывных параметра (углы Эйлера) дополняются четвертым параметром, принимающим два значения (скажем, + и -) и различающим собственные и несобственные вращения.

Группа движений евклидова пространства — совокупность преобразований, не меняющих расстояния между любыми двумя точками; помимо вращений включает параллельные переносы точек.

Группа трансляций бесконечной кристаллической решетки — бесконечная дискретная абелева группа. В качестве элементов группы можно рассматривать векторы трансляций $a(m, n, k) = ma_1 + na_2 + ka_3$, где m, n, k — любые целые числа; a_1, a_2, a_3 определяют **элементарные трансляции**, параллелепипед, построенный на них, является **элементарной ячейкой кристалла**.

Симметрическая группа n -ой степени P_n — группа всех перестановок n объектов (чисел) — конечная группа порядка $n!$ Произведение двух перестановок — результат последовательного проведения этих перестановок (в порядке справа налево):

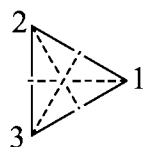
$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ b_1 & b_2 & \dots & b_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ a_1 & a_2 & \dots & a_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ b_{a_1} & b_{a_2} & \dots & b_{a_n} \end{pmatrix}$$

Перестановки можно записывать в одну строчку, в виде произведения независимых **циклов**: рядом с каждым числом в цикле ставится то число, на место которого переходит первое; цикл замыкается числом, переходящим на место числа, открывающего цикл. Например,

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 5 & 2 & 1 & 6 \end{pmatrix} \equiv (135)(24)(6)$$

Число объектов в цикле называется его **длиной**, циклы длины 1, как правило, не выписываются. Перестановка, затрагивающая только два числа, называется **транспозицией**; она представляется одним циклом длины два. Запись перестановок

неоднозначна: в полной записи можно как угодно переставлять столбцы, циклы можно начинать с любого из содержащихся в нем чисел, независимые циклы можно переставлять. Переход к обратному элементу достигается перестановкой рядов в двухрядной записи. Всякую перестановку можно представить в виде произведения транспозиций (задача 24). Число множителей в таком произведении определяет **четность перестановки**. Подгруппа P_n , составленная только из четных перестановок, называется **знакопеременной группой** A_n .



Важную роль в различных приложениях играют так называемые **точечные группы симметрии** — группы самосовмещений конечных геометрических фигур. Они являются подгруппами ортогональной группы O_3 . Так, группа n -го порядка C_n состоит из поворотов около некоторой оси на углы, кратные $2\pi/n$. В качестве объекта с такой симметрией можно представить себе коническую шестеренку с n наклонными зубцами. Группа симметрии правильной треугольной пирамиды, C_{3v} , содержит шесть элементов: единичный E , поворот C_3 на 120° (для определенности против часовой стрелки, считая ось направленной от основания к вершине пирамиды), поворот C_3^2 на 240° (равносильный повороту на 120° по часовой стрелке), отражения $\sigma^{(1)}$, $\sigma^{(2)}$, $\sigma^{(3)}$ относительно плоскостей, проходящих через высоту и вершины 1,2,3 основания пирамиды (нумерация, для определенности, против часовой стрелки, см. рис.).

Подробное перечисление точечных групп приводится в конце раздела.

1.3. Порождающие множества элементов

Целые степени любого элемента группы определяются следующим образом:

$$a^n = aa\dots a \text{ (} n \text{ раз)}, \quad a^{-n} = a^{-1}a^{-1}\dots a^{-1}, \quad a^0 = e$$

Очевидно при этом, что $a^n a^m = a^{n+m}$, и множество $\{a^n\}$ образует подгруппу, называемую **циклической подгруппой**, порожденной элементом a . Порядок циклической подгруппы называют также **порядком элемента a** — это наименьшая степень, при возведении в которую элемента a получается единица: $a^r = e$. Так, циклическая группа C_n образована элементом n -го порядка C_n .

В общем случае некоторое множество элементов группы $\{x_1, x_2, \dots, x_r\}$ называется **порождающим множеством**, или системой образующих группы, если произвольный элемент группы может быть представлен в виде произведения $g = x_i x_j \dots$, составленного из элементов этого множества и обратных к ним. Образующие элементы группы

связаны множеством соотношений вида $x_i x_j \dots = x_k x_l \dots$. **Определяющими соотношениями** группы называют минимальную совокупность таких соотношений, из которых все остальные можно получить в качестве следствия. В группе C_{3v} наименьшее порождающее множество состоит из двух элементов, например, $C_3; \sigma^{(1)}$, связанных определяющими соотношениями $C_3^3 = E, \sigma^{(1)2} = E, \sigma^{(1)} C_3 = C_3^2 \sigma^{(1)}$.

1.4. Теорема Лагранжа

Пусть H подгруппа группы G , a — произвольный элемент группы. Множество $aH = \{ah; h \in H\}$ называется **левым смежным классом** группы G по подгруппе H , образованным элементом a . Смежный класс содержит столько же элементов, что и подгруппа; если $a \notin H$, то все элементы класса отличны от элементов подгруппы, тогда как $hH = H$ для любого $h \in H$. Очевидно, в качестве “образующего” может выступать любой элемент класса, $aH = ahH$. Если в группе остался элемент b , не содержащийся ни в H , ни в aH , можно образовать класс bH , не имеющий общих элементов с H и aH и т.д. В результате группа представляется в виде объединения непересекающихся смежных классов:

$$G = H + aH + bH + \dots$$

Число слагаемых в этой “сумме” (r) называется **индексом подгруппы H** в группе G . Для конечной группы порядка n и подгруппы H порядка m мы получаем соотношение $n = mr$ и **теорему Лагранжа**: порядок подгруппы является делителем порядка группы.

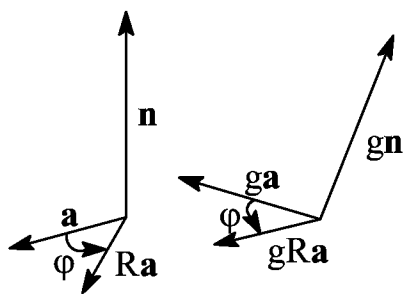
В группе C_{3v} подгруппа C_3 обладает индексом 2, а три отражения составляют смежный класс по этой подгруппе.

1.5. Классы сопряженных элементов

Элементы группы a и b называются **сопряженными** друг другу, если в группе найдется элемент g такой что $a = gbg^{-1}$. Множество сопряженных друг другу элементов группы образует **класс**, и группа может быть представлена как объединение непересекающихся классов сопряженных элементов. Порядки сопряженных элементов совпадают, единичный элемент группы сам по себе образует класс, в абелевых группах любой элемент сам по себе образует класс сопряженных элементов.

Элементом, сопряженным к повороту в группе (или подгруппе) движений евклидова пространства, является поворот на такой же по величине угол около оси,

получаемой из исходной оси в результате преобразования, осуществляющего сопряжение: $gR(\mathbf{n}, \varphi)g^{-1} = R(\hat{g}\mathbf{n}, \pm \varphi)$ (см. рис.).



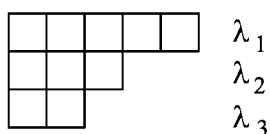
Угол поворота в правой части равенства берется со знаком $-$, если преобразование g меняет правый винт на левый. Аналогично, сопряженным к отражению в плоскости элементом является также отражение, трансляции сопряжена трансляция на такой же по величине вектор и т.д., т.е., сопряженные пространственные преобразования однотипны.

Напротив, два однотипных преобразования сопряжены друг другу, если в группе имеется преобразование, переводящее соответствующие элементы симметрии (оси, плоскости) друг в друга. Так, в группе C_{3v} повороты C_3, C_3^2 сопряжены, поскольку отражение (любое из трех) переводит ось вращения в себя, но меняет направление поворота. Три отражения сопряжены друг другу, так как их плоскости переводятся друг в друга поворотами (или отражениями в другой плоскости).

Сопряженным к перестановке элементом является перестановка с той же циклической структурой. В полной группе перестановок P_n для любых двух элементов с одинаковой циклической структурой найдется перестановка, сопрягающая их:

$$(a_1 a_2 \dots a_i)(a_{i+1} \dots a_j) \dots = g(b_1 b_2 \dots b_i)(b_{i+1} \dots b_j) \dots g^{-1}, g = \begin{pmatrix} b_1 \dots & b_i & b_{i+1} \dots & b_j \dots \\ a_1 \dots & a_i & a_{i+1} \dots & a_j \dots \end{pmatrix}$$

так что общее число классов сопряженных элементов определяется числом возможных циклических структур для перестановок данной степени. **Циклическая структура** (ν) однозначно определяется указанием числа циклов всех возможных длин от 1 до n , $(1^{\nu_1} 2^{\nu_2} \dots n^{\nu_n})$, или разбиением (λ) числа n в упорядоченную сумму целых неотрицательных чисел: $\nu_1 + \nu_2 + \dots + \nu_n = \lambda_1, \nu_2 + \dots + \nu_n = \lambda_2, \dots, \nu_n = \lambda_n, \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n, \lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_n = n$. Разбиения наглядно изображаются **схемами Юнга** — упорядоченным расположением n клеток вида:



1.6. Инвариантные подгруппы. Гомоморфизмы групп

Подгруппа $H' = gHg^{-1}$ называется *сопряженной* с подгруппой H . Если $H' = H$ для всех $g \in G$, подгруппа H называется *инвариантной* (нормальным делителем группы G). *Простые группы* не имеют нетривиальных ($H \neq e, G$) нормальных делителей. *Полупростые группы* не имеют абелевых нормальных делителей. Правые и левые смежные классы группы по инвариантной подгруппе совпадают: $aH = Ha$. Отсюда вытекает, что произведения элементов двух таких классов aH, bH (взятых в определенном порядке) все входят в один и тот же класс abH , что позволяет на множестве классов определить операцию группового умножения $aH \cdot bH = abH$. В результате множество классов становится группой, G/H , называемой *фактор-группой* группы G по инвариантной подгруппе H . Пример: подгруппа C_3 в группе C_{3v} инвариантна, два смежных класса по этой подгруппе образуют фактор-группу второго порядка.

Две группы G и G^* *изоморфны*, если между их элементами можно установить взаимно-однозначное соответствие $g \leftrightarrow g^*$, сохраняющее операцию умножения: $(ab)^* = a^*b^*$. Изоморфное отображение группы на себя называется *автоморфизмом*; например, $a^* = gag^{-1}$ (*внутренний автоморфизм*). Более общим является понятие *гомоморфизма* групп; группа G гомоморфна на группу G^* , $G \rightarrow G^*$, если между элементами этих групп можно установить соответствие $g \rightarrow g^*$ (однозначное в одном направлении), сохраняющее операцию умножения, $(ab)^* = a^*b^*$. Элемент g^* называют *образом* g , а g — *прообразом* g^* . Нетрудно убедиться, что при гомоморфизме (и изоморфизме) единичный элемент отображается на единичный, а обратный элемент — на обратный к его образу, $a^{-1} \rightarrow (a^*)^{-1}$. Множество $N \subset G$ прообразов единичного элемента e^* группы G^* называется *ядром гомоморфизма* $G \rightarrow G^*$. *Основная теорема о гомоморфизме*: ядро N гомоморфизма $G \rightarrow G^*$ является инвариантной подгруппой группы G , а фактор-группа G/N изоморфна G^* . Для доказательства достаточно убедиться в том, что любой элемент смежного класса aN отображается на один и тот же элемент a^* .

Пример гомоморфизма группы $GL(n)$: $\hat{A} \rightarrow \det \hat{A}$ (отображение на мультипликативное множество всех чисел, отличных от нуля); ядро гомоморфизма — группа $SL(n)$.

1.7. Прямое произведение групп

Прямое произведение можно формально определить для любых двух (и более) групп G и G' как множество пар $G \times G' = \{(g, g')\}$ со следующим законом группового умножения: $(a, a')(b, b') = (ab, a'b')$. Разбиение прямого произведения групп на классы сопряженных элементов предопределяется соответствующим разбиением перемножаемых групп: если $\{a\}$ — класс группы G , $\{a'\}$ — класс группы G' , то множество пар $\{(a, a')\}$ является классом $G \times G'$. Множества пар $\{(g, e')\}$, $\{(e, g')\}$ являются инвариантными подгруппами $G \times G'$, изоморфными, соответственно, G и G' . Любая пара элементов этих подгрупп коммутирует, а любой элемент всей группы однозначно представляется в виде произведения элементов подгрупп: $(a, a') = (a, e')(e, a') = (e, a')(a, e')$. Таким образом, всякая группа, содержащая две (и более) подгруппы с указанными свойствами, может рассматриваться как прямое произведение этих подгрупп. Например, $C_6 = C_3 \times C_2$, $O_3 = O_3^+ \times C_2$.

1.8. Теорема Кэли

Структура группы определяется операцией умножения — правилом, сопоставляющим любой паре элементов (в том числе одинаковых) третий элемент группы. Для конечных групп структура наглядно представляется таблицей умножения (“доской Кэли”), в каждой клетке которой указан результат умножения элементов, стоящих в начале соответствующего ряда (левый множитель) и столбца. Таблица умножения группы C_{3v} :

| E | C_3 | C_3^2 | $\sigma^{(1)}$ | $\sigma^{(2)}$ | $\sigma^{(3)}$ |
|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|----------------|
| C_3 | C_3^2 | E | $\sigma^{(3)}$ | $\sigma^{(1)}$ | $\sigma^{(2)}$ |
| C_3^2 | E | C_3 | $\sigma^{(2)}$ | $\sigma^{(3)}$ | $\sigma^{(1)}$ |
| $\sigma^{(1)}$ | $\sigma^{(2)}$ | $\sigma^{(3)}$ | E | C_3 | C_3^2 |
| $\sigma^{(2)}$ | $\sigma^{(3)}$ | $\sigma^{(1)}$ | C_3^2 | E | C_3 |
| $\sigma^{(3)}$ | $\sigma^{(1)}$ | $\sigma^{(2)}$ | C_3 | C_3^2 | E |

Короче структура может быть задана системой образующих и определяющими соотношениями между ними. Любой элемент группы простого порядка обязательно имеет тот же порядок, т.е., такая группа может быть только циклической. Группа четвертого порядка помимо циклической может обладать структурой, в которой все неединичные элементы — второго порядка (**четверная группа** типа $C_2 \times C_2$). Группы шестого порядка могут иметь две различные структуры: циклическую и структуру

группы C_{3v} . Пять различных структур возможны для групп восьмого порядка (см. задачу 23).

Из таблицы умножения группы вытекает, что в результате умножения элементов группы, расположенных в определенном порядке [верхняя строчка таблицы — (a_1, a_2, \dots, a_n)], слева на какой либо элемент группы a получается строчка $(aa_1, aa_2, \dots, aa_n)$, в которой те же элементы расположены в другом порядке (переставлены). Таким образом, каждому элементу группы сопоставляется перестановка n предметов:

$$a \rightarrow \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \dots & a_n \\ aa_1 & aa_2 & \dots & aa_n \end{pmatrix},$$

причем нетрудно убедиться в том, что произведению элементов группы отвечает произведение соответствующих перестановок. Сказанное формулируется как **теорема Кэли**: всякая группа порядка n изоморфна некоторой подгруппе симметрической группы n -й степени P_n . Эти подгруппы содержат только “правильные” перестановки, представляемые в виде произведения независимых циклов одинаковой длины.

1.9. Точечные группы симметрии

Элементами точечной **симметрии** могут быть ось симметрии, плоскость симметрии, центр симметрии. **Порядок оси** — наибольший из порядков поворотов, совершаемых около этой оси. **Зеркальный поворот** — комбинация поворота с отражением в плоскости, перпендикулярной оси поворота: $S(\varphi) = C(\varphi)\sigma_h = \sigma_h C(\varphi)$. Отражение в плоскости и инверсия являются частными случаями зеркальных поворотов: $S_1 = \sigma_h$, $S_2 = C_2\sigma_h = I$. Отметим, что произведение двух зеркальных поворотов является чистым поворотом, произведение зеркального поворота на поворот является зеркальным поворотом. В частности, $\sigma_v\sigma_{v'} = C(2\varphi)$ — поворот около линии пересечения плоскостей v' и v , φ — угол между плоскостями, отсчитываемый от плоскости v' . Отсюда можно получить и результат умножения поворота на отражение в плоскости, проходящей через ось поворота: $\sigma_v = C(2\varphi)\sigma_v$. Кроме того, $\sigma_v C(\varphi)\sigma_v = C(-\varphi)$, с примером такого соотношения мы уже сталкивались при рассмотрении группы C_{3v} . Когда повороты около оси на противоположные углы сопряжены друг другу, ось называют **двусторонней**.

Перечислим возможные точечные группы симметрии:

1. Циклические группы C_n (в пределе C_∞); объекты с такой симметрией обладают лишь одной осью n -го порядка.

2. Циклические группы S_{2n} (зеркально-поворотная ось четного порядка). Частный случай — группа инверсии S_2 (другое обозначение: C_i).
3. Абелевы группы $C_{nh} = C_n \times C_s$. Элементы симметрии — ось n -го порядка, плоскость отражения, а при n четном и центр симметрии. При n нечетном группа циклическая, с образующей $S_n = C_n \sigma_h$. Частный случай $C_{1h} \equiv C_s$.
4. Группы симметрии правильных n -угольных пирамид C_{nv} . Элементы симметрии — ось n -го порядка и n плоскостей, проходящих через ось и отстоящих друг от друга на углы, кратные π/n . При $n > 2$ группа неабелева; каждая пара взаимно-обратных поворотов образует класс сопряженных элементов; при нечетном n все отражения входят в один класс, а при n четном они разбиваются на два класса по $n/2$ отражений в плоскостях, связанных друг с другом поворотами C_n .
5. Группы D_n содержат в дополнение к группе C_n повороты на 180° около n осей второго порядка, перпендикулярных к “главной” оси и расположенных под углами π/n друг к другу. Группы D_n и C_{nv} изоморфны.
6. Группы симметрии правильных n -угольных призм $D_{nh} = D_n \times C_{1h}$. Элементы симметрии — ось n -го порядка, n перпендикулярных ей осей второго порядка, n плоскостей отражения, проходящих через главную ось и одну из осей второго порядка, плоскость отражения, содержащая оси второго порядка, при n четном имеется также центр симметрии. Число классов сопряженных элементов вдвое больше, чем в группе D_n .
7. Группы D_{nd} получаются в результате добавления к осям симметрии группы D_n n плоскостей, проходящих через главную ось и биссектрисы углов между соседними осями второго порядка. Нетрудно убедиться в том, что произведение отражения в плоскости и поворота на угол π около оси, расположенной под углом φ к плоскости есть зеркальный поворот на угол 2φ около главной оси (см. задачу 41). Таким образом, элементы симметрии здесь такие: зеркально-поворотная ось $2n$ -го порядка, n эквивалентных друг другу (вне зависимости от четности n) осей второго порядка, n эквивалентных плоскостей, а при n нечетном еще и центр симметрии. Симметрией D_{nd} обладает, например, фигура, полученная из двух одинаковых правильных n -угольных призм, сложенных основаниями, поворотом одной из них около общей оси на угол π/n .
8. Группы симметрии правильных многогранников — тетраэдра (T, T_d), октаэдра (куба) ($O, O_h = O \times C_i$), икосаэдра (додекаэдра) ($Y, Y_h = Y \times C_i$). Группы T, O, Y содержат только

поворотные элементы. Укажем классы сопряженных элементов некоторых из групп (число элементов класса и типичный элемент): $T(E, 4C_3, 4C_3^2, 3C_2)$, $T_d(E, 8C_3, 3C_2, 6S_4, 6\sigma_d)$, $O(E, 8C_3, 3C_4^2, 6C_4, 6C_2)$, $O_h(E, 8C_3^2, 3C_4^2, 6C_4, 6C_2, I, 8S_6, 3\sigma_h, 6S_4, 6\sigma_d)$. Отметим, что оси третьего порядка в группе T односторонние, а в группе T_d двусторонние из-за наличия отражений в плоскостях, проходящих через эти оси. Группы T_d и O изоморфны. В кристаллографии приходится встречаться еще с группой $T_h = T \times C_i$.

Число точечных кристаллографических групп ограничено 32-мя (см. раздел 6). Это всевозможные подгруппы групп O_h и D_{6h} , и их таблицы умножения, таким образом, содержатся в таблицах умножения групп O_h и D_{6h} , приведенных в приложениях.

Для точечных кристаллографических групп (которые содержат повороты только второго, третьего, четвертого и шестого порядков) часто используются международные обозначения, в которых вначале указываются порядки главных осей поворотов (ось Z), при этом *инверсионно-поворотная* ось обозначается чертой над цифрой; наличие плоскости отражения, перпендикулярной оси, при необходимости отмечается символом $/m$ рядом с обозначением оси. Другие оси и плоскости указываются на втором и третьем местах (если имеется несколько эквивалентных осей или плоскостей, то указывается лишь одна из них). Примеры международных обозначений: $C_n \equiv n$, $C_i \equiv \bar{1}$, $C_s \equiv m$, $C_{2h} \equiv 2/m$, $D_2 \equiv 222$, $C_{2v} \equiv mm2$, $D_{2h} \equiv mmm$, $C_{4h} \equiv 4/m$, $S_4 \equiv \bar{4}$, $D_4 \equiv 422$, $D_{2d} \equiv \bar{4}2m$, $C_{4v} \equiv 4mm$, $D_{4h} \equiv 4/mmm$, $C_{3i} = S_6 \equiv \bar{3}$, $C_{3h} = S_3 \equiv \bar{6}$, $D_{3d} \equiv \bar{3}m$, $D_{3h} \equiv \bar{6}2m$, $T \equiv 23$, $T_h \equiv m\bar{3}$, $O \equiv 432$, $T_d \equiv \bar{4}3m$, $O_h \equiv m\bar{3}m$. Из различных возможных обозначений (например, $\bar{6}$ и $3/m$ для C_{3h}) выбираются наиболее простые. В кубических системах за ось Z выбирается одна из трех взаимно-перпендикулярных осей симметрии четвертого (для тетраэдров второго) порядка.

1.10. Некоторые дополнительные сведения

Приведем определения некоторых важных понятий теории групп, сравнительно редко встречающихся в физической литературе.

- **Полугруппа** — множество, замкнутое относительно умножения, удовлетворяющего лишь условию ассоциативности.
- **Центр группы** $\{z\} = Z \subset G$ — множество элементов, коммутирующих со всеми элементами группы: $zg = gz$. Центр — абелева инвариантная подгруппа.

- **Нормализатор подмножества** $M \subset G$ — совокупность элементов $a \in G$, которые удовлетворяют соотношению $aM = Ma$.
- **p -группа** — группа порядка p^k , где p — простое, k — любое целое число. Аналогично определяются (p, q) - , (p, q, r) -группы. Так, P_5 — $(2, 3, 5)$ -группа.
- **Коммутатор элементов** группы a и b : $[a, b] = a^{-1}b^{-1}ab$.
- **Коммутант группы** — подгруппа $G' \subset G$, порожденная всеми коммутаторами. Так, C_3 — коммутант C_{3v} . Если $G' = G$, то G — **совершенная группа**.
- Группа G называется **разрешимой**, если ее **производный ряд** $G \supset G' \supset (G')' \supset \dots$ завершается (“стабилизируется”) подгруппой e .
- **Нормальный ряд группы** — последовательность подгрупп $G \supset N_1 \supset N_2 \supset \dots e$, в которой каждый член является нетривиальным нормальным делителем предыдущего. Группа оказывается разрешимой при наличии у нее нормального ряда, у которого все фактор-группы N_i/N_{i+1} абелевы.
- Группа G преобразований некоторого множества Ω называется **транзитивной**, если для любых $\alpha, \beta \in \Omega$ найдется элемент $g \in G$ такой, что $g\alpha = \beta$.
- **Свободная группа ранга r** — порождена множеством r элементов, не связанных никакими определяющими соотношениями.
- Группа G является **полупрямым произведением** подгрупп A и B , $G = AB$, если любой элемент группы может быть представлен в виде $g = ab$, $a \in A$, $b \in B$, $A \cap B = e$, A — инвариантная подгруппа G . Группа B ($\sim G/A$) изоморфна подгруппе автоморфизмов A : $b \rightarrow bAb^{-1}$. Полупрямыми произведениями являются евклидова группа, группа Пуанкаре (в них A — подгруппа трансляций).
- **Сплетение** группы A с помощью группы B (порядка n), $A \tilde{B}$, — полупрямое произведение групп $A^n = A \times A \times \dots \times A$ и B , причем действие элементов B на элементы A^n определяется по правилу $b(a_1, a_2, \dots, a_n)b^{-1} = (a_1', a_2', \dots, a_n')$, где $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1' & 2' & \dots & n' \end{pmatrix}$ — перестановка, соответствующая b по теореме Кэли.
- Пусть G непрерывная r -параметрическая группа: $g(p_1, \dots, p_r) \equiv g(p) \in G$, $[g(p)]^{-1} = g(p')$, $g(a)g(b) = g(c)$, $p' = p'(p)$, $c = c(a, b)$. Если p' и c — аналитические функции своих аргументов, то G — **r -параметрическая группа Ли**.
- Существует исчерпывающий список конечных простых групп, включающий знакопеременные группы степени не меньше 5, группы типа Ли и 26 так называемых

спорадических групп (Горенштейн, 1985). Группы типа Ли являются аналогами над конечными полями комплексных групп Ли. **Классификационная теорема** гласит: Если G — конечная простая группа, то она изоморфна одной из простых групп указанного списка.

Задачи к разделу 1

1. Образуют ли группу следующие множества матриц, если в качестве группового умножения взять обычное умножение матриц?

$$a) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ 0 & a_{22} & a_{23} \\ 0 & 0 & a_{33} \end{pmatrix}, \prod a_{jj} \neq 0, b) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21} \neq 0, c) \begin{pmatrix} 0 & a_{12} \\ a_{21} & 0 \end{pmatrix}.$$

2. Показать, что $(ab)^{-1} = b^{-1}a^{-1}$.
3. Доказать, что пересечение любого числа подгрупп — подгруппа.
4. Доказать, что все элементы группы, перестановочные с данным элементом a (нормализатор a), образуют подгруппу.
5. Пусть все неединичные элементы группы имеют порядки, равные 2. Доказать, что группа абелева.
6. Пусть a — элемент конечной группы порядка n . Вычислить a^n .
7. Доказать, что всякая бесконечная группа имеет бесконечное множество подгрупп.
8. Доказать, что если $b \in aH$, то $bH = aH$ (H — подгруппа).
9. Доказать, что элементы xu и ux сопряжены.
10. Доказать, что число элементов в классе сопряженных с a элементов равно n/m , где n — порядок группы, m — порядок нормализатора a .
11. Доказать, что в любой группе подгруппа индекса 2 является нормальным делителем.
12. Доказать, что центр группы является инвариантной подгруппой.
13. Могут ли абелевы группы быть простыми?
14. Показать, что инвариантная подгруппа содержит вместе с элементом a весь класс сопряженных a элементов.
15. Пусть порядок конечной группы делится на простое число p . Доказать, что в группе имеются элементы порядка p .
16. Привести примеры автоморфизмов, отличных от $a \rightarrow bab^{-1}$.

17. Доказать, что если существуют гомоморфизмы $G \rightarrow G^*$ и $G^* \rightarrow G^{**}$, то существует гомоморфизм $G \rightarrow G^{**}$.
18. Доказать, что все гомоморфизмы простой группы, за исключением $G \rightarrow e^*$, являются изоморфизмами.
19. Доказать, что отображение $a \leftrightarrow a^{-1}$ является автоморфизмом тогда и только тогда, когда группа коммутативна.
20. Доказать, что фактор-группа G/Z некоммутативной группы G по ее центру является нециклической.
21. Может ли прямое произведение нетривиальных групп ($\neq e$) быть простой группой?
22. Доказать, что прямое произведение двух конечных циклических групп со взаимно-простыми порядками является циклической группой.
23. Выяснить возможные структуры групп восьмого порядка.
24. Показать, что всякую перестановку можно представить в виде произведения транспозиций.
25. Найти все элементы группы P_n , перестановочные с циклом $(123\dots n)$.
26. Доказать, что если разложение перестановки p на независимые циклы состоит из циклов длин m_1, m_2, \dots, m_k , то порядок p равен наименьшему общему кратному чисел m_1, m_2, \dots, m_k .
27. Доказать, что четность перестановки $p \in P_n$ равна $(-1)^{n-m}$, где m — число циклов, на которые распадается перестановка.
28. Доказать, что множество транспозиций $(12), (23), \dots, (n-1, n)$ порождает группу P_n .
29. Доказать, что две перестановки $(12), (12\dots n)$ порождают P_n .
30. Разбить группу P_5 на классы сопряженных элементов.
31. Разбить знакопеременную группу A_4 (подгруппа четных перестановок группы P_4) на классы сопряженных элементов.
32. Перечислить подгруппы, сопряженные P_3 в группе P_4 .
33. Показать, что в группе вращений коммутируют между собой только вращения вокруг одной и той же оси или повороты на π около взаимно-перпендикулярных осей.
34. Разбить на классы сопряженных элементов унитарные группы $U(n)$.
35. Показать, что преобразование $C(\varphi)I$ является зеркальным поворотом.
36. Показать, что группа самосовмещений многогранника, имеющего n вершин, изоморфна некоторой подгруппе P_n .

37. Найти подгруппу самосовмещений правильного n -угольника в группе всех движений плоскости.
38. Пусть фигура Φ состоит из всех точек плоскости, имеющих целые координаты в некоторой прямоугольной системе координат. Найти подгруппу самосовмещений Φ и описать ее подгруппы четвертого порядка.
39. Найти наименьшее множество элементов, порождающих группу D_n .
40. Показать, что все элементы группы октаэдра O порождаются поворотами вокруг осей четвертого порядка.
41. Показать, что главная ось группы D_{nd} есть зеркально-поворотная ось порядка $2n$.

2. Линейные представления групп

2.1. Определение представлений

Линейным представлением группы G называется гомоморфизм $G \rightarrow \Gamma [g \rightarrow \hat{D}_\Gamma(g)]$, где $\Gamma = \{\hat{D}_\Gamma(g)\}$ — группа неособенных линейных операторов, действующих в некотором пространстве L_n , или соответствующих им матриц. **Размерность представления** (n) — размерность пространства L_n (порядок матриц). Изоморфное отображение $G \rightarrow \Gamma$ называется **точным представлением**. Два представления Γ и Γ' одинаковой размерности называются **эквивалентными**, если имеется хотя бы один неособенный линейный оператор (матрица) S (мы не всегда используем значок $\hat{}$ для обозначения оператора) такой, что $\hat{D}'_\Gamma(g) = S\hat{D}_\Gamma(g)S^{-1}$ для всех $g \in G$. Эквивалентные матричные представления можно рассматривать как представления одними и теми же операторами, записанными в разных базисах. **Унитарные представления** — представления унитарными операторами (матрицами).

Представление Γ называется **приводимым**, если имеется нетривиальное подпространство $L_m \subset L_n$, инвариантное относительно всех операторов $\hat{D}_\Gamma(g)$. В противном случае представление называется **неприводимым** (НП). Матрицы приводимых представлений в базисе $(e_1, \dots, e_m, e_{m+1}, \dots, e_n)$, где (e_1, \dots, e_m) — базис L_m , имеют “приведенный” вид:

$$\hat{D}_\Gamma(g) = \begin{pmatrix} \hat{D}_1(g) & \hat{D}_3(g) \\ 0 & \hat{D}_2(g) \end{pmatrix}.$$

Приводимое представление индуцирует два представления меньшей размерности: $\Gamma_1, g \rightarrow \hat{D}_1(g)$; $\Gamma_2, g \rightarrow \hat{D}_2(g)$. Представление Γ называется **вполне приводимым (разложимым)**, если пространство L_n распадается в прямую сумму двух или более инвариантных относительно всех $\hat{D}_\Gamma(g)$ подпространств, в каждом из которых индуцируются неприводимые представления. В подходящем базисе (составленном из базисов инвариантных подпространств) матрица такого представления имеет вид “прямой” суммы матриц, соответственно, Γ называют **суммой** НП, $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2 + \dots$.

2.2. Разложение приводимых унитарных представлений

Приводимые унитарные представления вполне приводимы, поскольку унитарное пространство можно записать в виде прямой суммы подпространства L_m и его ортогонального дополнения L_m^\perp , а из инвариантности L_m относительно унитарных операторов вытекает и инвариантность L_m^\perp . Представления конечных групп унитарны: в пространстве, где действуют операторы $\hat{D}(g)$, можно определить скалярное произведение таким образом, что эти операторы будут сохранять его, $\{\hat{D}(g)x, \hat{D}(g)y\} = \{x, y\}$. Достаточно положить $\{x, y\} = \sum_g \hat{D}(g)x, \hat{D}(g)y$, где (x, y) — произвольное исходное скалярное произведение. “Старое” скалярное произведение сохраняется операторами $S\hat{D}S^{-1}$, где S — матрица перехода от любого ортонормированного полного базиса f_i , $\{f_i, f_j\} = \delta_{ij}$, к базису e_i , ортонормированному по-старому: $(e_i, e_j) = \delta_{ij}$, $Sf_i = e_i$. Для доказательства удобно дважды воспользоваться соотношением $(Sx, Sy) = \{x, y\}$, которое легко получается, если разложить x и y по координатам: $x = \xi^i f_i$, $y = \eta^j f_j$.

Сказанное выше сводит исследование представлений конечных групп к нахождению их неэквивалентных унитарных НП.

Утверждение об унитарности представлений (а также приводимые ниже соотношения ортогональности матричных элементов и характеров НП) можно распространить и на непрерывные компактные группы, заменяя сумму по группе $\sum_g F(g)$ “инвариантным” интегралом $\int F(g)dg = \int F(g_0g)dg$. Фактически это интеграл по параметрам группы (в конечных пределах!) с некоторой весовой функцией: $\int F(g)dg = \int F(p_1, \dots, p_r) \rho(p_1, \dots, p_r) dp_1 \dots dp_r$.

2.3. Лемма Шура и ее следствия

Лемма Шура: если $XD^{(\alpha)}(g) = D^{(\beta)}(g)X$ для двух неприводимых представлений Γ_α и Γ_β (любой группы), то либо $X = 0$, либо X — неособенная квадратная матрица, и тогда Γ_α эквивалентно Γ_β . Доказательство: матрица X содержит $n_\alpha = \dim \Gamma_\alpha$ столбцов и n_β строчек и (линейно) отображает векторы n_α -мерного пространства с базисом $\{e_i\}$ на векторы n_β -мерного. Транспонированную матрицу \tilde{X} можно рассматривать как отображение n_β -мерного пространства на n_α -мерное. При $n_\alpha > n_\beta$ векторы $\{Xe_i\}$ линейно зависимы, т.е., существуют ненулевые векторы $x = \xi^i e_i$ такие, что $Xx = 0$. Эти векторы образуют подпространство в L_{n_α} , которое по условию леммы оказывается

инвариантным относительно всех $D^{(\alpha)}$; в силу неприводимости Γ_α оно обязано совпадать со всем пространством, и, следовательно, $X = 0$. При $n_\alpha < n_\beta$ из тех же соображений $\tilde{X} = 0$, т.е., снова $X = 0$. При $n_\alpha = n_\beta$ векторы $\{Xe_i\}$ не обязательно линейно зависимы, но тогда X — неособенный оператор.

Следствие (**вторая лемма Шура**): если $XD^{(\alpha)}(g) = D^{(\alpha)}(g)X$ для всех $g \in G$, то $X = \lambda E$ — скалярная матрица. (Если X — неособенная матрица, то $X - \lambda E$, где λ — собственное значение X , особенная, а поэтому $X - \lambda E = 0$.) Отсюда вытекает важный вывод для абелевых групп: все НП абелевых групп одномерны.

Рассмотрим конечную группу G (порядка g) и ее НП Γ_α и Γ_β . Пусть M_{ij} — прямоугольная матрица, в которой только один элемент (в i -й строчке и j -м столбце) отличен от нуля и равен 1. Матрица $X = \frac{1}{g} \sum_g D^{(\beta)}(g) M_{ij} D^{(\alpha)}(g^{-1})$ удовлетворяет условию леммы Шура (а при $\alpha = \beta$ — условию следствия из нее); поэтому можно написать $X = \lambda_{ij} \delta_{\alpha\beta} E$, полагая, что $\alpha \neq \beta$ означает неэквивалентность представлений Γ_α и Γ_β . Расписывая это матричное равенство по элементам, получим соотношение:

$$\frac{1}{g} \sum_g D_{li}^{(\beta)}(g) D_{jk}^{(\alpha)}(g^{-1}) = \lambda_{ij} \delta_{\alpha\beta} \delta_{lk}.$$

Полагая здесь $\alpha = \beta$, $l = k$ и суммируя по k , находим $\lambda_{ij} = \delta_{ij} / n_\alpha$; подстановка этого выражения в приведенное выше равенство приводит к **соотношению ортогональности для матричных элементов НП**. Для унитарных представлений $D(g^{-1}) = \tilde{D}(g)^*$ (звездочка здесь означает комплексное сопряжение, а тильда — транспонирование), и поэтому соотношение ортогональности можно представить в виде

$$\frac{1}{g} \sum_g D_{kj}^{(\alpha)}(g)^* D_{li}^{(\beta)}(g) = \frac{1}{n_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{kl} \delta_{ji}. \quad (2.1)$$

2.4. Характер представления

Характер элемента g в представлении Γ : $\chi_\Gamma(g) = \text{Sp } D_\Gamma(g)$. Характеры сопряженных элементов совпадают, $\chi_\Gamma(aga^{-1}) = \chi_\Gamma(g)$, и можно говорить о **характере класса** сопряженных элементов. **Характер представления** Γ — совокупность характеров элементов группы (классов) в этом представлении. Характеры

эквивалентных представлений совпадают. Из (2.1) вытекают **соотношения ортогональности для характеров НП**:

$$\frac{1}{g} \sum_g \chi^{(\alpha)}(g) * \chi^{(\beta)}(g) = \delta_{\alpha\beta},$$

или (для конечных групп)

$$\frac{1}{g} \sum_i m_i \chi_i^{(\alpha)} * \chi_i^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta}, \quad (2.2)$$

где m_i — число элементов класса K_i . Вследствие этого, число неэквивалентных НП группы не превышает числа классов k (как будет показано в дальнейшем, совпадает с ним). Действительно, число ненулевых векторов $\chi^{(\alpha)} = \left(\sqrt{\frac{m_1}{g}} \chi_1^{(\alpha)}, \dots, \sqrt{\frac{m_k}{g}} \chi_k^{(\alpha)} \right)$,

ортогональных друг другу согласно (2.2), не превышает размерности пространства.

Однозначность разложения вполне приводимого представления по неприводимым:

$$\Gamma = \sum_{\alpha} N_{\alpha} \Gamma_{\alpha} \Rightarrow \chi_{\Gamma}(g) = \sum_{\alpha} N_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(g), \quad N_{\alpha} = \frac{1}{g} \sum_i m_i \chi_{\Gamma_i} \chi_i^{(\alpha)*}. \quad (2.3)$$

$$\frac{1}{g} \sum_g |\chi_{\Gamma}(g)|^2 = \sum_{\alpha} N_{\alpha}^2. \quad (2.4)$$

Критерием неприводимости представления Γ служит обращение правой части (2.4) в единицу.

2.5. Регулярное представление конечной группы.

Регулярное представление конечной группы: $g_s \rightarrow G_s$, где матрица G_s определяется соотношением

$$(g_s g_1, g_s g_2, \dots, g_s g_g) = (g_{s1}, g_{s2}, \dots, g_{sg}) = (g_1, g_2, \dots, g_g) G_s,$$

т.е., $(G_s)_{ki} = \delta_{k,si}$. Характер регулярного представления: $\chi_{\text{reg}}(e) = g$, $\chi_{\text{reg}}(a \neq e) = 0$.

Разложение на НП: согласно (2.3), $N_{\alpha} = n_{\alpha} = \dim \Gamma_{\alpha}$. Отсюда вытекают важные **соотношения Бернсайда**:

$$g = \chi_{\text{reg}}(e) = \sum_{\alpha} N_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(e) = \sum_{\alpha} n_{\alpha}^2, \quad \sum_{\alpha} n_{\alpha} \chi^{(\alpha)}(a \neq e) = 0. \quad (2.5)$$

Например, группа T имеет 4 класса сопряженных элементов, а значит и 4 неэквивалентных НП, размерности которых связаны соотношением (2.5): $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 + n_4^2 = 12$, т.е., имеются три одномерных и одно трехмерное НП.

2.6. Комплексно-сопряженные представления

Комплексно-сопряженные представления: $\Gamma = \{D(g)\}$ и $\Gamma^* = \{D^*(g)\}$; $\chi_{\Gamma^*} = \chi_{\Gamma}^*$.

Если Γ — НП, то Γ^* — тоже НП. Если характер Γ вещественный, то Γ и Γ^* эквивалентны. Для эквивалентных НП Γ и Γ^* $D(g) = SD^*(g)S^{-1} = SS^*D(g)(S^*)^{-1}S^{-1}$, и, согласно лемме Шура, $SS^* = \lambda E$. Для унитарных Γ матрица S может быть выбрана унитарной (задача 5), и тогда $S = \lambda \tilde{S}$, откуда $\lambda = \pm 1$. При $\lambda = 1$, $S = \tilde{S}$ представление Γ называется **потенциально-вещественным**, оно эквивалентно вещественному [с вещественными матрицами $D(g) = D^*(g)$]. Если U — матрица преобразования к вещественной матрице D' : $D' = U^{-1}DU = (U^{-1}DU)^*$, то $D = (U\tilde{U})D^*(U\tilde{U})^{-1}$, т.е., матрица U находится решением уравнения $U\tilde{U} = S$. Отсюда видно, что **псевдовещественные представления** ($S = -\tilde{S}$) никаким эквивалентным преобразованием не могут быть приведены к вещественному виду. Сумма комплексно-сопряженных представлений $\Gamma + \Gamma^*$ всегда может быть приведена к вещественному виду: если $D_{\Gamma}(g) = D_1(g) + iD_2(g)$, где $D_1(g)$ и $D_2(g)$ — вещественные матрицы, то

$$S \begin{pmatrix} D_{\Gamma}(g) & 0 \\ 0 & D_{\Gamma}^*(g) \end{pmatrix} S^{-1} = \begin{pmatrix} D_1(g) & D_2(g) \\ -D_2(g) & D_1(g) \end{pmatrix}, \quad S = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} E & iE \\ iE & E \end{pmatrix},$$

где E — единичная матрица порядка размерности Γ .

Представление, **сопряженное** Γ : $\tilde{\Gamma}, g \rightarrow \tilde{D}_{\Gamma}(g^{-1})$. Для унитарных представлений $\Gamma^* = \tilde{\Gamma}$.

2.7. Прямое произведение представлений группы

Прямое произведение пространств $L_n \times L_m$ определяется как линейная оболочка множества билинейных комбинаций $\{xy\}$, где $x \in L_n, y \in L_m$. Если $\{e_i\}, \{f_j\}$ — базисы L_n и L_m , соответственно, то произвольный элемент $z \in L_n \times L_m$ однозначно может быть представлен в виде $z = \zeta^{ij} e_i f_j$, т.е., множество пар $\{e_i f_j\}$ служит **естественным базисом** в произведении пространств, размерность которого оказывается равной произведению размерностей сомножителей, $\dim L_n \times L_m = nm$. **Прямое произведение операторов** A и B , действующих в L_n и L_m , соответственно, определяется как линейный оператор на $L_n \times L_m$, причем $(A \times B)xy = (Ax)(By)$. Матрица $A \times B$ в базисе $\{e_i f_j\}$ является “прямым произведением” матриц A и B в базисах $\{e_i\}$ и $\{f_j\}$, соответственно:

$$(A \times B)_{ij', ij} = A_i B_{j'j}.$$

Если L_n и L_m — унитарны (в них определены скалярные произведения), то скалярное произведение в $L_n \times L_m$ определяется условиями $(xu, x'y') = (x, x')(y, y')$ и линейности (антилинейности) по аргументам. Тогда, если $\{e_i\}$ и $\{f_j\}$ — ортонормированные базисы, то $\{e_i f_j\}$ — ортонормированный базис в $L_n \times L_m$.

Прямое произведение представлений группы $\Gamma_1, g \rightarrow D_1(g)$ и $\Gamma_2, g \rightarrow D_2(g)$: $\Gamma_1 \times \Gamma_2, g \rightarrow D_1(g) \times D_2(g)$. Если Γ_1 и Γ_2 — унитарны, то $\Gamma_1 \times \Gamma_2$ также унитарное представление. Характер прямого произведения представлений:

$$\chi_{\Gamma_1 \times \Gamma_2}(g) = \chi_{\Gamma_1}(g) \chi_{\Gamma_2}(g). \quad (2.6)$$

Понятие прямого произведения очевидным образом обобщается на любое число сомножителей. В частности, каждое представление порождает **тензорное представление** любого ранга r в соответствующем пространстве: $\Gamma \times \Gamma \times \dots \times \Gamma$ (r раз). Тензорное пространство (ранга r) распадается в сумму подпространств, обладающих определенной симметрией относительно перестановок (r -ой степени), инвариантных относительно тензорного представления.

Например, тензор второго ранга является суммой симметричного и антисимметричного тензоров; соответственно, квадрат представления Γ приводится к сумме симметризованного и антисимметризованного квадратов:

$$\Gamma \times \Gamma = \Gamma^2 = [\Gamma^2] + \{\Gamma^2\}.$$

Если L_n — пространство действия представления $\Gamma, g \rightarrow D(g)$, с базисом $\{e_i\}$, то пространством действия представления $\Gamma^2, g \rightarrow D(g) \times D(g)$ служит $L_n^{(1)} \times L_n^{(2)}$ с базисом $\{e_i^{(1)} e_j^{(2)}\}$. Базисом подпространства симметричных тензоров служит набор $n(n+1)/2$ векторов $\{e_i^{(1)} e_j^{(2)} + e_j^{(1)} e_i^{(2)}\}$, а базисом для антисимметричных тензоров — набор $n(n-1)/2$ векторов $\{e_i^{(1)} e_j^{(2)} - e_j^{(1)} e_i^{(2)}\}$. Простые расчеты приводят к следующим характеристам:

$$\chi_{[\Gamma^2]} \equiv [\chi_{\Gamma}^2(g)] = \frac{1}{2} \chi_{\Gamma}^2(g) + \frac{1}{2} \chi_{\Gamma}(g^2), \quad \chi_{\{\Gamma^2\}} = \frac{1}{2} \chi_{\Gamma}^2(g) - \frac{1}{2} \chi_{\Gamma}(g^2). \quad (2.7)$$

2.8. Представления прямого произведения групп

Построение представлений прямого произведения групп по представлениям перемножаемых групп: пусть $G \rightarrow \Gamma, D(g)$ в L_n , $G' \rightarrow \Gamma', D'(g')$ в L_m ; тогда $G \times G' \rightarrow \Gamma \times \Gamma', (aa') \rightarrow D(a) \times D'(a')$ в $L_n \times L_m$. Характер $\chi_{\Gamma \times \Gamma'}(aa') = \chi_{\Gamma}(a) \chi_{\Gamma'}(a')$. Если Γ и Γ' — НП, то $\Gamma \times \Gamma'$ — НП группы $G \times G'$. Для конечных групп это следует из критерия неприводимости.

2.9. Метод Бете вычисления характеров НП конечных групп

Представим класс K_i как объединение элементов: $K_i = a_{i1} + a_{i2} + \dots + a_{imi}$. Очевидно, $bK_ib^{-1} = K_i$, $b \in G$. В сумме $K_iK_j = K_jK_i = \sum a_{it}a_{js}$ каждый элемент $a_{it}a_{js} = a_{kr}$ входит вместе со всем классом сопряженных элементов K_k , ибо $ba_{kr}b^{-1} = ba_{it}b^{-1}ba_{js}b^{-1} \in K_iK_j$. Таким образом, K_iK_j составлено из классов:

$$K_iK_j = \sum_k c(ijk)K_k. \quad (2.8)$$

Положительные целые числа $c(ijk)$ в этих соотношениях называются **структурными коэффициентами группы**. Пусть $G \rightarrow \Gamma_\alpha$, $g \rightarrow D^{(\alpha)}(g)$, тогда $K_i \rightarrow D_i = b_iE$ (следствие леммы Шура), $\text{Sp}D_i = m_i\chi_i = b_in_\alpha$, $\sum m_i|\chi_i|^2 = g$, поэтому $n_\alpha^2 = g(\sum |b_i|^2/m_i)^{-1}$. Согласно (2.8)

$$b_ib_j = \sum c(ijk)b_k. \quad (2.9)$$

Решение этой системы уравнений дает возможные наборы $b_i^{(\alpha)}$, а с ними и наборы характеров $\chi_i^{(\alpha)}$. Например, для группы C_{3v} ($K_1 = e$, $K_2 = C_3 + C_3^2$, $K_3 = \sigma^{(1)} + \sigma^{(2)} + \sigma^{(3)}$); $b_1 = 1$, $b_2^2 = 2b_1 + b_2$, $b_3^2 = 3b_1 + 3b_2$, $b_2b_3 = 2b_3$; характеры трех НП: $\Gamma_1(1,1,1)$; $\Gamma_2(1,1,-1)$; $\Gamma_3(2,-1,0)$.

Из (2.9) и (2.5) следует, что

$$\sum_\alpha \chi_i^{(\alpha)} \chi_j^{(\alpha)} m_i m_j = \sum_{k\alpha} c(ijk) m_k n_\alpha \chi_k^{(\alpha)} = c(ij1)g;$$

$K_1 = e$, $c(ij1) = m_i \delta_{ij}$, где класс K_i состоит из элементов, обратных элементам K_i , $\chi_i = \chi_i^*$, $m_i = m_i$. Таким образом,

$$\sum_\alpha \chi_i^{(\alpha)} * \chi_j^{(\alpha)} \sqrt{m_i m_j / g^2} = \delta_{ij}. \quad (2.10)$$

Отсюда вытекает, что число классов сопряженных элементов не превышает числа неэквивалентных НП, т.е., совпадает с ним (ср. §2.4).

2.10. Другие методы вычисления характеров

При наличии инвариантной подгруппы N имеет место гомоморфизм $G \rightarrow G/N$, в силу которого представления фактор-группы одновременно являются представлениями исходной группы.

Составление характеров для группы по характерам НП произвольных ее подгрупп (**теорема Фробениуса**): $H \subset G$, $\varphi^{(v)}$ — характеры НП H , тогда

$$\chi_j = \frac{g}{m_j h} \sum_\tau m_{j\tau} \varphi_{j\tau}^{(v)} \quad (2.11)$$

— характер (вообще говоря, приводимого) представления G . Здесь j_τ — индексы классов H , элементы которых в группе G входят в один класс K_j . ($\chi_k = 0$, если элементы класса K_k не содержатся в подгруппе H .) Доказательство: каждое НП $G \rightarrow \Gamma_\alpha$ является представлением (приводимым) H , поэтому $\chi_i^{(\alpha)} = \sum a_{\alpha\nu} \varphi_{i1}^{(\nu)} = \sum a_{\alpha\nu} \varphi_{i2}^{(\nu)} = \dots$ для классов $K_i \subset G$, содержащих элементы H . В силу (2.10)

$$\sum_{\alpha} \chi_j^{(\alpha)} * \chi_i^{(\alpha)} = \sum_{\alpha\nu} a_{\alpha\nu} \chi_j^{(\alpha)} * \varphi_{i\tau}^{(\nu)} = \frac{g}{m_i} \delta_{ij},$$

и, умножая на $\varphi_{i\tau}^{(\mu)} * m_{i\tau}$ и суммируя по $i\tau$, получаем (2.11), где $\chi_j = \sum_{\alpha} a_{\alpha\nu} \chi_j^{(\alpha)}$ ($a_{\alpha\nu}$ — целые числа).

Если H — инвариантная подгруппа группы G , $h \rightarrow d(h)$ — некоторое ее представление (γ), то $h \rightarrow d_g(h) = d(ghg^{-1})$, $g \in G$ также является представлением (задача 2), которое называется **сопряженным** к γ относительно G . Если исходное представление неприводимо, то неприводимы и сопряженные к нему представления. Совокупность неэквивалентных друг другу сопряженных НП называют **орбитой H относительно группы G** . Имеет место следующая теорема:

Пусть Γ — НП G . При ограничении подгруппой H Γ разлагается по НП подгруппы H γ_α , принадлежащим одной и той же орбите, причем каждое γ_α встречается в разложении одинаковое число раз (m , **кратность орбиты**).

Можно построить все НП группы G , исходя из НП ее нормального делителя H . Мы рассмотрим такие построения на примере пространственных групп и группы Пуанкаре, обладающих абелевыми инвариантными подгруппами трансляций.

2.11. Фактическое разложение приводимого представления

Фактическое разложение (вполне) приводимого представления $\Gamma = \{D(g)\} = \sum_{\alpha} N_{\alpha} \Gamma_{\alpha}$ по неприводимым — нахождение “канонического” базиса $\{e_i^{(\alpha t)}\}$ в пространстве L , где это представление осуществляется; индекс $t = 1, \dots, N_{\alpha}$ различает одинаковые НП, i — индекс “строчки” НП, $i = 1, 2, \dots, n_{\alpha}$;

$$\hat{D}(g)e_j^{(\alpha t)} = \sum_i D_{ij}^{(\alpha)}(g)e_i^{(\alpha t)}, \quad (2.12)$$

$D(g)$ — матрица НП Γ_{α} , вид которой можно наперед фиксировать.

Неоднозначность канонического базиса: пусть U — любой невырожденный оператор, коммутирующий со всеми $D(g)$; тогда $e'_i^{(\alpha t)} = Ue_i^{(\alpha t)}$ — тоже канонический

базис. Вид матрицы U в каноническом базисе определяется леммой Шура: U — прямая сумма N_α -строчных блоков

$$\begin{pmatrix} b_{11}\hat{E} & \dots & b_{1N_\alpha}\hat{E} \\ \dots & \dots & \dots \\ b_{N_\alpha 1}\hat{E} & \dots & b_{N_\alpha N_\alpha}\hat{E} \end{pmatrix}, \quad (2.13)$$

где b_{ij} — произвольные числа. Как видно, в общем случае переход от одного канонического базиса к другому осуществляется невырожденными преобразованиями

$$e_k^{(\alpha t)} = \sum_{t'=1}^{N_\alpha} b_{t'k} e_k^{(\alpha t')} \quad (2.14)$$

одновременно для всех $k = 1, 2, \dots, n_\alpha$.

При известном $e_1^{(\alpha t)}$ остальные $e_i^{(\alpha t)}$ устанавливаются однозначно при помощи операторов “поворота”:

$$e_i^{(\alpha t)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{i1}^{(\alpha)} * (g) \hat{D}(g) e_1^{(\alpha t)}. \quad (2.15)$$

В качестве $e_1^{(\alpha 1)}, e_1^{(\alpha 2)}, \dots, e_1^{(\alpha N_\alpha)}$ согласно (2.14) можно взять любые N_α независимых векторов, полученных “проектированием” произвольных $x \in L$:

$$e_1^{(\alpha t)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{11}^{(\alpha)} * (g) \hat{D}(g) x = \sum_t x(\alpha t, 1) e_1^{(\alpha t)}. \quad (2.16)$$

При необходимости эти векторы можно ортогонализировать и нормировать.

Операторы проектирования $P_i^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{ii}^{(\alpha)} * (g) \hat{D}(g)$, порождают

инвариантные относительно $\{U\}$ подпространства $L_i^{(\alpha)} \subset L$, где $L_i^{(\alpha)}$ — линейная оболочка $\{e_i^{(\alpha 1)}, e_i^{(\alpha 2)}, \dots, e_i^{(\alpha N_\alpha)}\}$:

$$\begin{aligned} x \in L, x &= \sum_{\alpha i t} x(\alpha t, i) e_i^{(\alpha t)} = \sum_{\alpha i} x_i^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} x^{(\alpha)}, \\ x_i^{(\alpha)} &= P_i^{(\alpha)} x; \quad x^{(\alpha)} = \sum_i x_i^{(\alpha)} = \sum_i P_i^{(\alpha)} x = P^{(\alpha)} x, \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$P^{(\alpha)} = \frac{n_\alpha}{g} \sum_g \chi^{(\alpha)} * (g) \hat{D}(g). \quad (2.18)$$

$P^{(\alpha)}$ — оператор проектирования на подпространство $L^{(\alpha)} = L_1^{(\alpha)} + \dots + L_{n_\alpha}^{(\alpha)}$, инвариантное как относительно операторов $\{U\}$, так и относительно $\{D(g)\}$.

2.12. Элементы групповой алгебры

Матричная алгебра $[\Gamma]$ — линейная оболочка матриц $D(g)$, осуществляющих представление $G \rightarrow \Gamma$ группы G . Для конечной группы $[\Gamma] = \{\alpha^1 D(g_1) + \dots + \alpha^g D(g_g)\}$, где α^i — всевозможные числа. Множество $[\Gamma]$ замкнуто относительно трех определенных на нем операций (сложение, умножение, умножение на число) и потому является **алгеброй** — частью полной матричной алгебры $\{M_n\}$ соответствующего порядка. Матричная алгебра $[\Gamma]$ приводима или неприводима вместе с порождающим ее представлением Γ .

Всевозможные матричные алгебры $[\Gamma]$ в случае конечных групп удобно считать матричными представлениями (отображениями, сохраняющими основные операции) **абстрактной групповой алгебры** $[G]$ (группового кольца):

$$[G] = \{x = \sum_{a \in G} \xi(a)a\}; [G] \rightarrow [\Gamma], x \rightarrow \sum \xi(a)D(a).$$

Как видно, любая функция на группе может рассматриваться как элемент групповой алгебры. Правило умножения элементов алгебры:

$$\begin{aligned} \sum \zeta(c)c = z = xy = \sum_{ab} \xi(a)\eta(b)ab &= \sum_a \xi(a) \sum_c \eta(a^{-1}c)c, \\ \zeta(c) = \sum_a \xi(a)\eta(a^{-1}c) &= \sum_b \xi(cb^{-1})\eta(b). \end{aligned} \quad (2.19)$$

Регулярное представление групповой алгебры: $x \rightarrow G_x$ на $[G]$, $G_{xy} = xy$. Двойкая роль алгебры $[G]$ в регулярном представлении — 1) совокупность преобразований, 2) линейное пространство — поле действия этих преобразований.

Коммутаторная алгебра $\{A\}$ некоторого множества матриц $\{L\}$: $A \in \{A\}$, если $AL = LA$ для всех $L \in \{L\}$. Коммутаторной алгеброй НП Γ (и алгебры $[\Gamma]$) согласно лемме Шура является множество λE , где λ — любое число.

Полная приводимость регулярного представления G означает разложимость алгебры $[G]$ на подпространства B , инвариантные относительно умножения на элементы алгебры ($b \in B$, если для любого $x \in [G]$ $xb \in B$, B — “**левый идеал**” алгебры $[G]$). Процесс расщепления обрывается на “**минимальных идеалах**”, соответствующих НП $[G]$:

$$[G] = B_1 \oplus \dots \oplus B_f. \quad (2.20)$$

Согласно (2.20) любой элемент алгебры $x = x_1 + \dots + x_f$, $x_i \in B_i$, в том числе

$$e = e_1 + \dots + e_f. \quad (2.21)$$

Производящие идемпотенты: $xe_i = x_i$, $e_i e_j = e_i \delta_{ij}$, $be_i = b$ ($b \in B$); e_1, \dots, e_f — **взаимно нормальные примитивные идемпотенты** (не допускают дальнейшего разложения).

Центр алгебры Z : $z \in Z$, если $zx = xz$ для любого $x \in [G]$. Центр, как функция классов сопряженных элементов:

$$g \in G, z = \sum \zeta(a)a = gzg^{-1} = \sum \zeta(a)gag^{-1} = \sum \zeta(g^{-1}ag)a, \zeta(a) = \zeta(gag^{-1}) = \zeta(i),$$

откуда

$$z = \sum_i \zeta(i)K_i, \quad K_i = a_{i1} + a_{i2} + \dots + a_{im_i}, \quad (2.22)$$

$\{K_i\}$ — базис центра. В частности,

$$K_i K_j = \sum_k c(ijk)K_k. \quad (2.8)$$

Взаимосвязь групповой алгебры и коммутаторной алгебры $\{U\}$ произвольного представления Γ : прообраз $P_i^{(\alpha)} \in [\Gamma]$ в $[G]$, $\widehat{D}_{ii}^{(\alpha)}(\cdot) = \frac{n_\alpha}{g} \sum D_{ii}^{(\alpha)}(g)g$, является производящим идемпотентом типа введенных равенством (2.21), он порождает минимальный идеал $\{\widehat{D}_{ij}^{(\alpha)}(\cdot)\}$ (задача 29).

Задачи к разделу 2

1. Пусть $\{a^n\}$ — бесконечная циклическая группа. Показать, что отображение $a^n \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & n \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ является представлением. Является ли это представление вполне приводимым?
2. Пусть H — инвариантная подгруппа G , $h \rightarrow d(h)$ — некоторое ее представление. Убедиться, что отображение $h \rightarrow d_g(h) = d(ghg^{-1})$, $g \in G$ также является представлением H . Доказать, что совокупность элементов g , для которых $d_g \propto d$, образует подгруппу.
3. Найти все НП циклической группы порядка n .
4. Пусть $g \rightarrow D(g)$ — приводимое представление, действующее в пространстве L , а $L_1 \subset L$ — инвариантное подпространство, преобразующееся по НП Γ_1 . Доказать, что если некоторый оператор B коммутирует со всеми операторами $D(g)$, то подпространство, состоящее из векторов Bx_1 , $x_1 \in L_1$, инвариантно и преобразуется по Γ_1 .

5. Пусть унитарные НП $D_1(g)$ и $D_2(g)$ эквивалентны: $D_1(g) = AD_2(g)A^{-1}$. Доказать, что оператор $A/(\det A)^{1/n}$ — унитарный. n — размерность НП.
6. Доказать, что произведение НП на одномерное представление неприводимо.
7. Пусть $\Gamma_1, \Gamma_2, \Gamma_3$ — НП группы G . Доказать, что кратности, с которыми Γ_1^* содержится в $\Gamma_2 \times \Gamma_3$, Γ_2^* содержится в $\Gamma_1 \times \Gamma_3$ и Γ_3^* содержится в $\Gamma_1 \times \Gamma_2$, равны между собой.
8. Доказать, что произведение двух НП размерности n_1 и n_2 , $n_1 > n_2$, не могут содержать представления размерности меньшей, чем n_1/n_2 .
9. Доказать, что если каждый элемент группы сопряжен своему обратному, то каждое представление группы сопряжено самому себе.
10. Пусть K_i — класс сопряженных элементов, обратных элементам класса K_i . Показать, что для произвольных НП Γ_μ и Γ_ν имеют место равенства:
$$\sum_i m_i \chi_i^{(\mu)} \chi_i^{(\nu)} = g \delta_{\mu\nu}.$$

11. Показать, что для НП конечных групп имеют место соотношения (Фробениуса-Шура):

$$\frac{1}{g} \sum_g \chi(g^2) = \begin{cases} 1, & \text{если } D(g) \text{ вещественное} \\ -1, & \text{если } D(g) \text{ псевдовещественное} \\ 0, & \text{если } D(g) \text{ и } D^*(g) \text{ неэквивалентны.} \end{cases}$$

12. Доказать, что прямым умножением НП конечной группы G на НП конечной группы G' можно получить все НП группы $G \times G'$.
13. Вычислить $\sum_g D_{ij}^{(\alpha)}(g)$.
14. Если $\chi_\Gamma = \chi_{\Gamma'}$, то представления Γ и Γ' эквивалентны. Доказать.
15. Вычислить $[\chi_{\Gamma^3}(g)]$ и $\{\chi_{\Gamma^3}(g)\}$.
16. Пусть $\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2$. Разложить на части $\Gamma^2, [\Gamma^2], \{\Gamma^2\}, [\Gamma^3], \{\Gamma^3\}$.
17. Показать, что неприводимая матричная алгебра $[\Gamma_\alpha]$ совпадает с полной алгеброй матриц порядка n_α .
18. Что представляет собой коммутаторная алгебра матричной алгебры $[\Gamma]$, если а) $\Gamma = \Gamma_\alpha + \Gamma_\beta$, б) $\Gamma = 2\Gamma_\alpha$ (Γ_α и Γ_β — неэквивалентные НП)? Описать коммутаторную алгебру в случае, если Γ_α — одномерное представление.
19. Составить регулярное представление алгебры $[\Gamma_\alpha]$ при $n_\alpha = 2$.
20. Какая связь существует между регулярным представлением группы и регулярным представлением групповой алгебры?

21. Пусть $[\alpha]$ — алгебра с единицей (например, $[\Gamma]$). Доказать, что единственными линейными преобразованиями на $[\alpha]$, коммутирующими со всеми преобразованиями $Ax = ax, a \in [\alpha]$, являются преобразования вида $B'x = xb$.
22. Написать матрицу преобразования B' из предыдущей задачи для алгебры $[\Gamma_\alpha]$ с $n_\alpha = 2$.
23. Рассмотрим следующее взаимно-однозначное отображение пространства $[G]$ на себя: $x = \sum \xi(a)a \leftrightarrow \hat{x} = \sum \xi(a^{-1})a$. Пусть $z = xy$. Показать, что $\hat{z} = \hat{y}\hat{x}$. Как выглядит рассматриваемое отображение для элементов группы G ?
24. Пусть $B = \{b\}$ — левый идеал алгебры $[G]$. Проверить, что $\{\hat{b}\} = \hat{B}$ является правым идеалом.
25. Является ли центр группового кольца его идеалом?
26. Доказать, что $\sum_{\alpha ij} n_\alpha D_{ij}^{(\alpha)} * (g) D_{ij}^{(\alpha)}(r) = g\delta(g, r)$.
27. Написать составные характеры C_{3v} , исходя из характеров НП C_3 .
28. Найти орбиты группы C_3 относительно группы C_{3v} .
29. Проверить идемпотентность элемента $\hat{D}_{ij}^{(\alpha)}(.) \in [G]$. Доказать, что он порождает левый идеал $\{\hat{D}_{ij}^{(\alpha)}(.)\}$.

3. Группа вращений

3.1. Одноосные вращения

Группа C_∞ — непрерывная абелева однопараметрическая компактная группа. Пространство параметров — отрезок (кольцо) $(-\pi, \pi)$. Инвариантный интеграл по группе (f — однозначная функция на группе, т.е., периодическая функция от φ):

$$\int f(g)dg = \int f(\varphi)d\varphi = \int f(\varphi + \varphi_0)d\varphi.$$

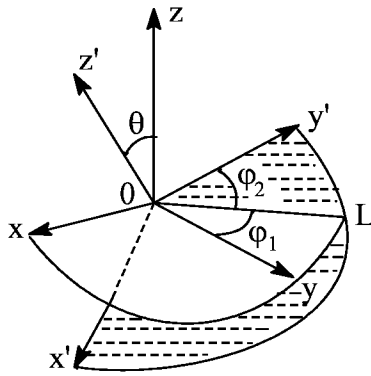
Непрерывные однозначные представления: $\chi(\varphi)\chi(\varphi') = \chi(\varphi + \varphi')$. Дифференцируем по φ' и полагаем затем $\varphi' = 0$: $\chi'(\varphi) = \chi(\varphi)A$, $A = d\chi/d\varphi|_{\varphi=0}$ — **инфинитезимальный оператор** представления (для НП — число). Для “унитарных” однозначных НП $A = im$, m — целое число. При m нецелых возникают т.н. **многозначные представления (двузначные при m полуцелых и т.д.)**.

Группа $C_{\infty v}$ ($\propto D_\infty$) — смешанная непрерывная группа. Пространство группы — два отрезка $(-\pi, \pi)$. Один из них (обозначим индексом $+$) соответствует элементам подгруппы C_∞ , а другой ($-$) элементам смежного класса $\sigma_v C_\infty$, где σ_v — любое из отражений. Классы сопряженных элементов: E , $C(\pm\varphi)$, σ . НП $C_{\infty v}$ одно- и двумерны: операция σ_v объединяет два НП C_∞ , $\chi^{(m)}$ и $\chi^{(-m)} = \chi^{(m)*}$, $m \neq 0$, в одно НП, $D^{(m)}$ с характером 2, $2\cos m\varphi$, 0; одномерные НП — Σ^+ и Σ^- (1, 1, -1). В отсутствии других НП можно убедиться непосредственным вычислением матрицы $D(\sigma_v)$ в базисе, в котором все $D(\varphi)$ диагональны. Операция усреднения по группе выглядит следующим образом:

$$\frac{1}{g} \sum f(g) \rightarrow \frac{1}{4\pi} \sum_{k=\pm 0} \int_0^{2\pi} f(\varphi, k) d\varphi. \quad (3.1)$$

3.2. Группа вращений в трехмерном пространстве

Обозначения группы: $SO(3, R) \equiv R_3 \equiv O_3^+$. **Пространство группы** — сфера радиуса π , в которой концы любого диаметра считаются одной точкой. Каждая точка L отвечает вращению около оси OL на угол $|OL|$. Классу поворотов на угол φ отвечает поверхность сферы радиуса φ . Некоторые параметризации элементов R_3 : а) (ξ_1, ξ_2, ξ_3) — декартовы координаты соответствующей точки пространства группы, б) $(\alpha, \theta, \varphi)$ — сферические координаты той же точки, в) $(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$, $0 \leq \varphi_1, \varphi_2 < 2\pi$, $0 \leq \theta < \pi$ — **углы**



Эйлера (см. рис.). При помощи углов Эйлера произвольное вращение сводится к последовательности трех поворотов около осей координат:

$$\begin{aligned}
 g(\varphi_1, \theta, \varphi_2) &= g_z(\varphi_2)g_{OL}(\theta)g_z(\varphi_1) = g_{OL}(\theta)g_z(\varphi_2)g_{OL}^{-1}(\theta) \\
 g_{OL}(\theta)g_z(\varphi_1) &= g_z(\varphi_1)g_y(\theta)g_z^{-1}(\varphi_1)g_z(\varphi_2)g_z(\varphi_1) = \\
 &g(0, 0, \varphi_1)g(0, \theta, 0)g(0, 0, \varphi_2)
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

Выражение матрицы поворота $g(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$ через углы Эйлера:

$$\begin{pmatrix}
 \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \theta - \sin \varphi_1 \sin \varphi_2 & -\cos \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \theta - \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 & \cos \varphi_1 \sin \theta \\
 \sin \varphi_1 \cos \varphi_2 \cos \theta + \cos \varphi_1 \sin \varphi_2 & -\sin \varphi_1 \sin \varphi_2 \cos \theta + \cos \varphi_1 \cos \varphi_2 & \sin \varphi_1 \sin \theta \\
 -\cos \varphi_2 \sin \theta & \sin \varphi_2 \sin \theta & \cos \theta
 \end{pmatrix} \tag{3.3}$$

Для определения инвариантного интеграла на группе необходимо найти **инвариантную плотность** $\rho(p_1, p_2, p_3)$ такую, что

$$\rho(p_1, p_2, p_3) \Delta p_1 \Delta p_2 \Delta p_3 = \Delta g = \Delta(g_0 g) = \rho(p_1', p_2', p_3') \Delta p_1' \Delta p_2' \Delta p_3',$$

где $g(p_1^0, p_2^0, p_3^0)$ — произвольно выбранное вращение, $(p_1', p_2', p_3') = (p_1^0, p_2^0, p_3^0) (p_1, p_2, p_3)$.

Отсюда:

$$\rho(p_1, p_2, p_3) = \rho(p_1', p_2', p_3') \left| \frac{\partial(p_1', p_2', p_3')}{\partial(p_1, p_2, p_3)} \right|. \tag{3.4}$$

Поскольку ρ определяется с точностью до умножения на произвольную постоянную, можно задаться произвольным $\rho(e) = \rho_0$. Тогда

$$\rho(p_1, p_2, p_3) = \rho_0 \left| \frac{\partial(p_1'(p^0, p), p_2'(p^0, p), p_3'(p^0, p))}{\partial(p_1, p_2, p_3)} \right|_{(p^0)=(p)^{-1}}. \tag{3.5}$$

Несколько громоздкий непосредственный расчет через углы Эйлера приводит к результату (задача 4):

$$\left| \frac{\partial(\varphi_1', \theta', \varphi_2')}{\partial(\varphi_1, \theta, \varphi_2)} \right| = \frac{\sin \theta}{\sin \theta'}, \quad \rho(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \sin \theta, \tag{3.6}$$

так что

$$\int f(g) dg = \int f(g_0 g) dg = \int f(g g_0) dg = \int f(\varphi_1 \theta \varphi_2) \sin \theta d\varphi_1 d\theta d\varphi_2. \tag{3.7}$$

Здесь мы воспользовались тем, что инвариантная плотность как лево-, так и правоинвариантна: $dg = d(g_0 g) = d(g g_0)$. Это общее для компактных групп Ли

утверждение для группы вращений можно проверить непосредственным расчетом. Инвариантная плотность в других параметрах:

$$dg = 2(1 - \cos\alpha)\sin\theta d\alpha d\theta d\phi, \quad \int dg = 8\pi^2. \quad (3.8)$$

3.3. Неприводимые представления группы вращений

Рассмотрим некоторое непрерывное унитарное представление группы вращений:

$$\hat{D}(t\xi)\hat{D}(s\xi) = \hat{D}((t+s)\xi), \quad \hat{D}(0) = \hat{E}.$$

Дифференцируя по s и полагая затем $s = 0$:

$$\frac{d}{dt}D(t\xi) = (\hat{A}_1\xi_1 + \hat{A}_2\xi_2 + \hat{A}_3\xi_3)D(t\xi), \quad \hat{A}_i = \left. \frac{\partial \hat{D}(\xi)}{\partial \xi_i} \right|_{\xi=0},$$

где \hat{A}_i — **инфинитезимальный оператор**, отвечающий параметру ξ_i . Таким образом, каждое непрерывное представление полностью определяется своими инфинитезимальными операторами:

$$\hat{D}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) = \exp \hat{A}_i \xi_i = \exp(-i\hat{J}_1\xi_1 - i\hat{J}_2\xi_2 - i\hat{J}_3\xi_3), \quad \hat{J}_i = i\hat{A}_i, \quad (3.9)$$

или через углы Эйлера, используя (3.2):

$$\hat{D}(\varphi_1\theta\varphi_2) = \exp(-i\hat{J}_3\varphi_1)\exp(-i\hat{J}_2\theta)\exp(-i\hat{J}_3\varphi_2). \quad (3.10)$$

Для унитарных представлений A_i — антиэрмитовы, J_i — эрмитовы. Соотношения коммутации инфинитезимальных операторов:

$$e^{A_2\varepsilon}e^{A_1}e^{-A_2\varepsilon} = e^{A_1 \cos \varepsilon - A_3 \sin \varepsilon}, \quad e^{A_2\varepsilon}\hat{A}_1e^{-A_2\varepsilon} = A_1 \cos \varepsilon - A_3 \sin \varepsilon. \quad (3.11)$$

Сравнивая члены первого порядка по ε , находим:

$$[J_1, J_2] = iJ_3, \quad [J_2, J_3] = iJ_1, \quad [J_3, J_1] = iJ_2. \quad (3.12)$$

Для НП тройка инфинитезимальных операторов также неприводима, т.е., не существует нетривиальных подпространств, инвариантных относительно всех трех операторов J_i .

Вычисление матриц инфинитезимальных операторов.

$$J_{\pm} = J_1 \pm iJ_2, \quad [J_+, J_3] = -J_+, \quad [J_-, J_3] = J_-, \quad [J_+, J_-] = 2J_3. \quad (3.13)$$

Выбираем ортонормированный базис, в котором диагонален J_3 :

$$J_3 f_m = m f_m, \quad J_- f_m = \alpha_m f_{m-1}, \quad J_+ f_{m-1} = \beta_m f_m.$$

Пусть l — наибольшее собственное значение J_3 , $J_+ f_l = 0$, $\beta_{l+1} = 0$. Тогда цепочка векторов, полученных последовательным применением оператора понижения J_- , $f_l, f_{l-1}, f_{l-2}, \dots$, инвариантна относительно тройки операторов J_i (доказывается по индукции). Отсюда вытекает $\alpha_m = \beta_m^*$ и, как результат действия оператора $[J_+, J_-] = 2J_3$ на эти векторы — цепочка равенств $|\alpha_m|^2 - |\alpha_{m+1}|^2 = 2m$, позволяющая последовательно вычислить коэффициенты α_m :

$$\alpha_m = (f_{m-1}, J_- f_m) = e^{i\varphi_m} \sqrt{(l+m)(l-m+1)}. \quad (3.14)$$

Подходящим выбором фаз базисных векторов можно обратить все φ_m в нуль, после чего базис (*канонический базис*) оказывается определенным с точностью до общего фазового множителя. Из (3.14) вытекает, что $\alpha_{l+1} = 0$ и $\alpha_{-l} = 0$, т.е., цепочка векторов f_l, f_{l-1}, \dots обрывается на f_{-l} . Так как $-l = l - N$, N — целое, то *вес НП* l — либо целое, либо полуцелое число. Размерность представления $r = 2l + 1$. Эквивалентность НП одинакового веса следует из эквивалентности соответствующих инфинитезимальных операторов.

Тождественное представление $D^{(l=0)}(g) = 1$ является единственным одномерным представлением группы вращений. *Векторное представление* $D^{(1)}$ — автоморфизм группы. Канонический базис векторного представления:

$$f_1 = -\frac{1}{\sqrt{2}}(e_x + ie_y), \quad f_0 = e_z, \quad f_{-1} = \frac{1}{\sqrt{2}}(e_x - ie_y).$$

Матрица НП для поворота около оси z : $D_{mm'}^{(l)}(00\varphi) = e^{-im\varphi} \delta_{mm'}$. *Характеры НП группы вращений*:

$$\chi^{(l)}(\varphi) = \sin(l + \frac{1}{2})\varphi / \sin \frac{1}{2}\varphi. \quad (3.15)$$

Неприводимые представления группы вращений целого порядка могут быть реализованы на сферических функциях: линейная оболочка сферических функций l -го порядка,

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm}, \quad Y_{lm}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} \Theta_{lm}(\theta), \quad \Theta_{l, -|m|} = (-1)^m \Theta_{l, |m|}, \\ \Theta_{lm} = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \sin^m \theta \frac{d^m P_l(\cos \theta)}{d(\cos \theta)^m}, \quad P_l(x) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l (x^2 - 1)^l}{dx^l}, \end{aligned} \quad (3.16)$$

инвариантна относительно вращений. Здесь \hat{l}^2 — угловая часть оператора Лапласа. Матрица поворота на угол ε в базисе Y_{lm} :

$$\hat{D}(00\varepsilon)Y_{lm} = Y_{lm}(\theta, \varphi - \varepsilon) = e^{-im\varepsilon} Y_{lm}, \quad D_{mm'}(00\varepsilon) = e^{-im\varepsilon} \delta_{mm'}.$$

Как видно, рассматриваемое представление есть НП веса l , т.е., любое НП целого веса фактически может быть реализовано на сферических функциях, которые при выбранных в (3.16) знаках и образуют канонический базис НП.

Здесь мы воспользовались следующим определением преобразования функций при изменении аргумента (ср. раздел 4):

$$\hat{D}(g)f(\mathbf{r}) = f(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}).$$

Рассмотрим поворот на бесконечно малый угол $\omega = |\omega|$, где вектор ω направлен вдоль оси поворота. Функция $f(\mathbf{r})$ претерпевает бесконечно малое изменение:

$$D(\omega)f(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r} - \omega \times \mathbf{r}) = f(\mathbf{r}) - (\omega \times \mathbf{r}) \cdot \nabla f(\mathbf{r}) = [1 - \omega \cdot (\mathbf{r} \times \nabla)]f(\mathbf{r}).$$

Таким образом, инфинитезимальные операторы представления группы вращений на пространстве функций имеют вид:

$$\mathbf{J} = -i(\mathbf{r} \times \nabla), \quad J_x = -i \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \dots$$

При j полуцелом $D^{(j)}(0,0,2\pi) = -E$; но поворот на угол 2π эквивалентен тождественному элементу, и, таким образом, нарушается требование однозначности отображения $g \rightarrow D^{(j)}(g)$. Можно несколько расширить понятие представлений и рассматривать указанные отображения при полуцелых j как **двузначные представления**. Представление веса $1/2$:

$$\begin{aligned} D^{(1/2)}(\varphi_1 \theta \varphi_2) &= \exp \left[-\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \varphi_1 \right] \exp \left[-\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \theta \right] \exp \left[-\frac{i}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \varphi_2 \right] = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}} & -\sin \frac{\theta}{2} e^{-i \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}} \\ \sin \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{2}} & \cos \frac{\theta}{2} e^{i \frac{\varphi_1 + \varphi_2}{2}} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Матрица $D^{(1/2)} \in \text{SU}(2)$, причем любая матрица группы $\text{SU}(2)$ может быть представлена в форме (3.17) и таким образом сопоставлена с некоторым вращением. Рассмотрим подробнее связь групп R_3 и $\text{SU}(2)$.

3.4. Гомоморфизм двумерной унитарной унимодулярной группы на группу вращений

Произвольный элемент группы $\text{SU}(2)$ записывается в виде:

$$u(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1. \quad (3.18)$$

Произвольная эрмитова матрица с нулевым следом имеет вид:

$$h = \begin{pmatrix} z & x - iy \\ x + iy & -z \end{pmatrix} = x\sigma_x + y\sigma_y + z\sigma_z, \quad \det h = -(x^2 + y^2 + z^2), \quad (3.19)$$

x, y, z вещественны, σ_i — **матрицы Паули**. Матрица $h' = uhu^+$ также эрмитова, обладает нулевым следом, $\det h' = -(x'^2 + y'^2 + z'^2) = \det h$, а матричные элементы x', y', z' линейно зависят от x, y, z , $\mathbf{r}' = R(\mathbf{u})\mathbf{r}$. Поскольку матрица $R(\mathbf{u})$ осуществляет преобразование вещественных векторов (x, y, z) с сохранением квадратичной формы, она является ортогональной матрицей. $\det R(\mathbf{u}) = +1$, так как $\det R(\mathbf{u})$ является непрерывной функцией аргументов α, β , любое значение (α, β) может быть достигнуто непрерывным движением от единичного элемента, а $\det R(\mathbf{e}) = 1$. $R(\mathbf{u}_1\mathbf{u}_2) = R(\mathbf{u}_1)R(\mathbf{u}_2)$. Множество $\{R(\mathbf{u})\}$ охватывает не часть, а всю группу вращений. Проще всего это установить, рассматривая матрицы $u_1(e^{i\varphi/2}, 0)$ и $u_2(\cos(\theta/2), -\sin(\theta/2))$. $R(u_1) = R(0, 0, \varphi)$, $R(u_2) = R(0, \theta, 0)$, а согласно (3.2) любой поворот может быть скомбинирован из вращений около осей z и y .

Связь между НП унитарной группы и группы вращений: 1) все НП R_3 являются НП $SU(2)$; 2) $D^2(-e) = E$, $D(-e) = \lambda E$ (лемма Шура), т.е., $D(-e) = \pm E$ [“четные” и “нечетные” НП $SU(2)$]. Четные НП $SU(2)$ оказываются собственными НП R_3 , а нечетные — двузначными НП.

Если рассматривать элементы $SU(2)$ и R_3 , соседние с единичным (**инфинитезимальные группы**), то между ними можно установить взаимно-однозначное соответствие (изоморфизм). Но свойства инфинитезимальных операторов представлений (эрмитовость, соотношения коммутации) вполне определяются свойствами группы вблизи единичного элемента. Это означает, что построения пункта 3.3 дают полный набор инфинитезимальных матриц НП $SU(2)$.

Установим связь между пространствами групп $SU(2)$ и R_3 . Пусть $\alpha = a_1 + ia_2$, $-\beta = b_1 + ib_2$, тогда $a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1$, т.е., пространство $SU(2)$ — поверхность четырехмерной сферы радиуса 1, причем диаметрально противоположные точки сферы соответствуют противоположным по знаку матрицам u , единичному элементу отвечает точка (1000). Пространство R_3 получится, если взять полусферу $a_1 > 0$ и отождествить диаметрально противоположные точки разреза. Классам сопряженных элементов $SU(2)$ отвечают в пространстве группы сечения гиперплоскостями $a_1 = \text{const}$ (задача б). Вместо зависимых параметров $(a_1 a_2 b_1 b_2)$ удобно ввести параметры $(\alpha \theta \varphi)$:

$$a_1 = \cos \frac{\alpha}{2}, \quad a_2 = \sin \frac{\alpha}{2} \cos \theta, \quad b_1 = \sin \frac{\alpha}{2} \sin \theta \sin \varphi, \quad b_2 = \sin \frac{\alpha}{2} \sin \theta \cos \varphi \quad (3.20)$$

$$(0 \leq \alpha < 2\pi, \quad 0 \leq \theta < \pi, \quad 0 \leq \varphi < 2\pi),$$

в которых легко узнать параметры группы вращений, только расширен предел изменения α . Инвариантная плотность в этих параметрах дается соотношением (3.8).

3.5. Произведения НП группы вращений (или SU(2)) и их разложение

Пусть $D^{(j)}, D^{(j')}$ — НП с каноническими базисами e_m, f_m ; естественный базис для произведения $D^{(j)} \times D^{(j')} = \{e_m f_{m'}\}$. Выразим инфинитезимальные операторы J_k $D^{(j)} \times D^{(j')}$ через инфинитезимальные операторы перемножаемых представлений, используя (3.9):

$$\exp(-i \sum J_k \xi_k) = \exp(-i \sum j_k \xi_k) \times \exp(-i \sum j'_k \xi_k).$$

Разлагая в ряд по ξ_k и сравнивая члены первого порядка по ξ_k , получим $J_k = j_k e' + e j'_k$, или короче $J_k = j_k + j'_k$. Этот результат сразу обобщается на произведение большего числа (не обязательно даже неприводимых) представлений $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times \dots \times D^{(j_n)}$ (“сложение моментов”):

$$J_k = j_{1k} + j_{2k} + \dots + j_{nk}. \quad (3.21)$$

Здесь j_{ik} — сокращенная запись оператора $e_1 \times \dots \times e_{i-1} \times j_{ik} \times e_{i+1} \times \dots$

Для двух НП: $J_3 e_m f_{m'} = (m + m') e_m f_{m'}$. Рассмотрим линейную оболочку векторов $e_j f_{j'}, J_- e_j f_{j'}, J_-^2 e_j f_{j'}, \dots$

Согласно построению пункта 3, на этом подпространстве осуществляется НП $D^{(j+j')}$. В дополнительном подпространстве (ортогональном дополнении) максимальное собственное значение J_3 равно $j+j'-1$, к нему относится только один собственный вектор, перпендикулярный $J_- e_j f_{j'}$, и последовательно действуя на этот вектор оператором J_- , можно выделить НП $D^{(j+j'-1)}$. Окончательно

$$D^{(j)} \times D^{(j')} = D^{(j+j')} + D^{(j+j'-1)} + \dots + D^{(|j-j'|)}. \quad (3.22)$$

Простой подсчет убеждает, что число собственных векторов J_3 , относящихся к собственным значениям $|j-j'|, \dots, 0$, одинаково, поэтому в (3.22) ряд обрывается на $D^{(|j-j'|)}$. Фактически мы описали процедуру получения канонического базиса для представления $D^{(j)} \times D^{(j')}$. Коэффициенты разложения векторов канонического базиса по естественному базису называются *коэффициентами Клебша-Гордона*.

На тензорах в трехмерном пространстве осуществляются *тензорные представления*: $D^{(1)} \times D^{(1)} \times \dots \times D^{(1)}$. Их *ранг* равен числу “множителей”. Более

фундаментальную роль играют **спинорные представления** $D^{(1/2)} \times D^{(1/2)} \times \dots \times D^{(1/2)}$, охватывающие как одно-, так и двузначные представления группы вращений.

3.6. Спиноры и спинорные представления

Согласно определению, **спинор r -го ранга** — элемент r -кратного произведения двумерного унитарного пространства на себя, по существу, обычный тензор на двумерном комплексном пространстве. Особенность спинора обусловлена необходимостью связать его с реальным трехмерным пространством и вращениями. Поскольку единице R_3 отвечают две матрицы $\pm e \in SU(2)$, то спиноры нечетного ранга, как объекты физического пространства, оказываются определенными лишь с точностью до знака.

Из спиноров второго ранга можно составить одно инвариантное относительно $SU(2)$ подпространство $L_1 \sim e_+ e_- - e_- e_+ (D^{(1/2)} \times D^{(1/2)} = D^{(0)} + D^{(1)})$, причем для спиноров вида $\xi\eta$, где ξ, η — спиноры первого ранга, этот инвариант (проекция на L_1) пропорционален ($\xi^\pm \equiv \xi^{\pm 1/2}$)

$$\xi^+ \eta^- - \xi^- \eta^+ = \varepsilon_{ik} \xi^i \eta^k, \quad \varepsilon_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.23)$$

Ковариантные компоненты спинора ξ :

$$\xi_i = \varepsilon_{ik} \xi^k = -\varepsilon_{ki} \xi^k, \quad \xi^i = \varepsilon^{ik} \xi_k, \quad \varepsilon^{ik} = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Введенный таким образом “метрический” тензор ε_{ik} позволяет свободно переходить от контравариантных к ковариантным и смешанным компонентам спинора любого ранга и производить операции свертки спиноров по любым парам индексов.

Симметричные спиноры: $\xi^{P(i_1 i_2 \dots i_r)} = \xi^{i_1 i_2 \dots i_r}$, P — любая перестановка индексов i_1, i_2, \dots, i_r . Из определения вытекает, что любой симметричный спинор выражается через следующие $r+1$ спинор:

$$\begin{aligned} \psi_j &= e_+^{(1)} e_+^{(2)} \dots e_+^{(2j)}, \quad \psi_{j-1} = \frac{1}{\sqrt{2j}} (e_+^{(1)} \dots e_-^{(2j)} + \dots + e_-^{(1)} e_+^{(2)} \dots e_+^{(2j)}), \dots \\ \psi_m &= \sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(2j)!}} (e_+^{(1)} \dots e_+^{(j+m)} e_-^{(j+m+1)} \dots e_-^{(2j)} + \dots) \dots \end{aligned} \quad (3.24)$$

Подпространство симметричных спиноров инвариантно относительно $SU(2)$. Базис (3.24) является каноническим базисом НП веса j :

$$J_3 \Psi_m = \left(\frac{j+m}{2} - \frac{j-m}{2} \right) \Psi_m = m \Psi_m,$$

$$J_- \Psi_m = \sqrt{\frac{(j+m)!(j-m)!}{(2j)!}} \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m-1)!(j-m+1)!}} (j-m+1) \Psi_{m-1} = \sqrt{(j+m)(j-m+1)} \Psi_{m-1}$$

(здесь фактор $j-m+1$ представляет собой отношение числа слагаемых в выражении $J_- \Psi_m$ к числу слагаемых Ψ_{m-1}). Таким образом, все НП SU(2) (и R₃) фактически осуществляются симметричными спинорами.

3.7. Матрицы неприводимых представлений группы вращений

Предварительно отметим формальную аналогию между спинорами r -го ранга $\xi = \xi^{i_1 i_2 \dots i_r} e_{i_1}^{(1)} e_{i_2}^{(2)} \dots e_{i_r}^{(r)}$ и r -линейными формами над (e_+, e_-) (с коэффициентами $\xi^{i_1 i_2 \dots i_r}$). Симметричным спинорам соответствуют симметричные формы или полиномы r -й степени (формально отбрасываются верхние индексы $e_i^{(k)}$):

$$\xi \leftrightarrow \sum_m \xi^{\overbrace{j+m}^{++\dots+} \overbrace{j-m}^{--\dots-}} \frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!} (e_+)^{j+m} (e_-)^{j-m},$$

$$\Psi_j \leftrightarrow e_+^{2j}, \dots, \Psi_m \leftrightarrow \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} e_+^{j+m} e_-^{j-m} \dots$$

Поэтому для написания канонических матриц НП группы вращений достаточно выяснить, как преобразуются при вращениях друг через друга $2j+1$ полиномов типа Ψ_m :

$$D(\alpha, \beta) \Psi_m = \sum_{m'} D_{m'm}(\alpha, \beta) \Psi_{m'} = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} (\alpha e_+ - \beta^* e_-)^{j+m} (\beta e_+ + \alpha^* e_-)^{j-m}$$

$$= \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}} \sum_{\kappa \kappa'} \binom{j+m}{\kappa} \binom{j-m}{\kappa'} \alpha^{j+m-\kappa} (-\beta^*)^\kappa \alpha^{*j-m-\kappa'} \beta^{\kappa'} (e_+)^{j+m-\kappa+\kappa'} (e_-)^{j-m-\kappa'+\kappa}.$$

Можно считать, что κ, κ' пробегают по всем целым числам с учетом того, что факториалы отрицательных чисел обращаются в ∞ . Далее вместо κ' вводится новый индекс суммирования $m' = m - \kappa + \kappa'$, и окончательно:

$$D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta) = \sum_{\kappa} (-1)^\kappa \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{\kappa!(j+m-\kappa)!(m'-m+\kappa)!(j-m'-\kappa)!} \alpha^{j+m-\kappa} \alpha^{*j-m'-\kappa} \beta^{m'-m+\kappa} \beta^{*\kappa}.$$

(3.25)

Соотношение (3.25) выражает матрицы НП через *параметры Кэли-Клейна* α, β . Равенства (3.17) и (3.20) позволяют выразить их через углы Эйлера $(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$ и параметры $(\alpha, \theta, \varphi)$:

$$D_{m'm}^{(j)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) = \sum_{\kappa} (-1)^{\kappa-m+m'} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!}}{\kappa!(j+m-\kappa)!(m'-m+\kappa)!(j-m'-\kappa)!} \left(\sin \frac{\theta}{2}\right)^{2\kappa+m'-m} \left(\cos \frac{\theta}{2}\right)^{2j+m-m'-2\kappa} e^{-im'\varphi_1} e^{-im\varphi_2}. \quad (3.26)$$

Соотношения ортогональности для матричных элементов:

$$\int D_{m'm}^{(j_1)}(g) D_{n'n}^{(j_2)}(g) dg = \frac{\int dg}{2j_1+1} \delta_{j_1 j_2} \delta_{m'n'} \delta_{mn}, \quad (3.27)$$

где интегрирование ведется по пространству параметров группы SU(2). Если подынтегральная функция четная, $f(\alpha, \beta) = f(-\alpha, -\beta)$, т.е., если $2j_1, 2j_2$ оба четные или нечетные, интеграл разбивается на две равные половины, иными словами, он представляет собой просто удвоенный интеграл по пространству параметров группы R_3 . Соотношения ортогональности для характеров удобнее всего записываются через параметры $(\alpha, \theta, \varphi)$, поскольку $\chi(g) = \chi(\alpha)$:

$$\int \chi_j(g) \chi_{j'}(g) dg = 8\pi \int_0^{2\pi} \chi_j(\alpha) \chi_{j'}(\alpha) (1 - \cos \alpha) d\alpha = 16\pi^2 \delta_{jj'}. \quad (3.28)$$

При совпадении четности $2j$ и $2j'$ интеграл можно брать в пределах $(0, \pi)$.

Матричные элементы (3.26) называются *обобщенными сферическими функциями*. Обычные сферические функции легко получить из них следующим образом:

$$\hat{D}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) Y_{jm}(\vartheta, \alpha) = Y_{jm}((\vartheta', \alpha') = g^{-1}(\vartheta, \alpha)) = \sum_{m'} D_{m'm}^{(j)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2) Y_{jm'}(\vartheta, \alpha).$$

Полагая $\varphi_1 = \alpha, \theta = \vartheta$, находим $(\vartheta', \alpha') = (0, -\varphi_2)$ и, по определению сферических функций, $Y_{jm}(0, -\varphi_2) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} \delta_{m0}$. Умножая обе части полученного равенства на

$D_{km}^{(j)*}(\alpha, \vartheta, \varphi_2)$ и суммируя по m , находим:

$$Y_{jm}(\vartheta, \alpha) = \sqrt{\frac{2j+1}{4\pi}} D_{m0}^{(j)*}(\alpha, \vartheta, \varphi_2). \quad (3.29)$$

3.8. Коэффициенты Клебша-Гордона

Согласно определению п.3.5:

$$e_{m_3}^{(j_3)} = \sum_{m_1 m_2} S_{m_1 m_2, j_3 m_3}^{(j_1 j_2)} e_{m_1}^{(j_1)} e_{m_2}^{(j_2)},$$

или

$$|j_1 j_2 j_3 m_3\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle, \quad m_1 + m_2 = m_3. \quad (3.30)$$

Последнее соотношение получается из

$$|j_1 j_2 j_3 j_3\rangle = \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 j_3 \rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$$

j_3 -кратным применением оператора j_- , а коэффициенты $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 j_3 \rangle$ находим с учетом равенства $j_+ |j_1 j_2 j_3 j_3\rangle = 0$. Отсюда вытекает рекуррентное соотношение

$$0 = \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 j_3 \rangle \sqrt{(j_1 - m_1)(j_1 + m_1 + 1)} + \\ + \langle j_1 m_1 + 1 j_2 m_2 - 1 | j_1 j_2 j_3 j_3 \rangle \sqrt{(j_2 + m_2)(j_2 - m_2 + 1)}$$

и

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 j_3 \rangle = C(j_1 j_2 j_3) \delta_{m_1 + m_2, j_3} (-1)^{j_1 - m_1} \sqrt{\frac{(j_1 + m_1)!(j_2 + m_2)!}{(j_1 - m_1)!(j_2 - m_2)!}}, \\ C(j_1 j_2 j_3) = \langle j_1 j_1 j_2 j_3 - j_1 | j_1 j_2 j_3 j_3 \rangle \sqrt{\frac{(j_1 + j_2 - j_3)!}{(2j_1)!(j_2 + j_3 - j_1)!}}.$$

Коэффициент C находим из условия нормированности вектора $|j_1 j_2 j_3 j_3\rangle$.

Возникающую при этом сумму легко вычислить, используя равенства

$$\binom{\alpha + \beta}{n} = \sum_m \binom{\alpha}{m} \binom{\beta}{n - m} = \sum_m (-1)^m \binom{m - 1 - \alpha}{m} \binom{\beta}{n - m}, \quad (3.31)$$

первое из которых получается путем сравнения коэффициентов при x^n в обеих частях равенства $(1 + x)^\alpha (1 + x)^\beta = (1 + x)^{\alpha + \beta}$ (α и β не обязательно положительные целые числа), а второе — следующей заменой биномиальных коэффициентов:

$$\binom{\alpha}{n} = \frac{\alpha(\alpha - 1)\dots(\alpha - n + 1)}{n!} = (-1)^n \frac{(n - 1 - \alpha)\dots(1 - \alpha)(-\alpha)}{n!} = (-1)^n \binom{n - 1 - \alpha}{n}.$$

Фаза коэффициента C (а с ним и всей системы канонических векторов $|j_3 m_3\rangle$) произвольна, и мы положим

$$C(j_1 j_2 j_3) = \sqrt{\frac{(2j_3 + 1)(j_1 + j_2 - j_3)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)(j_1 - j_2 + j_3)(j_2 + j_3 - j_1)!}}$$

Применяя, наконец, к вектору $|j_1 j_2 j_3 j_3\rangle$ оператор

$$(J_-)^{j_3 - m_3} = (j_{1-} + j_{2-})^{j_3 - m_3} = \sum_k \binom{j_3 - m_3}{k} j_{1-}^k j_{2-}^{j_3 - m_3 - k},$$

получим после некоторых преобразований

$$\begin{aligned} & \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle = \\ & = \delta_{m_1 + m_2, m_3} \sqrt{\frac{(2j_3 + 1)(j_1 + j_2 - j_3)(j_1 - m_1)(j_2 - m_2)(j_3 + m_3)(j_3 - m_3)!}{(j_1 + j_2 + j_3 + 1)(j_1 + j_3 - j_2)(j_2 + j_3 - j_1)(j_1 + m_1)(j_2 + m_2)!}} \times \\ & \times \sum_k (-1)^{j_1 - m_1 - k} \frac{(j_1 + m_1 + k)(j_2 + j_3 - m_1 - k)!}{k!(j_3 - m_3 - k)(j_1 - m_1 - k)(j_2 - j_3 + m_1 + k)!} \end{aligned} \quad (3.32)$$

Вследствие ортогональности матрицы коэффициентов Клебша-Гордона имеют место следующие равенства:

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle = \langle j_1 j_2 j_3 m_3 | j_1 m_1 j_2 m_2 \rangle, \quad (3.33)$$

$$\begin{aligned} & \sum_{m_1 m_2} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3' m_3' \rangle = \delta_{j_3 j_3'} \delta_{m_3 m_3'}, \\ & \sum_{j_3 m_3} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | j_1 j_2 j_3 m_3 \rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

3.9. 3j-символы и их свойства

Комплексно-сопряженные НП эквивалентны друг другу: $\hat{D}^{(j)} * (g) \hat{C}^{(j)} = \hat{C}^{(j)} \hat{D}^{(j)}(g)$, или, для инфинитезимальных операторов, $\hat{j}_i^{(j)} * \hat{C}^{(j)} = -\hat{C}^{(j)} \hat{j}_i^{(j)}$. Применяя это соотношение сначала к повороту около оси z ($i=3$), находим $C_{mn}^{(j)} = c_m^j \delta_{m,-n}$. Вычисляя матричный элемент $(m, -m-1)$ в равенстве $J_- C = -C J_+$, находим: $c_{m+1}^j = -c_m^j$. Выбирая $c_j^j = 1$, имеем

$$C_{mn}^{(j)} = (-1)^{j-m} \delta_{m,-n}; \quad D_{m'm}^{(j)} * (g) = (-1)^{m-m'} D_{-m'-m}^{(j)}(g). \quad (3.35)$$

Отметим, что $C_{mn}^{(1/2)} = \varepsilon_{mn}$ (см. (3.23)). При целых j матрица $C^{(j)}$ симметрична, при полуцелых антисимметрична, соответствующие представления, согласно п. 2.8, потенциально-вещественны и псевдовещественны.

В соотношении

$$D^{(j_1)}(g) \times D^{(j_2)}(g) = S^{-1} \left(\sum D^{(j_3)}(g) \right) S$$

возьмем матричный элемент $\langle j_1 m_1 j_2 m_2 |, |j_1 m_1' j_2 m_2' \rangle$, затем умножим обе части на $D_{m_3 m_3}^{(j_3)*}(g)$ и проинтегрируем по группе:

$$\int D_{m_1 m_1}^{(j_1)}(g) D_{m_2 m_2}^{(j_2)}(g) D_{m_3 m_3}^{(j_3)*}(g) dg = \frac{\int dg}{2j_3 + 1} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_3 m_3 \rangle \langle j_1 m_1' j_2 m_2' | j_3 m_3' \rangle.$$

Пользуясь (3.35) и вводя $3j$ -символы

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j_3 - m_3 \rangle, \quad (3.36)$$

получаем симметричное относительно j_1, j_2, j_3 соотношение

$$\int D_{m_1 m_1}^{(j_1)}(g) D_{m_2 m_2}^{(j_2)}(g) D_{m_3 m_3}^{(j_3)}(g) dg = \int dg \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1' & m_2' & m_3' \end{pmatrix}. \quad (3.37)$$

Полагая $m_i' = m_i$, находим отсюда, что перестановка любых двух столбцов $3j$ -символа может лишь изменить знак этого символа. Фактически имеют место следующие свойства симметрии $3j$ -символов:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

Доказательство осуществляется при помощи вытекающих из (3.37) равенств

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_1 & -j_1 + j_3 & -j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ -j_1 + j_3 & j_1 & -j_3 \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ j_1 & -j_3 & -j_1 + j_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -j_1 & j_1 - j_3 & j_3 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

простым подсчетом знаков правых $3j$ -символов по формулам (3.32), (3.36). Более сложные свойства симметрии $3j$ -символов получил Редже (задача 15). Из (3.34) вытекают соотношения ортонормировки. Некоторые частные значения $3j$ -символов:

$$\begin{pmatrix} j & j & 0 \\ m & -m & 0 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{2j+1}}, \quad \begin{pmatrix} j & k & j \\ -j & 0 & j \end{pmatrix} = \frac{(2j)!}{\sqrt{(2j-k)!(2j+k+1)!}}. \quad (3.39)$$

3.10. $6j$ - и $9j$ -символы

$6j$ -символы возникают при рассмотрении произведения трех НП: $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)} \times D^{(j_3)}$. Поскольку $D^{(j)}$ может входить в это произведение несколько раз,

канонический базис определяется неоднозначно. Если $D^{(j)} \in D^{(j_{12})} \times D^{(j_3)}$, где $D^{(j_{12})} \in D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$, то можно однозначно определить векторы

$$|(j_1 j_2) j_{12} j_3 j m\rangle = \sum_{m_i} \langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_{12} m_{12} \rangle \langle j_{12} m_{12} j_3 m_3 | j m \rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle. \quad (3.40)$$

Если $D^{(j)} \in D^{(j_1)} \times D^{(j_{23})}$, где $D^{(j_{23})} \in D^{(j_2)} \times D^{(j_3)}$, то аналогично

$$|j_1 (j_2 j_3) j_{23} j m\rangle = \sum_{m_i} \langle j_1 m_1 j_{23} m_{23} | j m \rangle \langle j_2 m_2 j_3 m_3 | j_{23} m_{23} \rangle |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle |j_3 m_3\rangle. \quad (3.41)$$

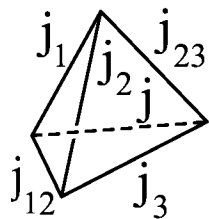
Векторы двух канонических базисов (3.40) и (3.41) связаны соотношением вида (2.14) при помощи унитарной матрицы \hat{b} (здесь оба базиса ортонормированы, роль t, t' играют j_{12} и j_{23}). b_j -символ определяется через матричные элементы этой матрицы:

$$\langle (j_1 j_2) j_{12} j_3 j | j_1 (j_2 j_3) j_{23} j \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3 + j} \sqrt{(2j_{12} + 1)(2j_{23} + 1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix}. \quad (3.42)$$

Составляя скалярное произведение векторов (3.40) и (3.41), суммируя по m и производя некоторые преобразования (перестановки столбцов в $3j$ -символах, изменение знаков m), получим выражение b_j -символа через $3j$ -символы:

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j & j_{23} \end{Bmatrix} &= \sum_{all\ m} (-1)^{\sum (j_i - m_i)} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ -m_1 & m_2 & m_{12} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_{23} \\ m_3 & -m_2 & m_{23} \end{pmatrix} \times \\ &\times \begin{pmatrix} j_1 & j & j_{23} \\ m_1 & m & -m_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ -m_3 & -m & -m_{12} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.43)$$

Для того чтобы b_j -символ отличался от нуля, согласно этой формуле должны выполняться соотношения треугольника для троек j , указанных в качестве верхних рядов $3j$ -символов. Из этой же формулы вытекают свойства симметрии b_j -символов: они не меняются при любой перестановке столбцов символа и перестановке верхних и нижних аргументов любых двух столбцов. Все эти свойства можно наглядно представить себе, изобразив b_j -символ в виде тетраэдра (см. рис.).



Другое выражение b_j -символа через $3j$ -символы получается после подстановки в соотношение типа (2.14),

$$|j_1 (j_2 j_3) j_{23} j m\rangle = \sum_{j_{12}} \langle (j_1 j_2) j_{12} j_3 j | j_1 (j_2 j_3) j_{23} j \rangle |(j_1 j_2) j_{12} j_3 j m\rangle, \quad (3.44)$$

выражений (3.40), (3.41), сравнения коэффициентов при $|j_1 m_1 j_2 m_2 j_3 m_3\rangle$ в обеих частях равенства и ряда несложных преобразований:

$$\begin{aligned} & \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \\ & = \sum_{m_4 m_5 m_6} (-1)^{j_4 + j_5 + j_6 - m_4 - m_5 - m_6} \begin{pmatrix} j_1 & j_5 & j_6 \\ m_1 & -m_5 & m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_2 & j_6 \\ m_4 & m_2 & -m_6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_4 & j_5 & j_3 \\ -m_4 & m_5 & m_3 \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.45)$$

Это выражение удобно использовать для получения явной формулы $6j$ -символа. Полагая $m_1 = j_1$, $m_2 = -j_2$ и подставляя выражения $3j$ -символов (3.33), находим:

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ j_4 & j_5 & j_6 \end{Bmatrix} &= \sum_z \frac{(-1)^z (z+1)! \Delta(j_1 j_2 j_3) \Delta(j_1 j_5 j_6) \Delta(j_4 j_2 j_6) \Delta(j_4 j_5 j_3)}{\left[(z - j_1 - j_2 - j_3)! (z - j_1 - j_5 - j_6)! (z - j_4 - j_2 - j_6)! (z - j_4 - j_5 - j_3)! \right]} \\ & \quad \times (j_1 + j_2 + j_4 + j_5 - z)! (j_2 + j_3 + j_5 + j_6 - z)! (j_3 + j_1 + j_4 + j_6 - z)! \end{aligned} \quad (3.46)$$

где

$$\Delta(abc) = \sqrt{\frac{(a+b-c)!(a-b+c)!(b+c-a)!}{(a+b+c+1)!}}$$

Вследствие ортогональности матрицы $\langle (j_1 j_2) j_{12} j_3 j | j_1 (j_2 j_3) j_{23} j \rangle$ имеем

$$\sum_{j_{12}} (2j_{23} + 1)(2j_{12} + 1) \begin{Bmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ j_1 & j_2 & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ j_1 & j_2 & j_{23}' \end{Bmatrix} = \delta(j_{23}, j_{23}'). \quad (3.47)$$

Наконец, рассматривая последовательно три схемы связи трех моментов (трех НП), находим:

$$\sum_{j_{23}} (2j_{23} + 1) (-1)^{j_{23} + j_{12} + j_{31}} \begin{Bmatrix} j_3 & j & j_{12} \\ j_1 & j_2 & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j & j_{23} \\ j_2 & j_3 & j_{31} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} j_2 & j & j_{31} \\ j_3 & j_1 & j_{12} \end{Bmatrix}. \quad (3.48)$$

$9j$ -символы связаны с матрицами перехода между каноническими базисами $|(j_1 j_2) j_{12} (j_3 j_4) j_{34} j m\rangle$ и $|(j_1 j_3) j_{13} (j_2 j_4) j_{24} j m\rangle$ следующим соотношением:

$$\begin{aligned} & \langle (j_1 j_2) j_{12} (j_3 j_4) j_{34} j | (j_1 j_3) j_{13} (j_2 j_4) j_{24} j \rangle = \\ & = \sqrt{(2j_{12} + 1)(2j_{13} + 1)(2j_{24} + 1)(2j_{34} + 1)} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_{12} \\ j_3 & j_4 & j_{34} \\ j_{13} & j_{24} & j \end{Bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Выражение через $3j$ -символы получается точно так же, как и для $6j$ -символов:

$$\begin{aligned} \begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} &= \sum_{all m} \begin{pmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ m_{11} & m_{12} & m_{13} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ m_{21} & m_{22} & m_{23} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{31} & j_{32} & j_{33} \\ m_{31} & m_{32} & m_{33} \end{pmatrix} \times \\ & \quad \begin{pmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ m_{11} & m_{21} & m_{31} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ m_{12} & m_{22} & m_{32} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ m_{13} & m_{23} & m_{33} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Свойства симметрии $9j$ -символа вытекают из этого равенства: при нечетной перестановке строк или столбцов $9j$ -символ умножается на $(-1)^J$, где J — сумма всех аргументов символа. При четной перестановке и транспонировании символ не меняется. Выражение через $6j$ -символы:

$$\begin{Bmatrix} j_{11} & j_{12} & j_{13} \\ j_{21} & j_{22} & j_{23} \\ j_{31} & j_{32} & j_{33} \end{Bmatrix} = \sum_x (-1)^{2x} (2x+1) \begin{Bmatrix} j_{11} & j_{21} & j_{31} \\ j_{32} & j_{33} & x \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{12} & j_{22} & j_{32} \\ j_{21} & x & j_{23} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_{13} & j_{23} & j_{33} \\ x & j_{11} & j_{12} \end{Bmatrix}. \quad (3.51)$$

Оно легко получается, если последовательно перейти от базиса $|(j_1 j_3) j_{13} (j_2 j_4) j_{24} j m\rangle$ к базису $|(j_1 j_2) j_{12} (j_3 j_4) j_{34} j m\rangle$ при помощи равенства (3.44) и результат умножить на $|(j_1 j_2) j_{12} (j_3 j_4) j_{34} j m\rangle$. Отметим, что здесь, как и в ряде предыдущих преобразований, следует иметь в виду соотношение

$$\langle j_1 m_1 j_2 m_2 | j_1 j_2 j m \rangle = (-1)^{j_1 + j_2 - j} \langle j_2 m_2 j_1 m_1 | j_2 j_1 j m \rangle, \quad (3.52)$$

соответствующее перестановке столбцов $3j$ -символа, так что, например,

$$|(j_2 j_3) j_{23} j_1 j \rangle = |j_1 (j_2 j_3) j_{23} j \rangle (-1)^{j_1 + j_{23} - j}.$$

3.11. Полная ортогональная группа в трех измерениях

Полная ортогональная группа: $O_3 = O_3^+ \times C_1 = O_3^+ + I O_3^+$. Пространство группы — две сферы радиуса π . НП O_3 — $D^{(l+)}$ и $D^{(l-)}$ — четные и нечетные представления (l — целое!), $D^{(l+)}(gI) = D^{(l+)}(g) = D^{(l)}(g)$, $g \in O_3^+$. Можно ввести абстрактную группу $SU(2) \times i$, имеющую вдвое больше НП, чем $SU(2)$ — $D^{(j+)}$, $D^{(j-)}$. Группа $SU(2) \times i$ гомоморфна на $O_3^+ \times C_1$ с ядром $(e, -e)$. Поэтому имеет место следующее соответствие представлений $SU(2) \times i$ и O_3 при полуцелых j :

$$gI \rightarrow D^{(j+)}(\pm gi) = \pm D^{(j)}(g), \quad gI \rightarrow D^{(j-)}(\pm gi) = \mp D^{(j)}(g).$$

Иными словами, двузначные представления O_3 те же, что и у O_3^+ .

3.12. Двузначные представления точечных групп

Каждой подгруппе $G \subset O_3^+$ отвечает подгруппа $G' \subset SU(2)$, гомоморфная на G с ядром $(e, -e \equiv q)$ — **двойная точечная группа** для G . Часть ее НП совпадает с НП G , а остальные являются **двузначными НП** G . Для обозначения элементов G' воспользуемся

малыми символами c_n . В качестве новых элементов фигурируют q (“поворот на 2π ”) и $c_n q = q c_n$, причем $(c_n, c_n q) \rightarrow C_n$. Рассмотрим, например, элементы двойной группы октаэдра O' : $e, q, c_2^{(z)} = \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix}$, $c_2^{(z)} q (= i\sigma_z, \text{матрица Паули})$, $c_2^{(y)} = -i\sigma_y$, $c_2^{(x)} = -i\sigma_x$ и

т.п. В общем, безразлично, которую из двух матриц $\pm c_n$ обозначить через c_n . Для определенности через c_n будем обозначать матрицу, имеющую в подходящем базисе в унитарном пространстве вид $\begin{pmatrix} \exp(-i\pi n) & 0 \\ 0 & \exp(i\pi n) \end{pmatrix}$, так что $c_n^n = q$, $c_n^{-1} = c_n^{n-1} q$.

Соотношение сопряженности $C_n = C_m C_n' C_m^{-1}$ переписывается в двойной группе с учетом указанного соглашения в виде $c_n = c_m c_n' c_m^{-1}$, так что каждый класс сопряженных поворотов (при $n \neq 2$) имеет прообразом в двойной группе два класса. Остается решить вопрос о сопряженности элементов c_2 и c_2^{-1} (в группе $SU(2)$ они не совпадают, но имеют одинаковый нулевой след). Условие сопряженности, $c_2 = g c_2 q g^{-1}$, будучи записано в системе координат, где $c_2 = -i\sigma_z$, приводит к следующему виду матрицы $g = \begin{pmatrix} 0 & \exp(-i\gamma) \\ -\exp i\gamma & 0 \end{pmatrix}$. Такая матрица соответствует повороту на π около некоторой оси,

перпендикулярной z . Таким образом, необходимым (и достаточным) условием сопряженности элементов c_2, c_2^{-1} в G' является наличие оси второго порядка, перпендикулярной оси C_2 . Окончательно разбиение группы O' на классы сопряженных элементов выглядит так:

$$O': e, q, \{8c_3\}, \{8c_3 q\}, \{3c_4^2, 3c_4^2 q\}, \{6c_4\}, \{6c_4 q\}, \{6c_2, 6c_2 q\}.$$

Элементы $c_4^{(z)}$ и $c_4^{(-z)}$ обратны друг к другу, т.е., $c_4^{(-z)} = c_4^{(z)3} q$, поэтому класс $\{6c_4\}$ можно написать и в виде $\{3c_4, 3c_4^3 q\}$; аналогично $\{8c_3\} = \{4c_3, 4c_3^2\}$ и т.п. НП G' можно найти регулярными способами, изложенными в разделе 2. O' имеет 8 НП, 5 из них совпадают с обычными НП O , остальные 3 (два двумерных и одно четырехмерное) — нечетные (двухзначные для O), в них q отображается на $-E$, соответственно $D(c_n q) = -D(c_n)$, $\chi(c_n q) = -\chi(c_n)$, откуда, в частности, сразу вытекает, что $\chi(c_2) = -\chi(c_2) = 0$. Одно из двумерных НП, Γ_6 — это автоморфизм O' , и характеры его находятся по формуле (3.15): $(2, -2, 1, -1, 0, \sqrt{2}, -\sqrt{2}, 0)$. Второе двумерное представление, $\Gamma_7 = \Gamma_6 \times \Gamma_2$, а характер четырехмерного представления Γ_8 : $(4, -4, -1, 1, 0, 0, 0, 0)$. $\chi^{(8)}(c_4) = 0$, иначе мы могли бы получить неэквивалентное $\Gamma_8' = \Gamma_8 \times \Gamma_2$; $\chi^{(8)}(c_3)$ находим из соотношений ортогональности.

Двойная группа для $G \times C_i - G' \times i$; если группа G не содержит инверсии, но содержит другие зеркальные преобразования, $C_n I$, то $C_n I \rightarrow (c_n i, c_n q i)$. Заметим, что $\sigma^2 = (c_2 i)^2 = q$, $\sigma^{-1} = \sigma q = c_2^{-1} i$, и условием сопряженности элементов σ и σ^{-1} служит опять наличие оси второго порядка, лежащего в плоскости отражения. Пример — двойная группа T_d' : $e, q, \{8c_3\}, \{8c_3 q\}, \{3c_2, 3c_2 q\}, \{6s_4\}, \{6s_4 q\}, \{6\sigma, 6\sigma q\}$. НП T_d' те же, что и у O' .

3.13. Группы Ли и алгебры Ли

Связь между группами Ли преобразований и их инфинитезимальными операторами (образующими алгебры Ли), рассмотренная в этой главе на примере группы вращений, универсальна. Каждой группе Ли соответствует своя алгебра Ли, обозначаемая так же, как и группа, но малыми буквами [$SU(n) \rightarrow su(n)$]. Приведем здесь лишь некоторые определения, теоремы, примеры, относящиеся к этому предмету.

Алгебра Ли — векторное пространство L , на котором для любой пары элементов задано **умножение Ли** $[X, Y]$, удовлетворяющее аксиомам

- (1) линейности: $[\alpha X + \beta Y, Z] = \alpha[X, Z] + \beta[Y, Z]$ (α, β — вещественные или комплексные числа),
- (2) антисимметричности: $[X, Y] = -[Y, X]$,
- (3) $[X, [Y, Z]] + [Y, [Z, X]] + [Z, [X, Y]] = 0$ (**тождество Якоби**).

Пусть $\{e_i\}$ — базис L , $[e_j, e_k] = c_{jk}^i e_i$. Числа c_{jk}^i называются **структурными константами** алгебры Ли. Примеры алгебр Ли:

Полная комплексная линейная алгебра Ли $gl(n, C)$ — множество всех комплексных $n \times n$ матриц с коммутаторами в качестве умножения Ли, $[X, Y] = XY - YX$. Подмножество матриц с нулевым следом образует подалгебру $sl(n, C)$ (или A_{n-1}).

Пусть $\Phi(x, y)$ — невырожденная билинейная форма в m -мерном комплексном пространстве V_m . Множество линейных преобразований в V_m , удовлетворяющих условию

$$\Phi(Xx, y) + \Phi(x, Xy) = 0,$$

образуют алгебру Ли L . Если форма Φ симметрическая, то L называется **ортогональной алгеброй Ли** $o(m, C)$ (B_n при $m = 2n+1$, D_n при $m = 2n$). Если Φ — кососимметрическая форма и $m = 2n$, то L — **симплектическая алгебра** $sp(n, C)$ (или C_n). A_n, B_n, C_n, D_n — классические комплексные алгебры Ли.

Комплексное расширение $V_{\mathbb{C}}$ вещественного векторного пространства V : множество всех элементов вида $z = x + iy$, $x, y \in V$. **Овеществление комплексного пространства** $V_{\mathbb{C}}$ с базисом e_1, \dots, e_n : вещественное пространство с базисом $e_1, \dots, e_n, ie_1, \dots, ie_n$; $z = z^k e_k = (\operatorname{Re} z^k) e_k + (\operatorname{Im} z^k) (ie_k)$.

Представление алгебры L в линейном пространстве H — гомоморфизм $X \rightarrow D(X)$ на множество линейных операторов в H , так, что

$$\alpha X + \beta Y \rightarrow \alpha D(X) + \beta D(Y), [X, Y] \rightarrow D(X)D(Y) - D(Y)D(X).$$

Теорема Адо. Всякая алгебра Ли над полем комплексных чисел изоморфна некоторой матричной алгебре. Это значит, что всякую абстрактную алгебру Ли можно рассматривать как подалгебру полной линейной алгебры $\mathfrak{gl}(n, \mathbb{C})$.

Подалгебра $N \subset L$ называется **идеалом**, если множество произведений $[L, M]$ принадлежит N . Алгебра Ли L проста, если она не имеет нетривиальных идеалов (отличных от $\{0\}$ и L) и $[L, L] \neq 0$. Четыре последовательности $A_n, n \geq 1$; $B_n, n \geq 2$; $C_n, n \geq 3$; $D_n, n \geq 4$ и пять так называемых исключительных алгебр (G_2, F_4, E_6, E_7, E_8) составляют все неизоморфные простые комплексные алгебры Ли.

С каждой простой комплексной алгеброй Ли связывается последовательность простых вещественных алгебр Ли. Укажем некоторые классические простые вещественные алгебры Ли:

- $\mathfrak{su}(n)$ — алгебра всех косоэрмитовых матриц порядка n со следом 0.
- $\mathfrak{so}(n)$ — алгебра Ли всех вещественных кососимметрических матриц порядка n .
- $\mathfrak{so}(p, q)$ — алгебра Ли вещественных матриц порядка $p+q$ вида

$$\begin{pmatrix} X_1 & X_2 \\ X_2^T & X_3 \end{pmatrix},$$

где X_1, X_3 — кососимметрические матрицы порядка p и q соответственно, X_2 — произвольно.

Между алгебрами Ли существуют изоморфизмы (перечисление см. Барут и Рончка, 1980). В этой главе установлен изоморфизм $\mathfrak{su}(2) \cong \mathfrak{so}(3)$. При рассмотрении группы Лоренца познакомимся с изоморфизмом $\mathfrak{sl}(2, \mathbb{C}) \cong \mathfrak{so}(3, 1)$.

Группы преобразований G можно рассматривать как поверхности в N -мерном пространстве, при этом касательные пространства в единице группы отождествляются с алгебрами Ли \mathfrak{g} . Касательные пространства состояются из векторов, касательных к любым кривым $A(t) \in G$, проходящим через единицу [$A(0) = e$], т.е., векторов $\dot{A}(t)|_{t=0}$, называемых еще векторами скорости. Рассмотрим ниже некоторые примеры.

Полная линейная группа $GL(n, R)$ — область в n^2 -мерном линейном пространстве $M(n, R)$ вещественных матриц n -го порядка (область — открытое множество, вместе с любой точкой пространства включает все достаточно близкие к ней точки). Евклидова метрика в $M(n, R)$ определяется так: если $A = (a_j^i)$, то

$$|A|^2 = \sum_{ij} |a_j^i|^2 = \text{Sp}(A \tilde{A})$$

(комплексным аналогом является метрика $|A|^2 = \text{Sp}(A^+A)$). Окрестность единицы определим как множество матриц A , для которых $|A - E| < 1$. Пусть X — любая матрица из $M(n, R)$. Кривая $A(t) = E + tX$ при малых t принадлежит окрестности единицы и лежит в $GL(n, R)$. При этом $A(0) = E$, $\dot{A}(0) = X$, т.е., касательное пространство совпадает с полной алгеброй $M(n, R)$, являющейся алгеброй Ли $\mathfrak{gl}(n, R)$ относительно коммутаторов матриц.

Группа $SL(n, R)$ задается одним уравнением $\det A = 1$ и представляет собой гиперповерхность в $M(n, R)$, целиком лежащую в области $GL(n, R)$. В окрестности единицы

$$\frac{d}{dt} \det(E + tX)|_{t=0} = \text{Sp}X = 0,$$

и касательное пространство в единице совпадает с совокупностью всех матриц со следом 0. Размерность его равна $n^2 - 1$ и совпадает с размерностью гиперповерхности.

Группа $O(n, R)$ задается системой $n(n+1)/2$ уравнений $\sum_k a_k^i a_k^j = \delta^{ij}$ (или $\tilde{A}A = E$).

Касательные векторы в единице удовлетворяют условию $\frac{d}{dt}(\tilde{A}A)|_{t=0} = \tilde{X} + X = 0$, т.е.,

касательное пространство совпадает с пространством всех кососимметрических матриц, также являющихся алгеброй Ли по отношению к коммутированию.

Экспоненциальное отображение алгебр Ли на соответствующую группу Ли:

Если $X \in \mathfrak{g}$ [$\mathfrak{gl}(n, R)$, $\mathfrak{o}(n)$, $\mathfrak{u}(n)$ и т.п.], то $\exp X \in G$ [$GL(n, R)$, $O(n)$, $U(n)$ и т.п.]. В некоторой окрестности начала координат \mathfrak{g} (единицы группы G) это отображение взаимно однозначно. В некоторых случаях [например, $GL(n, C)$] экспоненциальное

отображение покрывает всю группу. В целом же отображение $X \rightarrow \exp X$ может не быть взаимно-однозначным и даже не покрывать всю группу [например, $GL(n, R)$].

Задачи к разделу 3

1. Убедиться в том, что следующие пары функций преобразуются согласно НП C_{cov} : $x, y; xz, yz; x^2 - y^2, xy$.
2. Найти НП группы D_{oh} .
3. Убедиться в том, что вращение с углами Эйлера $(\pi - \varphi_2, \theta, \pi - \varphi_1)$ обратно вращению $(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$.
4. Рассчитать инвариантную плотность для R_3 через углы Эйлера.
5. Разложить произвольную функцию $f(x, y, z)$ по неприводимым функциям группы вращений.
6. Что представляет собой сечение пространства группы $SU(2)$ трехмерной гиперплоскостью $b_2 = 0$; $a_1 = \text{const}$? Рассмотреть последовательность сечений гиперплоскостями $a_1 = c$ при $0 \leq c \leq 1$, сравнить результат с пространством группы R_3 .
7. Осуществить фактическое разложение представления $D^{(l)} \times D^{(1/2)}$.
8. Составить таблицы разложения тензорных и спинорных представлений различных рангов.
9. Показать, что ковариантные спиноры преобразуются согласно представлению $D^{(1/2)*}$.
10. Вычислить $D_{m0}^{(l)}(\alpha, \theta, \varphi)$ при $l = 0, 1, 2$ и проверить выполнение соотношения (3.29).
11. Вычислить коэффициенты Клебша-Гордона $(jm \frac{1}{2} m' | JM)$ по общей формуле (3.32). Сравнить с результатом решения задачи 7.
12. Найти матрицу перехода от канонического НП $D^{(l)}(g)$ к вещественному представлению при j целом.
13. Найти связь между параметрами (ξ_1, ξ_2, ξ_3) и (α, β) .
14. Показать, что функция $\Psi_0 = \sum_m \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \Psi_{m_1}^{(j_1)} \Psi_{m_2}^{(j_2)} \Psi_{m_3}^{(j_3)}$ инвариантна относительно вращений.
15. Рассмотрим следующий однородный полином:

$$\begin{vmatrix} u_1 & v_1 & w_1 \\ u_2 & v_2 & w_2 \\ u_3 & v_3 & w_3 \end{vmatrix}^J = \sum_{\substack{\Sigma a = \Sigma b = \Sigma c = J \\ a_i + b_i + c_i = J}} K_J \begin{pmatrix} a_1 & b_1 & c_1 \\ a_2 & b_2 & c_2 \\ a_3 & b_3 & c_3 \end{pmatrix} u_1^{a_1} u_2^{a_2} u_3^{a_3} v_1^{b_1} v_2^{b_2} v_3^{b_3} w_1^{c_1} w_2^{c_2} w_3^{c_3}.$$

а) Установить свойства симметрии коэффициентов K_J при перестановке строк, столбцов и транспонировании. Выписать в явном виде аналитическое выражение этих коэффициентов.

б) Показать, что

$$K_J \begin{pmatrix} j_1 - m_1 & j_2 - m_2 & j_3 - m_3 \\ j_1 + m_1 & j_2 + m_2 & j_3 + m_3 \\ j_2 + j_3 - j_1 & j_1 + j_2 - j_3 & j_1 + j_2 - j_3 \end{pmatrix} \sqrt{(j_1 - m_1)!(j_1 + m_1)!(j_2 - m_2)!(j_2 + m_2)!} \times \\ \times \sqrt{(j_3 - m_3)!(j_3 + m_3)!(j_2 + j_3 - j_1)!(j_3 + j_1 - j_2)!(j_1 + j_2 - j_3)!} = f(J) \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$$

в) Введем обозначение

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{bmatrix} j_1 - m_1 & j_2 - m_2 & j_3 - m_3 \\ j_1 + m_1 & j_2 + m_2 & j_3 + m_3 \\ j_2 + j_3 - j_1 & j_1 + j_2 - j_3 & j_1 + j_2 - j_3 \end{bmatrix}$$

Каковы свойства симметрии $3j$ -символа в новом обозначении? Выписать в старом обозначении новые свойства симметрии $3j$ -символа.

г) Пользуясь выражением для коэффициента K_J , написать новую разновидность аналитической формулы $3j$ -символа.

16. Вычислить следующие $6j$ -символы:

$$\left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ 0 & c & b \end{matrix} \right\}, \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ \frac{1}{2} & c - \frac{1}{2} & b + \frac{1}{2} \end{matrix} \right\}, \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ \frac{1}{2} & c - \frac{1}{2} & b - \frac{1}{2} \end{matrix} \right\}, \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ 1 & c - 1 & b - 1 \end{matrix} \right\}, \\ \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ 1 & c - 1 & b \end{matrix} \right\}, \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ 1 & c - 1 & b + 1 \end{matrix} \right\}, \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ 1 & c & b \end{matrix} \right\}.$$

17. Вывести формулу (3.47).

18. Вычислить $\left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ d & e & c \\ f & f & 0 \end{matrix} \right\}$.

19. Доказать, что в гомоморфизме $G \rightarrow G^*$ 1) подгруппа $H \subset G$ отображается на подгруппу $H^* \subset G^*$, 2) множество всех элементов $H \subset G$, которые отображаются на подгруппу $H^* \subset G^*$, является подгруппой.

20. Найти двузначные представления групп C_∞, C_{cov} .

21. Найти характеры двузначных НП групп D_2, D_4, D_{2d} .

4. Некоторые физические приложения теории групп

4.1. Влияние симметрии на физические свойства кристаллов

Макроскопические свойства кристаллов определяются тензорами различных рангов в трехмерном пространстве: скалярами (плотность, температура и т.п.), векторами (неиндуцированная электрическая поляризация), тензорами второго ранга (диэлектрическая проницаемость, электропроводность, теплопроводность), третьего ранга (пьезоэлектрические модули), четвертого ранга (модули упругости) и т.д.

Если провести с кристаллом эксперимент, затем осуществить поворот (или зеркальный поворот) образца из точечной группы кристалла K (т.е., кристаллического класса, см. раздел 6) и повторить эксперимент, то результат эксперимента не изменится. Это можно сформулировать в виде *принципа Неймана*: группа симметрии любого физического свойства кристалла включает точечную группу K этого кристалла.

Тензор r -го ранга $\tilde{\lambda}$ под действием элементов группы K преобразуется согласно приводимому представлению $\Gamma_v \times \Gamma_v \times \dots \times \Gamma_v \equiv \Gamma_v^r$, где Γ_v — трехмерное векторное представление группы, и пусть разложение на НП имеет вид:

$$\Gamma_v^r = N_1 \Gamma_1 + N_2 \Gamma_2 + \dots \quad (4.1)$$

где Γ_1 — тождественное (инвариантное) представление. Инвариантность тензора относительно преобразования из группы K означает, что он лежит в N_1 -мерном подпространстве, на котором осуществляется НП Γ_1 . Иными словами, инвариантный тензор имеет N_1 линейно независимых компонент. Математический аппарат, развитый в предыдущих разделах, позволяет найти как число N_1 , так и сами инвариантные тензоры путем проектирования с помощью операторов $P^{(1)} = \frac{1}{g} \sum_{g \in K} \hat{D}_{\Gamma_v^r}(g)$ (ср. (2.18)).

Часто для установления связей между компонентами тензора явно используются условия инвариантности тензора:

$$\tilde{\lambda} = \hat{D}_{\Gamma_v^r}(g) \tilde{\lambda}, \quad g \in K, \quad (4.2)$$

которые расписываются по компонентам с использованием наиболее удобных систем координат.

Рассмотрим для примера кубический кристалл с $K = O$, $\Gamma_v = \Gamma_4$ (трехмерное НП группы октаэдра), $\Gamma_4^2 = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5$, т.е., тензор второго ранга имеет лишь один кубический инвариант:

$$\tilde{\lambda}^{(1)} = \frac{1}{g} \sum [\hat{D}^{(4)}(g) \times \hat{D}^{(4)}(g)] \tilde{\lambda}; \quad \lambda_{ik}^{(1)} = \frac{1}{g} \sum_{g'k'} D_{ii'}^{(4)}(g) D_{kk'}^{(4)}(g) \lambda_{i'k'} = \frac{1}{3} \delta_{ik} \text{Sp} \tilde{\lambda}.$$

Здесь мы воспользовались соотношением ортогональности матричных элементов НП (2.1).

Если тензор обладает той или иной симметрией относительно перестановок индексов, то для получения разложения (4.1) оказываются полезными формулы вида

$$[(\Gamma_a + \Gamma_b)^2] = [\Gamma_a^2] + [\Gamma_b^2] + \Gamma_a \times \Gamma_b, \quad (4.3)$$

вытекающие из соотношений (2.7). Так, тензор модулей упругости $\tilde{\lambda}$, определяемый соотношением $F = \frac{1}{2} \sum \lambda_{ijkl} u_{ij} u_{kl}$ (F — свободная энергия, u_{ij} — тензор деформаций), симметричен по первой и второй парам индексов, а также относительно перестановок этих пар. Поэтому компоненты этого тензора преобразуются по представлению группы вращений

$$[[D^{(1)^2}] \times [D^{(1)^2}]] = [(D^{(2)} + D^{(0)})^2] = [D^{(2)^2}] + D^{(2)} + D^{(0)} = D^{(4)} + 2D^{(2)} + 2D^{(0)}.$$

Здесь мы использовали также соотношение

$$[D^{(j)^2}] = D^{(2j)} + D^{(2j-2)} + D^{(2j-4)} + \dots,$$

которое можно получить, например, рассматривая симметрию соответствующих коэффициентов Клебша-Гордона. Таким образом, существует два независимых инвариантных относительно всех вращений (в том числе и несобственных) тензора. Базисные тензоры четвертого ранга:

$$\mathbf{e}_i \mathbf{e}_j \mathbf{e}_k \mathbf{e}_l \equiv \mathbf{e}_{ij} \mathbf{e}_{kl} \equiv \mathbf{e}_{ijkl}$$

Симметричные тензоры второго ранга, расщепленные как $D^{(2)} + D^{(0)}$:

$$\mathbf{e}_{xx} + \mathbf{e}_{yy} + \mathbf{e}_{zz};$$

$$(2 \mathbf{e}_{zz} - \mathbf{e}_{xx} - \mathbf{e}_{yy})/\sqrt{3}, \mathbf{e}_{xx} - \mathbf{e}_{yy}, \mathbf{e}_{xy} + \mathbf{e}_{yx}, \mathbf{e}_{xz} + \mathbf{e}_{zx}, \mathbf{e}_{yz} + \mathbf{e}_{zy}$$

Изотропные тензоры λ :

$$1) (\mathbf{e}_{xx} + \mathbf{e}_{yy} + \mathbf{e}_{zz})(\mathbf{e}_{xx} + \mathbf{e}_{yy} + \mathbf{e}_{zz}) =$$

$$\mathbf{e}_{xxxx} + \mathbf{e}_{yyyy} + \mathbf{e}_{zzzz} + \mathbf{e}_{xxyy} + \mathbf{e}_{yyxx} + \mathbf{e}_{zzxx} + \mathbf{e}_{xxzz} + \mathbf{e}_{yyzz} + \mathbf{e}_{zzyy},$$

$$2) (1/3)(2 \mathbf{e}_{zz} - \mathbf{e}_{xx} - \mathbf{e}_{yy})(2 \mathbf{e}_{zz} - \mathbf{e}_{xx} - \mathbf{e}_{yy}) + (\mathbf{e}_{xx} - \mathbf{e}_{yy})(\mathbf{e}_{xx} - \mathbf{e}_{yy}) + (\mathbf{e}_{xy} + \mathbf{e}_{yx})(\mathbf{e}_{xy} + \mathbf{e}_{yx}) + \dots =$$

$$(4/3)(\mathbf{e}_{xxxx} + \mathbf{e}_{yyyy} + \mathbf{e}_{zzzz}) - (2/3)(\mathbf{e}_{xxyy} + \mathbf{e}_{yyxx} + \mathbf{e}_{zzxx} + \mathbf{e}_{xxzz} + \mathbf{e}_{yyzz} + \mathbf{e}_{zzyy}) + (\mathbf{e}_{xyxy} + \mathbf{e}_{yxxy} + \mathbf{e}_{xyyx} + \mathbf{e}_{yxxy} + \mathbf{e}_{xzyz} + \mathbf{e}_{zxzx} + \mathbf{e}_{zyzy} + \mathbf{e}_{yzzy} + \mathbf{e}_{zyyz} + \mathbf{e}_{zyzy}).$$

С понижением симметрии число инвариантов (или независимых компонент тензора) возрастает. Например, для кубических систем появляется еще один инвариант, поскольку $D^{(4)}$ содержит единичное представление группы O_h . Инвариантный полином несложно найти проектированием:

$$P_{\text{cub}}^{(1)}(35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4) = \sum_{g \in O_h} D(g) P_{40} \sim x^4 + y^4 + z^4 - (3/5)r^4$$

Проектируемый полином инвариантен относительно подгруппы D_{4h} с осью четвертого порядка вдоль z , и удобно при суммировании по группе расположить элементы в порядке, соответствующем разбиению на смежные классы по подгруппе:

$$O_h = D_{4h} + C_3 D_{4h} + C_3^2 D_{4h}$$

Инвариантному полиному соответствует полностью симметричный тензор:

$$2(\mathbf{e}_{xxxx} + \mathbf{e}_{yyyy} + \mathbf{e}_{zzzz}) - (\mathbf{e}_{xxyy} + \mathbf{e}_{yyxx} + \mathbf{e}_{zzxx} + \mathbf{e}_{xxzz} + \mathbf{e}_{yyzz} + \mathbf{e}_{zzyy}) - (\mathbf{e}_{xyxy} + \mathbf{e}_{yxxy} + \mathbf{e}_{xyyx} + \mathbf{e}_{yxyx} + \mathbf{e}_{xzzx} + \mathbf{e}_{zxzx} + \mathbf{e}_{zxxz} + \mathbf{e}_{zxzx} + \mathbf{e}_{yzyz} + \mathbf{e}_{zyyz} + \mathbf{e}_{yzyz} + \mathbf{e}_{zyzy}),$$

ортогональный полученным выше изотропным тензорам. В качестве трех независимых кубически-инвариантных тензоров можно также выбрать следующие более простые:

$$\mathbf{e}_{xxxx} + \mathbf{e}_{yyyy} + \mathbf{e}_{zzzz}, \quad \mathbf{e}_{xxyy} + \mathbf{e}_{xxzz} + \mathbf{e}_{yyxx} + \mathbf{e}_{yyzz} + \mathbf{e}_{zzxx} + \mathbf{e}_{zzyy}, \quad \mathbf{e}_{xyxy} + \mathbf{e}_{yxxy} + \mathbf{e}_{xyyx} + \mathbf{e}_{yxyx} + \mathbf{e}_{xzzx} + \mathbf{e}_{zxzx} + \mathbf{e}_{zxxz} + \mathbf{e}_{zxxz} + \mathbf{e}_{yzyz} + \mathbf{e}_{zyyz} + \mathbf{e}_{yzyz} + \mathbf{e}_{zyzy},$$

однако в них не выделены изотропные части.

4.2. Нормальные колебания симметричных молекул

Рассмотрим малые колебания механических систем (молекул), состоящих из n частиц (атомов). Геометрия молекулы в каждый момент времени характеризуется вектором ρ в $3n$ -мерном “пространстве смещений” — совокупностью смещений всех атомов из положений равновесия: $\rho = (r_1, r_2, \dots, r_n)$. Естественные координаты системы — совокупность декартовых компонент смещений r_i , соответствующий базис (X_1, Y_1, Z_1, \dots) , так что

$$\rho = \sum_{i=1}^n (x_i X_i + y_i Y_i + z_i Z_i) \equiv \sum_{i\alpha} x_{i\alpha} X_{i\alpha}.$$

Здесь $\alpha = 1, 2, 3$ соответствуют x, y, z - координатам. При преобразованиях симметрии молекулы смещение ρ переходит в некоторое другое возможное смещение той же молекулы, $\rho' = D(g)\rho$. В (ортогональном) представлении Γ , $g \rightarrow D(g)$, выделяются инвариантные части, соответствующие поступательному и вращательному движению молекулы, так что $\Gamma = \Gamma_{\text{пост}} + \Gamma_{\text{вр}} + \Gamma_{\text{кол}}$.

Энергия системы

$$H = T + V = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha, j\beta} (m_i \dot{x}_{i\alpha}^2 + k_{i\alpha, j\beta} x_{i\alpha} x_{j\beta}) = \frac{1}{2} (\dot{\rho}, \hat{T} \dot{\rho}) + \frac{1}{2} (\rho, \hat{V} \rho), \quad (4.4)$$

где \hat{T} и \hat{V} — симметричные операторы, соответствующие положительно-определенным квадратичным формам T и V . Невырожденным линейным преобразованием

$$q_l = \sum_{i\alpha} c_{l, i\alpha} x_{i\alpha} \quad (4.5)$$

H приводится к диагональному виду

$$H = \frac{1}{2} \sum_l (\dot{q}_l^2 + \omega_l^2 q_l^2). \quad (4.6)$$

Здесь q_l — **нормальные координаты**. Движение системы, при котором отлична от нуля только координата q_l , называется **нормальным колебанием** с собственной частотой ω_l . Если к частоте ω относятся r разных колебаний, она называется **r -кратной частотой**, а соответствующие колебания **вырожденными**.

Преобразование (4.5) в общем случае (если не все массы одинаковы) неортогонально, но преобразование от **приведенных координат** $x'_{i\alpha} = x_{i\alpha} \sqrt{m_i}$ к q_l ортогонально, ибо оно сохраняет квадратичную форму $\sum_{i\alpha} \dot{x}'_{i\alpha}{}^2$. Если задать скалярное произведение соотношением $(X'_{i\alpha}, X'_{j\beta}) = \delta_{i\alpha, j\beta}$, то $\hat{T} = 1$, а Q_l — собственный вектор оператора V , относящийся к собственному значению ω_l^2 .

Три вектора, описывающие смещение молекулы как целой вдоль направлений x, y, z : $Q_\alpha(\text{пост}) \sim \sum_i X_{i\alpha}$. Ортогональность вектора смещения $\rho = \sum_{i\alpha} x_{i\alpha} X_{i\alpha}$ векторам Q_α означает, что при таком смещении центр тяжести молекулы остается на месте: $(\rho, Q_\alpha) \sim \sum_i m_i x_{i\alpha} = 0$. Вектор смещения, соответствующий вращению молекулы около направления Ω на (малый) угол $|\Omega|$: $\mathbf{Q} \sim \sum_i [\Omega \times \mathbf{R}_i]$, где радиус-вектор \mathbf{R}_i определяет равновесное положение i -го атома относительно центра вращения, который целесообразно совместить с центром тяжести молекулы. Ортогональность $(\rho, \mathbf{Q}(\Omega)) = \sum m_i (\mathbf{r}_i [\Omega \times \mathbf{R}_i]) = (\Omega \cdot \sum m_i [\mathbf{r}_i \times \mathbf{R}_i]) = 0$ означает, что при смещении ρ не возникает момент импульса молекулы.

Молекулу со смещением $\rho' = \hat{D}(g) \rho$ можно рассматривать как результат поворота g всей молекулы с исходным смещением ρ . Это действие эквивалентно изменению

системы координат и не вызывает изменения энергии системы, так что $(\rho, V\rho) = (\rho', V\rho')$,
и

$$D(g)VD(g^{-1}) = V. \quad (4.7)$$

Отсюда вытекает соотношение

$$V\hat{D}(g)Q_k = \omega_k^2 \hat{D}(g)Q_k, \quad (4.8)$$

т.е., нормальные координаты, связанные друг с другом преобразованиями симметрии, относятся к одной частоте. Можно сказать и так: преобразования $\hat{D}(g)$ связывают друг с другом лишь координаты, относящиеся к одной и той же частоте. Таким образом, пространство смещений молекулы расщепляется на инвариантные относительно $\hat{D}(g)$ подпространства, каждое из которых соответствует колебаниям с определенной частотой ω_i . Это означает разложение $\Gamma_{\text{колеб}}$:

$$\Gamma_{\text{кол}} = \Gamma_{\alpha}(\omega_1) + \Gamma_{\beta}(\omega_2) + \dots \quad (4.9)$$

Индукцированные представления $\Gamma(\omega_i)$, как правило, неприводимы; приводимость $\Gamma(\omega_i)$ означала бы возможность дальнейшего расщепления, $\Gamma(\omega_i) = \Gamma'(\omega_i) + \Gamma''(\omega_i)$, и ее можно было бы трактовать как случайное вырождение колебаний из двух или более подпространств, не связанных преобразованиями $\hat{D}(g)$.

Соотношение (4.9) говорит о том, что каждую частоту нормальных колебаний и соответствующие этой частоте нормальные координаты можно классифицировать индексом НП группы симметрии молекулы. Проведя разложение (4.9), можно предсказать число различных (отвлекаясь от возможности случайного вырождения) частот, их тип (НП) и кратность вырождения (размерность НП). Фактическое разложение $\Gamma_{\text{кол}}$ позволяет указать форму колебаний типа Γ_{α} , если Γ_{α} входит в $\Gamma_{\text{кол}}$ только один раз. В противном случае процедура проектирования, используемая при таком разложении, позволяет получить лишь так называемые **координаты симметрии** — смеси однотипных колебаний.

Для установления числа различных частот системы (типов нормальных колебаний) вычислим характеры представлений Γ , $\Gamma_{\text{кол}}$. Если атом с i -го места под действием операции симметрии переходит на j -ое место, то $D(g)\rho_i = \rho_j$, где ρ_i — смещение системы, при котором из положения равновесия выведен только i -ый атом. Поэтому диагональные матричные элементы в естественном базисе отличны от нуля только для тех $X_{i\alpha}$, которые отвечают атомам, остающимся на месте. Отсюда для

поворота на угол φ около некоторой оси и зеркального поворота получим, соответственно:

$$\chi_{\Gamma}(C(\varphi)) = N_C(1+2\cos\varphi), \quad \chi_{\Gamma}(S(\varphi)) = N_S(-1+2\cos\varphi), \quad (4.10)$$

где N_C и N_S — число атомов, остающихся на местах при этих преобразованиях.

Характер представления $\Gamma_{\text{пост}}$:

$$\chi_{\text{пост}}(C(\varphi)) = 1+2\cos\varphi, \quad \chi_{\text{пост}}(S(\varphi)) = -1+2\cos\varphi. \quad (4.11)$$

Базис (ненормированный) этого представления: $Q_{i\alpha} = \sum_i X_{i\alpha}$. Базис представления $\Gamma_{\text{вр}}$

состоит из трех аксиальных векторов $Q_{r\alpha} = \sum_i [\Omega_{\alpha} \times R_i]$, где Ω_{α} — три независимых вектора поворота. Характер представления $\Gamma_{\text{вр}}$:

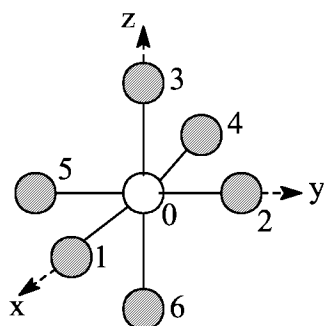
$$\chi_{\text{вр}}(C(\varphi)) = 1+2\cos\varphi, \quad \chi_{\text{вр}}(S(\varphi)) = 1-2\cos\varphi. \quad (4.12)$$

Отметим, что для линейных молекул представление $\Gamma_{\text{вр}}$ двумерно, и в характерах (3.12) следует опустить 1. Сравнивая (4.10) — (4.12), получаем характер колебательного представления:

$$\chi_{\text{кол}}(C(\varphi)) = (N_C - 2)(1+2\cos\varphi), \quad \chi_{\text{кол}}(S(\varphi)) = N_S(-1+2\cos\varphi). \quad (4.13)$$

В частности, $\chi_{\text{кол}}(I) = -3N_I$, $\chi_{\text{кол}}(\sigma) = N_{\sigma}$ (число атомов в плоскости отражения).

Отметим, что все представления и величины в этой задаче вещественны, поэтому встречающиеся при разложениях невещественные НП необходимо брать в паре с сопряженными НП, частоты колебаний для таких НП совпадают. При разложении полезно учесть, что молекула представляется в виде “слоев” эквивалентных атомов, сохраняющихся при преобразованиях симметрии, так что $\Gamma = \sum \Gamma_k$, где индекс k нумерует слои.



Пример — октаэдрическая молекула XY_6 , $m_X = M$, $m_Y = m$, системы координат для всех атомов выберем идентичными (см. рис.). Группа симметрии системы $O_h = O \times C_i$ (характеры см. в приложении). Пространство смещений 21-мерно, характеры представлений $\Gamma_{\text{пост}}$, $\Gamma_{\text{вр}}$ и $\Gamma_{\text{кол}}$, вычисленные по формулам (4.10) — (4.12):

| | E | $8C_3$ | $3C_4^2$ | $6C_2$ | $6C_4$ | I | $8S_6$ | 3σ | $6\sigma_d$ | $6S_4$ |
|----------------------|-----|--------|----------|--------|--------|-----|--------|-----------|-------------|--------|
| $\chi_{\text{пост}}$ | 3 | 0 | -1 | -1 | 1 | -3 | 0 | 1 | 1 | -1 |
| $\chi_{\text{вр}}$ | 3 | 0 | -1 | -1 | 1 | 3 | 0 | -1 | -1 | 1 |
| $\chi_{\text{кол}}$ | 15 | 0 | -1 | 1 | 1 | -3 | 0 | 5 | 3 | -1 |

Отсюда $\Gamma_{\text{пост}} = \Gamma_{4u}$, $\Gamma_{\text{вр}} = \Gamma_{4g}$, $\Gamma_{\text{кол}} = \Gamma_{1g} + \Gamma_{3g} + \Gamma_{5g} + 2\Gamma_{4u} + \Gamma_{5u}$. Поступательному и вращательному движению в (3.6) соответствуют нулевые частоты. Кроме того, имеются шесть типов нормальных колебаний. Координаты симметрии (канонический базис), находим проектированием (2.16) или (2.18), причем полезно обратить внимание на следующее. Пусть ищется смещение, соответствующее четному НП $\Gamma_{\alpha g} = \Gamma_{\alpha}(O) \times \Gamma_1(C_i)$:

$$\begin{aligned} \rho^{(\alpha g)} &= \frac{n_{\alpha}}{g} \sum_{g \in O_h} \chi^{(\alpha g)}(g) * \hat{D}(g) \rho = \frac{n_{\alpha}}{g} \sum_{g \in O} \chi^{(\alpha)}(g) * [\hat{D}(g) + \hat{D}(g) \hat{D}(I)] \rho = \\ &= \frac{n_{\alpha}}{g} \sum_{g \in O} \chi^{(\alpha)}(g) * \hat{D}(g) [\rho + \hat{D}(I) \rho]. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Таким образом, для нахождения четного (нечетного) относительно инверсии неприводимого смещения достаточно проектировать произвольное четное (нечетное) смещение оператором проектирования для подгруппы O .

Для НП, содержащихся в $\Gamma_{\text{кол}}$ по одному разу, координаты симметрии уже являются нормальными координатами. Поэтому в приводимом ниже наборе все координаты, за исключением тех, которые соответствуют Γ_{4u} , являются нормальными:

$$\begin{aligned} \Gamma_{1g}: Q_1 &= \frac{1}{\sqrt{6}} (X_1' - X_4' + Y_2' - Y_5' + Z_3' - Z_6') = \frac{1}{\sqrt{6m}} (X_1 - X_4 + Y_2 - Y_5 + Z_3 - Z_6); \\ \Gamma_{3g}: Q_2 &= \frac{1}{\sqrt{12m}} (2Z_3 - 2Z_6 - X_1 + X_4 - Y_2 + Y_5), \quad Q_3 = \frac{1}{\sqrt{4m}} (X_1 - X_4 - Y_2 + Y_5); \\ \Gamma_{5g}: Q_4 &= \frac{1}{\sqrt{4m}} (Z_2 - Z_5 + Y_3 - Y_6), \quad Q_5 = \frac{1}{\sqrt{4m}} (X_3 - X_6 + Z_1 - Z_4), \quad Q_6 = \frac{1}{\sqrt{4m}} (Y_1 - Y_4 + X_2 - X_5); \\ \Gamma_{4u}: Q_7 &= \frac{1}{\sqrt{12m}} (2X_1 + 2X_4 - X_2 - X_3 - X_5 - X_6), \dots; \\ \Gamma_{4u}': Q_{10} &= \frac{1}{\sqrt{6m(1+6m/M)}} [X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6 - (6m/M)X_0], \dots; \\ \Gamma_{5u}: Q_{13} &= \frac{1}{\sqrt{4m}} (X_2 + X_5 - X_3 - X_6), \quad Q_{14} = \frac{1}{\sqrt{4m}} (Y_3 + Y_6 - Y_1 - Y_4), \quad Q_{15} = \frac{1}{\sqrt{4m}} (Z_1 + Z_4 - Z_2 - Z_5); \\ \Gamma_{4u}(\text{пост}): Q_{16} &= \frac{1}{\sqrt{6m+M}} (X_0 + X_1 + X_2 + X_3 + X_4 + X_5 + X_6), \dots; \\ \Gamma_{4g}(\text{вр}): Q_{19} &= \frac{1}{\sqrt{4m}} (Z_2 - Z_5 - Y_3 + Y_6), \quad Q_{20} = \frac{1}{\sqrt{4m}} (X_3 - X_6 - Z_1 + Z_4), \quad Q_{21} = \frac{1}{\sqrt{4m}} (Y_1 - Y_4 - X_2 + X_5). \end{aligned} \quad (4.15)$$

Недостающие координаты представлений Γ_{4u} получаются из Q_7, Q_{10}, Q_{16} заменой в них X на Y и Z . При операциях $g \in O$ координаты симметрии $Q_{\alpha}(\Gamma_3)$ преобразуются как $3z^2 - r^2$,

$\sqrt{3}(x^2-y^2)$, $Q_\alpha(\Gamma_4)$ как x, y, z и $Q_\alpha(\Gamma_5)$ как yz, xz, xy . Разбиение на слои выглядит здесь как $\Gamma = \Gamma_X + \Gamma_Y$. Из $\Gamma_X \propto \Gamma_{4u}$ и поступательного смещения слоя Y_6 скомбинированы координаты представлений Γ_{4u} (пост) и Γ_{4u}' в (4.15).

Матрица упругих постоянных V на базисных векторах Q_α диагональна за исключением блока, соответствующего представлениям Γ_{4u} . Этот блок, согласно (2.13) и свойству симметричности, имеет вид

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 \hat{E} & \lambda_2 \hat{E} \\ \lambda_2 \hat{E} & \lambda_3 \hat{E} \end{pmatrix},$$

где E — единичная матрица третьего порядка, $\lambda_1 = (Q_7, VQ_7) = \dots$, $\lambda_2 = (Q_7, VQ_{10}) = \dots$. Частоты нормальных колебаний $\omega_{1,2}^2(\Gamma_{4u})$ находятся диагонализацией матрицы

$\begin{pmatrix} \lambda_1 & \lambda_2 \\ \lambda_2 & \lambda_3 \end{pmatrix}$, и эта же процедура обеспечивает коэффициенты μ, ν , выражающие истинные нормальные координаты через координаты симметрии: $Q_7' = \mu Q_7 + \nu Q_{10}$.

Частоты остальных нормальных колебаний задаются непосредственно элементами матрицы V . Например, $\omega^2(\Gamma_{1g}) = (Q_1, VQ_1)$, и, подставляя сюда выражение Q_1 через $X_{i\alpha}$ из (4.15), находим связь $\omega^2(\Gamma_{1g})$ с упругими постоянными $k_{i\alpha, j\beta} = (X_{i\alpha}, VX_{j\beta})$.

Инвариантность матрицы V и ортогональность матриц $D(g)$ приводят к соотношениям между различными матричными элементами: $k_{i\alpha, j\beta} = (D(g)X_{i\alpha}, VD(g)X_{j\beta})$. Отметим аналогию с предыдущим параграфом: тензор второго ранга $k_{i\alpha, j\beta}$ на $3n$ -мерном пространстве смещений преобразуется по представлению $[\Gamma^2] = N_1 \Gamma_1 + \dots$ группы симметрии, содержит N_1 инвариантов группы, или независимых компонент тензора. Например, октаэдрическая молекула XY_6 имеет 11 несвязанных преобразованиями симметрии компонент:

$$\begin{aligned} k_1 &= k_{0x0x} = k_{0y0y} = k_{0z0z}, k_2 = k_{0x1x} = k_{0y2y} = k_{0z3z} = k_{0x4x} = k_{0y5y} = k_{0z6z}, \\ k_3 &= k_{0x2x} = k_{0x5x} = k_{0x3x} = k_{0x6x} = k_{0y1y} = k_{0y4y} = \dots, \\ k_4 &= k_{1x1x} = k_{2y2y} = k_{3z3z} = k_{4x4x} = k_{5y5y} = k_{6z6z}, \\ k_5 &= k_{1y1y} = k_{1z1z} = k_{2x2x} = \dots, k_6 = k_{1x4x} = k_{2y5y} = k_{3z6z}, \\ k_7 &= k_{1y4y} = k_{1z4z} = k_{2x5x} = \dots, k_8 = k_{1x2x} = k_{1x5x} = k_{1x3x} = k_{1x6x} = k_{2y1y} = k_{2y4y} = \dots, \\ k_9 &= k_{1x2y} = -k_{1x5y} = k_{1x3z} = -k_{1x6z} = k_{2y3z} = -k_{2y6z}, \\ k_{10} &= k_{1y3y} = k_{2x3x} = k_{1z2z} = k_{1z5z} = \dots, k_{11} = k_{1y2x} = k_{1z3x} = -k_{1y5x} = \dots \end{aligned}$$

Остальные компоненты равны нулю. На упругие постоянные накладываются еще 4 условия, связанные с выделением поступательного и вращательного движений: $(Q_{16}, VQ_{16}) = (Q_7, VQ_{16}) = (Q_{10}, VQ_{16}) = (Q_{21}, VQ_{21}) = 0$. Или, после некоторых упрощений:

$$k_3 + k_5 + k_7 + 2k_8 + 2k_{10} = 0, \quad k_1 + 2k_2 + 4k_3 = 0, \quad k_2 + k_4 + k_6 + 4k_8 = 0, \quad k_5 - k_7 - 2k_{11} = 0.$$

Частоты колебаний и параметры λ :

$$\omega^2(\Gamma_{1g}) = (k_4 - k_6 + 4k_9)/m, \quad \omega^2(\Gamma_{3g}) = (k_4 - k_6 - 2k_9)/m, \quad \omega^2(\Gamma_{5g}) = (k_5 - k_7 + 2k_{11})/m = 4k_{11}/m,$$

$$\omega^2(\Gamma_{5u}) = (k_5 + k_7 - 2k_{10})/m; \quad \lambda_1 = (2k_4 + k_5 + 2k_6 + k_7 - 8k_8 + 2k_{10})/3m,$$

$$\lambda_3 = k_1(6m + M)/6mM, \quad \lambda_2 = 2(k_3 - k_2)(1 + 6m/M)^{1/2}/3m\sqrt{2}.$$

В молекулах с осевой симметрией представление Γ_k , соответствующее слою k , расщепляется на две части: $\Gamma_k = \Gamma_{kz} + \Gamma_{kxy}$, Γ_{kz} осуществляется смещениями атомов слоя вдоль оси симметрии z , а Γ_{kxy} — смещениями в перпендикулярной к z плоскости xy . Более того, “плоские” смещения атомов слоя в направлении линии, соединяющей атом с осью, при преобразованиях симметрии также переходят в аналогичные смещения других атомов слоя. В связи с этим может оказаться удобным использовать индивидуальные системы координат (xy) для атомов, в которых ось x направлена от оси симметрии, а ось y — перпендикулярно к этому направлению. Тогда $\Gamma_{kxy} = \Gamma_{kx} + \Gamma_{ky}$. Поступательные координаты всей молекулы комбинируются из поступательных координат слоев, а вращательные — из поступательных и вращательных координат слоев.

Характеры $\Gamma_{k\alpha}$ для отдельных слоев весьма простые. Так, слой атомов, занимающих общие положения (не на элементах симметрии) содержит g атомов, где g — порядок группы симметрии. Для такого слоя каждое представление $\Gamma_{k\alpha}$ совпадает с регулярным.

Рассмотрим молекулу NH_3 с симметрией C_{3v} (характеры НП группы C_{3v} приведены в разделе 2.9). Обозначим M массу атома N, m — массу H, ось z для всех атомов направлена вдоль оси C_3 , оси x, y для атомов H выбраны в соответствии со сказанным выше и указаны на рис.; $x_0 || x_1, y_0 || y_1$. Имеем два слоя: N (1 атом) и H (3 атома). Характеры и разложения представлений $\Gamma_{k\alpha}$ очевидны:

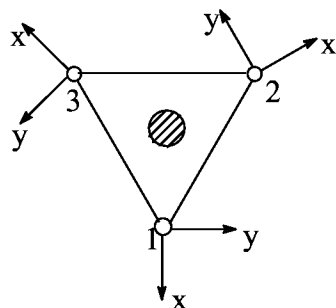
$$\Gamma_{Nz} = \Gamma_{1(N)}(Z_0), \quad \Gamma_{Nxy} = \Gamma_{3(N)}(X_0, -X_0/2 + (\sqrt{3}/2)Y_0),$$

$$\Gamma_{Hz} = \Gamma_{1(Hz)}(Z_1 + Z_2 + Z_3) + \Gamma_{3(Hz)}(2Z_1 - Z_2 - Z_3, 2Z_2 - Z_3 - Z_1),$$

$$\Gamma_{Hx} = \Gamma_{1(Hx)}(X_1 + X_2 + X_3) + \Gamma_{3(Hx)}(2X_1 - X_2 - X_3, 2X_2 - X_3 - X_1),$$

$$\Gamma_{Hy} = \Gamma_{2(Hy)}(Y_1 + Y_2 + Y_3) + \Gamma_{3(Hy)}(Y_2 - Y_3, Y_3 - Y_1).$$

В скобках указаны базисные векторы НП (ненормированные), причем для каждого НП Γ_3 пара базисных векторов преобразуется подобно двум неортогональным векторам на плоскости, расположенным под углом 120° . Из $\Gamma_{1(N)}$ и $\Gamma_{1(Hz)}$ комбинируется одно “поступательное” представление $\Gamma_1(\text{пост.})$ с координатой $Q_7 = Z_0+Z_1+Z_2+Z_3$ и одно колебательное Γ_1 с $Q_1 = (3m/M)Z_0-Z_1-Z_2-Z_3$. $\Gamma_{1(Hx)}$ — колебательное представление Γ_1' с



$Q_2 = X_1+X_2+X_3$, $\Gamma_{2(Hy)}$ — вращательное представление Γ_2 с $Q_{10} = Y_1+Y_2+Y_3$ (поворот молекулы около оси z). Из $\Gamma_{3(Hx)}$ и $\Gamma_{3(Hy)}$ комбинируется поступательное смещение слоя Н в плоскости xu :

$\Gamma_3(\text{пост.Н})$: $2X_1-X_2-\sqrt{3} Y_2-X_3+\sqrt{3} Y_3$, $2X_2-X_3-\sqrt{3} Y_3-X_1+\sqrt{3} Y_1$,
и колебательное представление Γ_3 :

$$Q_3(\Gamma_3) = 2X_1-X_2-X_3+\sqrt{3} (Y_2-Y_3), \quad Q_4(\Gamma_3) = 2X_2-X_3-X_1+\sqrt{3} (Y_3-Y_1).$$

В Q_3 атом 2 смещается перпендикулярно стороне 12 треугольника, атом 3 — навстречу ему перпендикулярно стороне 13; величины смещений всех атомов равны. Далее из Γ_{3N} и $\Gamma_3(\text{пост.Н})$ комбинируется представление, соответствующее поступательному смещению всей молекулы:

$$\Gamma_3(\text{пост.}): Q_8 = 2X_0+2X_1-X_2-X_3-\sqrt{3} (Y_2-Y_3), \quad Q_9 = -X_0+\sqrt{3} Y_0+2X_2-X_3-X_1-\sqrt{3} (Y_3-Y_1),$$

и ортогональная комбинация (промежуточная):

$$\Gamma_3(\text{пром.}): Q' = X_0-(M/6m)[2X_1-X_2-X_3-\sqrt{3} (Y_2-Y_3)],$$

$$Q'' = -X_0+\sqrt{3} Y_0-(M/6m)[2X_2-X_3-X_1-\sqrt{3} (Y_3-Y_1)].$$

Наконец, из $\Gamma_{3(Hz)}$ и $\Gamma_3(\text{пром.})$ комбинируем $\Gamma_3(\text{вращ.})$ и второе колебательное Γ_3' :

$$\Gamma_3(\text{вращ.}) Q_{11} = (6m/M)Q' - (a/h_0)(2Z_1-Z_2-Z_3), \quad Q_{12} = (6m/M)Q'' - (a/h_0)(2Z_2-Z_3-Z_1),$$

где a — расстояние от оси до атома Н, h_0 — расстояние от центра тяжести молекулы до плоскости атомов Н. Q_{11} соответствует повороту около оси, проходящей через центр тяжести параллельно y_1 , Q_{12} — около оси, параллельной y_2 .

$$\Gamma_3': Q_5 = (a/h_0)Q'+(1+M/3m)(2Z_1-Z_2-Z_3), \quad Q_6 = (a/h_0)Q''+(1+M/3m)(2Z_2-Z_3-Z_1).$$

Матрица упругих постоянных в координатах $Q_1 - Q_6$ имеет вид

$$V = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ h_{12} & h_{22} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_{33} & 0 & h_{35} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{33} & 0 & h_{35} \\ 0 & 0 & h_{35} & 0 & h_{55} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & h_{35} & 0 & h_{55} \end{pmatrix}.$$

Диагонализация ее сводится к решению двух квадратных уравнений, в результате чего получаются частоты двух полносимметричных невырожденных колебаний типа Γ_1 и двух двукратно вырожденных колебаний типа Γ_3 .

4.3. Классификация уровней энергии и стационарных состояний квантовомеханической системы по НП группы симметрии

Преобразование однозначных функций при преобразовании аргументов: пусть $x'=gx$ — взаимно-однозначное отображение, тогда, по определению

$$f'(x') = f(x), \text{ или } [D(g)f](gx) = f(x), \text{ или } [D(g)f](x) = f(g^{-1}x). \quad (4.16)$$

Если $\{g\}$ — группа, то соответствие $g \rightarrow D(g)$ — линейное представление $\{g\}$ в функциональном пространстве (задача 5). Если якобиан (определитель) преобразования g равен ± 1 , то представление $D(g)$ в гильбертовом пространстве унитарно:

$$(D(g)f, D(g)\varphi) = \int f^*(g^{-1}x)\varphi(g^{-1}x)dx = \int f^*(y)\varphi(y)dy = (f, \varphi).$$

Представление, порождаемое функцией f — реализуется на множестве $\{D(g)f\}$, $g \in G$. Разложение произвольной функции в сумму функций, преобразующихся как определенные строчки НП:

$$f = \sum_{\alpha i} f_i^{(\alpha)} = \sum_{\alpha} f^{(\alpha)}, \quad f_i^{(\alpha)} = \frac{n_{\alpha}}{g} \sum_g D_{ii}^{(\alpha)}(g) * \hat{D}(g)f. \quad (4.17)$$

Если на функциях $\varphi_i^{(\alpha)}$ осуществляется представление Γ_{α} , то на функциях $\varphi_i^{(\alpha)*}$ осуществляется представление Γ_{α}^* .

Группа симметрии системы (гамильтониана): $G = \{g\}$, $H(gx) = H(x)$ (в шредингеровском представлении x — координаты, спиновые переменные). Инвариантность собственных подпространств H относительно группы симметрии:

$$H\psi_{ni} = E_n\psi_{ni}, \quad H(g^{-1}x)\psi_{ni}(g^{-1}x) = E_n\psi_{ni}(g^{-1}x), \quad HD(g)\psi_{ni} = E_nD(g)\psi_{ni}. \quad (4.18)$$

Коммутирование гамильтониана с преобразованиями симметрии $D(g)$ (H — элемент коммутаторной алгебры для $[D(g)]$): $D(g)H\psi_{ni} = E_nD(g)\psi_{ni}$; сравнивая с (4.18), находим

$$D(g)H = HD(g) \quad (4.19)$$

применительно ко всем стационарным состояниям, а, значит, и для всего пространства состояний. Представление, которое осуществляется согласно (4.18) в собственном подпространстве гамильтониана H , как правило, является неприводимым, и индексы этого НП можно использовать для характеристики уровня и независимых собственных функций: E_α и $\psi_i^{(\alpha)}$, $H\psi_i^{(\alpha)} = E_\alpha\psi_i^{(\alpha)}$. Одинаковые НП различаются дополнительным индексом t : $E_{\alpha t}$. Приводимость представления в некотором собственном подпространстве H можно рассматривать как *случайное вырождение* состояний, не связанных преобразованиями симметрии.

Из квантовой механики известно, что перестановочность гамильтониана системы с эрмитовым оператором связана с сохранением во времени физической величины, описываемой указанным оператором. Если величина имела определенное значение в какой-то момент времени, то сохраняется это значение, и в любом случае не меняется со временем среднее значение величины. Таким образом, симметрия системы, выражающаяся в соотношениях (4.19), связана с некоторыми законами сохранения. Так, если система инвариантна относительно вращений (изотропна) в трехмерном пространстве, гамильтониан коммутирует со всеми операторами представления группы вращений в пространстве состояний, а, значит, и с эрмитовыми инфинитезимальными операторами J_α (раздел 3.3). Физическая величина, сохранение которой связано с изотропностью системы, есть момент импульса, поэтому J_α с точностью до постоянного множителя следует отождествить с оператором момента импульса (углового момента) системы.

С симметрией относительно пространственных трансляций связан закон сохранения импульса системы, с симметрией относительно сдвигов во времени — закон сохранения энергии. Из дискретных симметрий отметим пространственную инверсию: если система инвариантна относительно инверсии, то имеет место закон сохранения четности.

4.4. Применение теории групп к вычислению матричных элементов

Определим *неприводимые тензорные операторы* $O_i^{(\alpha)}$, $i = 1, 2, \dots, n_\alpha$:

$$D(g)\hat{O}_i^{(\alpha)}(x)D^{-1}(g) = \hat{O}_i^{(\alpha)}(g^{-1}x) = \sum_j D_{ji}^{(\alpha)}(g)\hat{O}_j^{(\alpha)}(x) \quad (4.20)$$

(запись преобразования операторов в форме $\hat{G}\hat{O} = \hat{D}(g)\hat{O}\hat{D}(g^{-1})$ устанавливает связь представлений $g \rightarrow \hat{G}$ и $g \rightarrow D(g)$ на пространстве операторов и пространстве функций, соответственно). Разложение произвольного оператора на неприводимые части аналогично (4.17). Матричные элементы неприводимых тензорных операторов на стационарных состояниях:

$$\begin{aligned} (\psi_i^{(\alpha)}, \hat{O}_j^{(\beta)} \psi_k^{(\gamma)}) &= \frac{1}{g} \sum_g (D(g) \psi_i^{(\alpha)}, D(g) \hat{O}_j^{(\beta)} \psi_k^{(\gamma)}) = \\ &= \frac{1}{g} \sum_{g^i j^k} D_{ii}^{(\alpha)}(g) D_{jj}^{(\beta)}(g) D_{kk}^{(\gamma)}(g) (\psi_i^{(\alpha)}, \hat{O}_j^{(\beta)} \psi_k^{(\gamma)}). \end{aligned} \quad (4.21)$$

Но $D_{j'j}^{(\beta)}(g) D_{k'k}^{(\gamma)}(g) = [D^{(\beta)}(g) \times D^{(\gamma)}(g)]_{j'k',jk} = [S^{-1} \sum_{vt} D^{(vt)}(g) S]_{j'k',jk}$,

где $\sum_{vt} D^{(vt)}(g)$ — приведенная форма матриц представления $\Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$. Поэтому

$$(\psi_i^{(\alpha)}, \hat{O}_j^{(\beta)} \psi_k^{(\gamma)}) = \frac{1}{g} \sum_{i' j' k'} \sum_{v t l} S_{j'k',v t l}^{-1} S_{v t l, j k} \sum_g D_{i i'}^{(\alpha)}(g) D_{l l'}^{(\beta)}(g) (\psi_{i'}^{(\alpha)}, \hat{O}_{l'}^{(\beta)} \psi_{k'}^{(\gamma)}).$$

Правила отбора: матричный элемент (4.21) отличен от нуля только в том случае, если $\Gamma_\alpha \in \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$, или $\Gamma \in \Gamma_\alpha * \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$. Отличные от нуля матричные элементы можно записать в виде:

$$(\psi_i^{(\alpha)}, \hat{O}_j^{(\beta)} \psi_k^{(\gamma)}) = \sum_t S_{\alpha t i, j k} (\alpha t \| \beta \| \gamma), \quad (4.22)$$

$$(\alpha t \| \beta \| \gamma) = \frac{1}{n_\alpha} \sum_{i' j' k'} S_{j'k', \alpha t i}^{-1} (\psi_{i'}^{(\alpha)}, \hat{O}_{j'}^{(\beta)} \psi_{k'}^{(\gamma)}). \quad (4.23)$$

Величины $(\alpha t \| \beta \| \gamma)$, $t = 1, 2, \dots, N_\alpha$ называют **приведенными матричными элементами**. **Коэффициенты Клебша-Гордона** (группы G) — матричные элементы S, S^{-1} . **Теорема Вигнера-Эккарта** (4.22) утверждает: зависимость матричных элементов (4.21) от индексов строчек НП полностью определяется коэффициентами Клебша-Гордона, т.е., симметрией гамильтониана. Приведенные матричные элементы можно найти, вычисляя N_α обычных матричных элементов и решая систему (4.22) относительно $(\alpha t \| \beta \| \gamma)$. Теорема Вигнера-Эккарта чаще всего используется для группы вращений.

4.5. Теория возмущений

Типичная ситуация: $H = H_0 + V$, G_0 — группа симметрии H_0 , $G \subset G_0$ — группа симметрии H . Пусть Γ_α (НП G_0) как представление подгруппы G , разлагается по НП

следующим образом: $\Gamma_\alpha = \sum_\nu N_{\alpha\nu} \gamma_\nu$. Тогда уровень $E(\Gamma_\alpha)$ невозмущенной системы расщепится на $\sum_\nu N_{\alpha\nu}$ подуровней $E_1(\gamma_1), \dots, E_{N_{\alpha 1}}(\gamma_1), E_1(\gamma_2), \dots$. Для фактического вычисления энергии возмущенной системы следует диагонализировать матрицу $(\psi_i^{(\alpha)}, H\psi_k^{(\alpha)})$. В каноническом базисе (на функциях, преобразующихся по НП G), матрица H , как всякого элемента коммутаторной алгебры, определяется соотношением (2.13).

4.6. Метод молекулярных орбиталей

Молекулярными орбиталями обычно называют одноэлектронные состояния в молекулах и молекулярных комплексах. Широко используется представление молекулярных орбиталей в виде линейных комбинаций *атомных орбиталей* — одноэлектронных состояний (nlm) атомов, составляющих молекулу (метод МО ЛКАО):

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{k,nlm} c_{nlm}^{(k)} \phi_{nlm}^{(k)}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_k), \quad (4.24)$$

где \mathbf{R}_k — радиус-вектор ядра k -го атома. Набор атомных орбиталей ограничивают конечным числом (N) функций, например, внешними оболочками атомов (“валентными” электронами). Такое ограничение сводит решение уравнения Шредингера для молекулы к диагонализации матрицы гамильтониана порядка N .

Если молекула обладает той или иной симметрией, то уровни энергии и стационарные МО классифицируются с помощью индексов НП группы симметрии молекулы G . Использование в качестве базиса при написании матрицы энергии функций, преобразующихся по НП группы симметрии, существенно упрощает эту матрицу, в связи с чем возникает проблема составления МО вида (4.24) с определенной симметрией. Множество функций (4.24) связано преобразованиями симметрии, и на нем реализуется представление Γ группы G . Разложение его на НП, $\Gamma = \sum N_\alpha \Gamma_\alpha$, указывает число N_α наборов МО (каждый из которых содержит n_α независимых состояний), реализующих НП Γ_α . Наборы эти можно получить, используя, как обычно, процедуру проектирования.

Разобьем молекулу на слои из эквивалентных атомов, переходящих друг в друга при преобразованиях симметрии. Атомные орбитали с данным l , относящиеся к выделенному слою (k), связываются преобразованиями симметрии только друг с другом, натягивая представление Γ_{kl} группы G . Таким образом, представление Γ расщепляется на части, $\Gamma = \sum \Gamma_{kl}$, и разложение его на неприводимые составляющие

сводится к разложению представлений Γ_{kl} . Характер представлений Γ_{kl} рассчитывается по формулам

$$\chi_{kl}(C(\varphi)) = N_C^{(k)} \frac{\sin(l + \frac{1}{2})\varphi}{\sin(\varphi/2)}; \quad \chi_{kl}(S(\varphi)) = N_S^{(k)} (-1)^l \frac{\sin(l + \frac{1}{2})(\pi + \varphi)}{\sin((\pi + \varphi)/2)}, \quad (4.25)$$

где $N_C^{(k)}$ и $N_S^{(k)}$ — числа атомов k -го слоя, остающихся на месте при повороте $C(\varphi)$ и зеркальном повороте $S(\varphi)$, соответственно. Отметим, что при $l = 1$ формулы (4.25) переходят в (4.10).

В качестве примера рассмотрим октаэдрическую молекулу XY_6 , состоящую из двух слоев (X и Y_6), и ее орбитали, которые можно составить из (пяти) d -орбиталей центрального атома X и s -, p -орбиталей периферических атомов (лигандов) Y . Общее число независимых АО $N = 29$, 29-мерное представление Γ расщепляется на три части: $\Gamma = \Gamma_{Xd} + \Gamma_{Ys} + \Gamma_{Yp}$, характеры которых имеют вид:

| O_h | E | $8C_3$ | $3C_4^2$ | $6C_4$ | $6U_2$ | I | $8S_6$ | $3\sigma_h$ | $6S_4$ | $6\sigma_d$ |
|---------------|-----|--------|----------|--------|--------|-----|--------|-------------|--------|-------------|
| Γ_{Xd} | 5 | -1 | 1 | -1 | 1 | 5 | -1 | 1 | -1 | 1 |
| Γ_{Ys} | 6 | 0 | 2 | 2 | 0 | 0 | 0 | 4 | 0 | 2 |
| Γ_{Yp} | 18 | 0 | -2 | 2 | 0 | 0 | 0 | 4 | 0 | 2 |

откуда видно, что $\Gamma_{Xd} = \Gamma_{3g} + \Gamma_{5g}$, $\Gamma_{Ys} = \Gamma_{1g} + \Gamma_{3g} + \Gamma_{4u}$, $\Gamma_{Yp} = \Gamma_{1g} + \Gamma_{3g} + \Gamma_{4g} + \Gamma_{5g} + \Gamma_{5u} + 2\Gamma_{4u}$. Приведем некоторые ЛКАО (ненормированные), относящиеся к НП, используя общую систему координат для всех атомов и обозначая для краткости s - и p -орбитали k -го лиганда посредством s_k и $p_{k\alpha}$:

$$\Gamma_{1g}: \psi_s(1g) = s_1 + s_2 + s_3 + s_4 + s_5 + s_6, \quad \psi_p(1g) = p_{1x} - p_{4x} + p_{2y} - p_{5y} + p_{3z} - p_{6z};$$

$$\Gamma_{3g}: \psi_{s1}(3g) = 2s_3 + 2s_6 - s_1 - s_4 - s_2 - s_5, \quad \psi_{s2}(3g) = \sqrt{3}(s_1 + s_4 - s_2 - s_5);$$

$$\psi_{p1}(3g) = 2p_{3z} - 2p_{6z} - p_{1x} + p_{4x} - p_{2y} + p_{5y}, \quad \psi_{p2}(3g) = \sqrt{3}(p_{1x} - p_{4x} - p_{2y} + p_{5y});$$

$$\Gamma_{4u}: \psi_{s1}(4u) = s_1 - s_4, \quad \psi_{s2}(4u) = s_2 - s_5, \quad \psi_{s3}(4u) = s_3 - s_6.$$

Отметим аналогию между функциями $\psi_p(1g)$, $\psi_{p1}(3g)$, $\psi_{p2}(3g)$ и нормальными координатами Q_1 , Q_2 , Q_3 (4.15). Точно также комбинации p -орбиталей лигандов, преобразующиеся по другим НП, содержащимся в Γ_{Yp} , аналогичны соответствующим координатам симметрии из (4.15).

29-мерная матрица энергии, будучи записана на найденных симметризованных МО, расщепляется на двумерный блок типа Γ_{1g} , два трехмерных блока типа Γ_{3g} , три двумерных блока типа Γ_{5g} , три трехмерных блока типа Γ_{4u} , а орбитали типа Γ_{4g} и Γ_{5u} уже являются собственными функциями гамильтониана.

Рассмотрим еще МО молекулы XY_3 с симметрией C_{3v} . Воспользуемся той же системой локальных координат, что и при нахождении симметрических координат в разделе 4.2. Тогда $\Gamma_{Y_s} = \Gamma_1 + \Gamma_3$, $\Gamma_{Y_{pz}} = \Gamma_1 + \Gamma_3$, $\Gamma_{Y_{px}} = \Gamma_1 + \Gamma_3$, $\Gamma_{Y_{py}} = \Gamma_2 + \Gamma_3$. Очевидно, три (ненормированные) орбитали типа Γ_1 следующие:

$$\Gamma_1: \psi_s(\Gamma_1) = s_1 + s_2 + s_3; \psi_{pz}(\Gamma_1) = p_{1z} + p_{2z} + p_{3z}; \psi_{px}(\Gamma_1) = p_{1x} + p_{2x} + p_{3x}.$$

Орбиталь типа Γ_2 : $\psi_{py}(\Gamma_2) = p_{1y} + p_{2y} + p_{3y}$. Орбитали типа Γ_3 , преобразующиеся при операциях из группы C_{3v} друг через друга подобно двум векторам на плоскости, расположенным под углом 120° :

$$\Gamma_3: \psi_{s1}(\Gamma_3) = 2s_1 - s_2 - s_3, \psi_{s2}(\Gamma_3) = 2s_2 - s_1 - s_3;$$

$$\psi_{pz1}(\Gamma_3) = 2p_{1z} - p_{2z} - p_{3z}, \psi_{pz2}(\Gamma_3) = 2p_{2z} - p_{1z} - p_{3z};$$

$$\psi_{px1}(\Gamma_3) = 2p_{1x} - p_{2x} - p_{3x}, \psi_{px2}(\Gamma_3) = 2p_{2x} - p_{1x} - p_{3x};$$

$$\psi_{py1}(\Gamma_3) = p_{2y} - p_{3y}, \psi_{py2}(\Gamma_3) = -p_{1y} + p_{3y}.$$

В методе МО нет видимых причин для предварительного комбинирования из симметризованных орбиталей “поступательных” или “вращательных” величин. Но, соответственно, не уменьшается и размерность матрицы гамильтониана, подлежащей диагонализации, тогда как размерность матрицы упругих постоянных молекулы после отделения поступательных и вращательных координат уменьшается на шесть.

4.7. Элементы теории кристаллического поля

Рассмотрим ионы переходных металлов в молекулярных комплексах или кристаллах, где на них действуют электростатические поля, создаваемые окружающими ионами. Будем полагать, что потенциал поля удовлетворяет уравнению Лапласа. Это равносильно предположению, что источники поля удалены от рассматриваемого иона на расстояния, существенно превышающие его радиус. Тогда потенциал можно разложить по сферическим гармоникам в виде:

$$V(\mathbf{r}) = \sum_{kq} B_k^q r^k Y_{kq}(\theta, \varphi) = \sum_k V_k(\mathbf{r}). \quad (4.26)$$

Условие вещественности потенциала накладывает на **параметры кристаллического поля** B_k^q ограничение: $B_k^{q*} = (-1)^k B_k^{-q}$, поскольку согласно (3.16) $Y_{kq}^* = (-1)^k Y_{k,-q}$. Множество функций $V(\mathbf{r})$ с различными коэффициентами B_k^q преобразуется при ортогональных преобразованиях по потенциально-вещественному представлению

$$D = D^{(0+)} + D^{(1-)} + D^{(2+)} + D^{(3-)} + D^{(4+)} + \dots$$

В то же время, если позиция иона обладает симметрией, описываемой группой $G \subset O_3$, потенциал $V(\mathbf{r})$ должен быть инвариантом этой группы, и отыскание независимых (не

связанных преобразованиями симметрии) параметров B_k^q сводится к выделению инвариантов (НП Γ_1) группы G из приводимого представления D .

Энергия иона в кристаллическом поле складывается из энергий отдельных электронов:

$$U = -e\sum_i V(r_i),$$

и ее можно рассматривать как возмущение, определяющее, наряду с межэлектронным кулоновским ($H_{кул}$) и спин-орбитальным (H_{so}) взаимодействиями, структуру подуровней незаполненной основной (а при необходимости и ближайших возбужденных) электронной конфигурации атома.

Кристаллическое поле **сильное**, если энергия U превосходит $H_{кул}$ и H_{so} ; в этом случае в качестве первого этапа вычисляется расщепление уровней “внешних” орбиталей иона в кристаллическом поле, а затем учитывается влияние кулоновского и спин-орбитального взаимодействий. В сильных полях могут быть велики эффекты ковалентной связи атомов; их учет целесообразно проводить в рамках метода молекулярных орбиталей. В **промежуточных** полях, характерных для ионов группы железа, $H_{кул} > U > H_{so}$, и кристаллическое поле проявляется в расщеплении термов ^{2S+1}L конфигураций (L — полное орбитальное, S — спиновое квантовые числа). В **слабых** кристаллических полях (ионы редких земель) возникает штарковская структура уровней $^{2S+1}L_J$ свободных ионов (J — полный момент).

При вычислении матричных элементов оператора (4.26) на слэтеровских детерминантах, составленных из атомных орбиталей $|nlmm_s\rangle$, возникают одночастичные элементы типа $\langle n'l'm' | r^k Y_{kq} | nlm \rangle$, отличные от нуля согласно правилам отбора (п.4.4) лишь при $k \leq |l+l'|$. Поэтому в (4.26) можно ограничиться слагаемыми с $k \leq 4$, если рассматриваются конфигурации ионов, содержащие лишь s, p, d -электроны; при изучении редкоземельных ионов достаточно сохранить слагаемые с $k \leq 6$. Слагаемое с $k = 0$ приводит лишь к общему сдвигу уровней энергии иона, и его также обычно опускают. Сферические гармоники до шестого порядка как функции декартовых координат выписаны в Приложении.

Гамильтониан свободного иона инвариантен относительно пространственной инверсии, и каждое состояние конфигурации $(l_1 l_2 \dots l_n)$ характеризуется определенной орбитальной четностью $(-1)^{l_1+l_2+\dots+l_n}$. Поэтому, если рассматриваются матричные элементы потенциала лишь между состояниями одной конфигурации, в (4.26) можно ограничиться слагаемыми с четными k . Слагаемые с нечетными k , которые могут быть

отличны от нуля, если группа симметрии G не содержит инверсию, приводят к перемешиванию конфигураций противоположной четности..

Составление инвариантов группы G из тензоров Y_{kq} , сводится к проектированию представлений $D^{(l)}$ группы вращений на единичное НП группы G . При наличии оси симметрии порядка n ($= 2,3,4,6$ в кристаллах) направим ее вдоль z . Инвариантами группы C_n являются функции Y_{kq} с $q = 0, \pm n, \pm 2n, \pm 3n \dots$. Добавление оси симметрии (y) второго порядка, перпендикулярной z , уменьшает число инвариантов: относительно группы D_n инвариантны только комбинации $Y_{kq} + (-1)^{k+q} Y_{k-q}$ [для поворота на π около оси y : $D(0, \pi, 0) | jm \rangle = (-1)^{j+m} | j-m \rangle$] с теми же $q = 0, \pm n, \pm 2n \dots$. При четных k это $\text{Re } Y_{kq}$, а при k нечетных — $\text{Im } Y_{kq}$. Добавление к оси C_n плоскости симметрии (zx), проходящей через ось z , приводит к инвариантам $\text{Re } Y_{kq}$ для любых k , ибо соответствующая операция представляется в виде $\sigma = IC_2(y)$. Таким образом, четный кристаллический потенциал до шестого порядка по r для групп C_{3v}, D_3, D_{3d} имеет вид:

$$V_{\text{trig}}^{(+)} = B_2^0 r^2 Y_{20} + B_4^0 r^4 Y_{40} + B_4^3 r^4 (Y_{43} - Y_{4-3}) + B_6^0 r^6 Y_{60} + B_6^3 r^6 (Y_{63} - Y_{6-3}) + B_6^6 r^6 (Y_{66} + Y_{6-6}).$$

Он содержит 6 независимых вещественных параметров в полном соответствии с разложением представлений $D^{(l)}$ по НП этих групп [$D^{(2)} = \Gamma_1 + 2\Gamma_3$, $D^{(4)} = 2\Gamma_1 + \Gamma_2 + 3\Gamma_3$, $D^{(6)} = 3\Gamma_1 + 2\Gamma_3 + 4\Gamma_3$]. Нечетная часть потенциала для группы C_{3v} является линейной комбинацией инвариантов $Y_{10}, Y_{30}, Y_{33} - Y_{3-3}, Y_{50}, Y_{53} - Y_{5-3}$ (5 параметров). Для группы D_3 (2 параметра):

$$V^{(-)}(D_3) = B_3^3 i r^3 (Y_{33} + Y_{3-3}) + B_5^3 i r^5 (Y_{53} + Y_{5-3}).$$

Для группы D_{3d} , естественно, $V^{(-)}(D_{3d}) = 0$. При отражении в плоскости xy [$\sigma_h = C_2(z)I$]

$$D(\sigma_h) Y_{kq} = (-1)^{k+q} Y_{kq},$$

и в качестве инвариантов группы C_{nh} выживают лишь сферические гармоники с четным q для четных k и нечетным q для нечетных k . Так, четные инварианты C_{3h} : $Y_{20}, Y_{40}, Y_{60}, Y_{66}, Y_{6-6}$, и $V^{(+)}$ содержит 5 параметров, нечетные инварианты: $Y_{33}, Y_{3-3}, Y_{53}, Y_{5-3}$ (4 параметра).

Существует по одной инвариантной гармонике кубической группы (O, T_d, O_h) четвертого и шестого порядка, и четный кубический потенциал имеет следующий вид (в кубических осях):

$$U_{\text{куб}} = a(x^4 + y^4 + z^4 - 3r^4/5) + b[7(x^6 + y^6 + z^6) + 210x^2 y^2 z^2 - 5r^6].$$

Для группы T_d имеется один инвариант третьей степени: $x y z$, нечетные инварианты группы O начинаются лишь с девятой степени.

4.8. Метод эквивалентных операторов

При вычислении матричных элементов используется *теорема Вигнера-Эккарта* (4.22), применительно к группе вращений она обычно записывается так:

$$\begin{aligned} \left(\Psi_{m_1}^{(j_1)}, \hat{O}_{m_2}^{(j_2)} \Psi_{m_3}^{(j_3)} \right) &= \langle j_2 j_3 j_1 m_1 | j_2 m_2 j_3 m_3 \rangle \frac{(-1)^{j_2 - j_3 + j_1}}{\sqrt{2j_1 + 1}} \langle j_1 \| O^{(j_2)} \| j_3 \rangle = \\ &= (-1)^{j_1 - m_1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \langle j_1 \| O^{(j_2)} \| j_3 \rangle. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Здесь приведенный матричный элемент определен несколько иначе, чем в (4.22). Теорема Вигнера-Эккарта является основой *метода эквивалентных операторов*, часто используемого в теории атомных спектров и теории магнитного резонанса при вычислении матричных элементов между состояниями с заданным значением момента j . В этом методе полиномы от пространственных координат заменяются полиномами от компонент угловых моментов, обладающими теми же свойствами преобразования при поворотах:

$$O_m^{(j_1)}(x) \Rightarrow (j \| j_1 \| j) O_m^{(j_1)}(j_x), \quad (j \| j_1 \| j) = \frac{\langle j \| O_x^{(j_1)} \| j \rangle}{\langle j \| O_{j_x}^{(j_1)} \| j \rangle}.$$

Поскольку полиномы от x, y, z соответствуют симметричным тензорам (представлениям симметричными тензорами), полиномы от j_x, j_y, j_z тоже должны быть полностью симметризованы, так что, например, полиному $r^4 = x^4 + y^4 + z^4 + 2x^2y^2 + 2x^2z^2 + 2y^2z^2$ отвечает

$$\begin{aligned} j_x^4 + j_y^4 + j_z^4 + \frac{1}{3}(j_x^2 j_y^2 + j_y^2 j_x^2 + j_x j_y^2 j_x + j_y j_x^2 j_y + j_x j_y j_x j_y + j_y j_x j_y j_x) + \dots \\ = \hat{j}^2 \hat{j}^2 + \frac{1}{3}i([j_x, j_y]j_z + [j_y, j_z]j_x + [j_z, j_x]j_y) = j^2(j+1)^2 - \frac{1}{3}j(j+1). \end{aligned}$$

В теории кристаллического поля приходится переходить к эквивалентным операторам, составленным из компонент орбитального момента электрона l (при расчетах одноэлектронных матричных элементов), из компонент суммарного орбитального момента L (при вычислениях, ограниченных состояниями одного терма), и из компонент полного момента J (при ограничении состояниями уровня SLJ редкоземельных ионов).

Установим связь между приведенными матричными элементами $(L \| O_k \| L)$ и $(J \| O_k \| J)$. В силу (4.27)

$$\begin{aligned}
(JM_J | O_k^q | J' M_{J'}) &= (-1)^{J-M_J} \begin{pmatrix} J & k & J' \\ -M_J & q & M_{J'} \end{pmatrix} (J \| O_k \| J') = \\
&\sum_{MM_S M'_S} (JM_J | LMSM_S) (LMSM_S | O_k^q | LM'SM'_S) (LM'SM'_S | J' M_{J'}) = \\
&\sqrt{(2J+1)(2J'+1)} (L \| O_k \| L) \sum_{MM_S M'_S} (-1)^{L-M-M_J+M_{J'}} \begin{pmatrix} L & S & J \\ M & M_S & -M_J \end{pmatrix} \times \\
&\begin{pmatrix} L & S & J' \\ M' & M_{S'} & -M_{J'} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} L & k & L \\ -M & q & M' \end{pmatrix} \delta_{M_S M_{S'}}.
\end{aligned}$$

Последняя сумма может быть вычислена с учетом соотношения (3.45). В результате получим:

$$(J \| O_k \| J') = (-1)^{L+S+J'+k} \sqrt{(2J+1)(2J'+1)} \begin{Bmatrix} J & k & J' \\ L & S & L \end{Bmatrix} (L \| O_k \| L).$$

Задачи к разделу 4

1. Найти компоненты пьезоэлектрического тензора γ_{ikl} для кристалла с точечной группой T_d . Тензор γ определяется соотношением $P_i = \gamma_{ikl} \sigma_{kl}$, где P_i — вектор поляризации, σ_{kl} — симметричный тензор напряжений.
2. Указать возможные числа атомов в слоях молекулы с симметрией C_{3v} и D_{3d} .
3. Пусть взаимодействие атомов октаэдрической молекулы зависит только от расстояния между ними (центральные силы). Написать матрицу упругих постоянных и вычислить частоты нормальных колебаний.
4. Найти нормальные координаты тетраэдрической молекулы XY_4 .
5. Проверить, что соответствие $g \rightarrow D(g)$, определенное равенством (4.16), является линейным представлением в пространстве функций.
6. В трехмерном евклидовом пространстве задана некоторая декартова система координат. Как преобразуются функции x , x^2 , $f'_x(x,y,z)$, $\sin x$ при повороте около оси z на угол α ?
7. Разбить функцию x^2 на части, преобразующиеся по НП группы октаэдра (оси координат направлены вдоль осей четвертого порядка).
8. Означает ли равенство (4.17), что в представлении, порожденном функцией $f(x)$, каждое НП содержится не более, чем по одному разу?
9. Построить матрицы трех НП группы октаэдра на функциях $3z^2-r^2$ и $\sqrt{3}(x^2-y^2)$; x, y и z ; yz, zx и xy .

10. Определить группу симметрии нерелятивистского гамильтониана для иона с зарядом Z и n электронами:

$$\hat{H} = \sum_i \frac{p_i^2}{2m} - \sum_i \frac{Ze^2}{r_i} + \sum_{i>j} \frac{e^2}{r_{ij}}.$$

11. Показать, что матрицы S , осуществляющие разложение представления $D^{(\beta)} \times D^{(\gamma)}$:
 $D^{(\beta)} \times D^{(\gamma)} = S^{-1} \left(\sum_{\nu\iota} D^{(\nu\iota)} \right) S$, определяются этим соотношением с точностью до умножения на элементы коммутаторной алгебры алгебры $[\sum D^{(\nu\iota)}]$.
12. Проверить ортогональность функций, преобразующихся по различным НП или как различные строчки одного НП.
13. Вычислить $\int \varphi_i^{(\omega)}(x) dx$, если Γ_α — нетождественное представление.
14. Показать, что $\Gamma_\alpha \in \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$ тогда и только тогда, когда $\Gamma_1 \in \Gamma_\alpha^* \times \Gamma_\beta \times \Gamma_\gamma$.
15. Найти правила отбора для электрических и магнитных дипольных переходов между уровнями системы, обладающей симметрией O_h .
16. На систему, обладающую симметрией группы O_h , наложено возмущение, которое понижает симметрию до группы а) D_{3d} , б) D_{2h} . Как расщепляются вырожденные уровни энергии системы под действием возмущения? Найти канонические базисы и написать матрицу возмущения для системы, обладающей тремя уровнями: $E(\Gamma_{4u}^1)$, $E(\Gamma_{4u}^2)$, $E(\Gamma_{5g})$.
17. Составить МО ЛКАО молекулы XY_4 , преобразующиеся по НП группы T_d , из s -, p -, d -орбиталей атома X и s -, p -орбиталей лигандов.
18. Как расщепляются уровни атома с данными значениями полного момента $j = 1/2, 1, \dots, 7/2, 4$ в поле с кубической симметрией O ?
19. Определить волновые функции расщепленных уровней в предыдущей задаче.
20. Показать, что функция $\psi_m^{(j)}$ является собственной функцией оператора $j^2 = j_x^2 + j_y^2 + j_z^2$. Вычислить соответствующее собственное значение.
21. Найти потенциал кристаллического поля с тетрагональной симметрией.
22. Найти эквивалентные операторы для полиномов

$$P_2^0 = 3z^2 - r^2, \quad P_2^2 = x^2 - y^2, \quad P_4^0 = 35z^4 - 30r^2z^2 + 3r^4,$$

$$P_4^2 = (7z^2 - r^2)(x^2 - y^2), \quad P_4^3 = xz(x^2 - 3y^2), \quad P_4^4 = x^4 - 6x^2y^2 + y^4.$$

5. Обращение времени

5.1. Антиунитарность оператора обращения времени

Обращение времени θ (*обращение направления движения*) заключается в изменении всех скоростей (в том числе и скоростей “собственных вращений”, спинов) системы на противоположные. Связь обращения времени и смещения во времени D_t :

$$\hat{D}_t = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \hat{H}t\right), \quad D_t\theta = c\theta D_{-t}, \quad |c|=1. \quad (5.1)$$

Если θ является элементом симметрии системы (не меняет гамильтониана), то, как обычно,

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n \rightarrow \hat{H}\theta\psi_n = E_n\theta\psi_n, \quad (5.2)$$

и

$$|(\theta x, \theta y)| = |(x, y)| \quad (5.3)$$

(сохраняется вероятность перехода между преобразованными состояниями). Равенство (5.3) имеет место для нормированных векторов, но распространяется по определению и на все другие векторы. Из него вытекает, что если $\{e_i\}$ — ортонормированный базис гильбертова пространства, то $\{\theta e_i\}$ — такой же базис. Если $x = \xi^i e_i$, то $\theta x = \xi^i \theta e_i$, причем $|\xi^i| = |\xi^i|$. Поскольку каждому состоянию отвечает целый набор векторов с произвольными фазами, можно воспользоваться этим произволом так, чтобы оператор θ стал линейным или антилинейным. Пусть

$$\theta f_i = \theta(e_1 + e_i) = c_1 \theta e_1 + c_i \theta e_i, \quad |c_1| = |c_i| = 1.$$

Снабдим θe_1 фазой 1, θe_i — фазой c_i / c_1 , θf_i — фазой c_1^{-1} , тогда для переопределенных состояний $\theta f_i = \theta e_1 + \theta e_i$. Умножая далее $\theta x = \xi^i \theta e_i$ на ξ^1 / ξ^1 (по модулю равное 1) и дополняя θx этой фазой, получим

$$\theta x = \xi^1 \theta e_1 + \xi^2 \theta e_2 + \xi^3 \theta e_3 + \dots, \quad |\xi^i| = |\xi^i| = |\xi^i|.$$

Согласно (5.3), $|(x, f_i)| = |(\theta x, \theta f_i)|$, т.е., $|\xi^1 + \xi^i| = |\xi^1 + \xi^i|$, или $\xi^1 * \xi^i + \xi^1 \xi^{i*} = \xi^1 * \xi^i + \xi^1 \xi^{i*}$. Умножая на ξ^{i*} и учитывая, что $|\xi^i|^2 = |\xi^i|^2$, получим для ξ^{i*} квадратное уравнение:

$$\xi^1 * (\xi^{i*})^2 - (\xi^1 * \xi^i + \xi^1 \xi^{i*}) \xi^{i*} + \xi^1 |\xi^i|^2 = 0;$$

откуда $\xi^{i*} = \xi^i$, либо $\xi^{i*} = \xi^i * (\xi^1 / \xi^{1*})$. (5.4)

В первом случае оператор θ оказывается линейным и унитарным, а во втором (после вторичного дополнения θx фазой ξ^{1*}/ξ^1) — антилинейным и антиунитарным:

$$\theta x = \xi^{i*} \theta e_i, \theta(\alpha x + \beta y) = \alpha^* \theta x + \beta^* \theta y, (\theta x, \theta y) = \sum_i \xi^i \eta^{i*} = (x, y)^* = (y, x). \quad (5.5)$$

Применяя соотношение (5.1) к произвольному состоянию, разложенному по стационарным состояниям, $\Psi = \sum a_n \varphi_n$, и предполагая линейность оператора θ , мы приходим к противоречию (неравенству), поэтому для оператора обращения времени может выполняться лишь вторая из возможностей (5.4), т.е., θ — антиунитарный оператор.

Оператор комплексного сопряжения меняет компоненты вектора (в любом базисе) на комплексно-сопряженные: $K\psi = \psi^*$, $K^2 = 1$. **Нормальная форма антиунитарного оператора:** $\theta = UK$, где U — унитарный оператор.

$$\theta^2 = UKUK = UU^* = cE \rightarrow U = c\tilde{U} \rightarrow c = \pm 1, \theta^2 = \pm 1. \quad (5.6)$$

5.2. Различные представления оператора обращения времени

Существует два класса физических величин по отношению к обращению времени: для первого класса (например, координаты) вероятность определенного значения величины одинакова в состояниях ψ и $\theta\psi$, а для второго (скорости) — одинакова вероятность противоположных значений. Операторы соответственно удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям

$$\theta q = q\theta, \theta p = -p\theta \quad (5.7)$$

(Т-четные и Т-нечетные операторы). В шредингеровском представлении, в котором оператор координаты соответствует просто умножению, а оператор импульса $p_x = -i\hbar\partial/\partial x$, унитарный оператор U в $\theta = UK$ коммутирует с x , p_x , т.е., он не зависит ни от координат, ни от импульсов, и, если не учитывать спина, то можно положить

$$U = 1, \theta = K, \theta\psi = \psi^*. \quad (5.8)$$

Чтобы установить, как действует U на спиновые координаты, применим соотношение (5.7) ко всем спиновым операторам в обычном представлении ($s_{i\alpha} = \sigma_{i\alpha}/2$, i — “номер электрона”). Тогда

$$Us_{ix} = -s_{ix}U, Us_{iz} = -s_{iz}U, Us_{iy} = s_{iy}U. \quad (5.9)$$

Отсюда с точностью до фазы получаем $U = \sigma_{1y} \times \sigma_{2y} \times \dots \times \sigma_{ny}$. Фазу выберем так, чтобы оператор U стал вещественным; тогда (опуская знак прямого умножения)

$$\theta = (-i)^n \sigma_{1y} \sigma_{2y} \dots \sigma_{ny} K, \quad (5.10)$$

$$\text{и} \quad \theta^2 = 1 \quad (n - \text{четное}), \quad \theta^2 = -1 \quad (n - \text{нечетное}). \quad (5.11)$$

Поскольку $-i\sigma_y$ соответствует повороту на π около оси y в спиновом пространстве, (5.10) можно переписать еще в виде

$$\theta = D_S(0, \pi, 0)K. \quad (5.12)$$

Аналогичное выражение:

$$\theta = D(0, \pi, 0)K = \exp(-i\pi J_y)K, \quad (5.12a)$$

оказывается удобным при использовании JM -представления. Имея в виду соотношение

$D_{m'm}^{(j)}(0, \pi, 0) = \delta_{m', -m} (-1)^{j-m}$ (ср.(4.26)), можно записать:

$$\theta \sum_{JM} a_{JM} |JM\rangle = \sum_{JM} a_{JM}^* (-1)^{J-M} |J, -M\rangle. \quad (5.12b)$$

5.3. Определение копредставлений

Перестановочность оператора θ с операторами пространственных преобразований:

$$\theta I = I\theta, \quad \theta D(g) = D(g)\theta, \quad g \in \text{SU}(2) (\mathbb{R}_3), \quad (5.13)$$

так как

$$D(0, \pi, 0)D^*(g) = D(g)D(0, \pi, 0).$$

Особенность полной группы операторов симметрии квантовомеханической системы, включающей обращение времени, заключается в том, что часть (половина) этих операторов являются антиунитарными:

$$G_\theta = G + \theta G, \quad G = \{D(g)\},$$

g — пространственные операции. Правила умножения операторов в группе определяются (5.13) и (5.11), в частности, $\theta D(g_1)\theta D(g_2) = -D(g_1 g_2)$, если система содержит нечетное число частиц с полуцелым спином.

Вследствие указанной особенности матрицы операторов G_θ не образуют представления этой группы, ибо обычное правило умножения матриц операторов имеет место только для линейных операторов. Для группы G_θ :

$$\begin{aligned} D(u_1 u_2) &= D(u_1)D(u_2), & D(ua) &= D(u)D(a), & D(au) &= D(a)D^*(u), \\ D(a_1 a_2) &= D(a_1)D^*(a_2), & u &\in G, & a &\in \theta G. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Соответствие $g \rightarrow D(g)$, при котором матрицы $D(g)$ удовлетворяют уравнениям (5.14), называют *копредставлением*. Эквивалентные копредставления:

$$\bar{D}(u) = S^{-1}D(u)S, \quad \bar{D}(a) = S^{-1}D(a)S^*. \quad (5.15)$$

Приводимость и неприводимость определяются как для обычных представлений.

Неприводимые копредставления (НКП) могут быть как приводимыми, так и неприводимыми представлениями унитарной подгруппы. Здесь различаются три случая:

- 1) Если $D(u) \propto D^*(u) = C^{-1}D(u)C$, и $CC^* = D(\theta^2)$ ($= \pm 1$), то НКП содержит только одно НП $D(u)$ унитарной подгруппы.
- 2) Если $D(u) \propto D^*(u)$, и $CC^* = -D(\theta^2)$, то НКП содержит $D(u)$ дважды.
- 3) Если $D(u)$ неэквивалентно $D^*(u)$, то НКП содержит $D + D^*$.

Доказательство. Пусть $\Delta(u)$ — НП G наименьшей размерности, содержащееся в НКП; базис $\Delta(u)$ — e_1, e_2, \dots, e_l . Тогда $\theta e_1, \dots, \theta e_l$ — базис НП $\Delta^*(u)$, а линейная оболочка $\{e_i, \theta e_i\}$ инвариантна относительно всех $u, a \in G_\theta$. Отсюда сразу вытекает, что, во-первых, возможны только указанные выше три типа разложения НКП по НП G , во-вторых, справедливо третье утверждение. Функции θe_i либо все выражаются через e_i , $L\{e_i, \theta e_i\} = L\{e_i\}$, либо все линейно независимы с $\{e_i\}$, поскольку в противном случае имелось бы подпространство меньшей, чем l , размерности ($L\{e_i, \theta e_i\} - L\{e_i\}$), инвариантное относительно $u \in G$. Если $\theta e_i = \sum D_{ij}(\theta)e_j$, то $\Delta^*(u) = D^{-1}(\theta)\Delta(u)D(\theta)$, т.е., с точностью до фазы $C = D(\theta)$, и $CC^* = D(\theta)D^*(\theta) = D(\theta^2)$. Если θe_i независимы от e_i , то в

базисе $\{e_i, \theta e_i\}$ матрицы НКП $D(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\theta^2) \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$, $D(u) = \begin{pmatrix} \Delta(u) & 0 \\ 0 & \Delta^*(u) \end{pmatrix}$, а в базисе

$\{e_i, \hat{C}^{-1}\theta e_i\}$ $u \rightarrow \begin{pmatrix} \Delta(u) & 0 \\ 0 & \Delta(u) \end{pmatrix}$, $\theta \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & \Delta(\theta^2)\hat{C}^* \\ \hat{C} & 0 \end{pmatrix}$. Допуская, что $CC^* = \Delta(\theta^2)$, получим

$D(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & \hat{C} \\ \hat{C} & 0 \end{pmatrix}$, но такая матрица может быть приведена ортогональным

преобразованием $S = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} & \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} \\ -\frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} & \frac{1}{\sqrt{2}}\hat{E} \end{pmatrix}$, не меняющим вида $D(u)$, и мы возвращаемся к

случаю 1). Если же $CC^* = -\Delta(\theta^2)$, то $D(\theta) = \begin{pmatrix} 0 & -\hat{C} \\ \hat{C} & 0 \end{pmatrix}$, и она может быть приведена

только при помощи комплексной матрицы S , и условие эквивалентности (5.15) при этом не будет удовлетворяться. Как видно, типы НКП полностью определяются свойствами неприводимых унитарных представлений.

5.4. Теорема Крамерса

Теорема Крамерса утверждает, что, если $\theta^2 = -1$, $H\theta = \theta H$, то каждый уровень энергии по крайней мере двукратно вырожден. Теорема вытекает из соотношений

$$(\psi_n, \theta\psi_n) = (\theta^2\psi_n, \theta\psi_n) = -(\psi_n, \theta\psi_n) = 0.$$

Состояния ψ и $\theta\psi$ при $\theta^2 = -1$ называются **крамерсово-сопряженными состояниями**.

Для Т-четных (q) и Т-нечетных (p) операторов:

$$(\psi, q\theta\psi) = 0, (\psi, q\psi) = (\theta\psi, q\theta\psi), (\psi, p\psi) = -(\theta\psi, p\theta\psi). \quad (5.16)$$

5.5. Правила отбора матричных элементов, связанные с обращением времени

Рассмотрим “диагональный” матричный элемент (на функциях, относящихся к одному уровню): $Y_{ik,j} = (\psi_i^{(\alpha)}, O_j^{(\beta)}\psi_k^{(\alpha)})$, причем $\Gamma_\alpha \propto \Gamma_\alpha^*$. Как мы видели в п. 3.4, при пространственных операциях симметрии $Y_{ik,j}$ преобразуются согласно представлению $\Gamma_\alpha^2 \times \Gamma_\beta$. Вместо $Y_{ik,j}$ удобно рассмотреть матричные элементы $Z_{ik,j} = (\theta\psi_i^{(\alpha)}, O_j^{(\beta)}\psi_k^{(\alpha)})$, линейно связанные с $Y_{ik,j}$:

$$Z_{ik,j} = (\theta O_j^{(\beta)}\psi_k^{(\alpha)}, \theta^2\psi_i^{(\alpha)}) = \varepsilon_\theta \varepsilon_O (\theta\psi_k^{(\alpha)}, O_j^{(\beta)}\psi_i^{(\alpha)}) = \varepsilon_\theta \varepsilon_O Z_{ki,j},$$

где $\varepsilon_\theta = \pm 1$ при $\theta^2 = \pm 1$, $\varepsilon_O = \pm 1$ в зависимости от типа оператора O относительно обращения времени. Таким образом,

$$Z_{ik,j} = \frac{1}{2}(Z_{ik,j} + \varepsilon_\theta \varepsilon_O Z_{ki,j}),$$

т.е., матричные элементы $Z_{ik,j}$ фактически образуют базис представления $[\Gamma_\alpha^2] \times \Gamma_\beta$ или $\{\Gamma_\alpha^2\} \times \Gamma_\beta$ при $\varepsilon_\theta \varepsilon_O = +1$ или -1 , соответственно. Поэтому правила отбора в этих случаях требуют, чтобы $\Gamma_\beta \in [\Gamma_\alpha^2]$ или $\Gamma_\beta \in \{\Gamma_\alpha^2\}$ вместо более широкого требования п.3.4. $\Gamma_\beta \in \Gamma_\alpha^2$. Отметим, что здесь Γ_α — не обязательно неприводимое представление; это может быть, например, неприводимое копредставление второго и третьего типов.

5.6. Формализм спиновых гамильтонианов

Спиновые гамильтонианы используются для описания спектров систем с ограниченным числом $r = 2S + 1$ (S — “эффективный спин”) состояний. С подобного рода системами приходится иметь дело, например, в магнитном резонансе; парамагнитные ионы в кристаллических полях часто обладают невырожденным основным орбитальным уровнем, удаленным от возбужденных уровней интервалом порядка сотен см^{-1} . Магнитные свойства системы определяются группой спиновых

состояний иона, их расщеплением в кристаллическом и магнитном полях. В этом случае эффективный спин системы совпадает с истинным спином иона, что, собственно, и оправдывает название *спиновый гамильтониан*.

Формально любой эрмитов оператор в r -мерном пространстве может быть представлен в виде конечной суммы “спиновых операторов” S_α и их степеней (симметризованных) до $r - 1$ включительно:

$$\hat{H} = a_0 + a_\alpha S_\alpha + a_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta + \dots \quad (5.17)$$

Диагонализированный оператор определяется r собственными значениями или числами a_z в выражениях

$$\hat{H}_d = a_0 + a_z^{(1)} S_z + a_z^{(2)} S_z^2 + \dots + a_z^{(r-1)} S_z^{r-1}.$$

Однако определенные конструктивные заключения о форме гамильтониана можно сделать лишь в случае, когда известны свойства преобразований “спиновых” состояний при преобразованиях в физическом пространстве и обращении времени. Гамильтониан системы упрощается при наличии той или иной симметрии, ибо он должен быть инвариантен относительно соответствующих поворотов, а также обращения времени с изменением знака внешнего магнитного поля. Если S — истинный спин, множество состояний его преобразуется по представлению $D^{(S)}$, и нечетные степени его компонент могут входить в гамильтониан лишь в комбинации с магнитным полем. Ограничиваясь линейными по магнитному полю членами и не учитывая общий сдвиг уровней спинового мультиплетта, представим гамильтониан для спина $S = 1$ (и $3/2$) в виде

$$\hat{H} = g_{\alpha\beta} H_\alpha S_\beta + D_{\alpha\beta} S_\alpha S_\beta,$$

где тензор $g_{\alpha\beta}$ и симметричный бесследный тензор $D_{\alpha\beta}$ должны быть инвариантами точечной группы симметрии позиции парамагнитного центра. В случае $S = 2, 5/2$ добавляются слагаемые четвертого порядка по S_α , а при $S = 3, 7/2$ — шестого. В нулевом магнитном поле спиновый гамильтониан является эквивалентным спиновым оператором для потенциала кристаллического поля. Матричные элементы кристаллического поля не обращаются точно в нуль, поскольку действующее как возмущение спин-орбитальное взаимодействие слегка примешивает к спиновым состояниям орбитальные состояния с той же симметрией.

Рассмотрим еще спиновые гамильтонианы для крамерсовых дублетов; в этом случае эффективный спин $S = 1/2$, $\theta^2 = -1$, и можно произвольно выбрать пару взаимно-

ортогональных состояний ψ и $\theta\psi$ в качестве собственных векторов оператора S_z . Операторы S_x, S_y, S_z меняют знак при обращении времени, и гамильтониан имеет вид:

$$\hat{H} = g_{\alpha\mu} H_{\alpha} S_{\mu}.$$

Произвол в выборе “ориентаций” в спиновом пространстве можно использовать для диагонализации “тензора” $g_{\alpha\mu}$ даже в отсутствие пространственной симметрии. “Спиновый” базис $\psi, \theta\psi$ можно менять с помощью унитарных преобразований из $SU(2)$, однако сопоставлять их можно только с теми вращениями в физическом пространстве (группа R_3), которые принадлежат группе симметрии $G \subset R_3$ парамагнитного иона в отсутствие магнитного поля и относительно которых поэтому пространство $\{\psi, \theta\psi\}$ инвариантно. Повороты из R_3 , не принадлежащие группе симметрии G , переводят состояния $\psi, \theta\psi$ в возбужденные состояния.

При наличии симметрии G гамильтониан должен быть инвариантен относительно соответствующих поворотов магнитного поля H и одновременных поворотов в двумерном пространстве. Последним отвечают трехмерные повороты “вектора” S и появляется возможность согласования “координат” в спиновом пространстве с системой координат физического пространства. Если Z — главная ось группы G порядка n , выберем функции $\psi, \theta\psi$ так, что $\hat{D}(C_n)\psi = e^{-i\alpha}\psi, \hat{D}(C_n)\theta\psi = e^{i\alpha}\theta\psi$ (α — половина угла поворота), тем самым фиксируя ось Z спинового пространства; $\sigma_3/2 = S_z$. При таком выборе $g_{z1} = g_{z2} = g_{xz} = g_{yz} = 0$. Если других преобразований симметрии нет, то остается произвол в выборе одной из осей 1,2 (x, y) в спиновом пространстве. При наличии оси второго порядка, перпендикулярной к главной, выберем ее за ось Y , так что

$$\hat{D}(C_2^y)\psi = -\hat{D}(C_2^y)\theta\psi = K\theta\psi, \hat{D}(C_2^y)\theta\psi = -K\psi,$$

т.е., в базисе $\{\psi, \theta\psi\}$ $\hat{D}(C_2^y) = -i\sigma_2$, и, таким образом,

$D'(C_2^y)S_z = -S_z, D'(C_2^y)S_x = -S_x$. Тем самым тензор $g_{\alpha\mu}$ автоматически становится симметричным и диагональным; если же $n \geq 3$, то $g_{xx} = g_{yy} = g_{||}$.

Задачи к разделу 5

1. Каков вид оператора обращения времени в импульсном представлении (без учета спина)?
2. Показать, что матрицы антиунитарных операторов унитарны.

3. Показать, что матрица $D(\theta)$ симметрична или антисимметрична в зависимости от четности числа электронов.
4. Убедиться в том, что все неприводимые копредставления при наличии вращательной симметрии относятся к первому типу (иными словами, в этом случае симметрия относительно обращения времени не приводит к дополнительному вырождению).
5. Исследовать неприводимые копредставления при наличии осевой симметрии (C_∞ , $C_{\infty v}$).
6. Какие из следующих операторов являются T-четными и T-нечетными: $(s_1 \cdot s_2)(p \cdot r)$, $(r \cdot s)$, $(r \cdot s_1)(r \cdot s_2)$, $(p \times r) \cdot s$?
7. Возможен ли линейный эффект Штарка для систем, обладающих симметрией R_3 , O , T_d ?

6. Пространственные группы и их представления

6.1. Определение пространственной группы

Произвольный элемент группы движений трехмерного евклидова пространства можно представить в виде $g = t_a r = (a | r)$, где t_a — трансляция на вектор a , r — простой или зеркальный поворот. Преобразование g называется **винтовым вращением**, если r — простой поворот, а вектор a параллелен оси поворота, которую в этом случае называют **винтовой осью**. **Скользящее отражение** — $g = t_a \sigma$, когда a параллельно плоскости отражения (**плоскости скольжения**). Сопряженные элементы (ср. п.1.5):

$$g t_a g^{-1} = t_{\hat{g}a}, \quad t_a R(n, \varphi) t_{-a} = R(\hat{t}_a n, \varphi).$$

При этом надо иметь в виду, что $\hat{t}_a a = a$ (начало вектора a не закреплено).

Произведение элементов:

$$g_1 g_2 = (a_1 | r_1)(a_2 | r_2) = (a_1 + \hat{r}_1 a_2 | r_1 r_2). \quad (6.1)$$

Отметим еще, что поворот с последующей трансляцией на вектор, перпендикулярный оси, является поворотом около параллельной оси:

$$(a | R(n, \varphi)) = R(n', \varphi), \quad n' = \hat{t}_a n, \quad (6.2)$$

причем вектор сдвига a' повернут относительно a на угол $(\pi - \varphi)/2$ вокруг оси n , а по величине он равен $(a/2)\sec(\varphi/2)$. Отражение в плоскости с последующей трансляцией на вектор a , перпендикулярный плоскости, является отражением в плоскости, отстоящей от исходной на $a/2$. Эти замечания позволяют использовать в стандартном представлении элементов группы движений $g = tr$ множество поворотных элементов r , оставляющих неподвижной выделенную точку (начало координат). Группа движений оказывается полупрямым произведением подгруппы трансляций и ортогональной подгруппы.

Пространственные группы — группы самосовмещений бесконечных идеальных кристаллов; они являются подгруппами группы движений евклидова пространства. Основное свойство пространственных групп — наличие дискретной подгруппы трансляций $T = \{t_a\}$ на вектора $a = m_1 a_1 + m_2 a_2 + m_3 a_3$ (m_i — целые числа). T — абелева группа с образующими $t_{a_1}, t_{a_2}, t_{a_3}$; она изоморфна векторной группе $T = \{a\}$.

a_1, a_2, a_3 — базисные векторы кристаллической решетки, параллелепипед, построенный на них, называется *основным параллелепипедом (элементарной ячейкой)*. *Решетка Бравэ* — совокупность точек $t_a O$ (*узлов Бравэ*), где O — произвольная точка. *Простая кристаллическая решетка* (один атом на элементарную ячейку) по форме совпадает с решеткой Бравэ; сложную кристаллическую решетку можно рассматривать как состоящую из вдвинутых одна в другую решеток Бравэ.

Произвол в выборе основного параллелепипеда: одно из ребер может быть направлено вдоль любого $a \in T$, одна грань может лежать в произвольной плоскости, содержащей a и $b \neq \lambda a$. Объем основного параллелепипеда $\Omega_0 = |a_1(a_2 \times a_3)|$ не зависит от выбора базисных векторов (задача 5).

6.2. Типы решеток Бравэ

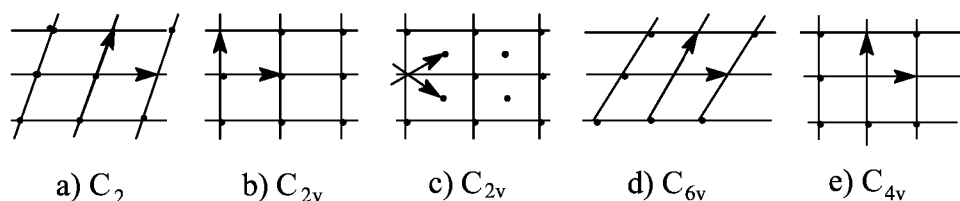
Точечная группа симметрии K решетки Бравэ (векторной группы T) — совокупность поворотов и зеркальных поворотов (с центром на некотором узле), совмещающих решетку Бравэ с собой. Необходимое и достаточное условие того, что $r \in K$ (*условие совместности* поворотов и трансляций):

$$r a_j = \sum r_{ij} a_i, \quad r_{ij} — \text{целые числа.} \quad (6.3)$$

Инверсия $I \in K$. Возможные оси симметрии K : $n = 2, 3, 4, 6$. (Действительно, $\text{Sp } r = 1 + 2\cos(2\pi/n)$, с другой стороны, согласно (6.3), это должно быть целое число.) Вместе с осью симметрии при $n = 3, 4, 6$ группа K содержит и плоскость отражения σ_v (задача 7). Эти замечания ограничивают число возможных групп K семью; *кристаллические сингонии* (системы векторных групп T) характеризуются соответствующей группой K : *триклинная* T (S_2), *моноклинная* M (C_{2h}), *ромбическая* (или *ортогональная*) O (D_{2h}), *ромбоэдрическая* (или *тригональная*) R (D_{3d}), *тетрагональная* (или *квадратная*) Q (D_{4h}), *гексагональная* H (D_{6h}), *кубическая* C (O_h).

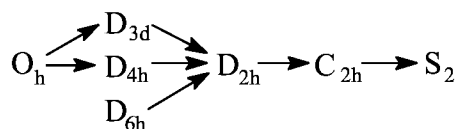
Однотипные решетки Бравэ относятся к одной сингонии и могут быть получены друг из друга непрерывной деформацией без понижения симметрии. Решетки Бравэ можно получить прямым построением систем узлов в плоскостях, перпендикулярных “главной” оси и проходящих через две ближайшие точки на этой оси, после чего исследуется возможность размещения других плоскостей между этими двумя. Параллельные линии узлов (или плоскости узлов) изоморфны, поскольку могут быть получены друг из друга сдвигом на вектор решетки. Существует 5 типов плоских

решеток, изображенных на рисунке, относящихся к четырем плоским сингониям — C_2 , C_{2v} , C_{4v} , C_{6v} (движениям плоскости).



В пространственных решетках моноклинной сингонии плоскости, перпендикулярные оси C_2 , выглядят подобно рис. а). Простая моноклинная решетка Γ_m получается, если между плоскостями, проведенными через ближайшие узлы на оси C_2 , нет других плоскостей. В базоцентрированной решетке Γ_m^b посередине между этими двумя плоскостями размещается еще одна, причем ось C_2 может проходить через точки этой третьей плоскости, лежащие в центре ячейки или делящие пополам базисные векторы плоскости. Всего имеется 14 типов решеток Бравэ: Γ_i ; Γ_m , Γ_m^b ; Γ_o , Γ_o^b , Γ_o^v , Γ_o^f ; Γ_q , Γ_q^v ; Γ_c , Γ_c^v , Γ_c^f ; Γ_{rh} ; Γ_h , где нижний индекс означает сингонию. Интернациональная символика решеток включает обозначение группы К, которому предшествуют буквы P , F , I , A , B , C . Например, $\Gamma_i \equiv P\bar{1}$, $\Gamma_c^f \equiv Fm\bar{3}m$, $\Gamma_m^b \equiv A2/m$. Описание всех решеток, различные их обозначения см. в книге Ковалева (1986) (см. также Бир и Пикус, 1972). Для всех сингоний, за исключением гексагональной, вышеуказанное построение позволяет получить **параллелепипед Бравэ**, обладающий симметрией сингонии К и ребра которого являются векторами решетки. Для **простых решеток** Бравэ (без верхних индексов, или первая буква P в международных обозначениях) параллелепипед Бравэ совпадает с элементарной ячейкой. В **базоцентрированных решетках** (индекс b , или A, B, C) имеются узлы в центрах двух противоположных граней параллелепипеда Бравэ, в **границентрированных** (f, F) — в центрах всех граней, в **объемноцентрированных** (v, I) — в центре параллелепипеда. Каждый тип решетки характеризуется параметрами, задающими размеры соответствующего параллелепипеда Бравэ. Кубические решетки — однопараметрические (величина ребра куба), тригональные и тетрагональные решетки — двухпараметрические и т.д.

Понятие о **подчинении систем**: система А подчиняет В ($A \rightarrow B$), если $K_B \subset K_A$ и каждый тип решетки системы А может быть переведен в один из типов В бесконечно малой деформацией. Схема подчинения сингоний:

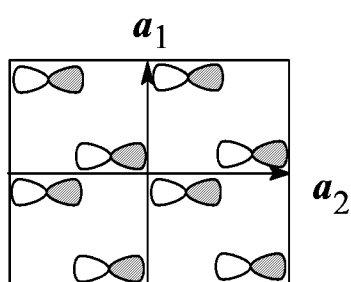


6.3. Кристаллические классы. Неэлементарные трансляции

Пространственная группа сложных кристаллов может и не содержать некоторые элементы сингонии K . Так будет, если “молекула”, помещенная в элементарную ячейку (или параллелепипед Бравэ), обладает симметрией ниже K . **Кристаллическим классом** называют подгруппу $F \subset K$, элементы которой переводят каждое направление в кристалле в эквивалентное ему. Существует 32 кристаллических класса по числу подгрупп семи сингоний K . Они распределяются по сингониям по принципу (“по одежке протягивай ножки”): F относится к K , если $F \subset K$, но не содержится в подчиненной сингонии. Отметим, что классы сингонии D_{3d} должны быть повторены и в D_{6h} , поскольку D_{3d} не подчинено D_{6h} .

| Сингонии | Классы |
|-------------|--|
| T, S_2 | C_1, S_2 |
| M, C_{2h} | C_2, C_s, C_{2h} |
| O, D_{2h} | C_{2v}, D_2, D_{2h} |
| Q, D_{4h} | $C_4, S_4, C_{4h}, C_{4v}, D_{2d}, D_4, D_{4h}$ |
| R, D_{3d} | $C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d}$ |
| H, D_{6h} | $C_{3h}, C_6, C_{6h}, D_{3h}, C_{6v}, D_6, D_{6h}$ |
| C, O_h | T, T_h, T_d, O, O_h |

Кристаллический класс (группа симметрии направлений) определяет **макроскопическую симметрию** кристалла. В результате поворота (или зеркального поворота) $r \in F$ кристалл может и не совместиться с собой: решетка Бравэ, конечно, перейдет в себя, но “молекулы” в ячейках (эквивалентные точки) могут оказаться



смещенными относительно исходных позиций, так что для совмещения кристалла поворот r необходимо дополнить “неэлементарной” трансляцией t_{ar} .

Простой иллюстрацией ситуации является двумерный кристалл, изображенный на рисунке. Прямоугольная решетка относится к сингонии C_{2v} , но элементы группы C_2 и $\sigma^{(1)}$ (отражение относительно вертикальной линии) не входят в пространственную группу, поскольку здесь направления вправо и влево неэквивалентны. “Кристаллический класс” составляет подгруппа $(e, \sigma^{(2)})$, связывающая пары эквивалентных направлений, симметричных относительно отражения в

горизонтальной линии. Для самосовмещения кристалла после отражения необходимо совершить трансляцию на половину базисного вектора \mathbf{a}_2 .

Векторы α_r определены с точностью до вектора решетки, что позволяет выбрать их в виде:

$$\alpha_r = \alpha_r^1 \mathbf{a}_1 + \alpha_r^2 \mathbf{a}_2 + \alpha_r^3 \mathbf{a}_3, \quad 0 \leq \alpha_r^i < 1.$$

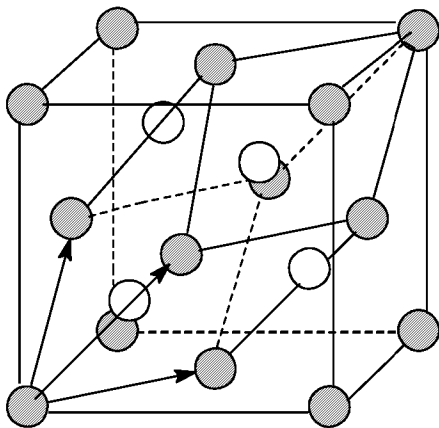
Таким образом, структура пространственной группы определяется типом решетки (базисными векторами, решеткой Бравэ), кристаллическим классом F , неэлементарными трансляциями α_r , отвечающими каждому из элементов F .

$$G = T \oplus \sum_{r \neq e} t_{\alpha_r} r T, \quad G/T \propto F. \quad (6.4)$$

Структура группы F накладывает определенные условия на векторы α_r :

$$\alpha_{r_1 r_2} = \alpha_{r_1} + r_1 \alpha_{r_2} + \mathbf{a}, \quad \mathbf{a} \in T. \quad (6.5)$$

Эти условия ограничивают общее число пространственных групп до 230. Обозначаются пространственные группы символом класса F с верхним индексом, различающим тип решетки и набор неэлементарных трансляций для образующих элементов группы F . Например, C_s^1 соответствует кристаллу класса C_s с простой моноклинной решеткой и нулевой трансляцией $\alpha_\sigma = (000)$; C_s^2 — то же с трансляцией $(\frac{1}{2}00)$; C_s^3 — кристалл класса C_s с базоцентрированной моноклинной решеткой и нулевой трансляцией α_σ , и т.д. Используются также международные обозначения — в символе решетки вращение n , сопровождаемое неэлементарной трансляцией вдоль оси



вращения на $(p/n)\mathbf{a}_\parallel$ (винтовое вращение; \mathbf{a}_\parallel — минимальный вектор решетки, направленный вдоль оси, p — целое число, $p < n$) снабжается индексом p . Плоскость скольжения обозначается буквами a, b, c, n, d вместо m в зависимости от направления неэлементарного вектора скольжения \mathbf{a}_\parallel по отношению к ребрам ячейки Бравэ. Так, $C_s^1 \equiv Pm$ (номер 6 из 230 групп), $C_s^2 \equiv Pb$ (7), $C_2^2 \equiv P2_1$ (4), $C_{2h}^4 \equiv P2_1/m$ (11).

Рассмотрим подробнее пространственную группу O_h^7 ($\equiv Fd\bar{3}m$, №227); она описывает, например, структуру алмаза, изображенную на рисунке: кубическая гранецентрированная решетка (узлы помечены темными кружками) с основными векторами $\mathbf{a}_1 = (a/2)(110)$, $\mathbf{a}_2 = (a/2)(101)$, $\mathbf{a}_3 = (a/2)(011)$, a — ребро куба Бравэ; объем элементарной ячейки $a^3/4$. В решетку вдвинута точно такая же решетка с узлами

(светлые кружки), отстоящими от ближайших узлов исходной решетки на расстоянии в четверть пространственной диагонали куба [позиции $(a/4)(111)$]. Структура переходит в себя при всех преобразованиях подгруппы T_d (в качестве центральных точек можно выбрать как узлы решетки, так и центры кубов), тогда как инверсия относительно центра должна сопровождаться неэлементарной трансляцией $\alpha_I = (a/4)(111)$. Ввиду условия (6.5) ту же трансляцию мы должны приписать и остальным элементам группы O_h , входящим в смежный класс Γ_d . Отметим, что можно воспользоваться соотношением (6.2) для переопределения системы векторов неэлементарных трансляций. Если, например, перенести центр на середину расстояния между узлами двух подрешеток, неэлементарная трансляция для инверсии обратится в нуль.

6.4. Унитарные НП группы трансляций

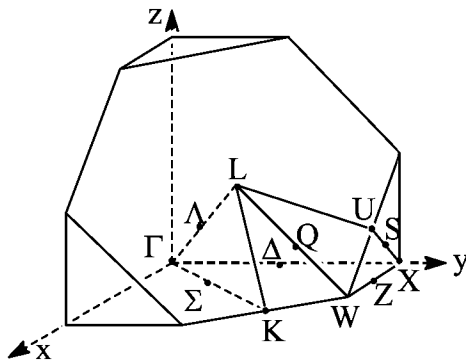
Абелева группа трансляций обладает лишь одномерными НП: $D_{\mathbf{k}}(\mathbf{a}) = \exp[-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}] = \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})$, где вектор \mathbf{k} определяется условиями $(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) = f(\mathbf{a}_i)$. Неоднозначность выбора \mathbf{k} : векторы \mathbf{k} и \mathbf{k}' соответствуют одному и тому же представлению, $D_{\mathbf{k}'} = D_{\mathbf{k}}$, если они отличаются на вектор \mathbf{b} , $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{b}$, удовлетворяющий условиям $\mathbf{b} \cdot \mathbf{a} = 2\pi m$ (m — целое) для всех $\mathbf{a} \in T$. Представим \mathbf{b} в виде разложения по трем некопланарным векторам: $\mathbf{b} = n_1\mathbf{b}_1 + n_2\mathbf{b}_2 + n_3\mathbf{b}_3$, где

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega_0} \mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega_0} \mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega_0} \mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2. \quad (6.6)$$

Приведенные выше условия сводятся к требованию целочисленности координат (n_1, n_2, n_3) в этом базисе; векторы \mathbf{b} образуют решетку, называемую *обратной решеткой* (по отношению к исходной решетке Бравэ). Неэквивалентные друг другу НП группы трансляций описываются векторами \mathbf{k} , лежащими в пределах элементарной ячейки обратной решетки.

Обычно вместо основного параллелепипеда в качестве ячейки выбирают т.н. *зону Бриллюэна* (первую) — совокупность векторов \mathbf{k} , которые нельзя укоротить добавлением какого либо вектора обратной решетки. Для построения зон Бриллюэна “начальный” узел обратной решетки соединяют векторами со всеми другими узлами и через середину каждого вектора перпендикулярно ему проводят плоскость. Получающийся при этом внутренний многогранник и является первой зоной Бриллюэна. Аналогичное построение для прямой решетки дает т.н. *ячейку Вигнера-Зейтца*. Очевидно, точечные симметрии обратной и прямой решетки совпадают:

$K_{\text{обр}}=K$. Зона Бриллюэна обладает симметрией K (вся система векторов и плоскостей преобразованиями из K переводится в себя). Однако типы прямой и обратной решеток не обязаны совпадать; так, при обращении простой кубической решетки получается простая кубическая решетка, гранецентрированная кубическая решетка переходит в объемноцентрированную, и наоборот. На рисунке изображена восьмая часть зоны Бриллюэна для кубических гранецентрированных кристаллов и отмечены некоторые характерные точки (в обозначениях Боукарта-Вигнера-Смолуховского). Элементарные векторы обратной решетки:



$\mathbf{b}_1=(2\pi/a)(11-1)$, $\mathbf{b}_2=(2\pi/a)(1-11)$, $\mathbf{b}_3=(2\pi/a)(-111)$; размер элементарного куба $4\pi/a$. Отметим еще, что внешняя форма зоны Бриллюэна не полностью определяется типом решетки; зона может выглядеть по-разному в зависимости от степени вытянутости параллелепипедов Бравэ обратной решетки.

Каждая внутренняя точка зоны Бриллюэна отвечает вполне определенному НП группы трансляций кристаллической решетки $D_{\mathbf{k}}$; в частности, центр зоны соответствует тождественному представлению $D_0(\mathbf{a})=1$. В этом отношении определенной особенностью обладают границы зоны, поскольку противоположные грани удалены друг от друга как раз на вектор решетки (\mathbf{a}), и две точки \mathbf{k} и $\mathbf{k}'=\mathbf{k} + \mathbf{a}$ на этих гранях эквивалентны друг другу в том смысле, что они отвечают одному и тому же НП: $D_{\mathbf{k}}(\mathbf{a}) = D_{\mathbf{k}'}(\mathbf{a})$. Могут оказаться эквивалентными и более чем две точки, лежащие на ребрах и вершинах многогранника, ограничивающего зону Бриллюэна.

6.5. Теорема Блоха

Теорема Блоха утверждает, что представление $D_{\mathbf{k}}$ группы трансляций осуществляется функцией $f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ тогда и только тогда, когда она имеет вид:

$$f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (6.7)$$

где $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — произвольная периодическая функция: $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{a}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$. Действительно, если $\hat{D}(\mathbf{a})f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}-\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, то $\hat{D}(\mathbf{a})e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}-\mathbf{a})} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}-\mathbf{a}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, т.е., функция $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} f_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ — периодическая; она преобразуется по тождественному представлению группы решеточных трансляций. Функцию (6.7) называют также **блеховской функцией**; она является функцией симметрии для группы трансляций. В пределе, когда

базисные вектора $\mathbf{a}_i \rightarrow 0$, $u(\mathbf{r}) = \text{const}$, и блоховская функция становится гармонической функцией — собственной функцией оператора импульса (инфинитезимального оператора сдвига). Представление произвольной функции в виде комбинации блоховских функций является аналогом разложения в ряд Фурье.

Если гамильтониан системы обладает трансляционной симметрией, то можно стационарные состояния описывать индексом НП группы трансляций \mathbf{k} (даже если трансляции составляют лишь часть полной группы симметрии) и представить соответствующие функции в виде блоховских функций. Как обычно, при использовании функций симметрии гамильтониан оказывается диагональным по индексу \mathbf{k} (согласно лемме Шура), в матрице его выделяются блоки $H_{\mathbf{k}}$, соответствующие каждому значению \mathbf{k} , и дальнейшее решение уравнения Шредингера сводится к диагонализации этих блоков: $H_{\mathbf{k}}u_{n\mathbf{k}} = E_n(\mathbf{k})u_{n\mathbf{k}}$. В одноэлектронных задачах индекс n соответствует “зонам” спектра $E_n(\mathbf{k})$, в теории нормальных колебаний решетки — “ветвям” (или модам) колебаний. В отдельных точках зоны Бриллюэна возможно вырождение “зон”, связанное с более высокой, нежели чисто трансляционная, симметрией решеток.

6.6. Представления пространственных групп

Любое одномерное представление $g \rightarrow D(g)$ пространственной группы для подгруппы трансляций является приводимым. **Звезда представления** пространственной группы $D(g)$ — совокупность неэквивалентных между собой волновых векторов \mathbf{k} (“лучей” звезды), входящих в разложение

$$D(t_{\mathbf{a}}) = D_{\mathbf{k}1}(\mathbf{a}) + D_{\mathbf{k}2}(\mathbf{a}) + \dots + D_{\mathbf{k}s}(\mathbf{a}). \quad (6.8)$$

Каждый луч \mathbf{k} в этом разложении может встретиться несколько раз; пространство представления разбивается на собственные подпространства $L_{\mathbf{k}}$ операторов $D(t_{\mathbf{a}})$, относящиеся к собственным значениям $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}$. Звезда представления инвариантна относительно пространственной группы:

$$\begin{aligned} D(t_{\mathbf{a}})D(g)e_{\mathbf{k}} &= D(g)D(t_{g^{-1}\mathbf{a}})e_{\mathbf{k}} = \exp(-i\mathbf{k}\cdot g^{-1}\mathbf{a})D(g)e_{\mathbf{k}} = \\ &= \exp(-ig\mathbf{k}\cdot\mathbf{a})D(g)e_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (6.9)$$

т.е., вместе с лучом \mathbf{k} звезда содержит и луч $g\mathbf{k}$, где g — любой элемент группы (удобно считать, что любые трансляции не меняют волнового вектора, как и вектора решетки, $i\mathbf{k}=\mathbf{k}$). **Звезда неприводимая**, если все лучи ее получаются из одного преобразованиями

пространственной группы (фактически, поворотами из кристаллического класса); поэтому ее можно обозначить одним лучом, $\{k\}$. *Приводимые звезды* расщепляются на несколько неприводимых; соответственно, пространство представления разбивается в сумму подпространств, относящихся к этим неприводимым звездам. Каждое из этих подпространств, как вытекает из (6.9), инвариантно относительно всех операторов представления. Таким образом, звезда НП — неприводима. Звезда приводимого представления также может быть неприводимой (например, если оно составлено из одинаковых НП).

Группа волнового вектора k : $G_k \subset G$, $g_k k = k + b$. G_k содержит все трансляции T , фактор-группа $G_k/T \propto F_k \subset F$.

Рассмотрим представление $D(g)$ с неприводимой звездой $\{k\}$. Подпространство L_k , в соответствии с (6.9), инвариантно относительно всех операторов $D(g_k)$, $g_k \in G_k$, т.е., на этом подпространстве индуцируется представление группы волнового вектора k , называемое *малым представлением*, $D(g_k) \rightarrow D^k(g_k)$. Представление $D(g)$ может быть восстановлено по малому представлению следующим образом:

Пусть $e_1^{(1)}, e_2^{(1)}, \dots, e_\mu^{(1)}$ — базис L_k (малого представления D^k), $\{g_j\}$ — некоторое множество элементов, порождающих звезду $\{k\}$: $g_j k = k_j$, $j = 2, \dots, l$, l — число лучей звезды. Отметим, что пространственная группа может быть представлена в виде следующей суммы смежных классов:

$$G = G_k + g_2 G_k + \dots + g_l G_k.$$

Исходя из базиса $\{e_\nu^{(1)}\} \subset L_k$ построим систему базисных векторов всего пространства $L = L_k + L_{k_2} + \dots + L_{k_l}$:

$$e_1^{(j)} = D(g_j) e_1^{(1)}, \dots, e_\mu^{(j)} = D(g_j) e_\mu^{(1)}.$$

Если $g k_j = k_j$, то $g_j^{-1} g g_j \in G_k$ и $g = g_j' g_k g_j^{-1}$. Тогда матрица $D(g)$ в выбранном нами базисе имеет вид:

$$D(g) e_\nu^{(j)} = \sum_{\nu'} D_{\nu'\nu}^k(g_k) e_{\nu'}^{(j)}, [D(g)]_{\nu'\nu}^{j'j} = D_{\nu'\nu}^k(g_k) \delta(k_{j'}, \hat{g} k_j + b). \quad (6.10)$$

Построенное таким образом представление $D(g)$ унитарно, если унитарно малое представление D^k ; $D(g)$ неприводимо, если неприводимо D^k . Размерность представления D равна размерности D^k , умноженной на число лучей звезды. Таким образом, *построение НП пространственных групп сводится к построению неприводимых малых представлений.*

Представления группы волнового вектора G_k связаны с представлениями ее фактор-группы F_k . Произвольный элемент G_k имеет вид $g_k = t_{\alpha} r$, $r \in F_k$, $\alpha = \alpha_r + a$. Матрица $e^{ik \cdot \alpha} D^k(g_k) = D(r)$ не зависит от вектора решетки a и определяется лишь поворотным элементом r . Отображение $r \rightarrow D(r)$ обладает следующим свойством:

$$\begin{aligned} D(r_1 r_2) &= \exp(ik \cdot \alpha_{12}) D^k(g_1 g_2) = \exp[ik \cdot (\alpha_{12} - \alpha_1 - \alpha_2)] D(r_1) D(r_2) \\ &= \exp[i(r_1^{-1} k - k) \cdot \alpha_2] D(r_1) D(r_2) \end{aligned} \quad (6.11)$$

(так как $\alpha_{12} = \alpha_1 + r_1 \alpha_2$) и в общем случае относится к так называемым **проективным представлениям**. Множество множителей $\omega(r_1, r_2) = \exp i(k - r^{-1} k) \cdot \alpha_2$, отличающих рассматриваемое матричное отображение группы F_k от обычного представления, называют **фактор-системой проективных представлений**. В теории пространственных групп она определяется звездой представлений $\{k\}$ и набором неэлементарных трансляций поворотных элементов группы. Из построения видно, что малое представление группы волнового вектора G_k и индуцированное им проективное представление группы F_k совместно являются или приводимыми, или неприводимыми. Таким образом, поиск неприводимых представлений пространственных групп сводится к поиску неприводимых проективных представлений 32 точечных групп F_k .

Отметим, что множители фактор-системы в (6.11) сводятся к единице и, соответственно, проективное представление сводится к обычному представлению, если (а) все неэлементарные трансляции $\alpha(r_k)$ равны нулю; (б) имеет место точное равенство $r k = k$ для всех $r \in F_k$. Последнее, в частности, справедливо для всех звезд, лучи которых являются внутренними точками зоны Бриллюэна.

Подытожим последовательность нахождения НП со звездой $\{k\}$ пространственной группы G :

1) Устанавливается точечная группа симметрии $F_k \subset F$ произвольного луча k звезды.

2) Определяется фактор-система $\omega(r_1, r_2)$ проективного представления группы F_k ,

$$\omega(r_1, r_2) = \exp i(k - r_1^{-1} k) \cdot \alpha_{r_2}. \quad (6.12)$$

3) Строятся (или берутся из таблиц) матрицы неприводимых проективных представлений группы F_k с данной фактор-системой, $D^{(\beta)}(r)$.

4) Строится малое представление группы G_k по формуле

$$D^{k, \beta}(g_k = (a + \alpha_r | r)) = \exp[-ik \cdot (a + \alpha_r)] D^{(\beta)}(r) \quad (6.13)$$

5) По этому малому представлению восстанавливается полное представление группы G по формуле (6.10).

6.7. Некоторые неприводимые представления группы O_h^7

Рассмотрим в качестве примеров НП группы O_h^7 . Для центра зоны Бриллюэна (точка Γ) $k = 0$ (однолучевая звезда $\{0\}$), точечная группа луча — O_h , фактор-система, как для любой внутренней точки зоны Бриллюэна, тривиальна: $\omega(r_1, r_2) = 1$. Матрицы НП полной группы октаэдра $D^{(\alpha)}$ оказываются и матрицами НП группы O_h со звездой $\{0\}$:

$$D^{(\{0\}, \alpha)}(g = (a + \alpha_r | r)) = D^{(\alpha)}(r).$$

Всего имеется десять однозначных и шесть двузначных НП такого вида (по числу НП группы O_h).

Точка Δ на оси четвертого порядка, $k = k_0(100)$, порождает шестилучевую звезду, точечная группа луча — C_{4v} ; пять однозначных (из них четыре одномерных и одно двумерное) и два двузначных (двумерных) представления этой группы выступают в качестве “проективных” представлений группы F_k , а после умножения их матриц на число $e^{-ik \cdot (a + \alpha r)}$ получаем малые НП группы волнового вектора G_k . Напомним, что $\alpha_r = 0$ для элементов e, C_4^2 и отражений в плоскостях, проходящих через ось x и составляющих угол 45° с осями y, z — эти элементы входят в T_d . Для остальных четырех элементов группы C_{4v} $\alpha_r = (a/4)(111)$. Наконец, по формулам (6.9) восстанавливаем НП группы O_h^7 . При этом одномерные малые НП порождают шестимерные НП пространственной группы, а двумерные малые НП — 12-мерные.

Рассмотрим еще точку X на границе зоны Бриллюэна; для нее $k = (2\pi/a)(100)$, она порождает трехлучевую звезду, точечная группа луча D_{4h} , $\alpha_r = 0$ для элементов подгруппы D_{2d} , и элементы фактор-системы $\omega(r_1, r_2) = e^{-2ik \cdot \alpha r} = -1$, если r_1 относится к смежному классу IC_{4v} (для него $r_1 k = -k$) и $r_2 \in ID_{2d}$ ($\alpha_{r_2} \neq 0$); для остальных пар r_1, r_2 $\omega(r_1, r_2) = 1$.

Будем искать унитарные матрицы $D(r)$ для образующих элементов группы D_{4h} — S_4, U_2, I , удовлетворяющие условиям: (1) $D(S_4)D(U_2)D(S_4)D(U_2) = E$, (2) $D^4(S_4) = E$, (3) $D^2(U_2) = E$, (4) $D^2(I) = -E$, (5) $D(S_4)D(I) = -D(I)D(S_4)$, (6) $D(U_2)D(I) = -D(I)D(U_2)$. Как видно, некоторые матрицы антикоммутируют, поэтому они не могут быть одномерными, и мы сначала рассмотрим двумерные матрицы. Используем базис, в котором $D(S_4)$ диагональна: $D(S_4) = \begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}$, тогда из (5) $D(I) = \begin{pmatrix} 0 & \alpha \\ \beta & 0 \end{pmatrix}$ и $a = -b$; из (2): $a = 1, i, (-1, -i$ можно исключить перенумерацией базисных векторов), из (4) $\beta = -\alpha^{-1}$, и

выбором относительной фазы базисных векторов можно преобразовать $D(I)$ к виду $\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$. Условие (6) приводит к $D(U_2) = \begin{pmatrix} c & d \\ d & -c \end{pmatrix}$, из (3): $c^2 + d^2 = 1$; из (1): при $a = 1$ $d = 0, c = \pm 1$; при $a = +i$ $c = 0, d = \pm 1$. Таким образом, получаются четыре различных проективных представления, исчерпывающих все неприводимые проективные представления с данной фактор-системой (ср. п. 6.9). Они порождают четыре однозначных шестимерных НП группы O_h^7 со звездой $\{X\}$. Для спинорных представлений в правых частях условий (1) – (3) E заменяется на $-E$, двумерных матриц, удовлетворяющих этим условиям, нет; существует одно четырехмерное неприводимое проективное представление нужного типа.

6.8. Аппроксимация группы трансляций конечной группой

Часто бывает удобно заменить бесконечную группу трансляций T конечной группой высокого порядка N^3 (N – очень большое целое число), используя “периодические граничные условия”: $t(Na_i) = e$. Такая группа имеет конечное число (N^3) НП:

$$D_k(a) = e^{-ik \cdot a}, \quad k = k_1 b_1 + k_2 b_2 + k_3 b_3, \quad k_i = n_i/N, \quad n_i = 0, 1, \dots, N-1. \quad (6.14)$$

Точки k , отвечающие НП, равномерно распределены по зоне Бриллюэна с плотностью

$$N^3 / |\mathbf{b}_1 \cdot (\mathbf{b}_2 \times \mathbf{b}_3)| = V / (2\pi)^3, \quad V = N^3 \Omega_0.$$

В качестве приложения выведем **критерий вещественности НП пространственных групп**, исходя из общей формулы, приведенной в задаче 2.11:

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} \sum_g \chi(g^2) &= \frac{1}{g} \sum_{g^j v} D_{vv}^{jj}(g^2) = \frac{1}{g} \sum_{g^j v} D_{vv}^k(g_j^{-1} g^2 g_j) \delta(k_j, g^2 k_j + b) = \\ &= \frac{l}{g} \sum_{g^j v} D_{vv}^k(g^2) \delta(k, g^2 k + b) = \frac{l}{g} \sum_{v, a, h^2 \in G_k} D_{vv}^k(t_{a+ha} h^2) = \\ &= \frac{l}{g} \sum_{v, a, h^2 \in G_k} e^{-ik \cdot (a+ha)} D_{vv}^k(h^2) = \frac{l}{g} \sum_{h^2 \in G_k} \chi^k(h^2) N^3 \delta(k + b, -h^{-1} k) \end{aligned} \quad (6.15)$$

$$= \frac{l}{n} \sum_{hk \equiv -k} \chi^k(h^2) = \begin{cases} 0, & D \text{ не эквивалентно } D^* \\ 1, & D \text{ потенциально - вещественно} \\ -1, & D \text{ псевдовещественно} \end{cases}$$

Здесь l – число лучей звезды $\{k\}$, n – число элементов точечной группы направлений (кристаллического класса), h – поворотные элементы группы со своими неэлементарными трансляциями.

6.9. Элементы теории проективных представлений

Отображение $r \rightarrow D(r)$ называется **проективным представлением**, если

$$D(r_1)D(r_2) = \omega(r_1, r_2)D(r_1r_2), \quad |\omega(r_1, r_2)| = 1.$$

Совокупность множителей $\omega(r_1, r_2)$ называют **фактор-системой** проективного представления. В силу ассоциативности группового умножения выполняются соотношения:

$$\omega(r_1, r_2r_3) \omega(r_2, r_3) = \omega(r_1, r_2) \omega(r_1r_2, r_3).$$

***p*-эквивалентные представления и фактор-системы:**

$$D'(r) = D(r)/u(r), \quad \omega'(r_1, r_2) = \omega(r_1, r_2)u(r_1r_2)/u(r_1)u(r_2),$$

где $u(r)$ — произвольные числа с $|u(r)| = 1$. Множество фактор-систем группы разбивается на классы *p*-эквивалентных систем; множество классов фактор-систем $\{K\}$ называют **мультипликатором группы**. На мультипликаторе определяется операция умножения по правилу: $K_p K_q = K_q K_p = K_s$, если $\omega_p(r_1, r_2) \omega_q(r_1, r_2) = \omega_s(r_1, r_2) \in K_s$ (очевидно, K_s не зависит от конкретного выбора $\omega_p(r_1, r_2) \in K_p$ и $\omega_q(r_1, r_2) \in K_q$). В результате мультипликатор $\{K\}$ оказывается абелевой группой, роль единичного элемента в ней играет класс K_0 фактор-систем, *p*-эквивалентных системе $\omega(r_1, r_2) = 1$ (соответствующей обычным представлениям группы). Мультипликатор конечных групп содержит конечное число элементов.

Эквивалентные, приводимые и неприводимые проективные представления определяются по аналогии с соответствующими обычными представлениями. Эквивалентные (в обычном смысле) проективные представления обладают одинаковой фактор-системой. Одномерные проективные представления могут относиться только к классу K_0 .

Если группа определяется в соотношениями $a^{ni}b^{mi}c^{li}\dots = e$, то для проективных представлений возникает ν чисел :

$$D(e) = D(a^{ni}b^{mi}c^{li}\dots) = \alpha_i D^{ni}(a) D^{mi}(b) D^{li}(c)\dots = E. \quad (6.16)$$

При переходе к *p*-эквивалентным представлениям $\alpha_i' = \alpha_i u^{ni}(a) u^{mi}(b)\dots$, и подходящим выбором $u(r)$ можно часть (или все) чисел α_i' обратить в единицу. Из соотношений (6.16) получаются уравнения для определения α_i' (для точечных групп $\alpha_i'^2 = 1$). С каждой совокупностью полученных решений этих уравнений $\{\alpha_i'(p)\}$ можно связать элемент мультипликатора K_p . Структура мультипликатора устанавливается соотношениями $\alpha_i'(p)\alpha_i'(q) = \alpha_i'(s)$.

Группа представлений G' группы G определяется соотношениями

$$\alpha_i a^{ni} b^{mi} c^{li} \dots = e, \quad \alpha_i^2 = e, \quad \alpha_i \alpha_j = \alpha_j \alpha_i, \quad a \alpha_i = \alpha_i a.$$

Все элементы G' имеют вид $g' = hr$, $r \in G$. Каждое НП группы G' , $g' \rightarrow D(g')$ определяет неприводимое проективное представление группы G , $r \rightarrow D(r)$:

$$r_1 r_2 = h r_3, \quad D(r_1 r_2) = D(r_1) D(r_2) = D(h) D(r_3) = \omega_{12} D(r_3),$$

так как по лемме Шура $D(h) = \omega_{12} E$. $h \rightarrow \omega_{12}$ — представление мультипликатора $\{K\}$.

Для матричных элементов проективных НП имеет место соотношение ортогональности

$$\sum_r D_{ik}^{(\mu)}(r) D_{jl}^{(\mu')}(r) = \frac{g}{n_\mu} \delta_{\mu\mu'} \delta_{ij} \delta_{kl}.$$

Для НП, относящихся к одной фактор-системе, справедливо соотношение Бернсайда $\sum_\alpha n_\alpha^2 = g$.

6.10. Магнитные и цветные группы

Немагнитные кристаллы помимо пространственной симметрии обладают симметрией относительно обращения времени, и полная группа симметрии их $G_\theta = G \times \theta$, где G — пространственная группа, а θ — двухэлементная группа, включающая обращение времени θ . “Представления” этой группы при учете обращения времени ($\theta \neq 1$), как отмечалось в разделе 5, являются **копредставлениями** ввиду антиунитарности оператора $\hat{\theta}$.

Обращение времени меняет направление токов (и намагниченностей), поэтому θ не входит в группу симметрии магнитных кристаллов. При возникновении спонтанной намагниченности могут теряться и некоторые элементы пространственной симметрии кристаллов. Так, если кристалл тетрагональной симметрии D_{4h} намагничивается вдоль оси четвертого порядка, то из группы симметрии выпадают ряд отражений, повороты U_2 на π около осей второго порядка, перпендикулярных главной оси и т.п. Однако произведения этих элементов на θ являются элементами симметрии ферромагнитного кристалла, т.е., группой симметрии оказывается некоторая подгруппа G_θ , содержащая подгруппу пространственных преобразований $G' \subset G$ и произведения остальных элементов из G на θ . Подобные подгруппы группы G_θ , описывающие симметрию магнитных кристаллов, называют **магнитными группами** (или **группами антисимметрии, черно-белыми группами**). Магнитную группу можно представить в виде суммы $G'_\theta = G' + \{r\theta\}$, где $r \notin G'$, и, имея в виду, что $g'r\theta \in \{r\theta\}$, а $r_1\theta r_2\theta \in G'$,

убеждаемся, что оба множества, G' и $\{r\theta\}$, содержат одинаковое число элементов; G' является подгруппой индекса два как в G'_0 , так и в G . В принципе это замечание позволяет построить все магнитные группы.

Для построения *точечных магнитных групп* заметим, что 32 кристаллических класса имеют 58 различных подгрупп индекса два. Дополняя смежные классы этих подгрупп операцией θ и добавляя результат к подгруппам, получаем 58 специфических точечных магнитных групп.

Магнитные группы допускают дальнейшие обобщения. Можно, например, рассмотреть свойства решетки, принимающие не два, а более значений (цветов), что приводит к понятию *цветных групп*. Рассматриваются также несколько различных свойств, каждое из которых принимает два значения.

Задачи к разделу 6

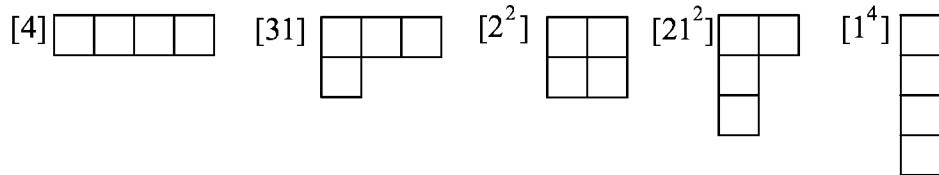
1. Показать, что каждый элемент типа $t_a R(n, \varphi)$ с $\varphi \neq 0$ является винтовым поворотом. Найти соответствующую винтовую ось.
2. Показать, что элемент типа $t_a S(n, \varphi)$, $\varphi \neq 0$ представляет собой некоторый зеркальный поворот.
3. Как связаны между собой точечные преобразования r_O и $r_{O'}$, оставляющие неподвижными точки O и O' , соответственно? Что представляет собой элемент $t_a I_O$?
4. Несколькими способами выбрать элементарную ячейку двумерной решетки.
5. Доказать, что объем элементарной ячейки не зависит от выбора базисных векторов.
6. Показать, что совокупность точечных операций симметрии решетки Бравэ, неподвижная точка которых находится в междоузлии, является подгруппой точечной группы симметрии решетки.
7. Проверить утверждение о наличии плоскости симметрии σ_v для группы K , содержащей ось C_n с $n = 3, 4, 6$.
8. Какова схема подчинения двумерных сингоний? Описать деформации, вызывающие соответствующее понижение симметрии.
9. Проследить за изменением типов решеток при деформациях, вызывающих следующее понижение симметрии: $O_h \rightarrow D_{4h} \rightarrow D_{2h}$.
10. Найти всевозможные структуры пространственных групп моноклинной сингонии.
11. Построить обратные решетки для плоских кристаллов.
12. Построить зоны Бриллюэна для плоских кристаллов.

13. Показать, что группы волновых векторов, входящих в одну звезду, сопряжены друг другу.
14. Показать, что разложение приводимых представлений пространственных групп сводится к разложению малых представлений.
15. Если $\{e_i\}$ — базис малого представления D^k , то $\{D(g_j)e_i\}$ — базис малого представления D^{k_j} , где $k_j = g_j k$. Доказать.
16. Пусть D и D' — НП пространственной группы со звездами $\{k\}$ и $\{k'\}$. Что представляют собой звезды представлений $D \times D'$, D^2 , D^* ?
17. Показать, что все одномерные представления проективно-эквивалентны тождественному.
18. Найти неприводимые проективные представления группы C_{nh} , $n = 2, 3, 4, 6$.
19. Рассматривая группу трансляций кристалла как конечную группу (при периодических граничных условиях), написать соотношения ортогональности для характеров НП.
20. Найти все плоские двухцветные точечные группы.

7. Группа перестановок и полная линейная группа

7.1. Симметризаторы Юнга и их свойства

Классы сопряженных элементов группы P_n определяются циклической структурой, а последние связаны с разбиением числа n (п. 1.6). Возможные разбиения изображаются *схемами Юнга*, например, для $n = 4$:



Схемы Юнга с определенным образом размещенными в них числами (“пешками”) $1, 2, \dots, n$ называют *таблицами Юнга*. Таблицу Юнга можно рассматривать как способ нумерации клеток схемы, либо как перестановку “пешек” в клетках, используя естественную нумерацию клеток вида:

| | | | |
|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 | 4 |
| 5 | 6 | 7 | |
| 8 | 9 | | |

Тогда таблицы

| | | |
|---|---|---|
| 3 | 4 | 5 |
| 2 | 1 | |

| | | | |
|---|---|---|---|
| 3 | 4 | 5 | 2 |
| 1 | | | |

| | | | | |
|---|---|---|---|---|
| 3 | 4 | 5 | 2 | 1 |
|---|---|---|---|---|

и т.д.

соответствуют перестановке $\begin{pmatrix} 12345 \\ 54123 \end{pmatrix}$. Число схем Юнга равно числу

НП группы P_n , и естественно попытаться использовать эти схемы для построения НП.

Как отмечалось в разделе 2, все НП конечных групп могут быть построены исходя из регулярного представления путем расщепления групповой алгебры на минимальные идеалы при помощи взаимно нормальных примитивных идемпотентов.

Если $D_{ij}^{(\alpha)}(g)$ — матрицы НП группы G , то роль указанных идемпотентов выполняют элементы алгебры $\hat{D}_{ii}^{(\alpha)}(\cdot) = \sum D_{ii}^{(\alpha)} * (g)g$; на элементах алгебры $\{\hat{D}_{ii}^{(\alpha)}(\cdot)\}$ осуществляется НП $D^{(\alpha)}$ с базисом $\{\sqrt{n_\alpha/g} \hat{D}_{ij}^{(\alpha)}(\cdot), j=1, \dots, n_\alpha\}$. Переход от естественного базиса алгебры $[G] = \{g\}$ — к базису $\{\sqrt{n_\alpha/g} \hat{D}_{ij}^{(\alpha)}(\cdot)\}$ (α, i, j пробегает все возможные значения) осуществляется унитарным преобразованием, если матрицы $D_{ij}^{(\alpha)}(g)$ унитарны. Обратное преобразование

$$g = \sum_{\alpha ij} \sqrt{\frac{n_\alpha}{g}} D_{ji}^{(\alpha)}(g) \hat{D}_{ji}^{(\alpha)}(\cdot) \sqrt{\frac{n_\alpha}{g}}. \quad (7.1)$$

Два идемпотента группы P_n очевидны:

$$S = \frac{1}{g} \widehat{D}^{(1)}(\cdot) = \frac{1}{n!} \sum p, \quad A = \frac{1}{n!} \sum \delta_p p, \quad (7.2)$$

($\delta_p = +1$ для четных перестановок, -1 для нечетных перестановок) и можно связать их со схемами Юнга с одной строчкой и одним столбцом, соответственно. Для других схем можно составить *симметризаторы* вида

$$c = \sum_{pq} \delta_q qp = \left(\sum_q \delta_q q \right) \left(\sum_p p \right), \quad (7.3)$$

где p — всевозможные перестановки, оставляющие объекты (пешки) в своей строке таблицы (Т) для данной схемы, а перестановки q оставляют пешки этой таблицы в своем столбце. Например, для схемы

| | | | |
|--|--|--|--|
| | | | |
| | | | |

$$c = [e - (14)][e + (12) + (13) + (23) + (123) + (132)].$$

При этом используется естественная нумерация клеток схемы, но размещение n пешек по n клеткам схемы (т.е., таблица Т) может быть любым. Если же использовать другую нумерацию клеток схемы (описываемую, например, таблицей Т), то получится подобный симметризатор $c_t = t^{-1} c t$, где t — перестановка, отвечающая таблице Т.

Свойства симметризаторов Юнга: а) с точностью до множителя c является идемпотентом:

$$c^2 = \mu c; \quad (7.4)$$

б) идемпотент $(1/\mu)c$ примитивен; в) НП, порожденные симметризаторами, соответствующими различным схемам Юнга $[\lambda]$ и $[\lambda']$, неэквивалентны.

Схема $[\lambda]$ *выше* схемы $[\lambda']$ (“предшествует” ей), если первая из неравных нулю разностей $(\lambda_1 - \lambda'_1, \lambda_2 - \lambda'_2, \dots)$ положительна. Если Т и Т' — любые две таблицы для схем $[\lambda]$ и $[\lambda']$, соответственно, то можно определить перестановку $s: T \rightarrow T'$, такую что $st = t'$, где t и t' перестановки, соответствующие таблицам Т и Т'. Например, перестановка для таблиц

| | | |
|---|---|---|
| 3 | 4 | 5 |
| 2 | 1 | |

Т

и Т'

| | |
|---|---|
| 5 | 3 |
| 1 | 4 |
| 2 | |

такая: $s = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 4 & 1 & 5 & 3 \end{pmatrix}$.

Имеет место следующая *комбинаторная лемма*:

Пусть T и T' — любые две таблицы Юнга, причем схема $[\lambda]$ не ниже $[\lambda']$. Тогда 1) либо имеются два номера (пешки), стоящие в одной и той же строчке в T и в одном и том же столбце в T' ; 2) либо $[\lambda] = [\lambda']$, и перестановка $s: T \rightarrow T'$ имеет вид qp .

Доказательство осуществляется последовательным рассмотрением номеров, стоящих в строчках таблицы T и возможным распределением их по столбцам таблицы T' . Если имеет место первая альтернатива леммы, то

$$sus^{-1} = v', \text{ или } su = v's, \quad (7.5)$$

где u — транспозиция двух пешек (перестановка типа p), о которых идет речь в формулировке леммы, в таблице T ; v' (типа q') — транспозиция их в таблице T' . В вышеприведенном примере пешки 3,4 первой строчки T (транспозиция $u = (12)$) оказываются во втором столбце T' (транспозиция $v' = (24)$). Уравнение (7.5) верно для любых s , если $[\lambda]$ выше $[\lambda']$, а при одинаковых схемах — для тех s , которые нельзя записать в виде qp .

В сумму (7.3), определяющую симметризатор, каждый элемент группы входит не более одного раза, иными словами, равенство $q_1p_1 = q_2p_2$ возможно лишь при $q_1 = q_2$ и $p_1 = p_2$. Поэтому c является элементом алгебры с коэффициентами $c(s) = \delta_q$, если $s=qp$, $c(s) = 0$, если s нельзя представить в виде qp . Очевидно,

$$c(sp) = c(s), \quad c(qs) = \delta_q c(s). \quad (7.6)$$

Можно показать, что любая величина d , коэффициенты которой удовлетворяют тем же условиям, кратна симметризатору:

$$d = \lambda c, \quad \lambda = d(e). \quad (7.7)$$

(При доказательстве отдельно рассматриваются коэффициенты $d(qp)$ и $d(s)$ при $s \neq qp$.)

Точно так же, если $[\lambda]$ выше $[\lambda']$, то величина d , удовлетворяющая соотношениям

$$d(sp) = d(s), \quad d(q's) = \delta_q d(s), \quad (7.8)$$

равна нулю, ибо, согласно (7.5), $d(s) = d(su) = d(v's) = -d(s) = 0$. Эти замечания позволяют утверждать, что величина sxs (x — любой элемент алгебры), обладающая свойствами (7.6), кратна c , в частности, $cs = \mu c$. Кроме того, в силу (7.8), $c'xc = 0$, если $[\lambda]$ выше $[\lambda']$, в частности, $c'c = 0$.

Рассмотрим инвариантное подпространство $\rho_{[\lambda]}$ (размерности $n_{[\lambda]}$) величин вида xs . Вычисляя след преобразования $x' = xs$ в базисе, первые $n_{[\lambda]}$ векторов которого

являются базисом $\rho_{[\lambda]}$ (а остальные к ним ортогональны), и в естественном базисе, получаем соотношение

$$\mu = n!/n_{[\lambda]}, \quad (7.9)$$

где $n!$ — порядок группы P_n . Теперь сравнительно просто проверить, что идемпотент $e = c/\mu$ не допускает дальнейшего нетривиального разложения $e = e_1 + e_2$ (задача 3).

Эквивалентность представлений, порождаемых в ρ_T и $\rho_{T'}$, означает, что при подходящем выборе базисов в них матрицы, отвечающие любому элементу алгебры, окажутся одинаковыми. Но если, скажем, $[\lambda]$ выше $[\lambda']$, то $\widehat{c}x\widehat{c}' = 0$ при любом x , т.е., величине \widehat{c} отвечает нулевая матрица в $\rho_{T'}$, тогда как в ρ_T ей не может отвечать нулевая матрица, поскольку $\widehat{c} \in \rho_T$ и $c\widehat{c} \neq 0$. Это и доказывает свойство в) симметризаторов Юнга.

7.2. Разложение регулярного представления

Если вместо естественной нумерации клеток схемы Юнга — $12\dots n$ — пользоваться другой нумерацией: $r_1r_2\dots r_n$, то переход от позиции T к T' вместо s будет описываться перестановкой rsr^{-1} , где $r = \begin{pmatrix} 1 & \dots & n \\ r_1 & \dots & r_n \end{pmatrix}$. Соответственно, как уже отмечалось в предыдущем параграфе, симметризатор c заменится на $c_r = rcr^{-1}$ с коэффициентами $c_r(s) = c(r^{-1}sr)$. Симметризаторы c и c_r порождают эквивалентные инвариантные подпространства $\rho_T = \{x\widehat{c}\}$ и $\rho_{T'} = \{x\widehat{c}_r\}$, в которых осуществляются одинаковые НП ($xc \leftrightarrow xcr^{-1} = (xr^{-1})c_r$).

Рассмотрим величины

$$\varepsilon_{[\lambda]} = \frac{1}{\mu} \sum_r rcr^{-1}, \quad \varepsilon_{[\lambda]}(s) = \frac{1}{\mu} \sum_r c(r^{-1}sr). \quad (7.10)$$

Они принадлежат центру групповой алгебры и, кроме того, определяются только схемой Юнга $[\lambda]$, а не конкретной нумерацией клеток этой схемы. Эти величины являются идемпотентами (задача 4), взаимно-нормальными для разных схем Юнга. Последнее сразу вытекает из свойства в) симметризаторов. Число независимых величин ε равно числу классов сопряженных элементов, поэтому они образуют базис центра. Отсюда

$$e = \varepsilon + \varepsilon' + \dots \quad (7.11)$$

($e = \lambda\varepsilon + \lambda'\varepsilon' + \dots$; умножая обе части на ε , имеем $\varepsilon = \lambda\varepsilon^2 = \lambda\varepsilon$, т.е., $\lambda = 1$). Разложение регулярного представления на неприводимые составляющие выглядит следующим образом:

$$x = x\hat{\varepsilon} + x\hat{\varepsilon}' + \dots = \frac{1}{\mu^2} \sum_r x\hat{c}_r + \frac{1}{\mu'^2} \sum_r x\hat{c}_r' + \dots \quad (7.12)$$

Отметим, что не все идемпотенты c_r для данной схемы $[\lambda]$ независимы. (Можно ограничиться перестановками, отвечающими стандартным таблицам Юнга; см. раздел 7.4.) Сравнивая с (2.18), заключаем, что идемпотенты $\varepsilon_{[\lambda]}$ осуществляют проектирование подобно операторам $P^{(\alpha)}$, поэтому

$$\varepsilon_{[\lambda]}(s) = \frac{1}{\mu} \chi_{[\lambda]}(s). \quad (7.13)$$

7.3. Формулы Фробениуса для характеров групп перестановок

Подгруппы группы P_n , соответствующие разбиениям числа n (схемам Юнга $[\lambda]$):

$$P_{[\lambda]} = P_{\lambda_1} \times P_{\lambda_2} \times \dots \times P_{\lambda_n}.$$

Согласно (2.15) (полагая там ν индексом тождественного НП подгруппы), можно записать составные характеры P_n , $\varphi_{(\nu)}^{[\lambda]} = gh_{(\nu)}^{[\lambda]} / h^{[\lambda]} g_{(\nu)}$, где число элементов $g_{(\nu)}$ в классе (ν) определяется формулой

$$g_{(\nu)} = \frac{n!}{1^{\nu_1} \nu_1! 2^{\nu_2} \nu_2! \dots n^{\nu_n} \nu_n!},$$

а число элементов группы $P_{[\lambda]}$, обладающих циклической структурой (ν) , равно

$$h_{(\nu)}^{[\lambda]} = \sum_{\substack{\sum \nu_{ki} = \nu_k \\ \nu_{1i} + 2\nu_{2i} + \dots = \lambda_i}} \prod_{i=1}^n \frac{\lambda_i!}{1^{\nu_{1i}} \nu_{1i}! 2^{\nu_{2i}} \nu_{2i}! \dots}. \quad \text{Отсюда:}$$

$$\varphi_{(\nu)}^{[\lambda]} = \sum_{\substack{\sum \nu_{ki} = \nu_k \\ \sum k\nu_{ki} = \lambda_i}} \frac{\nu_1!}{\nu_{11}! \nu_{12}! \dots} \frac{\nu_2!}{\nu_{21}! \nu_{22}! \dots} \dots \quad (7.14)$$

Эти величины являются коэффициентами симметричных полиномов

$$s_{(\nu)} = s_1^{\nu_1} s_2^{\nu_2} \dots = \sum_{[\lambda]} \varphi_{(\nu)}^{[\lambda]} \sum_p p x_1^{\lambda_1} \dots x_n^{\lambda_n}, \quad (7.15)$$

где $s_r = x_1^r + x_2^r + \dots + x_n^r$, а суммирование в (7.15) проводится по всем перестановкам нижних индексов, которые приводят к несовпадающим между собой одночленам.

Линейная независимость характеров $\chi_{(v)}^{[\lambda]}$ следует из линейной независимости полиномов $s_{(v)}$, а последняя вытекает из функциональной независимости полиномов s_r .

Действительно, якобиан $\left| \frac{\partial s_r}{\partial x_i} \right| = n! \prod_{i < j} (x_i - x_j) \neq 0$. Число переменных x_i при вычислении

$\chi_{(v)}^{[\lambda]}$ не обязательно брать равным n , достаточно, чтобы это число было не меньше числа ненулевых слагаемых в разбиении $[\lambda]$.

Фробениус показал, что коэффициенты χ полинома

$$D(x_1, \dots, x_n) s_{(v)} = \sum_{[\lambda]} \chi_{(v)}^{[\lambda]} \sum_p \delta_p p x_1^{\lambda_1 + n - 1} x_2^{\lambda_2 + n - 2} \dots x_n^{\lambda_n} \quad (7.16)$$

являются простыми характерами группы перестановок. Здесь

$$D(x_1, \dots, x_m) = \prod_{i < j} (x_i - x_j) = \sum_p \delta_p p x_1^{m-1} x_2^{m-2} \dots x_m^0 = \begin{vmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_m & x_{m-1} & \dots & x_1 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_m^{m-1} & x_{m-1}^{m-1} & \dots & x_1^{m-1} \end{vmatrix}.$$

Применение формулы (7.16) к вычислению $\chi_0 \equiv \chi_{(1^v)}^{[\lambda]}$ (размерность НП) и

$\chi \equiv \chi_{(1^{n-2}2)}^{[\lambda]}$ приводит к результатам:

$$\begin{aligned} \chi_0 &= \frac{n!}{\Lambda_1! \dots \Lambda_m!} D(\Lambda_1, \dots, \Lambda_m), \quad \Lambda_m = \lambda_m + m - i, \\ \chi &= (n-1)! \sum_{i=1}^m \frac{D(\Lambda_1, \Lambda_2, \dots, \Lambda_i - 2, \dots, \Lambda_m)}{\Lambda_1! \Lambda_2! \dots (\Lambda_i - 2)! \dots \Lambda_m!} \end{aligned} \quad (7.17)$$

7.4. Графические методы вычисления характеров НП групп перестановок

Последовательно умножая $D(x_i)$ на s_1 , мы будем получать знакопеременные полиномы $\sum_p \delta_p p x_1^{1+m-1} x_2^{m-2} \dots x_m^0$, $\sum_p \delta_p p x_1^{2+m-1} x_2^{m-2} \dots x_m^0 + \sum_p \delta_p p x_1^{1+m-1} x_2^{1+m-2} \dots x_m^0$ и т.д. (Показатели последовательно возрастают на 1, но таким образом, что значения двух показателей при этом никогда не выравниваются.) При этом коэффициент $\chi_{(1^v)}^{[\lambda]}$ оказывается равным числу слагаемых в выражении $D(x_i) s_1^{n-1}$,

$$D(x_i) s_1^{n-1} = \sum_{[\lambda']} \chi_{(1^{n-1})}^{[\lambda']} \sum_p \delta_p p x_1^{\lambda'_1 + n - 1} \dots x_n^{\lambda'_n},$$

из которых можно получить $\sum_p \delta_p x_1^{\lambda_1+n-1} \dots x_n^{\lambda_n}$ путем увеличения одного из показателей на единицу, для чего, очевидно, необходимо, чтобы $\lambda'_i = \lambda_i - 1$ для одного из индексов i , а для остальных $\lambda'_j = \lambda_j$. Отсюда вытекает рекуррентное соотношение:

$$\chi_{(1^n)}^{[\lambda]} = \sum_{[\lambda']} \chi_{(1^{n-1})}^{[\lambda]}, \quad (7.18)$$

где схемы Юнга $[\lambda']$ получаются из λ “правильным” вычеркиванием одной клетки. Последовательно применяя эту процедуру, находим, что размерность НП $[\lambda]$ равна числу *стандартных таблиц* для схемы $[\lambda]$, которые получаются “правильным” размещением n чисел по клеткам схемы (возрастание номеров слева направо в каждой строчке и сверху вниз в каждом столбце). Стандартные таблицы для схемы [31]:

| | | |
|---|---|---|
| 1 | 2 | 3 |
| 4 | | |

| | | |
|---|---|---|
| 1 | 3 | 4 |
| 2 | | |

| | | |
|---|---|---|
| 1 | 2 | 4 |
| 3 | | |

Со стандартными таблицами схемы $[\lambda]$ однозначно связаны так называемые *решеточные перестановки* выражений $x_1^{\lambda_1} x_2^{\lambda_2} \dots x_m^{\lambda_m}$. Таблицы указывают последовательность появления множителей x в этом выражении (соответствующую правилу, отмеченному в начале параграфа). Так, указанные выше таблицы схемы [31] соответствуют решеточным перестановкам $x_1 x_1 x_1 x_2$, $x_1 x_2 x_1 x_1$ и $x_1 x_1 x_2 x_1$. Стандартные таблицы, решеточные перестановки (или связанные с ними символы Яманучи, см. 7.5) можно использовать для нумерации строк (базисных функций) НП.

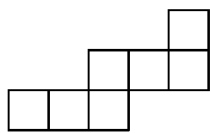
Аналогично (7.18) получается и *правило ветвления*:

$$\chi_{(l,1)}^{[\lambda]} = \sum_i \chi_{(l)}^{[\lambda_1 \dots \lambda_i - 1 \dots]}. \quad (7.19)$$

Формулировка правил ветвления $\chi_{(l,r)} \rightarrow \chi_{(l)}$ при $r = 2, 3, \dots$:

$$\chi_{(l,r)}^{[\lambda]} = \sum_{[\lambda']} \pm \chi_{(l)}^{[\lambda]}. \quad (7.20)$$

Схемы $[\lambda']$ получаются из $[\lambda]$ отбрасыванием “правильных” полосок длины r вида



; знак $+$ отвечает размещению r клеток на нечетном числе строчек (*положительные, или четные размещения*), знак $-$ отвечает *нечетным, или отрицательным, размещениям* (на четном числе строчек).

Общее правило вычисления $\chi_{(l_1 l_2 \dots)}^{[\lambda]}$ — на схеме $[\lambda]$ последовательно размещаются правильным образом l_1 точек с номером 1, l_2 точек с номером 2 и т.д. Характер равен количеству диаграмм с четным числом отрицательных размещений минус количество диаграмм с нечетным числом отрицательных размещений. Если правильное размещение точек невозможно, характер равен нулю. Очевидно, характеры тождественного и знакопеременного представлений удовлетворяют этому условию.

Разбиения $[\lambda]$ и $[\tilde{\lambda}]$ называются **сопряженными**, если схема одного из них получается из схемы другого заменой строк на столбцы. Соответствующие **представления** также называются **сопряженными**. Характеры сопряженных представлений связаны соотношением:

$$\chi_{(v)}^{[\lambda]} = \chi_{(v)}^{[\tilde{\lambda}]} \chi_{(v)}^{[1^n]}. \quad (7.21)$$

Учитывая результат задачи 2.7, можно утверждать, что знакопеременное представление содержится лишь в произведениях двух НП вида $[\lambda] \times [\tilde{\lambda}]$.

7.5. Матрицы НП групп перестановок

Представление $[\lambda]$ группы P_n для подгруппы P_{n-1} является приводимым и раскладывается по НП $[\lambda']$ согласно (7.19), поскольку элементы (v) подгруппы P_{n-1} имеют в P_n вид $((v), 1)$. В подходящем базисе

$$D^{[\lambda]}(p) = \sum D_r(p), \quad p \in P_{n-1},$$

где $D_r(p)$ — матрица НП $[\lambda']$, причем $[\lambda']$ получается из $[\lambda]$ вычеркиванием клетки из строчки r . Для определенности будем располагать матрицы D_r в порядке убывания r . Переходя последовательно к подгруппам P_{n-2}, \dots, P_1 , в качестве индексов строчек НП получаем **символы Яманучи** (Y-символы), однозначно связанные со стандартными таблицами Юнга и решеточными перестановками. Символ Яманучи — прочитанная справа налево решеточная перестановка. Например, строчки НП $[31^2]$ группы P_5 такие: 32111, 31211, 31121, 13211, 13121, 11321.

Произвольная перестановка из P_n может быть представлена в виде произведения элементов подгруппы P_{n-1} и транспозиции $(n, n-1)$. Поэтому для нахождения матриц НП P_n по известным матрицам НП P_{n-1} достаточно вычислить матрицу U указанной транспозиции. Но $VU=UV$, где V — матрица, соответствующая произвольной перестановке из P_{n-2} . В разложении V по НП P_{n-2} , $V=\sum V_{rs}$ (rs — первые индексы Y-

символов) могут встретиться три типа матриц V_{rs} : 1) V_{rr} , 2) $V_{rs} = V_{sr}$, 3) V_{rr-1} при $\lambda_{r-1} = \lambda_r$.
 В соответствии с леммой Шура $U_{rs,rs} = \sigma_{rs,rs} E_{rs,rs}$, $U_{rs,sr} = \sigma_{rs,sr} E_{rs,sr}$, причем для унитарных матриц U числа σ удовлетворяют условиям

$$|\sigma_{rr,rr}|^2 = 1, |\sigma_{rs,rs}|^2 + |\sigma_{rs,sr}|^2 = 1, |\sigma_{rr-1,rr-1}|^2 = 1 \quad (\lambda_{r-1} = \lambda_r).$$

Согласно п. 2.10:

$$\sum_{(ij)} U^{[\lambda]}(ij) = \frac{n(n-1)}{2} \frac{\chi_{(21^{n-2})}^{[\lambda]}}{\chi_{(1^n)}^{[\lambda]}} \hat{E} = \xi \hat{E}, \quad (7.22)$$

причем вычисление ξ с использованием (7.17) приводит к следующему результату:

$$\xi^{[\lambda]} = \frac{1}{2} \sum_k \lambda_k (\lambda_k + 1 - 2k).$$

Далее,
$$A_n = \sum_{i=1}^{n-1} U(in) = \sum_{i<j}^n U(ij) - \sum_{i<j}^{n-1} U(ij) = \sum_r (\xi - \xi_r) \hat{E}_{rr},$$

где ξ_r — коэффициенты аналогичного (7.22) соотношения для НП P_{n-1} , и $A_n U - U A_{n-1} = E$ (U соответствует транспозиции $(n, n-1)$). Рассматривая блок rs,rs в этом матричном равенстве, находим после подстановки значений ξ, ξ_r, ξ_{rs} :

$$\sigma_{rr,rr} = 1, \quad \sigma_{rr-1,rr-1} = -1 \quad (\lambda_{r-1} = \lambda_r),$$

$$\sigma_{rs,rs} = -\sigma_{sr,sr} = \frac{1}{\lambda_r - \lambda_s + s - r}, \quad \sigma_{rs,sr} = \sqrt{1 - \sigma_{rs,rs}^2}.$$

Выбор фазы $\sigma_{rs,rs}$ произволен, и ее можно изменить умножением базисных функций $\psi_{rs\dots}$ на $e^{i\alpha}$. Последовательным построением по этой схеме можно найти матрицы НП всех P_n .

Таким образом, все представления групп перестановок оказываются вещественными.

7.6. Внешние произведения представлений симметрической группы

Примитивный идемпотент группы $P_r \times P_{r'} \subset P_{r+r'}, c_{[\lambda]} \otimes c_{[\lambda']}$, как элемент алгебры $[P_{r+r}]$ также является идемпотентом, но не обязательно примитивным. Порождаемое им приводимое представление $[\lambda] \otimes [\lambda']$ и называется **внешним произведением представлений** $[\lambda]$ и $[\lambda']$. Его размерность, $\binom{r+r'}{r} n_{[\lambda]} n_{[\lambda']}$, можно

получить, рассматривая представления групп $P_r, P_r', P_{r+r'}$ в тензорных пространствах $T_r, T_{r'}$ и $T_{r+r'} = T_r \times T_{r'}$.

Общее правило разложения внешних произведений представлений $[\lambda] \otimes [\lambda']$ по НП следующее. Клетки каждой строчки $[\lambda]$ заполним одинаковыми символами, скажем, a в первой строчке, b во второй и т.д. Затем будем расширять схему $[\lambda]$ индексами a правильным образом — чтобы получались правильные схемы, но при этом индексы a не оказывались бы в одном столбце. Далее полученные схемы так же расширяются символами b и т.д. На полученные в конце концов схемы накладывается ограничение: добавленные символы при чтении их справа налево в первой строке, затем во второй и т.д. должны образовывать решеточную перестановку символов a, b, \dots

Например, $[\lambda] \otimes [1] = \sum [\lambda']$, где схемы $[\lambda']$ получаются из $[\lambda]$ правильным добавлением одной клетки

Аналогично осуществляется разложение на неприводимые относительно $GL(n)$ части кронекеровского произведения неприводимых тензорных пространств $T_{[\lambda]}$ и $T_{[\lambda']}$.

7.7. Связь между НП групп перестановок и групп линейных преобразований

Представление группы P_f в пространстве тензоров ранга f над $L_n: s \rightarrow \hat{s}$

$$s = \begin{pmatrix} 1 & \dots & f \\ \alpha_1 & \dots & \alpha_f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha'_1 & \dots & \alpha'_f \\ 1 & \dots & f \end{pmatrix}, \hat{s} e_{i_1}^{(1)} \dots e_{i_f}^{(f)} = e_{i_1}^{(\alpha_1)} \dots e_{i_f}^{(\alpha_f)} = e_{i_{\alpha_1}}^{(1)} \dots e_{i_{\alpha_f}}^{(f)}. \quad (7.23)$$

При этом для произвольного тензора x :

$$(\hat{s}x)^{i_1 \dots i_f} = x^{i_{\alpha_1} \dots i_{\alpha_f}}. \quad (7.24)$$

Разложение на НП осуществляется проектированием, причем идемпотенты $(1/\mu)\hat{c} = (1/\mu)\sum_{pq} \delta_{pq}$ порождают инвариантные и неприводимые относительно коммутаторной алгебры подпространства. **Коммутаторная алгебра** A_f алгебры $[\hat{s}]$

состоит из множества “бисимметричных” преобразований $A_{k_1 \dots k_f}^{i_1 \dots i_f} = A_{k_{\alpha_1} \dots k_{\alpha_f}}^{i_{\alpha_1} \dots i_{\alpha_f}}$. A_f

является (обертывающей) алгеброй представления $\Pi_f(A) = A \times A \times \dots \times A$ полной линейной

группы в тензорном пространстве. Действительно, размерность $[\Pi_f(A)]$, $\binom{n^2 + f - 1}{f}$,

равна размерности A_f . Более того, верно и соотношение $A_f \oplus A_v = [\Pi_f(A) \oplus \Pi_v(A)]$.

Взаимосвязь между групповой алгеброй и коммутаторной алгеброй произвольного представления группы, описанная в разделе 2, позволяет сформулировать следующее утверждение:

Если c — симметризатор Юнга, соответствующий разбиению на n слагаемых (некоторые из них могут обращаться в нуль), то тензоры $\hat{c}x$ осуществляют НП $GL(n)$. В разложение тензорного пространства на неприводимые части это представление входит n_T раз, где n_T — размерность НП $P_{\hat{\lambda}}$, соответствующего схеме Юнга, при помощи которого определяется симметризатор. Симметризаторы, соответствующие различным схемам, порождают неэквивалентные НП $GL(n)$. Ограничение разбиениями на n слагаемых необходимо, ибо если схема Юнга содержит больше чем n строк, то множество $\hat{c}x$ пусто (задача 5).

И, наконец, верно утверждение: любые два НП $GL(n)$, получающиеся из тензорных пространств различного ранга, неэквивалентны. Оно связано с отсутствием соотношений между элементами матриц из $GL(n)$ (неравенства $\det A \neq 0$ несущественны). Выпишем формулу размерности неприводимого представления группы $GL(n)$ тензорами с симметрией, описываемой схемой Юнга $[\lambda] \equiv [\lambda_1, \dots, \lambda_n]$:

$${}^n N_{[\lambda]} = \frac{D(l_1, \dots, l_n)}{D(n-1, n-2, \dots, 0)}, \quad (25)$$

где $l_j = \lambda_j + n - j$, а D — определитель, описываемый формулой (7.17). По структуре эта формула сходна с (7.18).

При ограничении подгруппой H некоторые НП группы $GL(n)$ могут оказаться приводимыми. Возможность приведения тензорного представления ранга r (с любым типом симметрии) означает, что существуют наборы однородных многочленов степени r , $P_r(A)$, от матричных элементов матриц $A \in GL(n)$, которые обращаются в нуль для всех $A \in H$. Отсюда вытекает, что при ограничении подгруппой вещественных преобразований $GL(n, R)$ НП полной линейной группы остаются неприводимыми, ибо обращение в нуль полиномов $P_r(A)$ при всех вещественных значениях аргументов приводит к обращению их в нуль и для комплексных аргументов.

Любую неособенную матрицу можно записать в виде:

$$A = (\det A)^{1/n} A', \quad A' \in SL(n). \quad (7.26)$$

Поэтому НП группы $GL(n)$ остаются неприводимыми и для $SL(n)$. При ограничении унимодулярной подгруппой, однако, некоторые НП полной линейной группы оказываются эквивалентными, а именно:

$$[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n] \equiv [\lambda_1 - \lambda_n, \lambda_2 - \lambda_n, \dots, \lambda_{n-1} - \lambda_n], \quad (7.27)$$

т.е., отбрасывая в схемах Юнга с n строчками столбцы, содержащие n элементов, мы получаем эквивалентные представления с более простой схемой. Это связано с тем, что антисимметризованное произведение векторов при унимодулярном преобразовании не меняется.

Не возникает существенных изменений и при унитарном ограничении: полином $P_\lambda(A)$, обращающийся в нуль для всех унитарных элементов A , равен нулю на всем $GL(n)$. Это можно проверить, переходя к инфинитезимальным преобразованиям. Каждая унитарная матрица некоторым унитарным преобразованием приводится к диагональному виду $(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n)$, $\varepsilon_i = \exp(i\phi_i)$; класс сопряженных элементов вполне определяется набором чисел ε_i . Неприводимое представление группы $U(n)$, описываемое схемой $[\lambda_1, \dots, \lambda_n]$, имеет размерность (7.25) и характер

$$\chi_{[\lambda]}(\varepsilon_1, \dots, \varepsilon_n) = \frac{|\varepsilon^{l_1}, \dots, \varepsilon^{l_n}|}{|\varepsilon^{n-1}, \dots, \varepsilon^0|}, \quad (7.28)$$

где n строк определителя $|\varepsilon^{l_1}, \dots, \varepsilon^{l_n}|$ получаются последовательной заменой ε на $\varepsilon_1, \varepsilon_2, \dots, \varepsilon_n$, а $l_1 = \lambda_1 + n - 1, \dots, l_{n-1} = \lambda_{n-1} + 1, l_n = \lambda_n$.

По поводу НП группы $SU(n)$ можно повторить сказанное о группах $SL(n)$; в частности, имеет место формула (7.27). Отметим еще, что два НП группы $SU(n)$, схемы Юнга которых дополняют друг друга до прямоугольника с n строчками, комплексно сопряжены. Простые примеры этого приводятся в главе 9, посвященной унитарным симметриям.

Псевдоунитарные группы $U(m, n-m)$ и $SU(m, n-m)$ сохраняют невырожденную эрмитову форму

$$\{x, y\} = x_1^* y_1 + \dots + x_m^* y_m - x_{m+1}^* y_{m+1} - \dots - x_n^* y_n.$$

Элементы псевдоунитарной матрицы удовлетворяют соотношениям

$$\sum_1^m u_i^i u_{j'}^{i'} - \sum_{m+1}^n u_i^i u_{j'}^{i'} = \pm \delta_{i'j'}, \quad (+ \text{ для } i' \leq m, - \text{ для } i' > m). \quad (7.29)$$

Неприводимые представления групп $GL(n)$ при переходе к этим подгруппам остаются неприводимыми.

7.8. Неприводимые представления ортогональной и симплектической групп

Псевдоортогональная группа $O(m, n-m)$ сохраняет невырожденную симметричную форму $B(x, y) (= x_1 y_1 + \dots + x_m y_m - x_{m+1} y_{m+1} - \dots - x_n y_n)$. Определитель матриц

$\det O = \pm 1$. Частные случаи — ортогональная группа в n измерениях $O(n)$, группа Лоренца $O(1,3)$. Иногда приходится рассматривать комплексное расширение этих групп $O(n, \mathbb{C})$, обычно же ортогональные группы, как и симплектические $Sp(n)$, рассматриваются в области вещественных чисел.

НП группы $GL(n)$ при ограничении ортогональной группой перестают быть неприводимыми. Это обусловлено наличием операций свертки (взятия следа) по парам индексов, коммутирующих с ортогональными преобразованиями.

Пусть базис пространства тензоров r -го ранга

$$e_{i_1}^{(1)} e_{i_2}^{(2)} \dots e_{i_r}^{(r)} \equiv e_{i_1 i_2 \dots i_r}.$$

Свертка по l -му и k -му индексам определяется следующим образом:

$$S^{(lk)} e_{i_1 \dots i_r} = \delta_{i_l i_k} \frac{1}{n} e_{\dots i_{l-1} m_{l+1} \dots i_{k-1} m_{k+1} \dots} \equiv \delta_{i_l i_k} E_{i_1 \dots i_{l-1} i_{l+1} \dots i_{k-1} i_{k+1} \dots i_r}^{(lk)} \quad (7.30)$$

(суммирование по m подразумевается). Очевидно,

$$(S^{(lk)} F)^{i_1 \dots i_r} = \frac{1}{n} \delta_{i_l i_k} F^{i_1 \dots i_{l-1} m_{l+1} \dots i_{k-1} m_{k+1} \dots i_r}.$$

Оператор $S^{(lk)}$ эрмитов и является идемпотентом (проектором), $S^{(lk)} S^{(lk)} = S^{(lk)}$. Прямая сумма всех $r(r-1)/2$ подпространств, $\sum_{(lk)} S^{(lk)} F^{(r)}$, как и ее ортогональное дополнение

$F_0^{(r)}$, инвариантны относительно и ортогональных преобразований, и всех перестановок индексов. Все следы тензоров $F_0^{(r)}$ обращаются в нуль, поскольку $(F_0^{(r)}, S^{(lk)} F^{(r)}) = (S^{(lk)} F_0^{(r)}, F^{(r)}) = 0$ для любого тензора $F^{(r)}$. Произвольный тензор представляется в виде

$$F^{i_1 \dots i_r} = F_0^{i_1 \dots i_r} + \sum_{(lk)} \delta_{i_l i_k} G^{i_1 \dots i_{l-1} i_{l+1} \dots i_{k-1} i_{k+1} \dots i_r}, \quad (7.31)$$

где тензоры $(r-2)$ -го ранга G могут быть найдены из условия обращения в нуль следов тензора F_0 .

Представление ортогональной группы бесследными тензорами F_0 разлагается на неприводимые посредством разбиения F_0 на части, обладающие определенной симметрией относительно перестановок индексов. При этом непустыми оказываются лишь подпространства, описываемые схемами Юнга, у которых сумма длин первых двух столбцов не превышает n : $a + b \leq n$. Допустимые схемы разбиваются на **ассоциированные пары** T и T' , такие, что длина первого столбца в T не превышает $n/2$, тогда как $a' = n - a$; длины остальных столбцов в T и T' одинаковы. При n четном

диаграммы с $a = n - a = n/2$ самоассоциированы. Каждой допустимой схеме отвечает определенное НП ортогональной группы; НП, отвечающие разным схемам, неэквивалентны.

При ограничении собственной ортогональной группой $O^+(n)$, НП, соответствующие ассоциированным схемам, становятся эквивалентными. Это утверждение является обобщением известного для $O(3)$ положения о том, что при чистых вращениях векторное представление (схема \square) и псевдовекторное (представление антисимметричными тензорами второго ранга, схема $\begin{smallmatrix} \square \\ \square \end{smallmatrix}$) эквивалентны. НП, описываемое самоассоциированной диаграммой, расщепляется на два комплексно-сопряженных НП группы $O^+(n)$. Таким образом, все НП группы $O^+(n)$ осуществляются скалярами, векторами и бесследными тензорами более высоких рангов с перестановочной симметрией, описываемой схемами Юнга с числом строк, не превышающим $n/2$. В частности, для O_3^+ это полностью симметричные тензоры, для $O^+(4)$ и $O^+(5)$ схемы Юнга для различных НП содержат две строки и т.д.

Симплектическая группа $Sp(n)$ сохраняет невырожденную кососимметричную форму $B(x,y) = -B(y,x) (= x_1y_2 - x_2y_1 + \dots + x_{2v-1}y_{2v} - x_{2v}y_{2v-1})$. Матрицы кососимметричных форм $\tilde{B} = -B$, т.е., $\det B = (-1)^{\dim B} \det B$, и форма может быть невырожденной лишь при четной размерности $n = 2v$. Определитель симплектических преобразований, как показывает детальное рассмотрение, равен +1.

Запишем каноническую кососимметричную форму в виде $\{x,y\} = \varepsilon_{ij}x_iy_j$, $\varepsilon_{i,i+1} = -\varepsilon_{i+1,i} = 1$ при i нечетном, остальные компоненты ε равны нулю. Далее определим след тензора по паре индексов

$$F_{(lk)}^{i_1 \dots i_{l-1} i_{l+1} \dots i_k i_{k+1} \dots i_r} = \varepsilon_{i_l i_k} F^{i_1 \dots i_{l-1} i_{l+1} \dots i_{k-1} i_{k+1} \dots i_r}. \quad (7.32)$$

Произвольный тензор расщепляется в сумму тензора со всеми следами, равными нулю, и тензоров вида (7.32), аналогично расщеплению (7.31) в случае ортогональной группы. Подпространство бесследных тензоров, инвариантное относительно симплектических преобразований и перестановок индексов, разбивается в сумму подпространств, обладающих определенными типами симметрии относительно перестановок, на которых осуществляются НП группы $Sp(n)$. При этом подпространства, описываемые схемами Юнга с числом строк больше $v = n/2$, оказываются пустыми.

7.9. Разложение НП группы $U(n)$ по НП группы $O^+(n)$

Множество тензоров r -го ранга с симметрией типа $[\lambda]$ расщепляется, согласно (7.31), на бесследные тензоры (соответствующее пространство или пусто, или на нем реализуется НП группы $O^+(n)$ со схемой (λ)) и тензоры ранга $(r-2)$ $G_{(lk)}$, дополненные множителями $\delta_{i_i i_k}$. Эти множители обладают симметрией $\square\square$, поэтому тензоры $G_{(lk)}$ могут иметь лишь симметрии $[\lambda']$ (схемы с $r-2$ клетками) такие, что во внешнем произведении $[\lambda'] \times [2]$ содержится схема $[\lambda]$. Таким образом, схемы $[\lambda']$ получаются из $[\lambda]$ правильным удалением двух клеток (в частности, удаленные клетки не должны быть из одного столбца схемы $[\lambda]$).

Представление ортогональной группы тензорами типа G в общем случае приводимо, и можно выделить из него неприводимую (или пустую) часть, ограничиваясь снова тензорами с нулевым следом. Последовательное проведение этой процедуры приводит к разложению вида:

$$[\lambda] \rightarrow (\lambda) + \Sigma(\lambda') + \Sigma(\lambda'') + \dots$$

где схемы $[\lambda']$, как уже отмечалось, получаются из $[\lambda]$ правильным удалением двух клеток, схемы $[\lambda'']$ получаются из $[\lambda]$ правильным удалением еще двух клеток и т.д. Приведенные простые рассуждения не дают возможности указать в общем виде кратности, с которыми НП ортогональной группы входят в выписанное разложение. Таблицы разложений имеются в литературе (см., например, Джадд и Вайборн 1973). Выпишем некоторые из таких разложений для приведения $U(5) \rightarrow O^+(5)$:

$$\begin{aligned} [2] &= (20) + (00), [11] = (11), [3] = (30) + (10), [21] = (21) + (10), \\ [111] &= (11), [4] = (40) + (20) + (00), [31] = (31) + (20) + (11), \\ [22] &= (22) + (20) + (00), [211] = (21) + (11), [1111] = (10). \end{aligned}$$

Так же выглядят и разложения $U(7) \rightarrow O^+(7)$ с добавлением дополнительного нуля в индексах НП $O^+(7)$. Исключения:

$$[111] = (111), [1111] = (110).$$

7.10. Некоторые приложения к теории атомных спектров

Одноэлектронные состояния в атоме в нулевом приближении описываются квантовыми числами (nlm, m_s) , уровни энергии ϵ_{nl} вырождены по m_l, m_s с кратностью $2(2l+1)$. (При моделировании одноэлектронного потенциала кулоновским полем имеет место и вырождение по $l = 0, 1, \dots, n-1$; целое число n нумерует уровни в порядке

возрастания энергии.) В силу принципа Паули каждое состояние может быть занято лишь одним электроном. Энергия атома в нулевом приближении определяется конфигурацией — распределением электронов по одноэлектронным состояниям. Соответствующие стационарные состояния можно представить в виде слэтеровских детерминантов из состояний отдельных электронов.

В основной конфигурации электроны последовательно занимают нижние по энергии состояния, заполняя “оболочки” $(1s)^2$, $(2s)^2$, $(2p)^6$ и т.д. Конфигурация, состоящая из полностью заполненных оболочек, не вырождена; в ней равны нулю как орбитальный, так и спиновый моменты. Если внешняя оболочка конфигурации $(nl)^r$ не заполнена, $1 \leq r < 2(2l+1)$, то такой уровень $\binom{4l+2}{r}$ -кратно вырожден. Вследствие кулоновского взаимодействия электронов между собой конфигурация расщепляется на термы ^{2S+1}L , характеризующиеся величиной полного орбитального L и спинового S моментов (рассел-саундерсовское приближение). Термы испытывают дальнейшее расщепление на уровни, описываемые полным моментом J , под действием спин-орбитального взаимодействия.

Разложить конфигурацию на термы можно с помощью следующих симметричных соображений. Множество функций $|m_{l1}m_{l2}\dots m_{lr}\rangle$ является базисом тензоров r -го ранга над $(2l+1)$ -мерным унитарным пространством представления $D^{(l)}$ группы вращений, тогда как функции $|m_{s1}m_{s2}\dots m_{sr}\rangle$ образуют базис тензоров над двумерным пространством $D^{(1/2)}$ ($SU(2)$). Оба множества разбиваются на подмножества, обладающие определенной симметрией относительно перестановок частиц P_r . Произведение функций типа $[\lambda_l]$ и $[\lambda_s]$ преобразуются при перестановках по представлению $[\lambda_l] \times [\lambda_s]$. Поскольку реализуются лишь полностью антисимметричные состояния всей системы, то достаточно рассматривать произведения типа $[\tilde{\lambda}] \times [\lambda]$, где значок \sim относится к сопряженному разбиению. Возможные типы симметрии представлений $SU(2)$ описываются схемами с числом строк не более двух, которые сразу дают значения спина S . Соответственно, орбитальные функции должны описываться сопряженными схемами с числом столбцов не более двух. Остается разложить тензоры с симметрией типа $[\tilde{\lambda}]$ на НП группы $O^+(3)$, чтобы получить возможные значения орбитального момента L . Проще всего это сделать с помощью соответствующих таблиц. Мы проиллюстрируем метод на простейших примерах.

Для конфигурации d^2 возможные значения полного спина определяются

схемами $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}$ ($S = 0$) и $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$ ($S = 1$, три симметричные функции с $M_S = 1, 0, -1$).

Соответствующие орбитальные функции обладают симметриями $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$ и $\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array}$. Но $D^{(2)} \times D^{(2)} = D^{(4)} + D^{(3)} + D^{(2)} + D^{(1)} + D^{(0)}$. Старший вектор представления $D^{(4)}$, $|22\rangle$, (а с ним и остальные векторы) симметричен относительно перестановки электронов. Представление $D^{(3)}$ натягивается антисимметричными тензорами (старший вектор $|21\rangle - |12\rangle$), $D^{(2)}$ — симметричными (старший вектор $|20\rangle + |02\rangle - \sqrt{\frac{3}{2}}|11\rangle$), $D^{(1)}$ — антисимметричными и $D^{(0)}$ — симметричными. Таким образом, конфигурация включает термы;

$$d^2: {}^1G, {}^1D, {}^1S; {}^3F, {}^3P.$$

Можно было здесь просто подсчитать число симметричных и антисимметричных функций, которые можно составить из исходных простейших функций, относящихся к данному значению M_L .

Полный спин в конфигурации d^3 $S = 3/2$ ($\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array}$) и $S = 1/2$ ($\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$). Полностью антисимметричные орбитальные тензоры старшим вектором имеют $\{|210\rangle\}$ ($M_L = 3$), а к $M_L = 1$ относятся уже два вектора $\{|20-1\rangle\}$ и $\{|21-2\rangle\}$, так что

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \rightarrow D^{(3)} + D^{(1)}.$$

Тензоры симметричного типа $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$ можно получить исходя из соотношений

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \times \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} + \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$$

и $(D^{(3)} + D^{(1)}) \times D^{(2)} = D^{(5)} + D^{(4)} + 2D^{(3)} + 2D^{(2)} + 2D^{(1)}$.

В последнем разложении $D^{(3)} + D^{(1)}$ относится к полностью антисимметричным

тензорам, так что оставшаяся часть относится к $\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$. Таким образом,

$$d^3: {}^4F, {}^4P; {}^2H, {}^2G, {}^2F, {}^2D, {}^2P.$$

Терм 2D встречается в этом разложении дважды, и для различения двух термов полезно иметь дополнительное квантовое число. Таким числом мог бы служить индекс НП группы, промежуточной между $U(2l+1)$ и $O^+(3)$. В качестве такой группы естественно выступает группа $O^+(2l+1)$, являющаяся подгруппой $U(2l+1)$ и содержащая

в качестве подгруппы $O^+(3)$. Разложение на термы представлений унитарной группы можно осуществить последовательным приведением

$$U(2l+1) \rightarrow O^+(2l+1) \rightarrow O^+(3),$$

и каждый терм описывается мультиплетностью $2S+1$, связанной со схемой $[\lambda]$, индексами (λ') представлений группы $O^+(2l+1)$, содержащихся в $[\lambda]$, и индексом L НП группы $O^+(3)$.

Выше мы уже отмечали, что для конфигурации $d^2: [2] \rightarrow D^{(4)} + D^{(2)} + D^{(0)}$.

Разложение на НП группы $O^+(5)$ выглядит так: $[2] \rightarrow (20) + (00)$. Второе слагаемое здесь является инвариантом группы $O^+(5)$ и соответствует свертке тензора (в циклических координатах свертка осуществляется с помощью $3j$ -символов (3.39)). Одновременно оно — инвариант группы $O^+(3)$ и поэтому отвечает представлению $D^{(0)}$ (S терм). Таким образом, $(00) \rightarrow D^{(0)}$, $(20) \rightarrow D^{(4)} + D^{(2)}$. Представление (00) впервые появляется в отсутствие электронов на d -оболочке, и говорят, что оно обладает **старшинством** $\nu=0$, тогда как (20) (и вместе с ним G - и D -термы) обладают старшинством $\nu=2$.

Для конфигурации d^3 , $[21] \rightarrow (21) + (10)$. Очевидно, $(10) \rightarrow D^{(2)}$ (D -терм) и, таким образом, один 2D терм обладает старшинством $\nu=1$ (представление (10) впервые появляется в конфигурации d^1). Остальные термы конфигурации d^3 мультиплетности 2 обладают старшинством 3, а термы 4P , 4F — старшинством 2 (ибо $[111] \rightarrow (11)$ — представление, возникающее для двух электронов).

В конфигурациях f^n старшинства оказывается недостаточно для однозначной классификации термов.

Задачи к разделу 7

1. Показать, что перестановка s не может быть представлена в виде qr двумя различными способами.
2. Выразить коэффициент μ в соотношении $c^2 = \mu c$ через коэффициенты симметризатора и показать, что μ — целое число.
3. Показать, что идемпотент $e = (1/\mu)c$ примитивен.
4. Проверить равенство $\varepsilon^2 = \varepsilon$, где ε определено равенством (7.10).
5. Доказать следующее утверждение: если схема $[\lambda]$ симметризатора Юнга c содержит более n строк, то $\hat{c}x = 0$ для любого тензора x над L_n . В противном случае существует тензор x_0 такой, что $\hat{c}x_0 \neq 0$.

6. Найти составные характеры группы P_3 по формуле (7.15) и представить их в виде линейных комбинаций простых характеров.
7. Найти простые характеры P_3 по формуле Фробениуса (7.16)
8. Выписать стандартные таблицы Юнга для P_4 .
9. Выразить характеры $\chi_{(l,2^2)}^{[642]}$ и $\chi_{(l,3,1)}^{[421]}$ через $\chi_{(l)}^{[\lambda]}$.
10. Показать, что $\chi_{(n)}^{[p1^q]} = (-1)^q$, $p + q = n$, а для остальных разбиений $\chi_{(n)}^{[\lambda]} = 0$.
11. Вычислить характеры НП $[n-1,1]$, $[n-2,1^2]$, $[n-2,2]$.
12. Найти матрицы НП группы P_3 и матрицы транспозиций в НП P_4 .
13. Разложить тензоры третьего ранга над L_3 на неприводимые составляющие (относительно $GL(3)$ и P_3).
14. Разложить тензоры третьего ранга на бесследные тензоры и тензоры первого ранга относительно ортогональных преобразований.
15. Найти термы конфигурации f^3 .
16. Найти базисные функции термов конфигурации p^3 .

8. Группы Лоренца и Пуанкаре

8.1. Определение групп Лоренца и Пуанкаре

Группа Пуанкаре (неоднородная группа Лоренца, группа движений пространства Минковского) — множество линейных преобразований L в четырехмерном (вещественном псевдоевклидовом) пространстве-времени:

$$x = x^\mu e_\mu = x^0 e_0 + \mathbf{r}, \quad x' = Lx + a, \quad x'^\mu = L^\mu_\nu x^\nu + a^\mu, \quad (8.1)$$

сохраняющих “интервалы” между “событиями” — точками пространства-времени. Это группа пространственно-временной симметрии изолированных физических систем, например, рассматриваемых отдельно элементарных частиц. Считается, что множество состояний частиц образует пространство НП ее группы симметрии, поэтому индексы унитарных НП группы Пуанкаре описывают физические характеристики частиц.

В специальной теории относительности координата $x^0 = ct$ соответствует времени, координаты $\mathbf{r}(x^1, x^2, x^3)$ — месту события. Квадрат интервала

$$(x - y)^2 = c^2(t_1 - t_2)^2 - (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)^2 = g_{\mu\nu}(x^\mu - y^\mu)(x^\nu - y^\nu), \quad (8.2)$$

$(e_\mu, e_\nu) = g_{\mu\nu}$ — диагональный “метрический” тензор, $g_{00} = 1, g_{11} = g_{22} = g_{33} = -1$.

Множество однородных преобразований (матриц L^μ_ν) образует (*общую*) *группу Лоренца*. Сохранение интервала накладывает на матрицу условия

$$g_{\nu\rho} = (Le_\nu, Le_\rho) = g_{\mu\sigma} L^\mu_\nu L^\sigma_\rho, \quad \text{или} \quad \hat{g} = \tilde{L} \hat{g} L, \quad L^0_\mu L^0_\nu - \sum_i L^i_\mu L^i_\nu = g_{\mu\nu}, \quad (8.3)$$

откуда

$$\det L = \pm 1, \quad \text{и} \quad 1 = (L^0_0)^2 - \sum (L^i_0)^2, \quad \text{т.е.,} \quad L^0_0 \geq 1, \quad \text{либо} \quad L^0_0 \leq -1. \quad (8.4)$$

Соответственно, пространство группы Лоренца разбивается на четыре несвязные части, первая из которых, включающая единичный элемент, соответствует подгруппе, называемой *собственной ортохронной (специальной) группой Лоренца* L_+^\uparrow с $\det L = +1$ и $L^0_0 \geq 1$. Разбиение полной группы Лоренца на смежные классы по L_+^\uparrow выглядит так:

$$L = L_+^\uparrow + PT L_+^\uparrow + P L_+^\uparrow + T L_+^\uparrow, \quad (8.5)$$

где T — обращение (отражение) времени, P (в этой главе) — пространственная инверсия. Первые два класса в (8.5) образуют собственную группу Лоренца L_+ , первый и третий — ортохронную группу L_+^\uparrow . Аналогичное (8.5) разбиение имеет место и для группы Пуанкаре.

Произвольное преобразование Пуанкаре (см.(8.1)) можно записать в виде $(a|L)$, a — 4-вектор “трансляции”; тогда произведение преобразований, по аналогии с (6.1), равно

$$g_1 g_2 = (a_1|L_1)(a_2|L_2) = (a_1 + L_1 a_2 | L_1 L_2). \quad (8.6)$$

Обратный элемент: $(a|L)^{-1} = (-L^{-1}a|L^{-1})$, сопряженные элементы:

$$(b|L') (a|L) (b|L')^{-1} = (b + L'a - L'LL'^{-1}b|L'LL'^{-1}),$$

так что подгруппа трансляций оказывается инвариантной. Группа Пуанкаре — полупрямое произведение инвариантной абелевой подгруппы трансляций и группы Лоренца. Имеется пятимерное матричное представление группы:

$$(a|L) \rightarrow \begin{pmatrix} L & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8.7)$$

Десять условий (8.3) сводят число параметров группы L_+^\uparrow до шести; группа Пуанкаре P_+^\uparrow — 10-параметрическая; обе группы, очевидно, некомпактны. Произвольный элемент группы Лоренца L_+^\uparrow можно представить как произведение трехмерного вращения пространственных координат $R(\xi_1\xi_2\xi_3)$ и “чисто лоренцева” преобразования (*буста*) B :

$$L(\xi, \mathbf{b}) = B(\mathbf{b})R(\xi) = R(\xi)B(R^{-1}\mathbf{b}). \quad (8.8)$$

Буст $B(\mathbf{b})$ описывает переход к системе координат, движущейся относительно исходной в направлении $\mathbf{b} = b\mathbf{n}$ ($n^2 = 1$) со скоростью $v = c \tanh b$:

$$\begin{aligned} B(\mathbf{b})[\mathbf{r} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r})] &= \mathbf{r} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \\ B\mathbf{e}_0 &= e_0 \cosh b + \mathbf{n} \sinh b, \quad B\mathbf{n} = e_0 \sinh b + \mathbf{n} \cosh b \\ x'^0 &= x^0 \cosh b + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \sinh b, \\ \mathbf{r}' &= \mathbf{r} - \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) + \mathbf{n} x^0 \sinh b + \mathbf{n}(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}) \cosh b. \end{aligned} \quad (8.9)$$

В более привычных для физики обозначениях при $\mathbf{n} \parallel x$ преобразование $B(v, \mathbf{e}_x)$ выглядит так:

$$t' = \frac{t + vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad x' = \frac{x + vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}. \quad (8.10)$$

Докажем возможность выражения (8.8) для преобразования Лоренца. Пусть $e_0 = (1, 0, 0, 0)$ и $Le_0 = x$; из (8.9) вытекает, что существует единственный буст, переводящий вектор e_0 в $x = (x^0, \mathbf{r})$, а именно буст с $\cosh b = x^0$, $\mathbf{n} = \mathbf{r}/\sinh b$ [$(x^0)^2 - \mathbf{r}^2 = (e_0, e_0) = 1$]. Таким образом, $B(-\mathbf{b})Le_0 = e_0$, т.е., $B(-\mathbf{b})L$ — обычное вращение.

8.2. Элементы специальной теории относительности

Преобразование Пуанкаре (8.1) будем трактовать как операцию над наблюдаемой физической системой (установкой, частицей), как ее поворот и смещение (так называемая “активная” точка зрения, в противоположность эквивалентной ей

“пассивной” точке зрения, трактующей преобразования как изменение системы координат).

Пусть с физической системой, покоящейся относительно данной “лаборатории” (системы отсчета) происходят два события $(0,0,0,0)$ и $(ct,0,0,0)$ (например, рождение и распад за время t мезона); интервал между событиями (временеподобный) равен ct . Если же система движется, скажем, со скоростью v вдоль оси x , то координаты второго события даются формулой (8.10) с $x = 0$. Интервал между событиями неизменен, но время между ними:

$$t' = t / \sqrt{1 - v^2 / c^2}. \quad (8.11)$$

Замедление времени тем заметнее, чем ближе v к c .

Рассмотрим теперь два события $(0,0,0,0)$ и $(0, x', 0, 0)$ (измерение длины движущейся линейки). Из (8.10) находим:

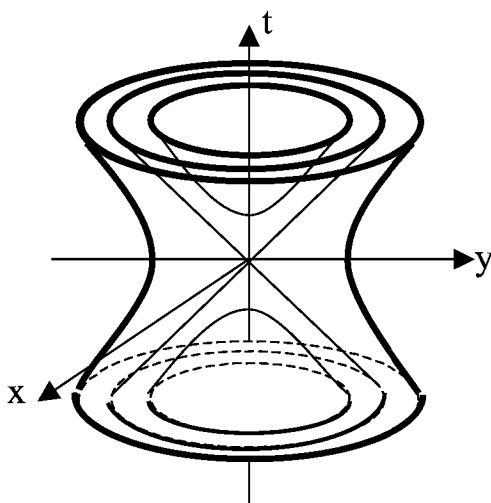
$$t = -vx / c^2, \quad x' = x \sqrt{1 - v^2 / c^2}, \quad (8.12)$$

что можно трактовать, как сокращение расстояний в движущемся объекте.

Рассмотрим еще физическую систему, движущуюся относительно установки со скоростью V (вдоль оси x), так что ее мировая линия определяется вектором $(ct, Vt, 0, 0)$. Если теперь сама установка движется со скоростью v , то

$$t' = \frac{t + vVt / c^2}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}}, \quad x' = \frac{Vt + vt}{\sqrt{1 - v^2 / c^2}} = \frac{(V + v)}{1 + Vv / c^2} t', \quad (8.13)$$

т.е., система движется относительно исходной системы отсчета со скоростью $V' = (V + v) / (1 + Vv / c^2)$, никогда не превышающей c .

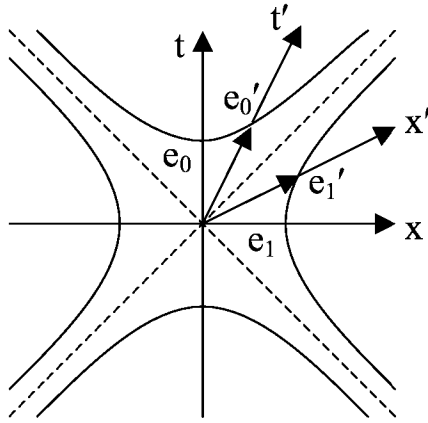


При малых скоростях движений $V, v \ll c$ можно воспользоваться приближением $\sinh b \cong \tanh b \cong b \cong v/c$, $\cosh b \cong 1$ и бусты переходят в преобразования Галилея

$$t = t', \quad \mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{v}t.$$

Соответственно, группа Пуанкаре переходит в группу Галилея — группу симметрии законов нерелятивистской механики. На символическом графике пространства-времени (см. рис.) изображен световой конус ($r = \pm ct$), образующие которого являются мировыми

линиями луча света. Все точки верхней половины конуса (*изотропные векторы*), исключая начало координат, можно получить друг из друга преобразованиями Лоренца. Времениподобные векторы, $(ct)^2 - r^2 > 0$, связанные преобразованиями Лоренца, изображаются гиперboloидами, лежащими внутри конуса. Концы пространственноподобных векторов $[(ct)^2 - r^2 < 0]$ располагаются на гиперboloидах, охватывающих световой конус. Переход к нерелятивистскому приближению можно представить как



увеличение угла раствора конуса до 90° , исчезновение области пространственноподобных векторов и вырождение времениподобных гиперboloидов в плоскости.

На рис. показаны различные системы координат на плоскости (t, x) (лоренцевы преобразования как изменение системы координат). Напомним еще некоторые часто употребляемые в специальной теории относительности

4-векторы. 4-скорость и 4-ускорение частицы:

$$u^\mu = dx^\mu/ds, a^\mu = du^\mu/ds, u^2 = 1, u_\mu a^\mu = 0, ds = cdt\sqrt{1 - v^2/c^2}. \quad (8.14)$$

4-импульс частицы:

$$p = m\mathbf{c}\mathbf{u}, p^i = mv^i/\sqrt{1 - v^2/c^2}, p^0 = mc/\sqrt{1 - v^2/c^2} = E/c. \quad (8.15)$$

8.3. Гомоморфизм двумерной унимодулярной группы на группу Лоренца

При изучении группы вращений оказалось полезным выявление гомоморфизма $SU(2) \rightarrow R_3$. По отношению к специальной группе Лоренца роль накрывающей группы играет группа $SL(2, C)$. Рассмотрим эрмитову матрицу второго порядка, однозначно связанную с 4-вектором x :

$$x \leftrightarrow X = \begin{pmatrix} x^0 + x^3 & x^1 - ix^2 \\ x^1 + ix^2 & x^0 - x^3 \end{pmatrix} = x^0 e + x^1 \sigma_1 + x^2 \sigma_2 + x^3 \sigma_3; \quad (8.16)$$

$$\det X = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2.$$

Пусть $\Lambda = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix} \in SL(2, C)$, т.е., $\alpha\delta - \beta\gamma = 1$. Тогда матричное преобразование

$$X' = \Lambda X \Lambda^+, \det X' = (x^0)^2 - (x^1)^2 - (x^2)^2 - (x^3)^2 = \det X \quad (8.17)$$

соответствует однородному линейному преобразованию L в пространстве-времени, сохраняющему релятивистскую “длину” векторов: $\Lambda \rightarrow L, x' = Lx, (Lx, Lx) = (x, x)$. Полагая $e = \sigma_0$ и учитывая, что матрицы Паули удовлетворяют соотношениям

$$\sigma_i \sigma_j = i \varepsilon_{ijk} \sigma_k + \delta_{ij} \sigma_0, \quad \sigma_i \sigma_j + \sigma_j \sigma_i = 2 \delta_{ij}, \quad \text{Sp} \sigma_\alpha \sigma_\beta = 2 \delta_{\alpha\beta}, \quad (8.18)$$

получаем

$$x'^\alpha = \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma_\alpha X') = \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma_\alpha \Lambda X \Lambda^+) = \frac{1}{2} \text{Sp}(\sigma_\alpha \Lambda \sigma_\beta \Lambda^+) x^\beta = L^\alpha_\beta x^\beta. \quad (8.19)$$

Как и в разделе 4.4, устанавливаем, что $\det L = +1$; кроме того, $L^0_0 = (1/2) \text{Sp}(\Lambda \Lambda^+) > 0$, сопоставляя с (8.4), имеем $L^0_0 \geq 1$. Таким образом, L — элемент группы L_+^\uparrow , и отображение $\Lambda \rightarrow L$ является гомоморфизмом $\text{SL}(2, \mathbb{C}) \rightarrow L_+^\uparrow$ с ядром $\pm e$.

Если ограничиться унитарной подгруппой группы $\text{SL}(2)$, то $\Lambda^+ = \Lambda^{-1}$, $x'^0 = x^0$, и мы возвращаемся к уже известному нам гомоморфизму $\text{SU}(2) \rightarrow \mathbb{R}_3$. Любая унитарная унимодулярная матрица второго порядка имеет вид:

$$u = e^{-iH} = e^{i(\sigma \cdot n)\varphi/2} = \sigma_0 \cos(\varphi/2) + i(\sigma \cdot n) \sin(\varphi/2), \quad (8.20)$$

что соответствует повороту на угол φ около оси \mathbf{n} [$\mathbf{n}^2 = 1$, $(\sigma \cdot \mathbf{n})^2 = \sigma_0 \equiv e$, отметим: $\sigma \cdot \mathbf{n} = \sqrt{\sigma_0}$].

Любая эрмитова матрица $h \in \text{SL}(2, \mathbb{C})$ может быть записана в виде

$$\pm h = \exp[-(\sigma \cdot \mathbf{n})b/2] = \sigma_0 \cosh(b/2) - (\sigma \cdot \mathbf{n}) \sinh(b/2), \quad (8.21)$$

что соответствует бусту вдоль оси \mathbf{n} со скоростью $v = c \tanh b$. Представлению (8.8) преобразования Лоренца соответствует представление произвольной матрицы $\Lambda \in \text{SL}(2)$ в виде произведения эрмитовой и унитарной матриц:

$$\Lambda = hu, \quad \text{где } h^2 = \Lambda \Lambda^+, \quad u = (\Lambda \Lambda^+)^{-1/2} \Lambda. \quad (8.22)$$

Используя комплексный 3-вектор α , можно представить элемент группы $\text{SL}(2, \mathbb{C})$ в форме

$$\Lambda = \exp(\sigma \cdot \alpha/2) = \cosh \frac{1}{2} \sqrt{\alpha^2} + \frac{\sigma \cdot \alpha}{\sqrt{\alpha^2}} \sinh \frac{1}{2} \sqrt{\alpha^2}. \quad (8.23)$$

Гомоморфизм $\text{SL}(2, \mathbb{C}) \rightarrow L_+^\uparrow$ и соотношения (8.20) — (8.23) обеспечивают различные параметризации группы Лоренца и связи между наборами параметров.

Имея в виду связь (8.16) между 4-векторами и эрмитовыми матрицами второго порядка, можно трансляции в пространстве-времени представить как сложение эрмитовых операторов: $x' = x + a \leftrightarrow X' = X + A$. Соответственно, элемент группы

Пуанкаре отображается парой матриц второго порядка (гомоморфизм $(A|\Lambda) \rightarrow (a|L)$) с законом умножения

$$(A_1|\Lambda_1)(A_2|\Lambda_2) = (A_1 + \Lambda_1 A_2 \Lambda_1^+ | \Lambda_1 \Lambda_2). \quad (8.24)$$

Пару $(A|\Lambda)$ можно считать оператором на множестве эрмитовых матриц:

$$(A|\Lambda)X = \Lambda X \Lambda^+ + A. \quad (8.25)$$

8.4. Спиноры и спинорные представления группы Лоренца

Специальная группа Лоренца [и группа $SL(2, C)$] обладают двумя неэквивалентными двумерными НП, комплексно-сопряженными друг другу: $L_+^\uparrow \rightarrow SL(2)$ и $L_+^\uparrow \rightarrow SL(2)^*$. Иными словами, существуют два равноправных комплексно-сопряженных спинорных представления первого ранга, $\Lambda \leftrightarrow \Lambda^*$, и мы будем говорить о спинорах первого и второго рода. Спинору $\xi = \xi^1 e_1 + \xi^2 e_2$ соответствует спинор $\xi^* = \xi^{1*} e_1^* + \xi^{2*} e_2^*$ ($\equiv \xi^{\dot{\alpha}} e_{\dot{\alpha}}$, $\dot{\alpha}$ — **пунктирные** индексы), преобразованию $\Lambda \xi = \xi'$ отвечает $\Lambda^* \xi^* = \xi'^*$.

Спиноры высшего ранга (спин-тензоры) получаются прямым умножением спиноров первого и второго рода; спинор ранга $(r_1 + r_2)$ является элементом прямого произведения r_1 спинорных пространств первого рода и r_2 — второго рода и осуществляет представление $\underbrace{\Lambda \times \Lambda \times \dots \times \Lambda}_{r_1} \times \underbrace{\Lambda^* \times \Lambda^* \times \dots \times \Lambda^*}_{r_2}$ группы $SL(2, C)$.

Неприводимыми являются представления симметричными по индексам каждого рода спинорами; по аналогии с группой вращений будем обозначать эти представления (и их матрицы) посредством $D^{(j_1 j_2)}(L)$, где $2j_1 = r_1$, $2j_2 = r_2$. Ими и ограничиваются все конечномерные НП группы Лоренца. За исключением одномерного представления ($j_1 = j_2 = 0$), представления $D^{(j_1 j_2)}$ неунитарны. Базисными элементами представления служат полиномы [ср. раздел 4.7]:

$$\Psi_{m_1 m_2}^{(j_1 j_2)} = \sqrt{\frac{(2j_1)!(2j_2)!}{(j_1 + m_1)!(j_1 - m_1)!(j_2 + m_2)!(j_2 - m_2)!}} e_+^{j_1 + m_1} e_-^{j_1 - m_1} e_+^{*j_2 + m_2} e_-^{*j_2 - m_2}. \quad (8.26)$$

(Подразумевается, что индекс m_2 — пунктирный.) Из способа построения матриц $D^{(j_1 j_2)}(L)$ вытекает соотношение:

$$D^{(j_1 j_2)}(L) = D^{(j_1 0)}(L) \times D^{(0 j_2)}(L) = D^{(j_1 0)}(L) \times [D^{(j_2 0)}(L)]^*. \quad (8.27)$$

Представления $D^{(jj)}$ обладают вещественным характером и эквивалентны своим комплексно-сопряженным. В частности, представление $D^{(\frac{1}{2}\frac{1}{2})}(L)$ эквивалентно множеству (вещественных) лоренцевых преобразований L . Переход от “канонических” координат $e_i e_j^*$ к псевдоевклидовым осуществляется посредством преобразования

$$\begin{aligned} e_{0,3} &= e_+ e_+^* \pm e_- e_-^*, \quad e_1 = e_+ e_-^* + e_- e_+^*, \quad i e_2 = e_+ e_-^* - e_- e_+^*, \\ 2x^0 &= x^{++} + x^{--}, \quad 2x^3 = x^{++} - x^{--}, \quad 2x^1 = x^{+-} + x^{-+}, \quad 2x^2 = i(x^{+-} - x^{-+}). \end{aligned} \quad (8.28)$$

Разложение на НП произведения двух НП осуществляется (как и для унитарной подгруппы $SU(2)$) с помощью обычных коэффициентов Клебша-Гордона:

$$D^{(j_1 j_2)} \times D^{(j_1' j_2')} = \sum_{J_1=j_1-j_1'}^{j_1+j_1'} \sum_{J_2=j_2-j_2'}^{j_2+j_2'} D^{(J_1 J_2)}, \quad (8.29)$$

$$\Psi_{M_1 M_2}^{J_1 J_2} = \sum (j_1 m_1 j_1' m_1' | J_1 M_1) (j_2 m_2 j_2' m_2' | J_2 M_2) \Psi_{m_1 m_2}^{J_1 J_2} \varphi_{m_1' m_2'}^{j_1' j_2'}. \quad (8.30)$$

При ограничении унитарными операторами представление $D^{(j_1 j_2)}$ становится приводимым представлением $D^{(j_1)} \times D^{(j_2)}$ и осуществляется операторами.

$$D^{(j_1)}(u) \times D^{(j_2)} * (u) = D^{(j_1)} \times C^{(j_2)} D^{(j_2)} [C^{(j_2)}]^{-1}.$$

Можно определить операцию поднятия и опускания спинорных индексов (каждого рода) с помощью “метрического” (единичного антисимметричного) тензора (ср. (3.23)):

$$\begin{aligned} (\varepsilon_{\alpha\beta}) = -(\varepsilon^{\alpha\beta}) = (C_{\alpha\beta}^{(1/2)}) &= \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} = i\sigma_2 = -D^{(1/2)}(0, \pi, 0) \\ \xi_\alpha &= \varepsilon_{\alpha\beta} \xi^\beta, \quad \xi^\alpha = \varepsilon^{\alpha\beta} \xi_\beta. \end{aligned} \quad (8.31)$$

Отметим следующую связь метрических тензоров $g_{\mu\nu}$ и $\varepsilon_{\alpha\beta}$:

$$g_{\mu\nu} x^\mu y^\nu = \frac{1}{2} \varepsilon_{\alpha\gamma} \varepsilon_{\beta\delta} x^{\alpha\dot{\gamma}} y^{\beta\dot{\delta}}.$$

Представлением матрицы $D^{(j)}(C)$ ($C^{(j)}$ в обозначениях раздела 4) можно воспользоваться для поднятия и опускания спинорных индексов m в формуле (8.26).

Спинорные представления группы Лоренца с пространственной инверсией.

Пространственная инверсия P (как и обращение времени T) коммутирует с поворотами, а бусты переводит в обратные:

$$PR(\xi) = RP(\xi), \quad PB(\mathbf{b}) = B(-\mathbf{b})P. \quad (8.32)$$

НП группы L^\uparrow при ограничении подгруппой L_+^\uparrow не может свестись к двумерному спинорному представлению $D^{(1/2,0)}$ или $D^{(0,1/2)}$, ибо, если выполняется первое из условий (8.32): $\Lambda(P)\Lambda(\xi) = \Lambda(\xi)\Lambda(P)$ для всех вращений, то $\Lambda(P)$ — скалярная матрица (лемма

Шура) и тогда она коммутирует со всеми матрицами второго порядка, что противоречит второму из условий (8.32). Таким образом, представления ортохронной группы Лоренца должны включать в себя пары сопряженных друг другу двумерных НП специальной группы Лоренца.

Представление $D^{(1/2,0)} + D^{(0,1/2)}$ неприводимо при учете инверсии. В каноническом базисе матрицы вращений, бустов и инверсии на основании леммы Шура и (8.32) имеют вид $[D(P)$ с точностью до множителей при $\sigma_2]$:

$$D(\xi, b) = \begin{pmatrix} \Lambda(\xi, b) & 0 \\ 0 & \Lambda^*(\xi, b) \end{pmatrix}, \quad D(P) = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_2 \\ \sigma_2 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.33)$$

Общий результат заключается в следующем. Конечномерными НП группы L^\uparrow являются $D^{(ij)} + D^{(j'i)}$ при $j \neq j'$, причем инверсия связывает между собой базисные векторы подпространств, инвариантных относительно вращений и бустов. Тензорные представления $D^{(ij)}$ при учете инверсии сохраняют свою размерность и могут дополнительно классифицироваться как истинно тензорные и псевдотензорные.

8.5. Инфинитезимальные операторы групп Лоренца и Пуанкаре

В разделе 5 было отмечено, что преобразования симметрии представляются в пространстве состояний физической системы унитарными или антиунитарными операторами. Группа Лоренца (и Пуанкаре), как любая непрерывная группа симметрии, представляется непрерывными унитарными операторами $U(L)$. Дело в том, что любое инфинитезимальное преобразование L можно рассматривать как квадрат другого преобразования L' , а квадрат как унитарного, так и антиунитарного оператора является унитарным оператором. Унитарные представления группы Лоренца, как отмечалось, могут быть только бесконечномерными, и их изучению целесообразно предпослать анализ инфинитезимальных операторов (*генераторов* представлений).

Рассмотрим преобразование Лоренца (8.8) с бесконечно малыми параметрами ξ и \mathbf{b} (для инфинитезимальной группы, впрочем, $\mathbf{b} = \mathbf{v}/c$; также $\mathbf{b} - i\xi = \boldsymbol{\alpha}$; см. (8.23)):

$$L(\xi, \mathbf{b}) = \begin{pmatrix} 1 & b^x & b^y & b^z \\ b^x & 1 & -\xi^z & \xi^y \\ b^y & \xi^z & 1 & -\xi^x \\ b^z & -\xi^y & \xi^x & 1 \end{pmatrix} = E + i\mathbf{J}\cdot\xi + i\mathbf{N}\cdot\mathbf{b}. \quad (8.34)$$

В унитарных представлениях генераторам J , N отвечают эрмитовы операторы, в векторном же представлении (8.34) инфинитезимальные матрицы поворотов эрмитовы, а матрицы бустеров — антиэрмитовы:

$$\begin{aligned} J_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, & J_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, & J_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \\ N_1 &= \begin{pmatrix} 0 & i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & N_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & N_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.35)$$

Соотношения коммутации генераторов определяются только правилом умножения элементов группы и потому одинаковы для всех представлений группы. Коммутируя матрицы (8.35), получаем (ϵ_{ijk} — единичный антисимметричный тензор в трех измерениях):

$$[J_i, J_j] = i\epsilon_{ijk} J_k, \quad [N_i, N_j] = -i\epsilon_{ijk} J_k, \quad [J_i, N_j] = i\epsilon_{ijk} N_k. \quad (8.36)$$

То же самое получается, конечно, если воспользоваться представлением генераторов через матрицы Паули согласно (8.20) — (8.22),

$$J_i \rightarrow \sigma_i/2, \quad N_i \rightarrow i\sigma_i/2.$$

Инфинитезимальные матрицы $A_i = (J_i - iN_i)/2$, $B_i = (J_i + iN_i)/2$ удовлетворяют еще более простым соотношениям

$$[A_i, A_j] = i\epsilon_{ijk} A_k, \quad [B_i, B_j] = i\epsilon_{ijk} B_k, \quad [A_i, B_j] = 0, \quad (8.37)$$

что можно сопоставить с рассмотренными выше спинорными представлениями группы. Через генераторы A , B равенство (8.34) переписывается в виде

$$L = E - iA_j (\xi^j - ib^j) - iB_j (\xi^j + ib^j). \quad (8.38)$$

В векторном, обоих спинорных первого ранга, а, значит, и во всех спинорных представлениях, рассмотренных в предыдущем параграфе, A , B — эрмитовы операторы (при комплексных параметрах). Группа Лоренца (по крайней мере, в некоторой окрестности единицы) распадается в прямое произведение двух групп “вращения”, что и обуславливает возможность составления ее НП как прямых произведений вида (8.27).

Отметим, что если матрицу Лоренца написать в виде $L^{\mu\nu} = g^{\nu\rho} L^{\mu}_{\rho}$, то в окрестности единичного преобразования $L^{\mu\nu} = g^{\mu\nu} + \omega^{\mu\nu}$, и $\omega^{\mu\nu} = -\omega^{\nu\mu}$ (ср. (8.3)). Теперь (8.34) можно переписать в ковариантной форме:

$$L = E + \omega^{\mu}_{\nu} T_{\mu}^{\nu} = E + \omega^{\mu\nu} T_{\mu\nu} = E - (i/2)\omega^{\mu\nu} M_{\mu\nu}, \quad (8.39)$$

где T_{μ}^{ν} — матрица (*проективная*) с единичным элементом в μ -ой строке и ν -ом столбце при прочих элементах, равных нулю, $T_{\mu\nu} = g_{\nu\rho} T_{\mu}^{\rho}$, $M_{\mu\nu} = i(T_{\mu\nu} - T_{\nu\mu})$. Очевидно, $\omega^{i0} \leftrightarrow b^i$, $\omega^{ij} \leftrightarrow \varepsilon_{ijk} \xi^k$; $M_{i0} = N_i$, $M_{ij} = \varepsilon_{ijk} J_k$, $J_k = \varepsilon_{ijk} M_{ij}/2$, кроме того

$$[T_{\mu}^{\nu}, T_{\sigma}^{\rho}] = \delta^{\nu}_{\sigma} T_{\mu}^{\rho} - \delta^{\rho}_{\mu} T_{\sigma}^{\nu}. \quad (8.40)$$

Отсюда:

$$[M_{\mu\nu}, M_{\rho\sigma}] = i(g_{\mu\sigma} M_{\nu\rho} + g_{\nu\rho} M_{\mu\sigma} - g_{\mu\rho} M_{\nu\sigma} - g_{\nu\sigma} M_{\mu\rho}). \quad (8.41)$$

Нетрудно включить в рассмотрение группу Пуанкаре, воспользовавшись 5-мерным представлением (8.7) этой группы при бесконечно малых параметрах a , ξ , b :

$$(a|L(\xi, b)) = E + iJ \cdot \xi + iN \cdot b + iP_{\mu} a^{\mu}, \quad (8.42)$$

где генераторы P_{μ} (“4-импульс”) представляются 5-мерными проективными матрицами $P_{\mu} = -iT_{\mu}^5$. Непосредственное вычисление приводит к следующим соотношениям

$$[P_{\mu}, P_{\nu}] = 0, [P_i, J_j] = i\varepsilon_{ijk} P_k, [P_i, N_j] = -i\delta_{ij} P_0, [P_0, J_i] = 0, [N_i, P_0] = iP_i. \quad (8.43)$$

или

$$[M_{\mu\nu}, P_{\rho}] = i(P_{\mu} g_{\nu\rho} - P_{\nu} g_{\mu\rho}). \quad (8.44)$$

Для получения этих соотношений опять-таки можно воспользоваться представлением группы Пуанкаре (8.24) с помощью двумерных матриц.

Определим теперь *операторы Казимира* групп Лоренца и Пуанкаре. Это составленные из генераторов операторы, коммутирующие со всеми генераторами (а, значит, и со всеми операторами, осуществляющими представление) группы и поэтому, согласно лемме Шура, являющиеся скалярами на пространствах, на которых осуществляются НП. Значения этих скаляров используются для индексации НП. Единственный оператор Казимира группы вращений [или SU(2)] — это $\mathbf{J}^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$, принимающий на пространстве НП $D^{(j)}$ значение $j(j+1)$. Для полной ортогональной группы O_3 еще одним оператором Казимира является оператор пространственной инверсии со значениями +1 и -1, и индексы +, - используются для различения тензоров и псевдотензоров. Как следует из (8.37), операторами Казимира группы Лоренца являются

$$\mathbf{A}^2 = A_1^2 + A_2^2 + A_3^2, \quad \mathbf{B}^2 = B_1^2 + B_2^2 + B_3^2. \quad (8.45)$$

Их собственные значения на (неунитарных) НП $D^{(j_1 j_2)}$ равны, соответственно, $j_1(j_1+1)$ и $j_2(j_2+1)$. Вместо \mathbf{A} , \mathbf{B} возможно использование их комбинаций

$$2(\mathbf{A}^2 + \mathbf{B}^2) = \mathbf{J}^2 - N^2, \quad -i(\mathbf{A}^2 - \mathbf{B}^2) = \mathbf{J} \cdot \mathbf{N}. \quad (7.46)$$

Для общей группы Лоренца существует еще один оператор Казимира — PT (комбинация пространственной инверсии и обращения времени). На пространствах физических состояний он представляется антиунитарным оператором.

Операторы A^2 , B^2 не коммутируют с импульсом P , и поэтому не являются операторами Казимира группы Пуанкаре. Один оператор Казимира этой группы очевиден — это лоренц-инвариантная величина

$$P^2 = P_0^2 - \mathbf{P}^2 = P_0^2 - P_1^2 - P_2^2 - P_3^2. \quad (8.47)$$

Еще один оператор Казимира можно получить следующим образом. Из компонент антисимметричного тензора $M_{\mu\nu}$ ($M_{0i} = N_i$, $M_{ik} = \varepsilon_{ikl} J_l$) и вектора P^σ можно составить псевдовектор

$$W^\mu = (1/2)\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} M_{\nu\rho} P_\sigma \quad (\varepsilon^{0123} = 1),$$

$$W^0 = \mathbf{J} \cdot \mathbf{P}, \quad \mathbf{W} = \mathbf{J} P^0 + [\mathbf{N} \times \mathbf{P}], \quad (8.48)$$

который, как легко убедиться, используя (8.44), коммутирует со всеми компонентами импульса. Поэтому квадрат его, $W^2 = W_\alpha W^\alpha$ является инвариантом группы Пуанкаре. Пространственные компоненты векторов во второй строке формулы (8.48) заданы своими контравариантными компонентами. Из определения W^μ вытекает: $W P = W^\mu P_\mu = 0$.

При преобразовании Пуанкаре неизменен также знак компоненты P^0 любого времениподобного вектора P ($P^2 > 0$):

$$\varepsilon = P^0 |P^0|. \quad (8.49)$$

Отметим еще нерелятивистские аналоги инфинитезимальных операторов и коммутационных соотношений для них. Переход к галилеевой группе осуществляется посредством замены $b \Rightarrow v/c$ и последующим переходом к пределу $c \rightarrow \infty$. Вместо (8.42) получаем

$$(\mathbf{a}|G(\xi, \mathbf{v})) = E + i\mathbf{J} \cdot \xi + (i/c)\mathbf{N} \cdot \mathbf{v} + i(cP_0)t - i\mathbf{P} \cdot \mathbf{a} \quad (8.50)$$

(\mathbf{J} , \mathbf{N} , \mathbf{P} — ковариантные векторы). Генераторы, отвечающие скорости \mathbf{v} , $\mathbf{N}' = \mathbf{N}/c$; соотношения коммутации (8.36) сохраняются без изменений, за исключением второго из них, $[N'_i, N'_j] = -(i/c^2)\varepsilon_{ijk} J_k \rightarrow 0$. Генератору сдвига во времени в нерелятивистской физике соответствует (нерелятивистский) гамильтониан (энергия) системы H ; при предельном переходе для отдельной частицы $cP_0 \rightarrow Mc^2 + Mv^2/2$ (ср. (8.15)). Поэтому и для произвольной системы в нерелятивистском случае следует сохранить связанный с массой покоя вклад в энергию Mc^2 : $cP_0 \rightarrow Mc^2 + H$. Таким образом, изменения в коммутаторах (8.43) следующие:

$$[P'_i, N'_j] = -i\delta_{ij}M, \quad [N'_i, H] = iP_i. \quad (8.51)$$

8.6. Унитарные неприводимые представления группы Пуанкаре

Наличие в группе Пуанкаре инвариантной абелевой подгруппы трансляций позволяет строить НП по аналогии с НП пространственных групп (раздел 6). В (гильбертовом) пространстве представления выбираем базис, диагонализующий операторы трансляций, а значит, и импульсы; поэтому можно говорить об **импульсном представлении**:

$$D(a)|p\zeta\rangle = \exp[i(p^0 a^0 - \mathbf{p}\cdot\mathbf{a})]|p\zeta\rangle; P^\mu|p\zeta\rangle = p^\mu|p\zeta\rangle. \quad (8.52)$$

Здесь ζ означает все дополнительные квантовые числа, характеризующие базисные векторы (состояния). По аналогии с (6.9) убеждаемся, что вектор $D(L)|p\zeta\rangle$ также является собственным для импульса и относится к собственным значениям $p'^\alpha = L^\alpha_\beta p^\beta$. Значение оператора Казимира P^2 (8.47) на функциях (8.52) равно $p^{0\ 2} - \mathbf{p}^2 = m^2$ (в релятивистской механике m — масса покоя “частицы”), так что величина m играет роль индекса “неприводимой звезды” представления. Для физики представляют интерес лишь значения $m^2 > 0$ и $m = 0$ (времениподобные и изотропные “импульсы”). Энергия частиц p^0 в пределах НП не меняет знака и считается положительной.

При $m^2 > 0$ в качестве исходного “луча” целесообразно выбрать 4-импульс $p_m = (m, 0, 0, 0)$, инвариантный относительно всех трехмерных вращений R_3 . Этот луч соответствует состояниям частицы в системе покоя. Пользуясь вытекающим из (8.8) разложением на смежные классы

$$L_+^\uparrow = \sum_b B(\mathbf{b})R_3,$$

в качестве элементов, порождающих остальные “лучи”, можно выбрать чистые бусты. На множестве векторов $|p_m, \zeta\rangle$ индуцируется (малое) представление группы R_3 , которое, очевидно, должно быть неприводимым, если неприводимо исходное представление группы Пуанкаре. Поэтому в число индексов ζ входят спин s (величина момента покоящейся частицы) и проекция его на ось z — σ . Остальные квантовые числа ζ' могут относиться к внутренней (не связанной с пространством и временем) симметрии частицы.

Значение второго оператора Казимира, W^2 , в состоянии $|p_m, s, \sigma, \zeta'\rangle$, а значит, и в других состояниях пространства НП, равно $m^2 s(s+1)$. Сам псевдовектор W^μ на этих состояниях фактически совпадает с вектором спина: $W^0 = 0$, $W^i = -mJ_i = mJ^i$. Таким образом, НП группы Пуанкаре однозначно характеризуются индексами $m, s, (D^{(m,s)})$, а базисные векторы пространства представления можно выбрать в виде $|p, \sigma, \zeta'\rangle$:

$$|p, \sigma, \zeta'\rangle = \hat{D}^{(ms)}(B_p)|p_m, s, \sigma, \zeta'\rangle.$$

Энергия соответствующего состояния равна $p^0 = \sqrt{m^2 + \mathbf{p}^2}$.

Запишем результат действия на базисный вектор произвольного оператора представления:

$$D^{(ms)}(a|L(\xi, \mathbf{b})|p, \sigma) = \exp(ip' \cdot a) \sum_{\sigma'} D^{(s)}_{\sigma', \sigma}(R(\xi')) |p', \sigma'), \quad (8.53)$$

где $p' = Lp$, а вращение $R(\xi')$ находится из соотношения $L(\xi, \mathbf{b})B(\mathbf{b}_p) = B(\mathbf{b}_{p'})R(\xi')$. Через $B(\mathbf{b}_p)$ обозначен буст, порождающий луч (p^0, \mathbf{p}) ; очевидно, $\mathbf{b}_p = (\mathbf{p}/|\mathbf{p}|) \operatorname{asinh}(|\mathbf{p}|/m)$ (см. (8.9)).

Пусть теперь $m^2 = 0$. В качестве представляющего (исходного) луча возьмем $p_0 = (1, 0, 0, 1)$. Этому 4-вектору отвечает эрмитова матрица $P_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$ (см. (8.16)),

инвариантная относительно преобразований (8.17) с матрицами вида

$$\Lambda = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & \beta \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta e^{-i\alpha} \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

образующими трехпараметрическую

подгруппу $SL(2)$. Эта подгруппа, в свою очередь, содержит двухпараметрическую

абелеву подгруппу матриц вида $\begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, изоморфную группе трансляций плоскости

(соответствующие преобразования Лоренца обозначим $L(\beta)$), и подгруппу вращений в

плоскости. Таким образом, малая подгруппа есть группа движений евклидовой плоскости; построение ее НП напоминает начальную часть настоящего параграфа. В

пространстве унитарного представления (унитарные) операторы подгруппы $L(\beta)$ можно

диагонализировать на векторах $|p_0, \mathbf{k}, \zeta\rangle$, относящихся к собственным значениям $\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a})$,

где \mathbf{a} — двумерный вектор, отвечающий комплексному параметру $\beta = a^1 + ia^2$.

Учитывая, что $\begin{pmatrix} e^{i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \beta e^{2i\alpha} \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$, нетрудно убедиться, что

пространство малого представления включает все векторы $|p_0, \mathbf{k}', \zeta\rangle$ с $|\mathbf{k}'| = |\mathbf{k}|$, (k^2 —

инвариант малой группы) и при $\mathbf{k} \neq 0$ оно бесконечномерно. Такие представления в

физике не рассматриваются (они могли бы соответствовать частицам с бесконечным,

даже непрерывным спином), положим поэтому $\mathbf{k} = 0$. Теперь векторы $|p_0, \zeta\rangle$ должны

осуществлять НП однопараметрической группы поворотов около оси z , т.е., это

векторы типа $|p_0, h\rangle$, где h — целое или полуцелое число — собственное значение

компоненты момента J_z частицы (*спиральность*). Напомним, что по оси z направлен

исходный луч — импульс p_0 частицы.

Далее, произвольный изотропный вектор $p = (p^0, \mathbf{p})$ можно получить из p_0 в два этапа: буст вдоль z с $b_{p0} = \ln p^0$ и поворот около оси $\mathbf{n} \perp \mathbf{p}$, z на угол $\theta = \angle(\mathbf{p}, z)$. Положим $D(R(\mathbf{n}, \theta)B(b_{p0}e_z))|p_0, h) = |p, h)$. Результат действия произвольного оператора представления на базисные векторы:

$$D^{(0h)}(a|L(\xi, \mathbf{b}))|p, h) = \exp(ip' \cdot a - ih\varphi)|p', h), \quad (8.54)$$

где снова $p' = Lp$, а угол φ определяется из соотношения

$$L(\xi, \mathbf{b})L(\mathbf{n}\theta, 0)L(0, b_{p0}e_z) = L(\mathbf{n}'\theta', 0)L(0, b_{p'0}e_z)L(\varphi e_z, 0)L(\beta).$$

Оба оператора Казимира P^2 и W^2 принимают в НП $D^{(0h)}$ нулевые значения (при вычислении $W_{1,2}|p_0, h)$ следует учесть, что $|p_0, h)$ относится к нулевому собственному значению $\mathbf{k} = 0$ инфинитезимальных операторов $N_1 - J_2, -J_1 - N_2$, отвечающих параметру $\beta = a_1 + ia_2$, см. задачу 19). Отметим еще, что $(W - hP)|p_0, h) = 0$, откуда вытекает, что в представлении $D^{(0h)}$ векторные операторы W и P пропорциональны друг другу с коэффициентом h :

$$W = hP. \quad (8.55)$$

Пространственная инверсия P коммутирует с вращениями, меняет знак направления буста и пространственной части вектора трансляции:

$$P(a^0, \mathbf{a}|L(\xi, \mathbf{b})) = (a^0, -\mathbf{a}|L(\xi, -\mathbf{b}))P. \quad (8.56)$$

Включение ее в группу симметрии удваивает число НП типа $D^{(ms)}$, классифицируя их по четности:

$$D^{(ms\pm)}(I)|p\sigma\pm) = \pm |p\sigma\pm). \quad (8.57)$$

Инверсия не входит в группу вектора $(1 \ 0 \ 0 \ 1)$, переводя его в $(1 \ 0 \ 0 \ -1)$. Поэтому она объединяет два НП $D^{(0h)}$ и $D^{(0-h)}$ с $h \neq 0$ в единое НП $D^{(0|h)}$, причем

$$D(I)|p h) = |p, -h). \quad (8.58)$$

Включение обращения времени, как уже отмечалось в разделе 5, связано с введением антиунитарных операторов и копредставлений. Подробнее вопросы, связанные с отражениями, обсудим ниже.

8.7. Спиральный и спинорный базисы НП группы Пуанкаре с $m^2 > 0$

Канонический базис НП группы Пуанкаре определялся посредством полного набора взаимно коммутирующих наблюдаемых (в скобках указаны соответствующие собственные значения):

$$P^2 (m^2), P_\mu [p^0, \mathbf{p}, (p^0)^2 - \mathbf{p}^2 = m^2], W^2 [m^2 s(s+1)], S_3 (\sigma). \quad (8.59)$$

Векторы канонического базиса $|m, \mathbf{p}, s, \sigma, \zeta\rangle \equiv |\mathbf{p}, \sigma, \zeta\rangle$ (квантовые числа ζ связаны с возможной внутренней симметрией частиц) взаимно ортогональны, и их нормировка определяется соотношением

$$(\mathbf{p}' \sigma \zeta | \mathbf{p} \sigma \zeta) = 2p^0 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \delta_{\sigma\sigma'}, \quad (8.60)$$

которое естественным образом согласуется с релятивистски инвариантным условием полноты базиса:

$$1 = \sum_{\sigma} \int |\mathbf{p}\sigma\rangle d^4 p \delta(p^2 - m^2) \theta(p^0) (\mathbf{p}\sigma | = \sum_{\sigma} \int |\mathbf{p}\sigma\rangle \frac{d^3 \mathbf{p}}{2p^0} (\mathbf{p}\sigma |. \quad (8.61)$$

С учетом (8.60) оператор (8.61) действительно переводит любой базисный вектор в себя, т.е., является единичным оператором. Произвольное состояние частицы разлагается по базисным состояниям следующим образом:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} \int |\mathbf{p}\sigma\rangle \frac{d^3 \mathbf{p}}{2p^0} \Psi(\mathbf{p}, \sigma), \quad (8.62)$$

$\Psi(\mathbf{p}, \sigma)$ — волновая функция частицы в каноническом представлении (базисе).

Спиральный базис отличается от канонического тем, что в полном наборе наблюдаемых (8.59) вместо S_3 фигурирует **спиральность** — проекция спина (и полного момента в этом случае) на направление движения частицы:

$$\hat{h} = \frac{\mathbf{S} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|} = \frac{\mathbf{J} \cdot \mathbf{p}}{|\mathbf{p}|}. \quad (8.63)$$

Оператор h коммутирует со всеми вращениями и трансляциями. Он, как и S_i , принимает значения от $-s$ до $+s$. Построить спиральный базис можно следующим образом. Буст вдоль оси z $B(0, 0, p^3)$ переводит базисные векторы $|p_m s \sigma \equiv h\rangle$ малого представления для исходного импульса $p_m = (m \ 0 \ 0 \ 0)$ в базисные векторы для импульса $(p^0 \ 0 \ 0 \ p^3)$, не меняя h , а последующий поворот этого вектора с $\mathbf{p}||z$ позволяет получить векторы, соответствующие всем значениям импульсов \mathbf{p} . Таким образом,

$$|\mathbf{p}, h, \zeta\rangle = D(R(\xi_{\mathbf{p}}))D(B(0, 0, p_3))|p_m \sigma \equiv h\rangle, \quad (8.64)$$

где $p^3 = |\mathbf{p}|$, а вектор поворота $\xi_{\mathbf{p}} \perp z, \mathbf{p}$, по величине равен углу между осью z и \mathbf{p} ($\xi_{\mathbf{p}} = \mathbf{e}_z \times \mathbf{p}/|\mathbf{p}|$; если \mathbf{p} направлен против оси z , то $|\xi_{\mathbf{p}}| = \pi$).

Отметим, что в отличие от случая безмассовых частиц, спиральность при $m^2 > 0$ не является сохраняющейся величиной. Для частиц с нулевой массой (в отсутствие инвариантности относительно пространственных отражений) спиральность сохраняется, два знака спиральности соответствуют двум разным частицам.

Определенным неудобством канонического (и спирального) базиса является то, что при преобразовании Пуанкаре базисного вектора вращение в спиновом пространстве частицы зависит от ее импульса (см. (8.53)). *Спинорный базис* свободен от этого недостатка, но достигается это усовершенствование за счет утраты ортогональности базисных состояний. Определяется он через канонический базис $|\mathbf{p}, \sigma\rangle$ следующим образом:

$$|\mathbf{p}, \lambda\rangle = D^{(s_0)}(B_p^{-1})|\mathbf{p}, \lambda\rangle_{\text{канон}} = \sum_{\sigma} D^{(s_0)}_{\sigma\lambda}(B_p^{-1})|\mathbf{p}, \sigma\rangle, \quad (8.65)$$

где $B_p = B(\mathbf{b}_p)$ — буст, порождающий луч (p^0, \mathbf{p}) из исходного p_m ($\mathbf{b}_p = (\mathbf{p}/|\mathbf{p}|)A\sinh(|\mathbf{p}|/m) = (\mathbf{p}/|\mathbf{p}|)A\cosh(p^0/m)$), а $D^{(s_0)}$ — спинорное представление веса (s_0) . В спинорном базисе:

$$\hat{D}^{(ms)}(a | L) | p\lambda\rangle = e^{iLp \cdot a} \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}^{(s_0)}(L) | Lp, \lambda'\rangle. \quad (8.66)$$

Как видно, теперь индексы \mathbf{p} , λ преобразуются независимо друг от друга; имеет смысл представить базисный вектор в виде $|\mathbf{p}, \lambda\rangle = |\mathbf{p}\rangle|\lambda\rangle$, и становится ясно, что $D^{(ms)} = D^{(m_0)} \times D^{(s_0)}$. Условие ортогональности и нормировки (8.60) в спинорном базисе заменяется на следующее:

$$\langle \mathbf{p}' \lambda' | \mathbf{p} \lambda \rangle = 2p^0 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') D_{\lambda'\lambda}^{(s_0)}(B_p^{-2}). \quad (8.67)$$

Очевидно,

$$\Lambda(\mathbf{b}_p) = \exp\left(\frac{1}{2} \mathbf{b}_p \cdot \boldsymbol{\sigma}\right) = \frac{p^0 + m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2m(p^0 + m)}}, \quad \Lambda(\mathbf{b}_p^{-2}) = \frac{p^0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{m} \equiv \frac{\hat{p}}{m}. \quad (8.68)$$

Вместо (8.62) в спинорном базисе имеем:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\lambda\lambda'} \int |\mathbf{p}\lambda\rangle \frac{d^3\mathbf{p}}{2p^0} D_{\lambda\lambda'}^{(s_0)}(B_p^2) \langle \mathbf{p}\lambda' | \Psi \rangle. \quad (8.69)$$

Выпишем еще вид инфинитезимальных операторов представлений в рассмотренных нами базисах. В каноническом базисе, используя (8.53), (8.60), (8.62), имеем

$$\begin{aligned} (\mathbf{p}, \sigma | \hat{D}^{(ms)}(a | \xi, \mathbf{b}) | \Psi) &= (\hat{D}^{(ms)}\Psi)(\mathbf{p}, \sigma) = \sum_{\sigma'} \int (\mathbf{p}, \sigma | \hat{D}^{(ms)} | \mathbf{p}', \sigma') \frac{d^3\mathbf{p}'}{2p'^0} \Psi(\mathbf{p}', \sigma') = \\ &= \sum_{\sigma'\sigma''} \int e^{iL(\xi, \mathbf{b})\mathbf{p}' \cdot \mathbf{a}} D_{\sigma''\sigma'}^{(s)}(R[\xi'(\mathbf{p}', \xi, \mathbf{b})]) (\mathbf{p}, \sigma | \mathbf{p}'' (= L\mathbf{p}'), \sigma'') \frac{d^3\mathbf{p}'}{2p'^0} \Psi(\mathbf{p}', \sigma') = \\ &= \sum_{\sigma'} e^{i\mathbf{p} \cdot \mathbf{a}} D_{\sigma\sigma'}^{(s)}(\xi'(L^{-1}\mathbf{p}, \xi, \mathbf{b})) \frac{p^0}{(L^{-1}p)^0} \Psi(L^{-1}\mathbf{p}, \sigma'). \end{aligned} \quad (8.70)$$

Перепишем соотношение $R(\xi') = B_p^{-1} L(\xi, \mathbf{b}) B_p$, ($p' = L^{-1}p$) через спиновые матрицы второго порядка при малых ξ, \mathbf{b} :

$$E - \frac{i}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot \xi' = \frac{p^0 + m - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}}{\sqrt{2m(p^0 + m)}} \left[E - \frac{i}{2} \boldsymbol{\sigma} \cdot (\xi + i\mathbf{b}) \right] \frac{p^{0'} + m + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}'}{\sqrt{2m(p^0 + m)}}.$$

Подставляя $p' = p - \delta p$, $\delta p^0 = \mathbf{b} \cdot \mathbf{p}$, $\delta \mathbf{p} = p^0 \mathbf{b} + [\xi \times \mathbf{p}]$, сохраняя члены первого по \mathbf{b}, ξ порядка и учитывая соотношения

$$(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) - (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}) = 2i (\boldsymbol{\sigma} \cdot [\mathbf{A} \times \mathbf{p}]), \quad (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p}) = -(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{A}) p^2 + 2(\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(\mathbf{A} \cdot \mathbf{p}),$$

получаем:

$$\boldsymbol{\sigma} \cdot \xi' = \boldsymbol{\sigma} \cdot \xi - [\mathbf{p} \times \boldsymbol{\sigma}] \cdot \mathbf{b} / (p^0 + m).$$

Соотношение (8.70) при $a = 0$, малых ξ, \mathbf{b} переписывается в виде:

$$(E - iJ_i \xi_i - iN_i b_i) \psi(\mathbf{p}, \sigma) = \sum_{\sigma'} \left\{ E - i\mathbf{S} \cdot \left(\xi - \frac{\mathbf{p} \times \mathbf{b}}{p^0 + m} \right) \right\}_{\sigma\sigma'} \left(1 + \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{b}}{p^0} \right) \left\{ 1 - (p^0 \mathbf{b} + [\xi \times \mathbf{p}]) \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}} \right\} \psi(\mathbf{p}, \sigma')$$

Отсюда

$$\mathbf{J} = \mathbf{S} - i\mathbf{p} \times \frac{\partial}{\partial \mathbf{p}}; \quad N = -ip^0 \frac{\partial}{\partial p} + \frac{1}{p^0} \mathbf{p} + \frac{\mathbf{S} \times \mathbf{p}}{p^0 + m}. \quad (8.71)$$

Полный момент, как и следует, складывается из спинового (\mathbf{S}) и орбитального момента $\mathbf{L} = \mathbf{R} \times \mathbf{p}$, в импульсном представлении $\mathbf{R} = i\partial / \partial \mathbf{p}$. Обратим внимание на то, что оператор буста включает в себя импульс — оператор соответствующего бусту смещения. В нерелятивистском пределе это слагаемое исчезает.

В спинорном базисе вместо (8.70) имеем

$$[D^{(ms)}(a | L) \psi](\mathbf{p}, \lambda) = \sum_{\lambda'} e^{ip \cdot a} D_{\lambda\lambda'}^{(s_0)} \left(B_p^{-2} L B_{L^{-1}p}^2 \right) \frac{p^0}{(L^{-1}p)^0} \psi(L^{-1}\mathbf{p}, \lambda'). \quad (8.72)$$

Матричный элемент в правой части для инфинитезимального преобразования L равен $(E - i\mathbf{S} \cdot (\xi - i\mathbf{b}))_{\lambda\lambda'}$, и для инфинитезимальных операторов получаем:

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}, \quad N = (\mathbf{p}/p^0) - p^0 \mathbf{R} - i\mathbf{S}. \quad (8.73)$$

в полном соответствии с неунитарностью спинорного представления и тем фактом, что спинорный базис является естественным для произведения $D^{(m_0)} \times D^{(s_0)}$. Нетрудно проверить, что для обоих наборов (8.71) и (8.73) коммутационные соотношения (8.36), (8.43) выполняются.

8.8. Элементы квантовой теории полей

Приведем некоторые сведения из квантовой теории полей в связи с приложениями в этой теории неприводимых представлений группы Пуанкаре. В квантовой теории полей приходится рассматривать одновременно состояния с разными числами частиц, с разными зарядами (это могут быть электрические заряды, барионные и лептонные числа и т.п.). Заряды Q_i обычно имеют строго определенные значения в любом физическом состоянии, т.е., соответствующие им операторы Q_i входят во все полные наборы коммутирующих наблюдаемых. Это обстоятельство накладывает определенные ограничения на принцип суперпозиции и на наблюдаемые; совокупность этих ограничений называют *правилами суперотбора*. Недопустимы суперпозиции состояний с разными значениями зарядов; не являются наблюдаемыми эрмитовы операторы, связывающие такие состояния. Все гильбертово пространство состояний распадается в прямую сумму неперемешивающихся ортогональных подпространств (*когерентных пространств*), в каждом из которых “заряды” имеют определенные значения. Эрмитов оператор, связывающий два подпространства, не коммутировал бы с совокупностью операторов заряда и потому не мог бы входить ни в один из полных наборов коммутирующих наблюдаемых.

Непрерывные преобразования группы Пуанкаре переводят каждый луч (физически реализуемое состояние) в луч того же когерентного пространства. Отражения могут связывать два разных когерентных пространства. Так, зарядовое сопряжение связывает пространства частиц и античастиц (если частицы совпадают с античастицами, это, конечно, одно и то же пространство). *Калибровочные (градиентные первого рода) преобразования* меняют фазы состояний каждого когерентного пространства, не меняя наблюдаемых. С инвариантностью физической картины относительно таких преобразований и связывают сохранение зарядов. Фазы частиц и античастиц при калибровочных преобразованиях меняются противоположным образом.

Множество взаимно ортогональных состояний одной частицы $|\mathbf{p}, \sigma, \zeta\rangle = D^{(ms)}(B_p)|\mathbf{p}_m, \sigma, \zeta\rangle$ удобно представить как результат действия на вакуумное состояние *операторов рождения* $a^+(\mathbf{p}, \sigma)$:

$$a^+(\mathbf{p}, \sigma)|0\rangle = |\mathbf{p}, \sigma\rangle. \quad (8.74)$$

Оператор уничтожения $a(\mathbf{p}, \sigma)$ эрмитово сопряжен к $a^+(\mathbf{p}, \sigma)$, $(|\mathbf{p}, \sigma\rangle)^+ = \langle 0|a(\mathbf{p}, \sigma)$; при этом полагается, что $a(\mathbf{p}, \sigma)|0\rangle = 0$. Операторы рождения и уничтожения подчиняются

коммутационным или антикоммутационным перестановочным соотношениям в зависимости от статистики частиц. Явный вид коммутатора (антикоммутатора) можно получить, используя соотношение нормировки одночастичных состояний (8.60):

$$[a(\mathbf{p}, \sigma), a^\dagger(\mathbf{p}', \sigma')] = 2p_0 \delta_{\sigma\sigma'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (8.75)$$

Часто множитель $\sqrt{2p_0}$ вводят в определение операторов a^\dagger , a для упрощения правил перестановки (исчезает множитель $2p_0$). Правила преобразования операторов вытекают из правил преобразования состояний (8.53):

$$\begin{aligned} \hat{D}(a | L) a^\dagger(\mathbf{p}, \sigma) \hat{D}^{-1}(a | L) &= \sum_{\sigma'} e^{iLp \cdot a} D_{\sigma'\sigma}^{(s)}(B_{\mathbf{p}'}^{-1} L B_{\mathbf{p}}) a^\dagger(\mathbf{p}', \sigma'), \\ \hat{D}(a | L) a(\mathbf{p}, \sigma) \hat{D}^{-1}(a | L) &= \sum_{\sigma'} e^{-iLp \cdot a} D_{\sigma\sigma'}^{(s)}(B_{\mathbf{p}}^{-1} L^{-1} B_{\mathbf{p}'}) a(\mathbf{p}', \sigma'). \end{aligned} \quad (8.76)$$

Вспоминая, что для вращений

$$D^{(s)}(R) = \tilde{D}^{(s)} * (R^{-1}) = C^{(s)} \tilde{D}^{(s)}(R^{-1}) C^{(s)-1},$$

можно переопределить операторы рождения следующим образом:

$$a^{\dagger+}(\mathbf{p}, \rho) = \sum_{\sigma} D_{\rho\sigma}^{(s)}(C^{(s)}) a^\dagger(\mathbf{p}, \sigma) = (-1)^{s-\rho} a^\dagger(\mathbf{p}, -\rho), \quad (8.77)$$

так что они при преобразованиях Лоренца меняются так же, как и операторы уничтожения. Операторы рождения и уничтожения в спинорном представлении:

$$a_\lambda^\dagger(\mathbf{p}) = \sum_{\sigma} D_{\lambda\sigma}^{(s_0)}(B_{\mathbf{p}}) a^{\dagger+}(\mathbf{p}, \sigma), \quad a_\lambda(\mathbf{p}) = \sum_{\sigma} D_{\lambda\sigma}^{(s_0)}(B_{\mathbf{p}}) a(\mathbf{p}, \sigma)$$

просто преобразуются под действием элементов группы Пуанкаре:

$$D(a | L) a_\lambda^\pm(\mathbf{p}) D^{-1}(a | L) = e^{\pm iLp \cdot a} \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}^{(s_0)}(L^{-1}) a_{\lambda'}^\pm(\mathbf{p}'), \quad p' = Lp. \quad (8.78)$$

Перестановочное соотношение для этих операторов:

$$\begin{aligned} [a_\lambda(\mathbf{p}), a_\sigma^\dagger(\mathbf{p}')]_{\pm} &= \sum_{\lambda'\sigma'} D_{\lambda\lambda'}^{(s_0)}(B_{\mathbf{p}}) D_{\sigma\sigma'}^{(s_0)}(B_{\mathbf{p}'}) [a(\mathbf{p}\lambda'), a^\dagger(\mathbf{p}'\sigma')] \\ &= 2p^0 \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') D_{\lambda\sigma}^{(s_0)}(B_{\mathbf{p}}^2), \end{aligned} \quad (8.79)$$

где учтено, что $D_{\lambda\lambda'}^{(s_0)}(B_{\mathbf{p}})$ — эрмитова матрица.

Операторы квантованных полей строятся как совокупности (инвариантные интегралы) операторов рождения и уничтожения частиц (и античастиц) с простым законом фазового преобразования $\varphi(x) \rightarrow e^{i\delta} \varphi(x)$ (симметрия относительно такого преобразования связана с тем, что наблюдаемые величины действительны и зависят лишь от комбинаций функций поля типа $\varphi\varphi^*$):

$$\begin{aligned}\varphi_\lambda(x) &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3 p}{2p^0} \{a_\lambda(\mathbf{p})e^{-ip \cdot x} + b_\lambda^+(\mathbf{p})e^{ip \cdot x}\} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int \frac{d^3 p}{2p^0} \sum_\sigma D_{\lambda\sigma}^{(s_0)}(B_p) \{a(\mathbf{p}\sigma)e^{-ip \cdot x} + (-1)^{s-\sigma} b^+(\mathbf{p}-\sigma)e^{ip \cdot x}\}\end{aligned}\quad (8.80)$$

Преобразование операторов поля при преобразованиях Пуанкаре осуществляется естественным образом:

$$D(a|L)\varphi_\lambda(x)D^{-1}(a|L) = \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}^{(s_0)}(L^{-1})\varphi_{\lambda'}(Lx+a). \quad (8.81)$$

Рассчитаем тот (анти)коммутатор операторов поля, который может отличаться от нуля:

$$\begin{aligned}[\varphi_\lambda(x), \varphi_\sigma^+(y)]_\pm &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{2p^0} D_{\lambda\sigma}^{(s_0)}\left(\frac{\hat{p}}{m}\right) \{e^{-ip \cdot (x-y)} \pm e^{ip \cdot (x-y)}\} = \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} D_{\lambda\sigma}^{(s_0)}\left(\frac{i}{m} \hat{\partial}\right) \int \frac{d^3 p}{2p^0} \{e^{-ip \cdot (x-y)} \pm (-1)^{2s} e^{ip \cdot (x-y)}\}\end{aligned}\quad (8.82)$$

где учтены равенства (8.74), (8.68), $D^{(s_0)}(-1) = (-1)^{2s}$ и введено обозначение $\hat{\partial} = \frac{\partial}{\partial x^0} - \sigma \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}}$. После интегрирования по углам, интегралы в (8.82) выражаются через

цилиндрические функции (см., например, Боголюбов и Ширков, 1956):

$$\begin{aligned}\frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{2p^0} e^{-ip \cdot (x-y)} &= \frac{1}{4\pi i} \varepsilon(x^0 - y^0) \delta(\lambda) + \frac{m}{8\pi\sqrt{\lambda}} \theta(\lambda) [N_1(m\sqrt{\lambda}) + \\ &+ i\varepsilon(x^0 - y^0) J_1(m\sqrt{\lambda})] + \frac{m}{4\pi^2\sqrt{-\lambda}} \theta(-\lambda) K_1(m\sqrt{-\lambda}), \\ \frac{1}{(2\pi)^3} \int \frac{d^3 p}{2p^0} e^{ip \cdot (x-y)} &= -\frac{1}{4\pi i} \varepsilon(x^0 - y^0) \delta(\lambda) + \frac{m}{8\pi\sqrt{\lambda}} \theta(\lambda) [N_1(m\sqrt{\lambda}) - \\ &- i\varepsilon(x^0 - y^0) J_1(m\sqrt{\lambda})] + \frac{m}{4\pi^2\sqrt{-\lambda}} \theta(-\lambda) K_1(m\sqrt{-\lambda})\end{aligned}\quad (8.83)$$

где $\lambda = (x - y)^2$, ε — знаковая функция, θ — ступенчатая функция Хевисайда (0 при отрицательных значениях аргумента и +1 при положительных).

В соответствии с **принципом причинности** выражение (8.82) должно обратиться в нуль для пространственноподобного интервала $\lambda = (x - y)^2 < 0$. Согласно (8.83), это возможно лишь если положительно- и отрицательно-частотные интегралы в (8.82) вычитаются друг из друга — тогда исчезают слагаемые с $\theta(-\lambda)$. Таким образом, выбор коммутатора или антикоммутатора для перестановочных соотношений, т.е., выбор статистики частиц, обусловлен спином частиц: при полуцелом спине $(-1)^{2s} = -1$, и следует выбирать антикоммутатор, статистику Ферми, при целом спине $(-1)^{2s} = 1$, и

частицы являются бозе-частицами. Это известная *теорема о связи спина и статистики частиц*. Перестановочные соотношения произвольных полей вполне определяются соответствующей функцией для скалярного поля (*функцией Паули-Йордана*):

$$D(x-y) = \frac{1}{2\pi i} \varepsilon(x^0 - y^0) \left[\delta(\lambda) - \frac{m}{2} \theta(\lambda) \frac{J_1(m\sqrt{\lambda})}{\sqrt{\lambda}} \right], \quad (8.84)$$

$$[\varphi_\lambda(x), \varphi_\sigma^+(y)]_\pm = D_{\lambda\sigma}^{(s_0)} \left(\frac{i}{m} \hat{\partial} \right) D(x-y). \quad (8.85)$$

Простейшие из полей — *скалярные* ($s = 0$) — преобразуются по представлению $D^{(m_0)}$ группы Пуанкаре, если соответствующие частицы совпадают с античастицами (действительное скалярное поле, заряды равны нулю) и $2D^{(m_0)}$ в противном случае. Функции поля (полевые операторы) $\varphi(x)$, $\varphi^*(x)$ подчиняются *уравнению Клейна-Гордона*:

$$\left(-\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \Delta \right) \varphi = m^2 \varphi. \quad (8.86)$$

Фактически это переписанное в координатах утверждение о том, что P^2 является оператором Казимира, равным m^2 на пространстве всех состояний частицы с массой m . Поэтому уравнению Клейна-Гордона подчиняются поля частиц (и античастиц) с любым спином. При $m = 0$ это обычные волновые уравнения, например, для потенциалов свободного электромагнитного поля.

Для двухкомпонентных безмассовых полей ($s = 1/2$, $m = 0$) уравнение Клейна-Гордона просто линейризуется, поскольку в этом случае возможно представление $p_0^2 - \mathbf{p}^2 = (p_0 + \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})(p_0 - \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{p})$, и мы приходим к *уравнению Вейля*:

$$\left(\frac{1}{c} \partial_t \mp \boldsymbol{\sigma} \cdot \nabla \right) \psi = 0. \quad (8.87)$$

Два знака в этом уравнении соответствуют частице (нейтрино) и античастице. Уравнение Вейля инвариантно относительно пространственной инверсии.

В случае $m \neq 0$, $s = 1/2$ можно получить линейное по производным *уравнение Дирака*, объединяя два представления $D^{(m, 1/2)}$, соответствующих частице и античастице, $2D^{(m, 1/2)} = D^{(m, 0)} \times (D^{(1/2, 0)} + D^{(0, 1/2)})$. Симметричная форма уравнения Дирака для 4-компонентной спинорной функции ψ :

$$(\gamma \cdot p - m)\psi = 0, \quad \gamma \cdot p = i\gamma^0 \frac{\partial}{\partial t} - i\gamma \cdot \nabla, \quad \gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \gamma = \begin{pmatrix} 0 & -\sigma \\ \sigma & 0 \end{pmatrix} \quad (8.88)$$

Отметим, что выше мы фактически нашли решения упомянутых (и неупомянутых) здесь уравнений поля прямым построением пространств НП группы Пуанкаре, относительно которой уравнения поля инвариантны.

Практически все эксперименты с элементарными частицами можно описать в терминах рассеяния частиц или волн. Начальные состояния (падающие волны, *in-состояния*) и конечные состояния (расходящиеся волны, *out-состояния*) натягивают гильбертовы пространства H_{in} и H_{out} , соответственно; они описывают совокупности свободных (невзаимодействующих) частиц и могут быть построены как пространства представлений группы Пуанкаре. В соответствии с *аксиомой асимптотической полноты* любое состояние системы является элементом этого пространства, т.е., эти пространства полны и совпадают: $H_{in} = H_{out} = H$. **Оператор рассеяния** S вызывает переход между (нормированными) in- и out состояниями: $|\Psi_{out}\rangle = S|\Phi_{in}\rangle$. Соответствующая унитарная матрица S называется **матрицей рассеяния**; $SS^+ = S^+S = E$. Матрица рассеяния подчиняется правилам свертывания, она распадается на блоки в соответствии с разложением H на когерентные пространства, не вызывая переходов между ними. Кроме того, она релятивистски инвариантна, $D(a|L)SD^{-1}(a|L) = S$, т.е., коммутирует с инфинитезимальными операторами группы Пуанкаре. Это приводит, в частности, к сохранению импульса в результате рассеяния, $[p^\mu(i) - p^\mu(f)]S_{if} = 0$. Удобно ввести **T -матрицу** следующим образом:

$$S_{fi} = \delta_{fi} + i(2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_i - P_f) T_{fi}. \quad (8.89)$$

Вероятность недиагонального перехода $i \rightarrow f$ в единицу времени в единице объема:

$$w_{if} = \lim_{V, t \rightarrow \infty} \frac{1}{Vt} |S_{fi}|^2 = (2\pi)^4 \delta^{(4)}(P_i - P_f) |T_{fi}|^2. \quad (8.90)$$

8.9. Пространственно-временные отражения. СРТ-теорема

Общая группа Лоренца, как отмечалось, включает пространственные (P), временные (T) и комбинированные отражения (PT). 4-инверсия $I = PT$ обладает определителем $+1$ и относится к собственным преобразованиям Лоренца, но при ограничении вещественными преобразованиями она не связана непрерывным образом с единичным элементом. В **комплексной группе Лоренца** к 4-инверсии можно непрерывным образом перейти от единичного элемента, например, путем изменения

параметра t от 0 до π в 4-матрице $\begin{pmatrix} \cosh it & \sinh it \\ \sinh it & \cosh it \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} \cos t & -\sin t \\ \sin t & \cos t \end{pmatrix}$. Эта несколько особая роль 4-инверсии в приложениях в квантовой теории выражается в так называемой *CPT-теореме*. Согласно этой теореме всякая релятивистски-инвариантная локальная теория (уравнения поля, S -матрица, вероятности переходов) инвариантна относительно комбинированного преобразования зарядового сопряжения (C), пространственного (P) и временного (T) отражения, $\theta = CPT$.

Поскольку

$$I(a | L)I^{-1} = (-a | L), \quad (8.91)$$

для квантовомеханических представлений имеют место аналогичные соотношения

$$\theta D(a | L)\theta^{-1} = D(-a | L), \quad \text{или} \quad (8.92)$$

$$\theta \exp(iP_\mu a^\mu)\theta^{-1} = \exp(-iP_\mu a^\mu), \quad \theta \exp(iM_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu})\theta^{-1} = \exp(iM_{\mu\nu}\omega^{\mu\nu}).$$

Для антиунитарного оператора θ получаем следующие правила перестановки с инфинитезимальными операторами импульса и моментов:

$$\theta P_\mu \theta^{-1} = P_\mu, \quad \theta M_{\mu\nu} \theta^{-1} = -M_{\mu\nu}. \quad (8.93)$$

Напомним, что здесь θ — комбинированная инверсия, включая и пространственную, а не только обращение времени, как в разделе 5. Знаки правых частей соотношений (8.93) изменились бы для унитарного оператора θ ; это, в частности, означало бы переход к состояниям с отрицательной энергией, приводящим к значительным трудностям в их истолковании. Как и для всех антиунитарных отражений, $\theta^2 = \pm 1$ [$= (-1)^{2s}$, ср. (5.6)].

4-инверсия не затрагивает внутренней симметрии элементарных частиц, т.е., как и преобразования Пуанкаре, коммутирует с элементами внутренней симметрии. Для унитарных представлений этих групп (с параметрами α_r) имеем:

$$\theta \exp(iF_r \alpha_r)\theta^{-1} = \exp(iF_r \alpha_r), \quad \theta F_r \theta^{-1} = -F_r. \quad (8.94)$$

Например, заряды Q_i при 4-инверсии меняют знаки, частицы переходят в античастицы. Таким образом, оператор 4-инверсии включает в себя зарядовое сопряжение, а частицы и античастицы описываются одним копредставлением расширенной за счет включения 4-инверсии группы Пуанкаре.

Теперь мы можем описать изменение одночастичных состояний (а тем самым, и операторов рождения-уничтожения) в результате 4-инверсии (*CPT*-преобразования).

Для определенности пользуемся спиральным базисом, для которого справедливы те же свойства преобразования (8.53), что и для канонического базиса, но при другом определении поворота $R(\xi')$, вытекающем из соотношения (8.64). Записывая (8.53) для лоренцева преобразования и используя (8.92), получаем:

$$\begin{aligned} \theta D^{(ms)}(L) | \mathbf{p}, \lambda, Q_i \rangle &= \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}^{(s)} * (R(\xi')) \theta | \mathbf{p}', \lambda', Q_i \rangle = \\ &= \sum_{\lambda'} (-1)^{\lambda-\lambda'-s+s} D_{-\lambda', -\lambda}^{(s)} (R(\xi')) \theta | \mathbf{p}' \lambda' Q_i \rangle. \end{aligned}$$

Отсюда, с учетом (8.94) для зарядов, следует:

$$\theta | \mathbf{p}, \lambda, Q_i \rangle = (-1)^{s-\lambda} | \mathbf{p}, -\lambda, -Q_i \rangle, \quad (8.95)$$

или

$$\theta a^+(\mathbf{p}, \lambda) \theta^{-1} = (-1)^{s-\lambda} b^+(\mathbf{p}, -\lambda).$$

4-инверсия, как и обращение времени T , переводит in-состояния в out- и обратно; соответственно, инвариантность S -матрицы относительно такой инверсии означает: $(\varphi, S\psi) = (\theta\psi, S\theta\varphi)$, или $\theta S^+ \theta^{-1} = S$.

Запишем CPT -преобразование для многочастичных состояний:

$$\begin{aligned} \theta | \mathbf{p}_1, \lambda_1, Q_i^{(1)}; \mathbf{p}_2, \lambda_2, Q_i^{(2)}; \dots in \rangle &= \\ = (-1)^{s_1-\lambda_1+s_2-\lambda_2+\dots} | \mathbf{p}_1, -\lambda_1, -Q_i^{(1)}; \mathbf{p}_2, -\lambda_2, -Q_i^{(2)}; \dots out \rangle & \end{aligned} \quad (8.96)$$

В отличие от θ , преобразования C , P , T по отдельности не являются универсальными преобразованиями симметрии; они могут даже переводить физические состояния в нефизические (например, P по отношению к нейтринным состояниям). Приведем здесь без обсуждений формулы преобразований одночастичных состояний при этих операциях:

$$\begin{aligned} P | \mathbf{p}, \sigma, Q \rangle &= \eta_P(Q) | -\mathbf{p}, \sigma, Q \rangle, \quad C | \mathbf{p}, \sigma, Q \rangle = \eta_C(Q) | \mathbf{p}, \sigma, -Q \rangle, \\ T | \mathbf{p}, \sigma, Q, in \rangle &= \eta_T(Q) (-1)^{s-\sigma} | -\mathbf{p}, -\sigma, Q, out \rangle. \end{aligned} \quad (8.97)$$

Фазовые множители удовлетворяют соотношениям

$$\eta_C \eta_P \eta_T = 1, \quad \eta_P(Q) = \eta_P(-Q), \quad \eta_P^2(Q) = (-1)^{2s}, \quad \eta_C(Q) \eta_C(-Q) = 1.$$

Величину η_P связывают с **внутренней четностью** частиц (или пар частиц).

Задачи к разделу 8

1. Показать, что $R(\xi)B(\mathbf{b})R^{-1}(\xi) = B(R(\xi)\mathbf{b})$.
2. Убедиться, что буст $B(\mathbf{b})$ коммутирует с вращениями около оси \mathbf{b} .
3. Показать, что $\det e^X = e^{\text{Sp}X}$.

4. Доказать: $(\sigma \cdot n)(\sigma \cdot n') = i\sigma \cdot [n \times n'] + (n \cdot n')$.
5. Показать, что $(L^{-1})^\lambda{}_\tau = g_{\mu\tau} g^{\nu\lambda} L^\mu{}_\nu$, т.е., $(L^{-1})_{\mu\nu} = L_{\nu\mu}$.
6. Какие условия накладываются на параметры A^μ ($A = A^\mu \sigma_\mu$) требованием косоэрмитовости матриц A ? унитарности?
7. Показать, что произвольную матрицу $\Lambda \in \text{SL}(2, \mathbb{C})$ можно записать в виде

$$\Lambda = u_1 h_d u_2, \text{ где } u_1, u_2 \in \text{SU}(2), h_d = \begin{pmatrix} d & 0 \\ 0 & d^{-1} \end{pmatrix}, d > 0.$$
8. Показать, что произвольную матрицу $\Lambda \in \text{SL}(2)$ можно записать в виде

$$\Lambda = h_d n_\beta u \text{ или } \Lambda = u h_d n_\beta, n_\beta = \begin{pmatrix} 1 & \beta \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \beta \text{ — произвольное комплексное число.}$$
9. Рассмотрим следующие два представления группы $\text{GL}(2, \mathbb{C})$ на множестве матриц второго порядка: а) $\hat{A} \rightarrow \hat{A} \hat{B} \hat{A}^{-1}$, б) $\hat{A} \rightarrow \hat{A} \hat{B} \hat{A}^+$. Написать матрицы этих представлений в базисе из матриц Паули
10. Показать, что $\det(A \times B) = (\det A)^{\dim B} (\det B)^{\dim A}$.
11. Выразить матрицу лоренцева преобразования через параметры $\alpha, \beta, \gamma, \delta$ группы $\text{SL}(2, \mathbb{C})$.
12. Написать матрицу $\Lambda \in \text{SL}(2, \mathbb{C})$ через параметры $\xi = n' \varphi, b = nb$.
13. Написать в явном виде матрицы $R(\xi = n' \varphi)$ и $B(b = nb)$.
14. Найти неподвижную точку преобразования $((a^0, a^1) | B(b))$ на плоскости (x^0, x^1) .
15. Написать в явном виде матрицу НП $D^{(j_1, j_2)}(\Lambda)$.
16. Получить соотношения (8.41) и (8.44).
17. Найти вид инфинитезимальных операторов A, B (8.31) в спинорных представлениях.
18. Написать в явном виде квадрат псевдовектора Паули-Любански W^μ .
19. Найти инфинитезимальные операторы представлений группы волнового вектора $p_0 = (1 \ 0 \ 0 \ 1)$ (раздел 8.6) и соотношения коммутации для них. Определить значения вектора Паули-Любански W^μ и его квадрата W^2 на состояниях $|p_0, \zeta\rangle$; на состояниях $|p_0, k, \zeta\rangle$, диагонализующих двумерные “трансляции” $L(\beta)$ при $k \neq 0$ и $k = 0$.

9. Унитарные симметрии

9.1. Внутренняя симметрия элементарных частиц. Изоспин

Помимо пространственно-временных, взаимодействия частиц характеризуются т.н. *внутренними симметриями*, которым, как правило, отвечают некоторые унитарные группы. Предполагается, что пространственно-временная и внутренняя симметрии независимы; полная группа симметрии является произведением двух групп, вектора состояний частиц — произведениями векторов из пространств представлений этих групп. Попарно коммутируют элементы двух групп, а, значит, и инфинитезимальные операторы и операторы Казимира.

К числу внутренних симметрий относятся упоминавшиеся выше калибровочные симметрии [группы $U(1)$], сводящиеся к умножению на фазу $e^{iQ\alpha}$ (α — вещественный параметр, Q — “заряд”) состояний частиц с зарядом Q . Заряды являются аддитивными квантовыми числами: заряд в многочастичном состоянии равняется сумме зарядов частиц, что на языке теории представлений соответствует утверждению о том, что генератор, отвечающий параметру α в произведении представлений, равняется сумме генераторов перемножаемых представлений. К числу точных внутренних симметрий, имеющих место для всех взаимодействий, относятся калибровочные симметрии, связанные с сохранением заряда, барионного и лептонного чисел. Большинство же внутренних симметрий являются приближенными и имеют место лишь для некоторых взаимодействий.

Изоспиновая (изотопическая) симметрия связана с зарядовой независимостью ядерных сил (сильных взаимодействий). Она проявляется в существовании *зарядовых (изоспиновых) мультиплетов* сильно взаимодействующих частиц типа протон-нейтрон (p, n), π -мезоны (π^+, π^0, π^-) и др. Частицы мультиплета имеют одинаковый спин и очень близки по массе; они одинаково участвуют в сильных взаимодействиях. Математически изоспиновая симметрия описывается группой $SU(2)$ (вращений в изоспиновом пространстве); изоспиновые мультиплеты образуют базисы НП этой группы и могут быть охарактеризованы изоспином $I = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Отдельные члены мультиплета являются собственными состояниями компоненты I_3 изоспина, им могут быть приписаны соответствующие собственные значения (аддитивные квантовые

числа t) в пределах от $-I$ до $+I$, которые, очевидно, должны быть связаны с электрическим зарядом Q . Так, в нуклонном дублете полагают,

$$I_3 |p\rangle = (1/2)|p\rangle, \quad I_3 |n\rangle = -(1/2)|n\rangle.$$

В триплете пионов $I_3|\pi^+\rangle = 1|\pi^+\rangle$ и т.д. В этих примерах $t = Q - \langle Q \rangle$, где $\langle Q \rangle$ — средний электрический заряд мультиплетета. Оказывается, что и в общем случае можно так идентифицировать отдельные компоненты зарядовых мультиплететов, что выполняется соотношение:

$$t = Q - Y/2, \quad Y = 2\langle Q \rangle, \quad (9.1)$$

где введена величина Y — *гиперзаряд* мультиплетета.

При ограничении сильными взаимодействиями (в приближении изоспиновой симметрии) изомultiплет можно рассматривать как одну частицу с дополнительной внутренней степенью свободы (t), обладающую определенным изоспином I и гиперзарядом Y . Множество состояний “частицы” натягивает пространство НП группы $\hat{P}_+^\uparrow \times SU(2)(I) \times U(1)(Y)$, где \hat{P}_+^\uparrow — накрывающая группы Пуанкаре. При включении электромагнитного и слабого взаимодействий изоспиновая симметрия утрачивается, и мультиплеты расщепляются на компоненты, отличающиеся по массе и электрическому заряду.

Изомultiплеты элементарных частиц естественным образом объединяются в расширенные *унитарные мультиплеты*. Вместе с рядом других экспериментальных фактов, это свидетельствует о наличии у частиц внутренней симметрии, более широкой, чем изоспиновая. В качестве соответствующей группы симметрии с успехом была использована группа $SU(3)$. Ряд приложений находят также группы $SU(4)$, $SU(5)$, $SU(6)$.

Остановимся кратко на трудностях, связанных с расширениями группы Пуанкаре за счет внутренних симметрий, описываемых компактными унитарными группами. Можно было бы надеяться, что разложение НП “супергруппы” G [типа псевдоунитарной группы $SU(6,6)$, включающей как группу Пуанкаре, так и группу внутренних симметрий] по НП ее подгрупп позволит унифицировать описание элементарных частиц. Однако был доказан ряд теорем, жестко регламентирующих указанное расширение релятивистской группы, следствием которых является утверждение о невозможности расщепления масс в НП группы G . Предложен ряд способов обойти эту трудность — использование приводимых представлений, использование в группах в качестве параметров не обычных s -чисел, а антикоммутирующих величин. В последнем случае возникает возможность

объединения в одном мультиплете фермионов и бозонов (см. Барут и Рончка, 1980; Каку, 1996).

Мы рассмотрим ниже применение унитарных групп $SU(n)$ к классификации адронов и кварковым моделям в отрыве от группы Пуанкаре, по существу, на эмпирическом уровне.

9.2. Группы $SU(n)$. Инфинитезимальные операторы групп

Произвольная унитарная матрица порядка n может быть представлена в виде $\hat{u} = \exp(-i\hat{H})$, где \hat{H} — эрмитова матрица; фактически такое представление осуществляется, например, путем перехода к базису, в котором матрица u будет диагональной. Запишем H в виде $H = (1/n) \text{Sp}H + H'$ (т.е., $\text{Sp}H' = 0$); это соответствует написанию u в виде $u = (\det u)^{1/n} u'$, где $u' \in SU(n)$. Таким образом, произвольный элемент группы $SU(n)$ записывается в виде $u = \exp(-iH)$, где H — бесследная эрмитова матрица. Выбирая базис H_a в пространстве бесследных операторов, $H = H_a p^a$, получаем возможность параметризовать группу $SU(n)$ набором координат $\{p^a\}$. Удобно (но не обязательно) выбрать базис из эрмитовых матриц H_a ; соответствующие $n^2 - 1$ параметров p^a будут вещественными, а H_a является инфинитезимальной матрицей, отвечающей параметру p^a в **фундаментальном представлении** — автоморфизме $SU(n) \rightarrow SU(n)$. В приложениях обычно используются матрицы H_a , напоминающие матрицы Паули для двумерных “плоскостей” в n -мерном пространстве. Например, для группы $SU(3)$ используется параметризация $u(p^a) = \exp(-i\lambda_a p^a)$ с матрицами:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_4 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \lambda_5 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_6 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \lambda_7 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \lambda_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9.2)$$

Эти матрицы взаимно ортогональны и одинаково нормированы относительно скалярного произведения

$$(A, B) = \text{Sp}A^+ B: \quad \text{Sp}\lambda_a \lambda_b = 2\delta_{ab}. \quad (9.3)$$

Поскольку любую матрицу можно разложить по базисным, то

$$\lambda_a \lambda_b = if_{abc} \lambda_c + d_{abc} \lambda_c + \frac{2}{3} \delta_{ab}, \quad (9.4)$$

где структурные коэффициенты f и d вещественны. Поскольку $\lambda_b \lambda_a = (\lambda_a \lambda_b)^+$, коэффициенты f_{abc} антисимметричны по индексам a, b ; а d_{abc} симметричны по этим индексам. Очевидно,

$$[\lambda_a, \lambda_b] = 2if_{abc}\lambda_c, \quad \{\lambda_a, \lambda_b\} = 2d_{abc}\lambda_c + (4/3)\delta_{ab}. \quad (9.5)$$

С учетом (9.4),

$$f_{abc} = (1/4i) \text{Sp}([\lambda_a, \lambda_b]\lambda_c), \quad d_{abc} = (1/4)\text{Sp}(\{\lambda_a, \lambda_b\}\lambda_c), \quad (9.6)$$

откуда вытекает симметричность d_{abc} и антисимметричность f_{abc} по всем индексам.

Сказанное очевидным образом распространяется на произвольные порядки $SU(n)$. Для написания инфинитезимальных матриц в общем виде целесообразно несколько усовершенствовать их обозначения:

$$\lambda_1^{ik} = T_i^k + T_k^i, \quad \lambda_2^{ik} = -iT_i^k + iT_k^i, \quad \lambda_3^k = \sqrt{\frac{2}{k(k+1)}} \left(\sum_1^k T_i^i - kT_{k+1}^{k+1} \right), \quad (9.7)$$

где T_i^k — проективные матрицы с одним единичным элементом в i -ой строке и k -м столбце, $i < k$, $1 \leq k \leq n-1$. Соотношения (9.3) — (9.6) при этом не меняются. Из величин λ_3^k можно скомбинировать аналоги матрицы Паули σ_3 :

$$\lambda_3^{ik} = T_i^k - T_k^i. \quad (9.8)$$

Очевидно,

$$\lambda_3^{12} \equiv \lambda_3^1, \quad \lambda_3^{12} + 2\lambda_3^{23} = \sqrt{3}\lambda_3^2, \quad \lambda_3^{12} + 2\lambda_3^{23} + \dots + k\lambda_3^{k,k+1} = \sqrt{\frac{k(k+1)}{2}}\lambda_3^k,$$

$$\text{т.е., } \lambda_3^{k,k+1} = \sqrt{\frac{k+1}{2k}}\lambda_3^k - \sqrt{\frac{k-1}{2k}}\lambda_3^{k-1}.$$

Кроме того, $\lambda_3^{ik} = \lambda_3^{i,i+1} + \lambda_3^{i+1,i+2} + \dots + \lambda_3^{k-1,k}$, что обеспечивает полную систему соотношений, позволяющих выразить $n(n-1)/2$ линейно-зависимых величин λ_3^{ik} через независимые матрицы λ_3^k . Тройки матриц $\lambda_{1,2,3}^{ik}$ обладают свойствами умножения, коммутирования и антикоммутирования, присущими матрицам Паули $\sigma_{1,2,3}$.

Представление инфинитезимальных операторов через проективные позволяет единообразно вычислить структурные коэффициенты, поскольку

$$\begin{aligned} T_i^k T_m^n &= \delta_{km} T_i^n, \quad T_i^k = \frac{1}{2}(\lambda_1^{ik} + i\lambda_2^{ik}), \quad T_k^i = \frac{1}{2}(\lambda_1^{ik} - i\lambda_2^{ik}), \quad i < k, \\ T_k^k &= \lambda_3^{k,k+1} + \dots + \lambda_3^{n-1,n} + T_n^n = \frac{1}{n}\hat{E} + \sqrt{\frac{1}{2n(n-1)}}\lambda_3^{n-1} + \\ &+ \sqrt{\frac{1}{2(n-1)(n-2)}}\lambda_3^{n-2} + \dots + \sqrt{\frac{1}{2(k+1)k}}\lambda_3^k - \frac{k-1}{\sqrt{2k(k-1)}}\lambda_3^{k-1}. \end{aligned}$$

В новых обозначениях матрицы (9.2) для группы SU(3) выглядят так:

$$\lambda_1 = \lambda_1^{12}, \lambda_2 = \lambda_2^{12}, \lambda_3 = \lambda_3^1, \lambda_4 = \lambda_1^{13}, \lambda_5 = \lambda_2^{13}, \lambda_6 = \lambda_1^{23}, \lambda_7 = \lambda_2^{23}, \lambda_8 = \lambda_3^2.$$

Структурные коэффициенты для группы SU(3) вычисляются в задаче 9.1; приведем здесь коэффициенты f_{abc} :

$$f_{123} = 1, f_{147} = -f_{156} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = -f_{367} = 1/2, f_{458} = f_{678} = \sqrt{3}/2. \quad (9.9)$$

Остальные коэффициенты f_{abc} равны нулю.

В качестве базиса для написания матриц H (и других матриц тоже) естественно использовать также набор матриц, включающий недиагональные проективные матрицы:

$$B_i^k = T_i^k - \frac{1}{3} \delta_{ik} \hat{E}, \quad \sum B_i^i = 0. \quad (9.10)$$

Очевидно, соотношения коммутации B_i^k такие же, как и матриц T_i^k . Из этих величин можно составить два оператора Казимира:

$$C_2 = \sum_{i,k} B_i^k B_k^i, \quad C_3 = \sum_{i,k,l} B_i^k B_k^l B_l^i, \quad (9.11)$$

которые, как нетрудно проверить, коммутируют со всеми B_i^k .

Существует также базис из “неприводимых сферических операторов”:

$$\begin{aligned} & \hat{E}; S_z, S_{\pm}; S_{\pm}^2, S_{\pm} S_z + S_z S_{\pm}, S(S+1) - 3S_z^2; \\ & S_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad S_{\pm} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (9.12)$$

Базис (9.12) ненормированный. Он очевидным образом распространяется на случай произвольных n .

9.3. Неприводимые представления группы SU(3)

Группа SU(3) — непрерывная компактная 8-параметрическая группа, все ее представления эквивалентны унитарным. Неприводимые унитарные конечномерные представления могут быть построены как представления тензорами (на трехмерном унитарном пространстве) с определенными свойствами симметрии относительно перестановки индексов. Подробнее о связи представлений групп перестановок и представлений групп линейных преобразований говорилось в седьмом разделе, здесь мы приведем несколько простых примеров.

Фундаментальное представление осуществляется на векторах (независимых состояниях) e_1, e_2, e_3 , и с ним можно связать одноклеточную “схему” Юнга \square .

Представление тензорами второго ранга распадается на симметричную ($\begin{smallmatrix} \square & \square \end{smallmatrix}$) и антисимметричную ($\begin{smallmatrix} \square \\ \square \end{smallmatrix}$) части. Первое из этих НП осуществляется на шести комбинациях пар $e_i e_j'$:

$$\begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_1 e_1', e_2 e_2', e_3 e_3', e_1 e_2' + e_2 e_1', e_1 e_3' + e_3 e_1', e_2 e_3' + e_3 e_2',$$

а второе — на трех антисимметричных комбинациях:

$$f_1 = e_2 e_3' - e_3 e_2' = \begin{smallmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{smallmatrix}, f_2 = e_3 e_1' - e_1 e_3' = \begin{smallmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{smallmatrix}, f_3 = e_1 e_2' - e_2 e_1' = \begin{smallmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{smallmatrix}. \quad (9.13)$$

Пусть $u \in SU(3)$ и $D(u)e_i = \sum u_{ji} e_j$; нетрудно проверить, что

$$D(u)f_i = \sum (\tilde{u}^{-1})_{ji} f_j = \sum u_{ji}^* f_j,$$

т.е., трехмерное представление $\begin{smallmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{smallmatrix}$ осуществляется комплексно-сопряженными матрицами, $u \rightarrow u^*$. Фактически, это представление тоже можно считать фундаментальным.

27-мерное тензорное представление распадается на 10-мерное НП $\begin{smallmatrix} \square & \square & \square \end{smallmatrix}$ (функции $111 = e_1 e_1' e_1''$, $112 = e_1 e_1' e_2'' + e_1 e_2' e_1'' + e_2 e_1' e_1''$, $113, 122, 123, 133, 222, 223,$

233 и 333), одномерное $\begin{smallmatrix} \square \\ \square \\ \square \end{smallmatrix}$ и два эквивалентных 8-мерных НП $\begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix}$. Два октета функций можно получить, либо производя вначале симметризацию по паре индексов, скажем, двум первым, а затем антисимметризуя по первому и третьему индексу, либо меняя порядок симметризации и антисимметризации (естественно располагать индексы в строках и столбцах в порядке возрастания слева направо и сверху вниз):

Первый набор:

$$\begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_1 e_1' e_2'' - e_2 e_1' e_1'', \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix}, \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_1 e_2' e_2'' - e_2 e_2' e_1'', \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_1 e_2' e_3'' + e_2 e_1' e_3'' - e_3 e_2' e_1'' - e_3 e_1' e_2'', \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_1 e_3' e_2'' + e_3 e_1' e_2'' - e_2 e_3' e_1'' - e_2 e_1' e_3'', \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_1 e_3' e_3'' - e_3 e_3' e_1'',$$

$$\begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_2 e_2' e_3'' - e_3 e_2' e_2'', \begin{smallmatrix} \square & \square \\ \square & \square \end{smallmatrix} = e_2 e_3' e_3'' - e_3 e_3' e_2''. \quad (9.14)$$

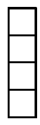
Второй набор (те же таблицы, вначале антисимметризация по двум первым индексам, размещенным в первом столбце):

$$\begin{aligned}
& 2e_1e_2'e_1'' - e_2e_1'e_1'' - e_1e_1'e_2'', 2e_1e_3'e_1'' - e_3e_1'e_1'' - e_1e_1'e_3'', e_1e_2'e_2'' - 2e_2e_1'e_2'' + e_2e_1'e_2'', \\
& e_1e_3'e_2'' - e_3e_1'e_2'' + e_2e_3'e_1'' - e_2e_1'e_3'', e_1e_2'e_3'' - e_2e_1'e_3'' + e_3e_2'e_1'' - e_3e_1'e_2'', e_1e_3'e_3'' - \\
& 2e_3e_1'e_3'' + e_3e_3'e_1'', 2e_2e_3'e_2'' - e_3e_2'e_2'' - e_2e_2'e_3'', e_2e_3'e_3'' - 2e_3e_2'e_3'' + e_3e_3'e_2''. \quad (9.15)
\end{aligned}$$

Эти наборы натягивают два взаимно-ортогональных 8-мерных пространства, однако внутри набора четвертый и пятый вектора неортогональны. Их можно

ортогонализировать, выбирая, например, вместо $\begin{matrix} \boxed{1} & \boxed{3} \\ \boxed{2} & \end{matrix}$ вектор $2e_1e_3'e_2'' - 2e_2e_3'e_1'' + e_1e_2'e_3'' - e_3e_2'e_1'' + e_2e_1'e_3'' - e_3e_1'e_2''$ (в первом наборе). Отметим, что пары соответствующих векторов из двух наборов осуществляют двумерное НП групп P_3 .

Переходя к тензорным представлениям более высокого ранга, заметим, что не существует НП, описываемых схемами, содержащими более трех строк (например,



), поскольку в нашем распоряжении только три индекса 1,2,3, и антисимметризация по четырем индексам приводит к нулевому результату. Аналогичный довод свидетельствует о возможности отбрасывания в схемах с тремя строчками столбцов,



содержащих три клетки. Например, представление $\begin{matrix} \square & \square \\ \square & \square \\ \square & \end{matrix}$ эквивалентно представлению



\square . Таким образом, существенно разными являются НП, описываемые схемами с двумя строчками, и их можно индексировать двумя индексами, как $D^{(\lambda_1, \lambda_2)}$, где $\lambda_1 \geq \lambda_2$ — длины первой и второй строчки схем. Тензорное представление четвертого ранга расщепляется на следующие НП:

$$D^{(40)} (\equiv \begin{matrix} \square & \square & \square & \square \end{matrix}), D^{(31)} (\begin{matrix} \square & \square & \square \\ \square & & \end{matrix}), D^{(22)} (\begin{matrix} \square & \square \\ \square & \square \end{matrix}), D^{(10)} (\square).$$

Кратность, с которой эти НП входят в тензорное представление, определяется размерностью соответствующих схемам Юнга неприводимых представлений самой группы перестановок P_4 . Так,

$$(D^{(10)})^4 = D^{(40)} + 3D^{(31)} + 2D^{(22)} + 3D^{(10)}.$$

Двустрочные схемы, дополняющие друг друга до трехмерных схем с равными длинами строк, соответствуют комплексно-сопряженным представлениям. Выше уже

отмечалось, что для фундаментальных представлений $\begin{matrix} \square \\ \square \end{matrix} = \square^*$. Еще примеры:

$$\begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} * \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \\ \hline \end{array} *$$

Вообще, самосопряжены НП, которым соответствуют схемы, вторая строка которых наполовину короче первой.

Теперь мы рассмотрим альтернативный способ построения НП группы $SU(3)$, аналогичный использованному для группы вращений ($SU(2)$; см. раздел 4.3). Он обеспечивает наглядное введение понятий об I - (изотопическом), U - и V -спинах. В этом способе мы исходим из базиса в пространстве представления, диагонализующего коммутирующие друг с другом инфинитезимальные операторы (отвечающие, например, операторам λ_3 и λ_8 из набора (9.2)), а затем устанавливаем связи между базисными векторами, вытекающие из соотношений коммутации инфинитезимальных операторов. Предварительно сгруппируем инфинитезимальные операторы $F_a (\lambda_a/2 \rightarrow F_a)$ в три тройки “спиновых” операторов, так чтобы внутри тройки операторы подчинялись обычным соотношениям коммутации для компонент момента количества движения:

$$I(F_1, F_2, F_3), V(F_4, F_5, F_8'), U(F_6, F_7, F_8''),$$

$$F_8' = \frac{1}{2} F_3 + \frac{\sqrt{3}}{2} F_8, F_8'' = -\frac{1}{2} F_3 + \frac{\sqrt{3}}{2} F_8. \quad (9.16)$$

В дальнейшем будем использовать обозначения I_1, I_2, I_3 для компонент “спинов”, а также обозначение $Y = \frac{2}{\sqrt{3}} F_8$ (гиперзаряд), так что

$$F_3 = I_3 = F_8' - F_8'' = V_3 - U_3, \sqrt{3} F_8 = V_3 + U_3 = \frac{3}{2} Y. \quad (9.17)$$

Вводя еще операторы повышения-понижения $V_{\pm} = V_1 \pm iV_2$ и др., выпишем соотношения коммутации инфинитезимальных операторов, используя уже найденные структурные коэффициенты (9.9):

$$[I_3, I_{\pm}] = \pm I_{\pm}, [I_+, I_-] = 2I_3. \quad (9.18a)$$

Аналогичные соотношения имеют место для компонент U -, V -спинов. Далее,

$$[I_3, U_{\pm}] = \mp \frac{1}{2} U_{\pm}, [I_3, V_{\pm}] = \pm \frac{1}{2} V_{\pm}, [V_3, I_{\pm}] = \pm \frac{1}{2} I_{\pm},$$

$$[V_3, U_{\pm}] = \pm \frac{1}{2} U_{\pm}, [U_3, I_{\pm}] = \mp \frac{1}{2} I_{\pm}, [U_3, V_{\pm}] = \pm \frac{1}{2} V_{\pm}, \quad (9.18b)$$

$$[Y, I_{\pm}] = 0, [Y, U_{\pm}] = \pm U_{\pm}, [Y, V_{\pm}] = \pm V_{\pm}.$$

Наконец,

$$[V_+, I_+] = [V_+, I_-] = 0, [V_+, I_-] = -U_+, [V_-, I_+] = U_-,$$

$$[U_+, I_+] = -V_+, [U_+, I_-] = [U_-, I_+] = 0, [U_-, I_-] = V_-, \quad (9.18c)$$

$$[U_+, V_+] = [U_-, V_-] = 0, [U_+, V_-] = I_-, [U_-, V_+] = -I_+.$$

Операторы (9.12) связаны с I -, V -, U -операторами соотношениями:

$$\begin{aligned} S_z &= 2V_3, \quad S_{\pm} = \sqrt{2}(I_{\pm} + U_{\pm}), \quad S_{\pm}^2 = 2V_{\pm}, \quad S_{\pm}S_z + S_zS_{\pm} = \\ &= \sqrt{2}(I_{\pm} - U_{\pm}), \quad S(S+1) - 3S_z^2 = 2(-I_3 + U_3). \end{aligned} \quad (9.19)$$

Выберем далее в качестве базисных собственные векторы эрмитовых операторов I_3 и $Y(F_8)$, $|t, y\rangle$; одновременно эти векторы являются собственными и для U_3, V_3 , так что иногда мы будем обозначать их $|t, u, v\rangle \equiv |t, y\rangle$. В силу (9.17) и (9.16):

$$t + u - v = 0, \quad u + v = \frac{3}{2}y, \quad u = \frac{3}{4}y - \frac{1}{2}t, \quad v = \frac{3}{4}y + \frac{1}{2}t. \quad (9.20)$$

Из соотношений коммутации вытекает, что $I_3\{I_{\pm}|t, y\rangle\} = (t \pm 1)\{I_{\pm}|t, y\rangle\}$, и, как и при построении представлений группы вращений, мы приходим к выводу о том, что возможные значения t — целые и полужелые числа. В силу полной симметрии спинов I, U, V то же, очевидно, можно сказать и о значениях u и v ; тогда величина y может принимать лишь значения, кратные $1/3$. Таким образом, возможные наборы (t, y) образуют плоскую решетку, причем подходящим выбором масштаба решетку можно сделать правильной гексагональной (см. рисунки ниже). Из соотношений коммутации вытекает также:

$$\begin{aligned} V_{\pm}|t, y\rangle &\propto |t \pm \frac{1}{2}, y \pm 1\rangle = |v \pm 1, y'\rangle, \\ U_{\pm}|t, y\rangle &\propto |t \mp \frac{1}{2}, y \pm 1\rangle = |u \pm 1, y''\rangle, \quad I_{\pm}|t, y\rangle \propto |t \pm 1, y\rangle, \end{aligned} \quad (9.21)$$

т.е., операторы повышения-понижения либо переводят базисные векторы в нуль, либо в другие базисные вектора, смещая их собственные значения в плоскости t, y как указано на рис. 9.1. В (9.21) y', y'' — собственные значения “гиперзарядов”

$$Y' = \frac{2}{3}(I_3 - U_3) = I_3 - \frac{1}{2}Y, \quad Y'' = \frac{2}{3}(-I_3 - V_3) = -I_3 - \frac{1}{2}Y, \quad Y + Y' + Y'' = 0.$$

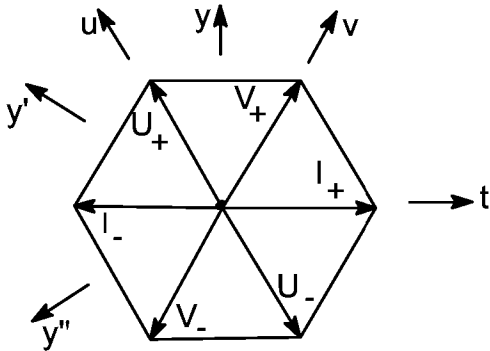


Рис. 9.1

Всю совокупность собственных значений (y, t) , а с ней и соответствующих им собственных векторов, образующих базис пространства НП, можно построить с использованием операторов сдвига, исходя из “старшего” вектора $|t_m, y_m\rangle$, относящегося к максимальному собственному значению $y_{max} \equiv y_m$ и к максимально возможному при y_m значению t_m . Очевидно,

$$V_+|t_m, y_m\rangle = I_+|t_m, y_m\rangle = U_+|t_m, y_m\rangle = 0.$$

Последовательное применение I_- к $|t_m, y_m\rangle$ приводит к I -спиновому мультиплету с $I=t_m$:

$$|t_m, y_m\rangle, |t_m - 1, y_m\rangle \propto I_- |t_m, y_m\rangle, \dots, |-t_m, y_m\rangle.$$

Действием оператора U_- на $|t_m, y_m\rangle$ получаем U -спиновый мультиплет с $U=u_m=(3/4)y_m-(1/2)t_m$:

$$|t_m, y_m\rangle \equiv |u_m, y_m'' = -t_m - \frac{1}{2}y_m\rangle, |u_m - 1, y_m''\rangle, \dots, |-u_m, y_m''\rangle.$$

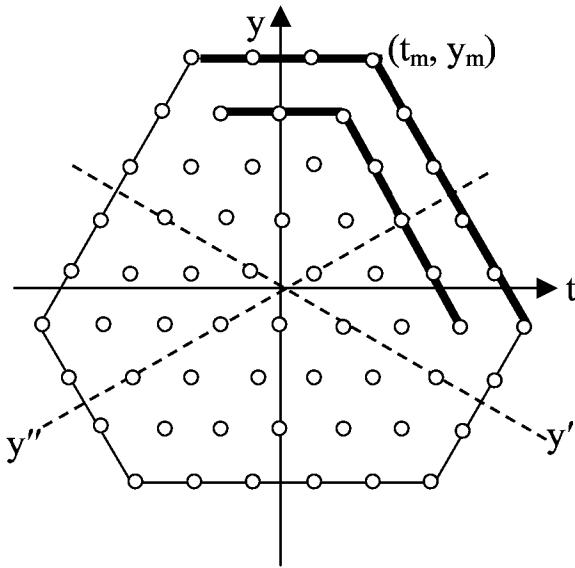


Рис. 9.2.

Эти два мультиплета изображены на рис. 9.2 отрезками, начинающимися в точке $|t_m, y_m\rangle$. Исходя из каждой точки второго мультиплета, можно построить t -мультиплеты, симметричные относительно оси y (и v -мультиплеты, симметричные относительно оси y'). Исходя из точек первого мультиплета строятся u -, v -мультиплеты. Все множество получаемых точек ($SU(3)$ -мультиплет) оказывается обладающим симметрией C_{3v} с центром в начале

координат и осями симметрии y, y', y'' . Пример контура, ограничивающего множество собственных значений (t, y) , также изображен на рис.9.2. Длины сторон получающегося шести- (или тре-) угольника, $\lambda = 2t_m$, $\mu = (3/2)y_m - t_m$, могут служить индексами НП группы [на рис. 9.2 изображена схема, соответствующая представлению $(3,5)$]. В случае, если “длины” t - и u -мультиплетов, начинающихся в точке $|t_m, y_m\rangle$, отличны от нуля, точке $|t_m - \frac{1}{2}, y_m - 1\rangle$ отвечают уже два независимых вектора, например, $U_- I_- |t_m, y_m\rangle, L U_- |t_m, y_m\rangle$. Исходя из этой точки можно построить еще один шестиугольник со сторонами $\lambda' = \lambda - 1$, и $\mu' = \mu - 1$.

В неприводимом представлении (λ, μ) каждой точке по периметру внешнего шестиугольника отвечает по одному состоянию, точкам по периметру шестиугольника со сторонами $(\lambda - 1, \mu - 1)$ отвечает по два независимых состояния. Можно строить

внутренние шестиугольники вплоть до вырождения их в треугольник [или в точку — начало координат — если исходный шестиугольник был правильным — (λ, λ)]. При этом точкам на сторонах каждого шестиугольника отвечает на одно состояние больше, чем точкам на сторонах предыдущего. Все точки первого (наибольшего) из полученного таким образом треугольника (включая точки периметра) обладают одинаковой кратностью вырождения. Описанная выше система многоугольников для НП $(3,5)$ воспроизведена на рис. 9.3. Исходя из него, нетрудно подсчитать число различных состояний (размерность представления), равную $d(3,5) = 120$. В общем случае:

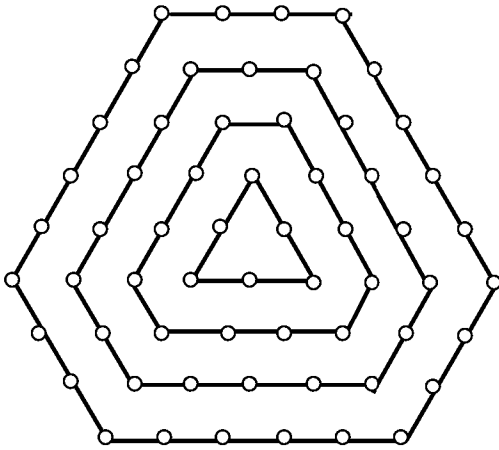


Рис.9.3.

$$d(\lambda, \mu) = \frac{1}{2}(\lambda + 1)(\mu + 1)(\lambda + \mu + 2). \quad (9.22)$$

Доказательство приведенных утверждений довольно громоздко; некоторые элементы его воспроизводятся в задачах к данному разделу (см. также книгу Газиоровича 1969). Отметим еще, что сопряжены НП, схемы которых получаются друг из друга поворотом на 180° около оси t : $(\lambda, \mu) = (\mu, \lambda)^*$.

Связь двух введенных в этом параграфе обозначений НП: $\lambda = \lambda_1 - \lambda_2$, $\mu = \lambda_2$, т.е., $(\lambda, \mu) = D^{(\mu + \lambda, \mu)}$. Иногда НП обозначаются

просто своей размерностью (жирными цифрами). Так, неприводимый октет обозначается $D^{(21)} \equiv (1, 1) \equiv \mathbf{8}$.

Диаграммная техника может быть использована для разложения произведения двух НП группы $SU(3)$. Вся совокупность векторов пространства представления $(\lambda_1, \mu_1) \times (\lambda_2, \mu_2)$ изображается точками, получающимися в результате наложения одной из диаграмм, скажем, (λ_2, μ_2) , своим центром на каждую точку второй диаграммы. Затем, начиная с состояния $|t_m = t_{1m} + t_{2m}, y_m = y_{1m} + y_{2m}\rangle$ из полученного множества точек последовательно выделяются подмножества, отвечающие НП, с учетом изложенных выше правил о кратности вырождения каждой точки. От естественного базиса $|t^{(1)}, y^{(1)}\rangle |t^{(2)}, y^{(2)}\rangle$ к каноническому можно переходить последовательным действием операторов повышения-понижения — процедура, естественно, в общем

случае значительно более громоздкая, чем в случае группы вращений, но при небольших размерностях перемножаемых представлений вполне обозримая.

На рис. 9.4 представлены графические изображения фундаментальных представлений $3, 3^*$ (кварки) и барионного октета.

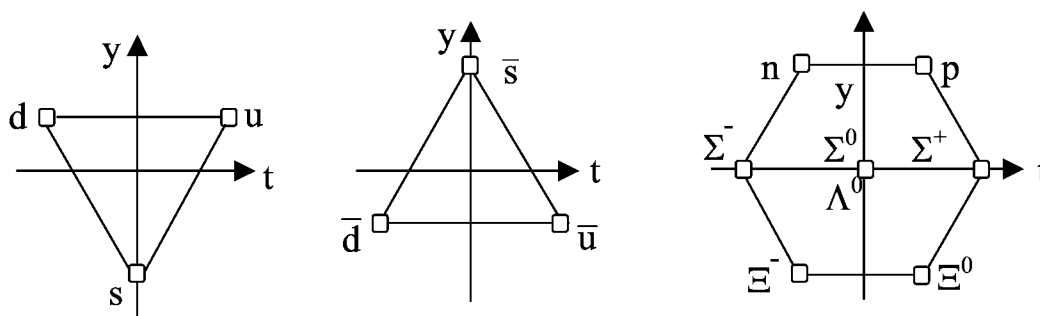


Рис. 9.4.

9.4. Классификация адронов по SU(3)-мультиплетам. Нарушение SU(3)-симметрии

Адроны — частицы, участвующие в сильных взаимодействиях — подразделяются на **барионы и мезоны**. Барионы обладают полуцелым спином, к ним относятся протон и нейтрон и большое число частиц, считающихся их возбужденными состояниями. Мезоны обладают целыми спинами и, в основном, меньшими массами.

Адроны группируются в близкие по массе изомультиплеты, а довольно близкие по массе изомультиплеты группируются в SU(3)-мультиплеты, что, как отмечалось выше, свидетельствует о наличии приближенной внутренней SU(3)-симметрии сильных взаимодействий и частиц, в них участвующих. На рис. 9.4 приведена схема барионного SU(3)-октета, состоящего из (p, n) -изодублета (приближенная масса частиц, соответственно, 938.3 и 939.6 Мэв; протон стабилен, время жизни нейтрона $\tau \sim 10^3$ с), Σ -изотриплета (масса 1193 Мэв, $\tau \sim 10^{-10}$ с, для Σ^0 $\tau < 10^{-24}$ с), изосинглета Λ^0 (1115.6 Мэв, $2.5 \cdot 10^{-10}$ с) и изодублета $\Xi^{-,0}$ (1318 Мэв, 10^{-10} с). Спины всех частиц равны 1/2, внутренняя четность положительная. Как видно, о близости масс можно говорить лишь весьма условно, силы, нарушающие симметрию, велики (“умеренно сильные” взаимодействия). Приведем еще схемы барионного декуплета и мезонного октета (рис. 9.5). Массы четырех изомультиплетов, на которые расщепляется барионный декуплет, составляют, соответственно, начиная с Δ -частиц, $\sim 1232, 1385, 1533, 1672$ Мэв, спин частиц 3/2, внутренняя четность — положительная. Мезонный октет включает триплет пионов ($m \sim 138$ Мэв), изосинглет η^0 (549 Мэв), два дублета К-

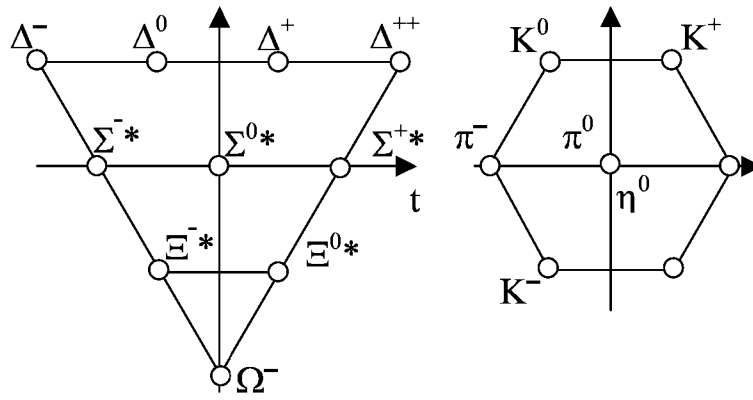


Рис. 9.5

мезонов (~ 495 МэВ). Спины всех мезонов изображенного октета равны 0. Мезонная схема содержит частицы и античастицы, занимающие диаметрально-противоположные позиции.

Таким образом, при учете лишь “сильной части” сильного взаимодействия симметрия адронов описывается группой $\tilde{P}^\uparrow \times SU(3)$ с НП $(ms;(\lambda\mu))$. Под действием “умеренной части” сильного взаимодействия $SU(3)$ -мультиплет расщепляется на изомультиплеты, характеризуемые величиной изоспина и гиперзаряда, наглядно видные на схемах мультиплетов. Дальнейшее расщепление изомультиплетов по массе происходит за счет электромагнитного взаимодействия.

Рассмотрим массовый оператор \hat{M} такой, что $\langle vi | \hat{M} | vi \rangle$, где v — индекс представления (например, $ms;(\lambda\mu)$), а i — индекс отдельного состояния. (Часто рассматривают и оператор квадрата массы.) При учете “сильной части” сильного взаимодействия оператор \hat{M} $SU(3)$ -симметричен. Нарушение этой симметрии (при включении умеренно-сильного взаимодействия) приводит к появлению в \hat{M} слагаемых с более низкой симметрией $[SU(2) \times U(1)]$, которые можно представить в виде ряда по неприводимым тензорным операторам группы $SU(3)$, составленным из инфинитезимальных операторов и различных их степеней. Среди линейных и квадратичных тензорных операторов существует всего два независимых неединичных оператора, обладающих симметрией изотопического спина $[SU(2) \times U(1)]$, а именно,

$$F_8 = \frac{\sqrt{3}}{2} Y, \quad D_8 = \frac{1}{\sqrt{3}} (T^2 - \frac{1}{4} Y^2 - \frac{1}{3} \sum F_a F_a).$$

Операторы D_a определяются как

$$D_a = \frac{2}{3} \sum_{b,c} d_{abc} F_b F_c, \quad (9.23)$$

где структурные константы d определены в ур. (9.6). Эти операторы подчиняются тем же перестановочным соотношениям, что и F_a , т.е., они образуют подобный F_a октет операторов, на которых реализуется НП (11) группы SU(3). Полагая, что указанные октетные вклады в \hat{M} являются основными, получаем известную **массовую формулу Гелл-Манна - Окубо**, описывающую расщепление SU(3)-мультиплетов на изомультиплеты:

$$\langle \lambda\mu, IY | \hat{M} | \lambda\mu, IY \rangle = m_0 + m_1 Y + m_2 \left[I(I+1) - \frac{1}{4} Y^2 \right]. \quad (9.24)$$

В третьем слагаемом можно исключить общий сдвиг изомультиплетов, добавляя слагаемое $-\frac{1}{3} \sum F_a F_a$, где оператор Казимира $\sum F_a F_a = \lambda + \mu + \frac{1}{3}(\lambda^2 + \mu^2 + \lambda\mu)$. Для “треугольных” представлений $[(\lambda 0)$ или $(0 \mu)]$ третье слагаемое сводится к линейному члену, и поэтому можно ожидать линейного по Y расщепления барионного декуплета (рис. 9.5). Действительно, интервалы между соседними (по Y) изомультиплетам составляют ≈ 150 Мэв. Более того, Ω^- -частица была обнаружена лишь после создания излагаемой здесь теории, и предсказание ее свойств явилось важным подтверждением SU(3)-симметрии и толчком к дальнейшему ее развитию. Массовая формула (9.24) хорошо описывает барионный октет (рис. 9.4) и заметно хуже октет псевдоскалярных мезонов (рис. 9.5).

Величина $\frac{2}{3}(I_3 + V_3) = I_3 + \frac{1}{2}Y \equiv Q = -Y''$ (электрический заряд) играет роль “гиперзаряда” по отношению к U -мультиплетам. Этот факт иллюстрируется на рис. 9.4, 9.5 тем, что U -мультиплеты состоят из частиц с одинаковым зарядом. Если сильные взаимодействия инвариантны относительно I -спиновой подгруппы SU(2), то можно предположить, что электромагнитное взаимодействие инвариантно относительно U -спиновой подгруппы.

9.5. Кварковые модели

Кварковые модели были предложены как ответ на вопрос, естественно возникающий в результате установления SU(3)-симметрии сильных взаимодействий, а именно, не состоят ли адроны из более простых объектов, подобно атомам и молекулам. Напрашивается мысль о том, что такие объекты (“кварки”, по Гелл-Манну) должны преобразовываться по фундаментальному представлению группы SU(3). В первоначальной модели были введены три кварка (фундаментальные состояния) u, d, s (up, down, strange), образующих изодублет (u, d) и изосинглет s (рис. 9.4).

Электрические заряды и гиперзаряды кварков, как видно из рисунка, дробные: $Y(u,d)=1/3$, $Y(s) = -2/3$; $Q(d,s) = -1/3$, $Q(u) = 2/3$. Антикварки осуществляют сопряженное фундаментальное представление $\mathbf{3}^*$ (рис. 9.4). Подходящим выбором фаз можно добиться выполнения соотношений

$$\begin{aligned} I_+|d\rangle &= |u\rangle, V_-|u\rangle = |s\rangle, U_+|s\rangle = |d\rangle, \\ I_+|\bar{u}\rangle &= -|\bar{d}\rangle, V_+|\bar{u}\rangle = -|\bar{s}\rangle, U_+|\bar{d}\rangle = -|\bar{s}\rangle. \end{aligned} \quad (9.25)$$

Предполагается, что кварки q являются фермионами с $S = 1/2$, барионы образованы тремя кварками (qqq), что позволяет приписать кварку барионное число $B = 1/3$ (для антикварка \bar{q} , $B = -1/3$). Мезоны обладают структурой $q\bar{q}$, для них $B = 0$; пара $q\bar{q}$ может аннигилировать, что объясняет отсутствие абсолютно стабильных мезонов.

В грубом приближении относительное движение связанной мезонной пары кварк-антикварк считается нерелятивистским, и мезонные октеты можно представить в виде последовательности термов $^{2S+1}L_J$ ($^1S_0, ^3S_0, ^1P_1, ^3P_{0,1,2}, \dots$). Спин мезонов — это полный момент J пары $q\bar{q}$. Мезоны на рис. 9.5 соответствуют состоянию 1S_0 . Кварковый состав мезонов можно получить исходя из разложения $\mathbf{3} \times \mathbf{3}^* = \mathbf{8} + \mathbf{1}$. Так,

$$|K^+\rangle = |u\bar{s}\rangle, |K^0\rangle = |d\bar{s}\rangle, |\pi^+\rangle = |u\bar{d}\rangle, |\pi^0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|d\bar{d}\rangle - |u\bar{u}\rangle), \quad (9.26)$$

и так далее.

Декуплет барионов можно построить, исходя из того, что

$$|\Delta^{++}\rangle = |u \uparrow u \uparrow u \uparrow\rangle, \quad (9.27)$$

где стрелками отмечены спиновые состояния кварков. Действием операторов I_+ , V_- можно получить остальные частицы мультиплета (S_- позволяет получить другие спиновые состояния частицы Δ^{++}). Кварковый состав протона $p = uud$, нейтрона udd , как и у Δ^+ , Δ^0 - частиц, соответственно. Более детально, с учетом ортогональности протонного состоянию состоянию Δ^+ ($M_S = 1/2$),

$$|p, M_S = \frac{1}{2}\rangle = \sqrt{\frac{2}{3}}|d \downarrow u \uparrow u \uparrow\rangle - \sqrt{\frac{1}{3}}|d \uparrow u \uparrow u \downarrow\rangle. \quad (9.28)$$

Для описания кваркового состава барионов (формулы (9.27), (9.28)) выше привлекались спиновые состояния кварков. Кварковые состояния и их спины,

$$u \uparrow, u \downarrow, d \uparrow, d \downarrow, s \uparrow, s \downarrow,$$

образуют базис шестимерного пространства, на котором осуществляется простейшее представление группы $SU(2)(S) \times SU(3)$. Различные произведения этого пространства на

себя расщепляются на мультиплеты — комбинации SU(3)-мультиплетов и обычных спиновых мультиплетов. Если считать, что взаимодействие между кварками в дополнение к SU(3)-инвариантности не зависит также от спина, то в качестве группы симметрии систем из кварков можно рассматривать группу SU(6), и состояния этих систем разбиваются по НП группы SU(6). Соответственно, мультиплеты (НП) группы SU(2)(S)×SU(3) объединяются в *супермультиплеты* [НП SU(6)]. В ядерной физике рассматриваются также супермультиплеты, связанные с группой SU(4), являющейся расширением группы SU(2)(S)×SU(2)(I) и отражающей зарядовую и спиновую независимость ядерных сил.

Группы SU(4) и SU(6) вошли в физику частиц и несколько по-другому. В момент создания первоначальной кварковой модели (1964 год) уже были известны “странные” частицы и введено квантовое число “странность” (S) для их описания. Для включения в модель этого понятия и был введен странный *s*-кварк с $S = -1$. Странности *u*- и *d*-кварков равны 0. Таким образом, в кварковой модели странные частицы — это частицы, содержащие *s*-кварки. Открытие “очарованных” частиц привело к необходимости введения *c*-кварка (charm) и расширению группы симметрии с SU(3) до SU(4). Затем были введены *b*- (bottom) и *t*- (top) кварки, и в настоящее время говорят об SU(6)-*ароматосимметрии*. В качестве *ароматов* выступают квантовые числа I_3, S, C, B, T , сохраняющиеся при сильных (и электромагнитных) взаимодействиях; носителями ароматов являются соответствующие кварки. Симметрия SU(6), однако, значительно менее строгая, чем начальная SU(3)-симметрия, о чем свидетельствуют, среди других фактов, и оценочные массы кварков: $m_d, m_u \approx 0.35$ Гэв, $m_s \approx 0.5$ Гэв, $m_c \approx 1.5$ Гэв, $m_b \approx 5$ Гэв, $m_t > 91$ Гэв.

Ряд теоретических и экспериментальных фактов указывал на необходимость введения дополнительной степени свободы кварков, помимо пространственных координат, спина и аромата. Наиболее важным из этих фактов является то, что все известные барионные состояния полностью симметричны по указанным степеням свободы, и для сохранения принципа Паули следует умножить состояния на функции, антисимметричные относительно перестановок кварков, составляющих барионы. Так была введена характеристика кварков, называемая *цветом* и принимающая три разных значения (*r*, красный, *y*, желтый и *b*, синий). Цветовая волновая функция барионов включает все три цвета и является антисимметричной функцией трех цветовых состояний, инвариантной относительно унитарных преобразований в трехмерном

цветовом пространстве. Говорят, что полный цвет такого состояния равен нулю (состояние “бесцветно”). Дальнейшее развитие теории привело к выводу о том, что цвет является источником сильного поля, посредством которого осуществляется очень сильное взаимодействие кварков. На основе этого положения была создана квантовая хромодинамика, во многом напоминающая квантовую электродинамику.

Задачи к разделу 9

1. Вычислить структурные константы для группы $SU(3)$ в базисе λ_a , определенном формулами (9.2).
2. Проверить выполнение следующих соотношений Якоби для структурных констант группы SU_3 : $f_{abc}f_{cel} + f_{ceb}f_{acl} + f_{aec}f_{bcl} = 0$, $d_{abc}f_{cel} + f_{ceb}d_{acl} - d_{cbl}f_{ace} = 0$.
3. Убедиться, что операторы $\sum F_a^2$ и $\sum d_{abc}F_aF_bF_c$ коммутируют с инфинитезимальными операторами F_a .
4. Найти структурные константы группы $SU(N)$ в базисе неприводимых сферических операторов $O_{lm}(\mathcal{S})$, $l_{\max} = N - 1$.
5. Доказать, что кратность состояний, сопоставляемых точкам следующего после границы слоя на диаграмме НП группы $SU(3)$, равна двум, если граница не треугольная.
6. Построить диаграмму НП (22) группы $SU(3)$. Определить возможные значения I и Y для этого представления и его размерность. Какая схема Юнга отвечает этому представлению?
7. Разложить с помощью диаграммного метода по НП произведения $(11) \times (11)$, $(11) \times (10)$, $(11) \times (30)$.

ЛИТЕРАТУРА

Основная

Е.Вигнер, Теория групп и ее приложения к квантовомеханической теории атомных спектров, ИИЛ, Москва, 1961, 444 с.

Г.Я.Любарский, Теория групп и ее применение в физике, Гостехиздат, Москва, 1957.

М.Хамермеш, Теория групп и ее применение к физическим проблемам, Мир, Москва, 1966.

Дж. Эллиот, П.Добер, Симметрия в физике, т.т. 1, 2, Мир, Москва, 1983.

Дополнительная

А.Абрагам, Б.Блини, Электронный парамагнитный резонанс переходных металлов, том 2, Мир, Москва, 1973.

А.Барут, Р.Рончка, Теория представлений групп и ее приложения, т.т. 1 и 2, Мир, Москва, 1980.

Г.Л.Бир, Г.Е.Пикус, Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках, Наука, Москва, 1972.

Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков, Введение в теорию квантованных полей, Наука, Москва, 1976.

Н.Н.Боголюбов, Д.В.Ширков, Квантованные поля, Наука, Москва, 1980.

Г.Вейль, Теория групп и квантовая механика, Наука, Москва, 1986.

Г.Вейль, Классические группы, их инварианты и представления, ИИЛ, Москва, 1947.

Г.Вейль, Симметрия, Наука, Москва, 1968, 192 с.

С.Газиорович, Физика элементарных частиц, Наука, Москва, 1969.

И.М.Гельфанд, Р.А.Минлос, З.Я.Шапиро, Представления группы вращений и группы Лоренца, их применения, Физматгиз, Москва, 1958.

Д.Горенштейн, Конечные простые группы (введение в их классификацию), Мир, Москва, 1985.

Б.Джадд, Б.Вайборн, Теория сложных атомных спектров, Мир, Москва, 1973.

Б.А.Дубровин, С.П.Новиков, А.Т.Фоменко, Современная геометрия, Наука, Москва, 1986.

- Ю.А.Изюмов, В.Н.Сыромятников*, Фазовые переходы и симметрия кристаллов, Наука, Москва, 1984.
- О.В.Ковалев*, Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп, Наука, Москва, 1985.
- Л.Д.Ландау и Е.М.Лифшиц*, Теория упругости, Наука, Москва, 1987, 248 с.
- Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц*, Квантовая механика (нерелятивистская теория), изд. физ.-мат. литер, Москва, 1963.
- Е.С.Ляпин, А.Я.Айзенштат, М.М.Лесохин*, Упражнения по теории групп, Наука, Москва, 1967.
- Дж.Най*, Физические свойства кристаллов и их описание при помощи тензоров и матриц, Мир, Москва, 1967, 388 с.
- Б.А.Наймарк*, Линейные представления группы Лоренца, Физматгиз, Москва, 1958.
- Ю.В.Новожилов*, Введение в теорию элементарных частиц, Наука, Москва, 1972.
- Р.Нокс и А.Голд*, Симметрия в твердом теле, Наука, Москва, 1970, 424 с.
- Л.С.Понтрягин*, Непрерывные группы, Наука, Москва, 1973.
- Р.Стритер, А.Вайтман*, PCT, спин и статистика и все такое, Наука, Москва, 1966.
- М.Каки*, Quantum Field Theory, a modern introduction, N.Y. Oxford, Oxford University Press, 1993.

ПРИЛОЖЕНИЯ

1. Сферические гармоники $P_{lm}(x, y, z) = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}} r^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$ порядков 1 – 6

$$l = 1: P_{10} = z, \quad P_{1\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{1}{2}}(x \pm iy)$$

$$l = 2: P_{20} = \frac{1}{2}(3z^2 - r^2), \quad P_{2\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{2}}z(x \pm iy), \quad P_{2\pm 2} = \sqrt{\frac{3}{8}}(x \pm iy)^2$$

$$l = 3: P_{30} = \frac{1}{2}z(5z^2 - r^2), \quad P_{3\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{16}}(5z^2 - r^2)(x \pm iy),$$

$$P_{3\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{8}}z(x \pm iy)^2 = \sqrt{\frac{15}{8}}z[(x^2 - y^2) \pm 2ixy],$$

$$P_{3\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{5}{16}}(x \pm iy)^3 = \mp \sqrt{\frac{5}{16}}[(x^3 - 3xy^2) \pm i(3x^2y - y^3)]$$

$$l = 4: P_{40} = \frac{1}{8}(35z^4 - 30z^2r^2 + 3r^4), \quad P_{4\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{5}{16}}z(7z^2 - 3r^2)(x \pm iy),$$

$$P_{4\pm 2} = \sqrt{\frac{5}{32}}(7z^2 - r^2)(x \pm iy)^2, \quad P_{4\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{35}{16}}z(x \pm iy)^3,$$

$$P_{4\pm 4} = \sqrt{\frac{35}{128}}(x \pm iy)^4 = \sqrt{\frac{35}{128}}[(x^4 - 6x^2y^2 + y^4) \pm 4ixy(x^2 - y^2)]$$

$$l = 5: P_{50} = \frac{1}{8}z(63z^4 - 70z^2r^2 + 15r^4),$$

$$P_{5\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{128}}(21z^4 - 14z^2r^2 + r^4)(x \pm iy), \quad P_{5\pm 2} = \sqrt{\frac{105}{32}}z(3z^2 - r^2)(x \pm iy)^2,$$

$$P_{5\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{35}{256}}(9z^2 - r^2)(x \pm iy)^3, \quad P_{5\pm 4} = \sqrt{\frac{315}{128}}z(x \pm iy)^4,$$

$$P_{5\pm 5} = \mp \sqrt{\frac{63}{256}}(x \pm iy)^5 = \mp \sqrt{\frac{63}{256}}[(x^5 - 10x^3y^2 + 5xy^4) \pm i(5x^4y - 10x^2y^3 + y^5)]$$

$$l = 6: P_{60} = \frac{1}{16}(231z^6 - 315z^4r^2 + 105z^2r^4 - 5r^6),$$

$$P_{6\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{21}{128}}z(33z^4 - 30z^2r^2 + 5r^4)(x \pm iy),$$

$$P_{6\pm 2} = \sqrt{\frac{105}{1024}}(33z^4 - 18z^2r^2 + r^4)(x \pm iy)^2, \quad P_{6\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{105}{256}}z(11z^2 - 3r^2)(x \pm iy)^3$$

$$P_{6\pm 4} = \sqrt{\frac{63}{512}}(11z^2 - r^2)(x \pm iy)^4, \quad P_{6\pm 5} = \mp \sqrt{\frac{693}{256}}z(x \pm iy)^5,$$

$$P_{6\pm 6} = \sqrt{\frac{231}{1024}}(x \pm iy)^6 = \sqrt{\frac{231}{1024}}[(x^6 - 15x^4y^2 + 15x^2y^4 - y^6)$$

$$\pm 5ixy(x^4 - 4x^2y^2 + y^4)]$$

2. Справочные данные по группе октаэдра и гексагональной группе

Группы O_h и D_{6h} вместе со своими подгруппами охватывают все 32 кристаллических класса. В таблице 1 приводится список элементов группы O_h , причем элементы в смежных классах по инвариантным подгруппам расставлены в порядке, соответствующем перечислению элементов в этих подгруппах (ср. Ковалев, 1984). По принятой нумерации первые четыре элемента составляют инвариантную подгруппу D_2 , первые 12 элементов - подгруппу T ; результату умножения i -го элемента на инверсию приписывается номер $i + 24$. Таким образом, подгруппу T_d образуют элементы 1–12 и 37–48. Для обозначения поворотов около осей n -го порядка вместо C_n использовано упрощенное обозначение n_j , где нижний индекс j различает однотипные оси; ось поворота указана в третьей колонке координатами простейшего вектора, направленного вдоль этой оси. В четвертой колонке указаны координаты вектора $C_n r$. В пятой колонке приведены углы Эйлера поворота (используется определение углов Эйлера, приведенное в §3.2). В шестой колонке указаны первые строчки “матриц-поворотов”

$D^{(1/2)}(\varphi_1, \theta, \varphi_2): (\alpha, \beta)$ (параметры Кэли-Клейна); вся матрица выглядит как $\begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix}$.

При этом мы изменили знаки матриц для элементов 2,7,10,11,12 и 19 (отмечены в таблице точками), что позволяет сохранить в одном классе сопряженных элементов матрицы, обозначенные как повороты на одинаковые углы, $(\{3\}, \{3^2\}, \{4\}, \{4^3\})$, и, кроме того, сохранить смысл степеней в этих обозначениях. Инверсия обозначена как I , отражения в плоскостях — m , зеркальные повороты S_6, S_4 как инверсионные повороты $\overline{3^2}, \overline{4^3} \equiv \overline{4^3}$, соответственно. Плоскость отражения инверсионного поворота перпендикулярна оси вращения, указанной в третьей колонке.

Двойная группа октаэдра получается добавлением к матрицам $D^{(1/2)}(\alpha, \beta)$ из шестой колонки списка матриц $-D^{(1/2)}(\alpha, \beta)$, которые нумеруются индексами $1^* - 24^*$, фигурирующими в таблице умножения. Эта двойная группа является простейшим двузначным НП группы поворотов октаэдра.

Таблицы 2 и 6 фактически являются таблицами умножения соответствующих двойных групп. Если $ab = c$, то, очевидно, $ab^* = a^*b = c, a^*b^* = c^*$.

Таблица 1. Список элементов группы октаэдра

| №№ | C | ось | Cr | $(\varphi_1 \theta \varphi_2)$ | $(\alpha \beta)$ | CI |
|----|---------|-------------|--------------|---|---|---------------|
| 1 | e | | $(x y z)$ | $(0 0 0)$ | $(1 0)$ | I |
| 2 | 4_1^2 | $[1 0 0]$ | $(x -y -z)$ | $(\pi \pi 0)$ | $(0 -i) \bullet$ | m_1 |
| 3 | 4_2^2 | $[0 1 0]$ | $(-x y -z)$ | $(0 \pi 0)$ | $(0 -1)$ | m_2 |
| 4 | 4_3^2 | $[0 0 1]$ | $(-x -y z)$ | $(\pi 0 0)$ | $(-i 0)$ | m_3 |
| 5 | 3_1^2 | $[1 1 1]$ | $(y z x)$ | $(\frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-\sigma -\sigma)$ | $\bar{3}_1^2$ |
| 6 | 3_2^2 | $[-1 -1 1]$ | $(y -z -x)$ | $(\frac{3}{2} \pi \frac{1}{2} \pi 0)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-\sigma \sigma)$ | $\bar{3}_2^2$ |
| 7 | 3_3^2 | $[1 -1 -1]$ | $(-y z -x)$ | $(\frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi 0)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-\sigma^* \sigma^*) \bullet$ | $\bar{3}_3^2$ |
| 8 | 3_4^2 | $[-1 1 -1]$ | $(-y -z x)$ | $(\frac{3}{2} \pi \frac{1}{2} \pi \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-\sigma^* -\sigma^*)$ | $\bar{3}_4^2$ |
| 9 | 3_1 | $[1 1 1]$ | $(z x y)$ | $(0 \frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (\sigma^* -\sigma)$ | $\bar{3}_1$ |
| 10 | 3_4 | $[-1 1 -1]$ | $(z -x -y)$ | $(0 \frac{1}{2} \pi \frac{3}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (\sigma -\sigma^*) \bullet$ | $\bar{3}_4$ |
| 11 | 3_2 | $[-1 -1 1]$ | $(-z x -y)$ | $(\pi \frac{1}{2} \pi \frac{3}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (\sigma^* \sigma) \bullet$ | $\bar{3}_2$ |
| 12 | 3_3 | $[1 -1 -1]$ | $(-z -x y)$ | $(\pi \frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (\sigma \sigma^*) \bullet$ | $\bar{3}_3$ |
| 13 | 2_2 | $[1 -1 0]$ | $(-y -x -z)$ | $(\frac{1}{2} \pi \pi 0)$ | $(0 -\sigma^*)$ | m_5 |
| 14 | 4_3 | $[0 0 1]$ | $(-y x z)$ | $(\frac{1}{2} \pi 0 0)$ | $(\sigma^* 0)$ | $\bar{4}_3$ |
| 15 | 4_3^3 | $[0 0 1]$ | $(y -x z)$ | $(\frac{3}{2} \pi 0 0)$ | $(-\sigma 0)$ | $\bar{4}_3^3$ |
| 16 | 2_1 | $[1 1 0]$ | $(y x -z)$ | $(0 \pi \frac{1}{2} \pi)$ | $(0 -\sigma)$ | m_4 |
| 17 | 2_6 | $[0 1 -1]$ | $(-x -z -y)$ | $(\frac{3}{2} \pi \frac{1}{2} \pi \frac{3}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (i -1)$ | m_9 |
| 18 | 2_5 | $[0 1 1]$ | $(-x z y)$ | $(\frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-i -1)$ | m_8 |
| 19 | 4_1 | $[1 0 0]$ | $(x -z y)$ | $(\frac{3}{2} \pi \frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (1 -i) \bullet$ | $\bar{4}_1$ |
| 20 | 4_1^3 | $[1 0 0]$ | $(x z -y)$ | $(\frac{1}{2} \pi \frac{1}{2} \pi \frac{3}{2} \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-1 -i)$ | $\bar{4}_1^3$ |
| 21 | 2_4 | $[1 0 -1]$ | $(-z -y -x)$ | $(\pi \frac{1}{2} \pi 0)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-i i)$ | m_7 |
| 22 | 4_2^3 | $[0 1 0]$ | $(-z y x)$ | $(\pi \frac{1}{2} \pi \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-1 -1)$ | $\bar{4}_2^3$ |
| 23 | 2_3 | $[1 0 1]$ | $(z -y x)$ | $(0 \frac{1}{2} \pi \pi)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (-i -i)$ | m_6 |
| 24 | 4_2 | $[0 1 0]$ | $(z y -x)$ | $(0 \frac{1}{2} \pi 0)$ | $\sqrt{\frac{1}{2}} (1 -1)$ | $\bar{4}_2$ |

2. Таблица умножения поворотов группы октаэдра

| | | | | | | | | | | | | |
|----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|-----|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | |
| 2 | 1* | 4 | 3* | 6 | 5* | 8 | 7* | 10* | 9 | 12 | 11* | |
| 3 | 4* | 1* | 2 | 7 | 8* | 5* | 6 | 11* | 12* | 9 | 10 | |
| 4 | 3 | 2* | 1* | 8 | 7 | 6* | 5* | 12* | 11 | 10* | 9 | |
| 5 | 8 | 6 | 7 | 9* | 12 | 10 | 11 | 1* | 4 | 2 | 3 | |
| 6 | 7* | 5* | 8 | 10 | 11* | 9 | 12 | 2* | 3* | 1* | 4 | |
| 7 | 6 | 8* | 5* | 11 | 10 | 12* | 9 | 3* | 2 | 4* | 1* | |
| 8 | 5* | 7 | 6* | 12 | 9 | 11 | 10* | 4* | 1* | 3 | 2* | |
| 9 | 11* | 12* | 10* | 1* | 3* | 4* | 2* | 5 | 7* | 8* | 6* | |
| 10 | 12 | 11* | 9 | 2 | 4 | 3* | 1* | 6* | 8 | 7* | 5* | |
| 11 | 9 | 10 | 12* | 3 | 1* | 2 | 4* | 7* | 5* | 6 | 8* | |
| 12 | 10* | 9 | 11 | 4 | 2* | 1* | 3 | 8* | 6* | 5* | 7 | |
| 13 | 15* | 14* | 16 | 21* | 23 | 22* | 24* | 17 | 19* | 18 | 20* | |
| 14 | 16 | 13 | 15 | 22 | 24* | 21* | 23* | 18 | 20* | 17* | 19 | |
| 15 | 13 | 16* | 14* | 23* | 21* | 24 | 22* | 19* | 17* | 20 | 18 | |
| 16 | 14* | 15 | 13* | 24* | 22* | 23 | 21 | 20 | 18 | 19 | 17 | |
| 17 | 18* | 20 | 19 | 13* | 14 | 16* | 15 | 21* | 22 | 24 | 23* | |
| 18 | 17 | 19* | 20 | 14* | 13* | 15* | 16* | 22 | 21 | 23 | 24 | |
| 19 | 20 | 18 | 17* | 15 | 16* | 14* | 13 | 23 | 24 | 22* | 21* | |
| 20 | 19* | 17* | 18* | 16* | 15* | 13 | 14 | 24* | 23 | 21* | 22 | |
| 21 | 24 | 23* | 22 | 17 | 20 | 19 | 18* | 13 | 16* | 15 | 14 | |
| 22 | 23* | 24* | 21* | 18* | 19 | 20* | 17* | 14* | 15 | 16 | 13 | |
| 23 | 22 | 21 | 24* | 19* | 18* | 17 | 20* | 15 | 14 | 13* | 16 | |
| 24 | 21* | 22 | 23 | 20 | 17* | 18* | 19* | 16 | 13 | 14 | 15* | |
| 1 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 | 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 |
| 2 | 14 | 13* | 16* | 15* | 18 | 17* | 20 | 19* | 22* | 21 | 24* | 23 |
| 3 | 15 | 16 | 13* | 14* | 19* | 20 | 17* | 18* | 23 | 24* | 21* | 22 |
| 4 | 16* | 15 | 14* | 13 | 20* | 19* | 18 | 17 | 24* | 23* | 22 | 21 |
| 5 | 17* | 20 | 18* | 19* | 21 | 24* | 22 | 23* | 13* | 16* | 14* | 15 |
| 6 | 18* | 19* | 17 | 20* | 22* | 23* | 21 | 24 | 14* | 15* | 13 | 16* |
| 7 | 19 | 18* | 20* | 17* | 23 | 22* | 24* | 21 | 15* | 14 | 16* | 13* |
| 8 | 20 | 17 | 19 | 18* | 24* | 21* | 23* | 22* | 16 | 13* | 15* | 14* |
| 9 | 21 | 23 | 24* | 22 | 13 | 15 | 16 | 14* | 17* | 19* | 20 | 18 |
| 10 | 22 | 24 | 23 | 21* | 14* | 16 | 15* | 13* | 18 | 20 | 19 | 17 |
| 11 | 23* | 21 | 22 | 24 | 15* | 13 | 14 | 16 | 19* | 17 | 18 | 20* |
| 12 | 24 | 22* | 21 | 23 | 16 | 14 | 13* | 15 | 20* | 18 | 17* | 19 |
| 13 | 1* | 3 | 2 | 4* | 9* | 11* | 10 | 12 | 5 | 7 | 6* | 8 |
| 14 | 2* | 4 | 1* | 3 | 10 | 12* | 9 | 11* | 6 | 8 | 5 | 7* |
| 15 | 3* | 1* | 4* | 2* | 11 | 9* | 12* | 10 | 7 | 5* | 8 | 6 |
| 16 | 4 | 2 | 3* | 1* | 12* | 10* | 11* | 9* | 8* | 6 | 7 | 5 |
| 17 | 5 | 6* | 8* | 7 | 1* | 2 | 4* | 3* | 9 | 10* | 12 | 11* |
| 18 | 6 | 5 | 7 | 8 | 2* | 1* | 3 | 4* | 10* | 9* | 11* | 12* |
| 19 | 7* | 8* | 6 | 5 | 3 | 4 | 2 | 1* | 11 | 12* | 10* | 9 |
| 20 | 8* | 7 | 5* | 6 | 4 | 3* | 1* | 2* | 12 | 11 | 9* | 10* |
| 21 | 9* | 12* | 11* | 10 | 5* | 8 | 7* | 6* | 1* | 4* | 3 | 2* |
| 22 | 10* | 11* | 12 | 9* | 6 | 7 | 8 | 5* | 2 | 3* | 4* | 1* |
| 23 | 11 | 10* | 9* | 12* | 7* | 6 | 5 | 8 | 3* | 2* | 1* | 4 |
| 24 | 12* | 9 | 10* | 11* | 8 | 5 | 6* | 7 | 4 | 1* | 2 | 3 |

Таблицы 3. Характеры НП группы октаэдра

| O | E | $8 C_3$ | $3 C_4^2$ | $6 C_4$ | $6 U_2$ |
|------------|-----|---------|-----------|---------|---------|
| Γ_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 |
| Γ_2 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 |
| Γ_3 | 2 | -1 | 2 | 0 | 0 |
| Γ_4 | 3 | 0 | -1 | 1 | -1 |
| Γ_5 | 3 | 0 | -1 | -1 | 1 |

Двузначные НП (нечетные НП двойной группы октаэдра)

| o | e | e^* | $3, 3^{2*}$ | $3^2, 3^*$ | $4^2, 4^{2*}$ | $4, 4^{3*}$ | $4^3, 4^*$ | $2, 2^*$ |
|------------|-----|-------|-------------|------------|---------------|-------------|-------------|----------|
| Γ_6 | 2 | -2 | 1 | -1 | 0 | $\sqrt{2}$ | $-\sqrt{2}$ | 0 |
| Γ_7 | 2 | -2 | 1 | -1 | 0 | $-\sqrt{2}$ | $\sqrt{2}$ | 0 |
| Γ_8 | 4 | -4 | -1 | 1 | 0 | 0 | 0 | 0 |

Матрицы НП группы октаэдра

Двумерное НП Γ_3 можно построить на функциях $3z^2 - r^2, \sqrt{3}(x^2 - y^2)$ (в кубических осях). Соответствующие матрицы:

$$\begin{aligned}
 (e, 4_1^2, 4_2^2, 4_3^2) &\rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3_1^2, 3_2^2, 3_3^2, 3_4^2) \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \\
 (3_1, 3_2, 3_3, 3_4) &\rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, \quad (2_2, 4_3, 4_3^3, 2_1) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \\
 (2_6, 2_5, 4_1, 4_1^3) &\rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}, \quad (2_4, 4_2^3, 2_3, 4_2) \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}.
 \end{aligned}$$

Отметим, что эти матрицы осуществляют точное представление группы D_3 , изоморфной фактор-группе O/D_2 .

Выпишем еще вещественные матрицы НП Γ_4 ; их можно получить подстановкой углов Эйлера из таблицы 1 в формулу (4.3), т.е., это матрицы, построенные на функциях x, y, z . Матрицы НП Γ_5 получаются умножением последних двенадцати матриц НП Γ_4 на (-1) .

Таблица 4. Матрицы НП Γ_4 группы октаэдра

| | | | | |
|--|--|---|---|--|
| 4_1^2 | 4_2^2 | 4_3^2 | 3_1^2 | 3_2^2 |
| $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ |
| 3_3^2 | 3_4^2 | 3_1 | 3_4 | 3_2 |
| $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ |
| 3_3 | 2_2 | 4_3 | 4_3^3 | 2_1 |
| $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$ |
| 2_6 | 2_5 | 4_1 | 4_1^3 | 2_4 |
| $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ |
| 4_2^3 | 2_3 | 4_2 | | |
| $\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | $\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$ | | |

Комплексные матрицы НП Γ_4 (а вместе с ними и матрицы НП Γ_5) можно получить подстановкой соответствующих параметров Кэли-Клейна в следующую матрицу:

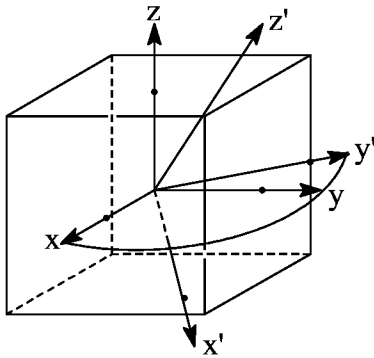
$$\hat{D}^{(1)}(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha^2 & \sqrt{2}\alpha\beta & \beta^2 \\ -\sqrt{2}\alpha\beta^* & |\alpha|^2 - |\beta|^2 & \sqrt{2}\alpha^*\beta \\ \beta^{*2} & -\sqrt{2}\alpha^*\beta^* & \alpha^{*2} \end{pmatrix}.$$

Матрицы двузначного представления Γ_6 — это “матрицы-повороты”, приведенные в шестой колонке таблицы 1 своей первой строчкой; фактически это двойная группа октаэдра. Представление Γ_7 получается отсюда умножением элементов 13 — 24 на (-1) . Наконец, матрицы НП Γ_8 можно получить подстановкой соответствующих параметров (α, β) в матрицу:

$$\hat{D}^{(3/2)}(\alpha, \beta) = \begin{pmatrix} \alpha^3 & \sqrt{3}\alpha^2\beta & \sqrt{3}\alpha\beta^2 & \beta^3 \\ -\sqrt{3}\alpha^2\beta^* & \alpha(1-3|\beta|^2) & -\beta(1-3|\alpha|^2) & \sqrt{3}\alpha^*\beta^2 \\ \sqrt{3}\alpha\beta^{*2} & \beta^*(1-3|\alpha|^2) & \alpha^*(1-3|\beta|^2) & \sqrt{3}\alpha^{*2}\beta \\ -\beta^{*3} & \sqrt{3}\alpha^*\beta^{*2} & -\sqrt{3}\alpha^{*2}\beta^* & \alpha^{*3} \end{pmatrix}.$$

Переход от тетрагональных к тригональным осям

Переход от системы координат, в которой оси x, y, z ориентированы вдоль осей четвертого порядка куба к тригональной системе, в которой ось z направлена вдоль оси третьего порядка $[111]$ (см. рис.), осуществляется поворотом с углами Эйлера $(\frac{1}{4}\pi, \arctan\sqrt{2}, 0)$. Отметим, что $\arctan\sqrt{2} = \arccos\frac{1}{\sqrt{3}} = \arcsin\sqrt{\frac{2}{3}}$. Матрица перехода (S) следующая:



$$(e_{x'}, e_{y'}, e_{z'}) = (e_x, e_y, e_z) \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{6}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -\frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix},$$

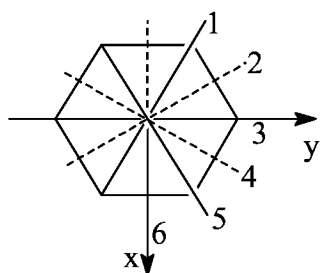
соответствующая “матрица-поворот”:

$$\hat{s} = \begin{pmatrix} \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{3}}} e^{-i\pi/8} & -\sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}}} e^{-i\pi/8} \\ \sqrt{\frac{1}{2} - \frac{1}{2\sqrt{3}}} e^{i\pi/8} & \sqrt{\frac{1}{2} + \frac{1}{2\sqrt{3}}} e^{i\pi/8} \end{pmatrix}.$$

Матрицы операторов в тригональных осях, D' , связаны с матрицами в тетрагональных осях, D , соотношением $D' = S^{-1}DS$.

Таблица 5. Список элементов группы D_{6h}

| №№ | C | ось | $(\varphi_1, \theta, \varphi_2)$ | (α, β) | CI |
|----|-------|---------------------|----------------------------------|-------------------|--------------------|
| 1 | e | $[0\ 0\ 1]$ | $(0\ 0\ 0)$ | $(1\ 0)$ | I |
| 2 | 6 | $[0\ 0\ 1]$ | $(\frac{1}{3}\pi\ 0\ 0)$ | $(v^*\ 0)$ | $\bar{6}$ |
| 3 | 6^2 | $[0\ 0\ 1]$ | $(\frac{2}{3}\pi\ 0\ 0)$ | $(v^{*2}\ 0)$ | $\bar{3}$ |
| 4 | 6^3 | $[0\ 0\ 1]$ | $(\pi\ 0\ 0)$ | $(-i\ 0)$ | $\bar{2} \equiv m$ |
| 5 | 6^4 | $[0\ 0\ 1]$ | $(\frac{4}{3}\pi\ 0\ 0)$ | $(-v^2\ 0)$ | $\bar{3}^2$ |
| 6 | 6^5 | $[0\ 0\ 1]$ | $(\frac{5}{3}\pi\ 0\ 0)$ | $(-v\ 0)$ | $\bar{6}^5$ |
| 7 | 2_3 | $[0\ 1\ 0]$ | $(0\ \pi\ 0)$ | $(0\ -1)$ | m_3 |
| 8 | 2_2 | $[-1\ \sqrt{3}\ 0]$ | $(\frac{1}{3}\pi\ \pi\ 0)$ | $(0\ -v^*)$ | m_2 |
| 9 | 2_1 | $[\sqrt{3}\ -1\ 0]$ | $(\frac{2}{3}\pi\ \pi\ 0)$ | $(0\ -v^{*2})$ | m_1 |
| 10 | 2_6 | $[1\ 0\ 0]$ | $(\pi\ \pi\ 0)$ | $(0\ i)$ | m_6 |
| 11 | 2_5 | $[\sqrt{3}\ 1\ 0]$ | $(\frac{4}{3}\pi\ \pi\ 0)$ | $(0\ v^2)$ | m_5 |
| 12 | 2_4 | $[1\ \sqrt{3}\ 0]$ | $(\frac{5}{3}\pi\ \pi\ 0)$ | $(0\ v)$ | m_4 |



На рисунке указано расположение осей второго порядка. В таблицах 1 и 5 использованы обозначения:

$$\sigma = e^{i\pi/4} = \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + i), \quad \sigma^{-1} = \sigma^*, \quad \sigma^2 = i;$$

$$v = e^{i\pi/6} = \frac{1}{2}(\sqrt{3} + i), \quad v^2 = \frac{1}{2}(-1 + \sqrt{3}), \quad v^{-1} = v^*, \quad v^3 = i$$

Таблица (6) умножения поворотов группы D_6

| | | | | | | | | | | | |
|----|-----|-----|-----|-----|-----|----|----|----|----|-----|-----|
| 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 |
| 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 1* | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 7* |
| 3 | 4 | 5 | 6 | 1* | 2* | 9 | 10 | 11 | 12 | 7* | 8* |
| 4 | 5 | 6 | 1* | 2* | 3* | 10 | 11 | 12 | 7* | 8* | 9* |
| 5 | 6 | 1* | 2* | 3* | 4* | 11 | 12 | 7* | 8* | 9* | 10* |
| 6 | 1* | 2* | 3* | 4* | 5* | 12 | 7* | 8* | 9* | 10* | 11* |
| 7 | 12* | 11* | 10* | 9* | 8* | 1* | 6 | 5 | 4 | 3 | 2 |
| 8 | 7 | 12* | 11* | 10* | 9* | 2* | 1* | 6 | 5 | 4 | 3 |
| 9 | 8 | 7 | 12* | 11* | 10* | 3* | 2* | 1* | 6 | 5 | 4 |
| 10 | 9 | 8 | 7 | 12* | 11* | 4* | 3* | 2* | 1* | 6 | 5 |
| 11 | 10 | 9 | 8 | 7 | 12* | 5* | 4* | 3* | 2* | 1* | 6 |
| 12 | 11 | 10 | 9 | 8 | 7 | 6* | 5* | 4* | 3* | 2* | 1* |

Таблицы 7. Характеры НП группы D_6

| D_6 | E | $2C_6$ | $2C_6^2$ | C_6^3 | $3U_2$ | $3U_2'$ |
|------------|-----|--------|----------|---------|--------|---------|
| Γ_1 | 1 | 1 | 1 | 1 | 1 | |
| Γ_2 | 1 | 1 | 1 | 1 | -1 | -1 |
| Γ_3 | 1 | -1 | 1 | -1 | 1 | -1 |
| Γ_4 | 1 | -1 | 1 | -1 | -1 | 1 |
| Γ_5 | 2 | 1 | -1 | -2 | 0 | 0 |
| Γ_6 | 2 | -1 | -1 | 2 | 0 | 0 |

Двузначные НП (нечетные НП двойной группы D_6)

| d_6 | e | e^* | $6,6^{5*}$ | $6^*,6^5$ | $3,3^{2*}$ | $3^*,3^2$ | $6^3,6^{3*}$ | $2,2^*$ | $2',2'^*$ |
|------------|-----|-------|-------------|-------------|------------|-----------|--------------|---------|-----------|
| Γ_7 | 2 | -2 | $\sqrt{3}$ | $-\sqrt{3}$ | 1 | -1 | 0 | 0 | 0 |
| Γ_8 | 2 | -2 | $-\sqrt{3}$ | $\sqrt{3}$ | 1 | -1 | 0 | 0 | 0 |
| Γ_9 | 2 | -2 | 0 | 0 | -2 | 2 | 0 | 0 | 0 |

Матрицы НП группы D_6

$$\Gamma_6: (e, 6^3) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, (6, 6^4) \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}, (6^2, 6^5) \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ \sqrt{3} & -1 \end{pmatrix}$$

$$(2_3, 2_6) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, (2_2, 2_5) \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & -\sqrt{3} \\ -\sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}, (2_1, 2_4) \rightarrow \frac{1}{2} \begin{pmatrix} -1 & \sqrt{3} \\ \sqrt{3} & 1 \end{pmatrix}.$$

Знаки матриц, отвечающих элементам $2_1 - 2_6$, можно изменить, ибо $\Gamma_6 \times \Gamma_2 = \Gamma_6$. Матрицы НП Γ_5 получаются отсюда изменением знака матриц элементов $6^3, 6, 6^5, 2_3, 2_1, 2_5$.

Матрицы НП Γ_7 — это двойная группа для D_6 ; они указаны в пятой колонке списка группы. Матрицы НП Γ_8 можно получить из матриц НП Γ_7 , если учесть, что $\Gamma_8 = \Gamma_7 \times \Gamma_3$ (или $\Gamma_7 \times \Gamma_4$).

Матрицы НП Γ_9 :

$$(e, 3^2) \rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, 3 \rightarrow \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, (6, 6^5) \rightarrow \begin{pmatrix} i & 0 \\ 0 & -i \end{pmatrix}, 6^3 \rightarrow \begin{pmatrix} -i & 0 \\ 0 & i \end{pmatrix},$$

$$(2_3, 2_5) \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, (2_2, 2_4) \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & -i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, 2_1 \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, 2_6 \rightarrow \begin{pmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{pmatrix}.$$

Некоторые подгруппы групп O_h и D_{6h}

O_h : $D_{4h}(z) - 1, 2, 3, 4, 13, 14, 15, 16$ и номера $(i + 24)$

$D_{2d}(z) - 1, 2, 3, 4, 37, 38, 39, 40$ $D_{2h} - 1, 2, 3, 4, 25, 26, 27, 28$

$D_{3d}(111) - 1, 5, 9, 13, 17, 21$ и $(i + 24)$

$C_{3v}(z') - 1, 5, 9, 37, 41, 45$

D_{6h} : $D_{3d} - 1, 3, 5, 7, 9, 11$ и $(i + 12)$

$C_{3v} - 1, 3, 5, 19, 21, 23$

$D_{2h} - 1, 4, 7, 10, 13, 16, 19, 22.$

Ответы и указания к решению задач

Раздел 1.

1. а, б — да, с — нет.

5. $(ab)^2 = abab = e$. Умножить справа на a , потом на b .

6. e .

7. Рассмотреть две возможности: имеются элементы бесконечного порядка; таких элементов нет.

9. $xy = y^{-1}(yx)y$.

10. Разложить группу на смежные классы по нормализатору. Учесть, что элементы bab^{-1} одинаковы для всех b , принадлежащих одному классу.

13. Да, например, C_3 .

15. Порядок группы $n = k_1 + k_2 + \dots + k_r$, где k_i — число элементов i -го класса. Собирая слагаемые с $k_i = 1$, имеем $n = c + k_k + \dots + k_r$, где c — порядок центра. Если c делится на p , то элемент порядка p содержится в центре; если нет, то на p не делится и какое-то из $k_i \neq 1$, но тогда на p делится порядок нормализатора элементов i -го класса, т.е., порядок подгруппы. Далее — по индукции.

16. Например, $C_3 \leftrightarrow C_3^2$ в группе C_3 .

20. Противное означало бы: $G = Z + aZ + a^2Z + \dots$, т.е., любой элемент G имел бы вид $a^n z$, и группа оказалась бы коммутативной.

21. Нет.

22. Порядок элемента (a, b) , где a и b — образующие групп Z_1 и Z_2 , оказывается равным порядку группы $Z_1 \times Z_2$.

23. 5 структур: 1) циклическая (типа C_8), 2) абелева, все элементы второго порядка (D_{2n}), 3) абелева, есть элемент четвертого порядка (C_{4n}), 4) неабелева, $G = \{a\} + b\{a\}$, $a^4 = e$, $b^2 = e$ (D_4), 5) неабелева, $G = \{a\} + b\{a\}$, $a^4 = e$, но $b^2 = a^2$ (кватернионы).

24. Достаточно заметить, что любой цикл $(12\dots p) = (1p)(1, p-1)\dots(13)(12)$.

25. Все степени указанного цикла.

27. Каждый цикл длины l распадается на $l-1$ транспозицию, а общее число транспозиций $(l_1-1) + (l_2-1) + \dots + (l_m-1) = (l_1 + l_2 + \dots + l_m) - m = n - m$.

28. Из указанных транспозиций можно получить любую другую, например, $(24) = (34)(23)(34)$; вообще, $(a, c+1) = (c, c+1)(a, c)(c, c+1)$.

29. $(12\dots n)(m, m+1)(12\dots n)^{-1} = (m+1, m+2)$, и задача сводится к предыдущей.
31. $e; (123), (142), (134), (243); (132), (124), (143), (234); (12)(34), (13)(24), (14)(23)$.
32. Сопряжены подгруппы перестановок трех элементов (исключая 4, 3, 2 или 1).
33. Если $r_2 r_1 = r_1 r_2$, то $r_1 r_2 r_1^{-1} = r_2$, т.е., вращение r_1 не меняет оси r_2 ; отсюда либо ось r_1 совпадает с осью r_2 , либо ось $r_1 \perp$ оси r_2 , и r_1 представляет собой поворот на π . Во втором случае $r_1 r_2 r_1^{-1} = r_2^{-1}$, но $r_2 = r_2^{-1}$ только если r_2 также является поворотом на π .
34. Класс составляют унитарные матрицы с одинаковыми собственными значениями $(\exp i\varphi_1, \dots, \exp i\varphi_n)$.
37. C_{nv} .
38. Множество трансляций на $\mathbf{a} = m\mathbf{e}_1 + n\mathbf{e}_2$, m, n — целые, и их комбинации с поворотами C_4, C_4^2, C_4^3 относительно начала (одного из узлов). В качестве поворотных центров четвертого порядка служат узлы и центры квадратов (ячеек).
39. (C_n, U_2) .
40. $C_4^z C_4^x = C_3^{(xyz)}$; $C_4^y C_4^z C_4^x = C_2^{(xy)}$.
41. $\sigma U_2 = S(\varphi)$, где $\varphi = 2\angle U_2 \wedge \sigma$; но минимальный угол между плоскостью и U_2 в D_{nd} равен $\pi/2n$, так что $\varphi_{\min} = \pi/n$.

Раздел 2.

1. Нет.

3. $a^n = e$, имеется n НП с $a \rightarrow \exp(2\pi i m/n)$, $m=0, 1, 2, \dots, n-1$.

5. $D_1^+(g) = (A^+)^{-1} D_2^+(g) A^+$, с другой стороны, $D_1(g^{-1}) = A D_2(g^{-1}) A^{-1}$, откуда $AA^+ = \lambda E$.

7. Все кратности равны $(1/g) \sum_g \chi^{(1)}(g) \chi^{(2)}(g) \chi^{(3)}(g)$.

8. В противном случае возникло бы противоречие с теоремой задачи 7.

9. При выполнении условия задачи характеры любых представлений оказываются вещественными.

11. Расписать характер и воспользоваться соотношением ортогональности матричных элементов.

13. 0 для $\Gamma_\alpha \neq \Gamma_1$.

14. Γ и Γ' одинаково разлагаются по НП.

15. $[\chi_\Gamma^3(g)] = \frac{1}{6} [\chi_\Gamma^3(g) + 3\chi_\Gamma(g^2)\chi_\Gamma(g) + 2\chi_\Gamma(g^3)]$, в $\{\chi_\Gamma^3(g)\}$ — знак (-) перед вторым слагаемым.

16. $[\Gamma^2] = [\Gamma_1^2] + \Gamma_1 \times \Gamma_2 + [\Gamma_2^2]$, $[\Gamma^3] = [\Gamma_1^3] + [\Gamma_1^2] \times \Gamma_2 + \Gamma_1 \times [\Gamma_2^2] + [\Gamma_2^3]$ и т.д.

17. Достаточно заметить, что любую матрицу, содержащую один единичный элемент при остальных элементах, равных нулю, можно выразить через матрицы НП:

$$\frac{n_\alpha}{g} \sum_g D_{ij}^{(\alpha)} * \hat{D}^{(\alpha)}(g) = \hat{P}_{ij}.$$

18. Использовать лемму Шура. а) $\hat{A} = \lambda_1 E_\alpha \oplus \lambda_2 E_\beta$ б) $\begin{pmatrix} \lambda_1 E_\alpha & \lambda_2 E_\alpha \\ \lambda_3 E_\alpha & \lambda_4 E_\alpha \end{pmatrix}$, где E_α — единичная матрица размерности n_α .

19. $a, x \in [\Gamma_\alpha]$, $a \rightarrow A$, $Ax = ax$; в базисе из матриц $P_{11}, P_{12}, P_{21}, P_{22}$ $(A) = \begin{pmatrix} a_{11}E & a_{12}E \\ a_{21}E & a_{22}E \end{pmatrix}$.

20. $[\Gamma_{\text{рег}}]$ совпадает с регулярным представлением групповой алгебры.

21. Пусть $B'e = b$; из $B'Ae = AB'e$ следует $B'a = ab$.

22. $\begin{pmatrix} b_{11} & b_{21} & 0 & 0 \\ b_{12} & b_{22} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & b_{11} & b_{21} \\ 0 & 0 & b_{12} & b_{22} \end{pmatrix}$ в том же базисе, что и в задаче 19.

23. $g \leftrightarrow g^{-1}$.

25. Только для коммутативных групп ($Z = [G]$).

26. Убедиться, что равенство сводится к соотношению (2.5).

27. $(2 \ 2 \ 0)$, исходя из Γ_1 для C_3 ; $(2 \ -1 \ 0)$ из Γ_2 и Γ_3 .

28. Единичное НП самосопряжено и само является орбитой первого порядка; два комплексных НП $(1, \varepsilon, \varepsilon^2)$ и $(1, \varepsilon^2, \varepsilon)$ составляют орбиту второго порядка, с кратностью единица составляющую разложение НП Γ_3 группы C_{3v} .

Раздел 3.

2. $D_{\text{oh}} = D_\infty \times C_i$; НП — $D_{g,u}^{(m)}, \Sigma_{g,u}^\pm$.

4. Из сравнения матриц $g(\varphi_1' \theta' \varphi_2') = g(\varphi_1^0 \theta^0 \varphi_2^0) g(\varphi_1 \theta \varphi_2)$ следует $\partial \varphi_2' / \partial \varphi_2 = 1$, и якобиан $|\partial(\varphi_1' \theta' \varphi_2') / \partial(\varphi_1 \theta \varphi_2)| = |\partial(\varphi_1' \theta') / \partial(\varphi_1 \theta)|$. Поэтому для упрощения записи можно положить $\varphi_1^0 = \varphi_2^0 = \varphi_2 = 0$, а в конечном выражении якобиана, если понадобится, заменить φ_1 на $\varphi_1 + \varphi_2^0$, φ_1' на $\varphi_1' - \varphi_1^0$.

5. $f = \sum_{lm} f_l^m(r) Y_{lm}(\theta, \varphi)$.

6. Сечение $a_1 = c$ — сфера радиуса $\sqrt{1-c^2}$, соответствует сопряженным, с одинаковым следом, матрицам (и вращениям на углы α , $\cos(\alpha/2) = \sqrt{1-c^2}$).

9. Если $\eta^k = D_{kl} \xi^l$, то $\eta_i = \varepsilon_{ik} \eta^k = \varepsilon_{ik} D_{kl} \varepsilon^{lm} \xi_m = D_{im} \varepsilon^{lm} \xi_m$. (Знаки суммирования опущены.)

$$11. \left(jm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \middle| j + \frac{1}{2}, m \pm \frac{1}{2} \right) = \sqrt{\frac{j \pm m + 1}{2j + 1}}, \quad \left(jm \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \middle| j - \frac{1}{2}, m \pm \frac{1}{2} \right) = \mp \sqrt{\frac{j \mp m}{2j + 1}}.$$

12. Матрица $D^{(l)}$ вещественна на функциях $(P_{ll}, \dots, P_{lm}, \dots, Y_{l0}, \dots, Q_{lm}, \dots, Q_{ll})$, где матрица перехода S определяется соотношениями

$$(P_{lm}, Q_{lm}) = (Y_{lm}, Y_{l-m}) \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ (-1)^m & i(-1)^m \end{pmatrix}; \quad \hat{D}^{(l)} = S_l^{-1} \hat{D}^{(l)} S_l,$$

$$S_l S_l = (-1)^l \hat{C}^{(l)}.$$

13. $\xi_1 = Ab_2$, $\xi_2 = Ab_1$, $\xi_3 = Aa_2$, где $A = 2 \arccos a_1 / \sqrt{1-a_1^2}$ (ср.(4.20)).

15. а) При нечетных перестановках строк и столбцов K_J умножается на $(-1)^J$, при транспонировании не меняется. б) Рассмотреть спиноры (u_1, u_2) , (v_1, v_2) , (w_1, w_2) и положить $u_3 = v_3 = w_3 = 1$. в) В новых обозначениях $3j$ -символ обладает всеми свойствами симметрии символа K_J . Часть из них приводит к соотношениям (4.38); транспонирование K_J дает:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(j_1 + j_2 + m_3) & \frac{1}{2}(j_1 + j_2 - m_3) & j_3 \\ \frac{1}{2}(j_2 - j_1 + m_1 - m_2) & \frac{1}{2}(j_2 - j_1 - m_1 + m_2) & j_1 - j_2 \end{pmatrix}$$

$$16. \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ 0 & c & b \end{matrix} \right\} = \frac{(-1)^{a+b+c}}{\sqrt{(2b+1)(2c+1)}} \text{ и т.д. (см., например, Ландау и Лифшиц, 1963).}$$

$$18. \frac{(-1)^{b+c+d+f}}{\sqrt{(2c+1)(2f+1)}} \left\{ \begin{matrix} a & b & c \\ e & d & f \end{matrix} \right\}.$$

20. $C(\varphi) \rightarrow e^{im\varphi}$, m — полуцелое; двойная группа $D_\infty(\alpha C_{\alpha\nu})$ состоит из матриц $c(\varphi)$, $c_2^{(v)}$, q и их произведений, “нечетные” НП — двумерные $D^{(m)}$ с полуцелым m .

21. D_2 имеет одно двузначное двумерное НП с $\chi(e) = -\chi(q) = 2$, остальные $\chi(c) = 0$. D_{2d} и D_4 изоморфны, имеют по два двумерных двузначных НП с $\chi(e) = -\chi(q) = 2$, $\chi(c_4) = -\chi(c_4^3) = \chi(c_4^3 q) = -\chi(c_4 q) = \pm\sqrt{2}$, остальные характеры — нули.

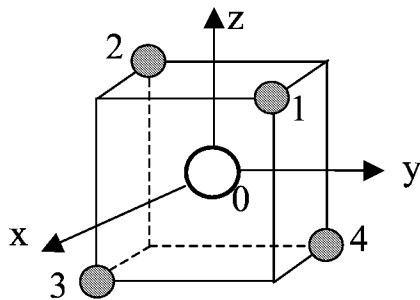
Раздел 4.

1. Тензор $\gamma_{i,k}$ преобразуется по представлению ортогональной группы $D^{(1-)} \times [D^{(1-2)}] = D^{(3-)} + D^{(2-)} + 2D^{(1-)}$. $D^{(3-)}$ содержит один инвариант группы T_d . В кубических осях инвариантный тензор пропорционален следующему: $e_x e_y e_z + e_x e_z e_y + e_y e_x e_z + e_y e_z e_x + e_z e_x e_y + e_z e_y e_x$.

2. C_{3v} : возможны 3 типа слоев — 1 атом на оси C_3 , 3 атома на плоскостях симметрии, 6 атомов, занимающих общее положение. D_{3d} : 5 типов — 1 атом в центре симметрии, 2 атома на оси C_3 , равноудаленных от центра, 6 атомов на плоскостях симметрии, 6 атомов на осях второго порядка, 12 атомов в общих положениях.

3. Пусть G_1 — энергия взаимодействия центрального атома X с атомом Y, G_2 — энергия взаимодействия соседних атомов Y, $G_3(Y_1, Y_4) = 0$. Тогда $k_2 = -G_1''(R)$ (R — равновесное расстояние X — Y), $k_3 = -G_1'/R$, $k_1 = -2k_2 - 4k_3$, $k_6 = k_7 = 0$, $k_8 = -G_2''/2 - G_2'/2R\sqrt{2}$, $k_4 = -k_2 - 4k_8$, $k_9 = k_{11} = -G_2''/2 + G_2'/2R\sqrt{2}$, $k_{10} = -G_2'/R\sqrt{2}$, $k_5 = -k_3 - 2k_8 - 2k_{10}$, так что, например, $\omega^2(\Gamma_{1g}) = G_1''(R) + 4G_2'(R\sqrt{2})/R\sqrt{2}$. При этом $G_1' + 2\sqrt{2}G_2' = 0$ из условия минимума энергии в равновесной конфигурации.

4. Колебательное представление молекулы XY_4 (см. рис.) расщепляется на



неприводимые так: $\Gamma_{\text{кол}} = \Gamma_1 + \Gamma_3 + 2\Gamma_4$, где Γ_4 — векторное представление группы T_d . Обозначим $R_1 = X_1 + Y_1 + Z_1$, $R_2 = -X_2 - Y_2 + Z_2$, $R_3 = X_3 - Y_3 - Z_3$, $R_4 = -X_4 + Y_4 - Z_4$ (смещения атомов Y от центра). Тогда ненормированные симметрические координаты молекулы следующие:

$$\Gamma_1: Q_1 = R_1 + R_2 + R_3 + R_4,$$

$$\Gamma_3: Q_2 = 3(Z_1 + Z_2 - Z_3 - Z_4) - R_1 - R_2 - R_3 - R_4,$$

$$Q_3 = X_1 + X_3 - X_2 - X_4 - Y_1 - Y_4 + Y_2 + Y_4,$$

$$\Gamma_4: Q_4 = X_1 + X_2 + X_3 + X_4 - \frac{4m}{M} X_0, \quad Q_5, Q_6 \text{ получаются заменой } X \text{ на } Y \text{ и } Z,$$

$$\Gamma_4': Q_7 = Y_1 + Z_1 + Y_2 - Z_2 - Y_3 - Z_3 - Y_4 + Z_4,$$

$$Q_8 = X_1 + Z_1 + X_2 - Z_2 - X_3 + Z_3 - X_4 - Z_4,$$

$$Q_9 = X_1 + Y_1 - X_2 - Y_2 - X_3 + Y_3 + X_4 - Y_4.$$

$$5. [\hat{D}(g_1 g_2) f](x) = f(g_2^{-1} g_1^{-1} x) = [\hat{D}(g_2) f](g_1^{-1} x) = [\hat{D}(g_1) \hat{D}(g_2) f](x).$$

$$6. x \cos \alpha + y \sin \alpha, x^2 \cos^2 \alpha + y^2 \sin^2 \alpha + xy \sin 2\alpha; \sin x \rightarrow \sin(x \cos \alpha + y \sin \alpha),$$

$$F(\mathbf{r}) = \frac{\partial}{\partial x} f(\mathbf{r}), \quad (\hat{D}F)(\mathbf{r}) = \cos \alpha \frac{\partial}{\partial x} f(g^{-1}\mathbf{r}) + \sin \alpha \frac{\partial}{\partial y} f(g^{-1}\mathbf{r}).$$

7. $x^2 = \frac{1}{3}(x^2 + y^2 + z^2)[\Gamma_1] + \frac{1}{3}(2x^2 - y^2 - z^2)[\Gamma_3]$.

8. Нет; например, $f(\mathbf{r}) = x^2 + y^4$ порождает пятимерное представление O , распадающееся в $\Gamma_1 + 2\Gamma_3$.

9. См. приложение.

10. $O_3 \times P_n$.

13. 0.

15. $\Gamma_1 \leftrightarrow \Gamma_4, \Gamma_2 \leftrightarrow \Gamma_5, \Gamma_3 \leftrightarrow \Gamma_4, \Gamma_5, \Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_4, \Gamma_5$; для электрических переходов — между состояниями разной четности, для магнитных — одинаковой.

16. а) $\Gamma_4 = \Gamma_{t3} + \Gamma_{t2}; \Gamma_5 = \Gamma_{t3} + \Gamma_{t1}$ (четности уровней не меняются). б) $\Gamma_3 = \Gamma_{r1} + \Gamma_{r2}, \Gamma_4, \Gamma_5 = \Gamma_{r2} + \Gamma_{r3} + \Gamma_{r4}$ (искажение вдоль кубических осей x, y, z).

17. $\Gamma_{Ys} = \Gamma_1 + \Gamma_4, \Gamma_{Yp} = \Gamma_1 + \Gamma_3 + 2\Gamma_4 + \Gamma_5$. Некоторые из МО: $\psi_{s1}(\Gamma_4) = s_1 + s_3 - s_2 - s_4, \psi_{s1}(\Gamma_4) = s_1 + s_4 - s_2 - s_3, \psi_{s1}(\Gamma_4) = s_1 + s_2 - s_3 - s_4$. МО типов $\Gamma_1, \Gamma_3, \Gamma_4$ из атомных p -орбиталей составляют подобно симметрическим координатам задачи 4, типа Γ_5 — подобно вращательным координатам молекулы.

18. $D^{(2)} = \Gamma_3 + \Gamma_5, D^{(3)} = \Gamma_2 + \Gamma_4 + \Gamma_5, D^{(4)} = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5, D^{(5/2)} = \Gamma_7 + \Gamma_8, D^{(7/2)} = \Gamma_6 + \Gamma_7 + \Gamma_8$.

19. Таблицы функций приведены, например, в книге Абрагама и Блини (1973).

20. $j(j+1)$.

21. Инварианты тетрагональных групп состоят из функций $Y_{k0}, Y_{4\pm 4}, Y_{5\pm 4}, Y_{6\pm 4}$.

Четный кристаллический потенциал для групп $D_{2d}, C_{4v}, D_4, D_{4h}$:

$$B_{20}Y_{20} + B_{40}Y_{40} + B_{44}(Y_{44} + Y_{4-4}) + B_{60}Y_{60} + B_{64}(Y_{64} + Y_{6-4}).$$

Нечетный потенциал для группы C_{4v} : $B_{10}Y_{10} + B_{30}Y_{30} + B_{50}Y_{50} + B_{54}(Y_{54} - Y_{5-4})$, для группы

$$D_4: B_{54}'(Y_{54} + Y_{5-4}).$$

22. $O_4^0 = 35J_z^4 - 30J(J+1)J_z^2 + 25J_z^2 - 6J(J+1) + 3J^2(J+1)^2,$

$$O_4^2 = \frac{1}{2} [(7J_z^2 - J(J+1) - 5)(J_+^2 + J_-^2)]_+, \quad O_4^3 = \frac{1}{2} [J_z(J_+^3 + J_-^3)]_+, \quad O_4^4 = \frac{1}{2} (J_+^4 + J_-^4)$$

(знак + при скобках означает антикоммутирует).

Раздел 5.

1. $\theta = UK$, где $U\psi(p) = \psi(-p)$.

3. $D(\theta^2) = \pm 1 = D(\theta)D^*(\theta) = D(\theta)D(\theta)^{-1}$.

5. НКП группы θC_∞ содержит $\chi^{(m)} + \chi^{(-m)}$ ($m \neq 0$; третий тип НКП). НКП группы θD_∞ относятся к первому типу.
6. Два последних — Т-четные.
7. Нет; нет; да (см. Абрагам и Блини, 1973).

Раздел 6.

1. Представить t_a в виде $t_{a\parallel}t_{a\perp}$ и учесть (6.2).
2. $t_a S(\mathbf{n}, \varphi) = S'(\mathbf{n}', \varphi)$, \mathbf{n}' определяется как в (6.2), $\sigma' = t_{a\parallel/2}\sigma$.
3. $t_a I_O = I_{O'}$, где O' получается сдвигом O на $a/2$.
5. $\Omega_0' = |\mathbf{a}_1'(\mathbf{a}_2' \times \mathbf{a}_3')| = |\sum \lambda_{1i} \lambda_{2j} \lambda_{3k} \mathbf{a}_i(\mathbf{a}_j \times \mathbf{a}_k)| = \Omega_0 |\text{Det} \lambda_{ij}| \geq \Omega_0$ (λ_{ii} - целые числа)
6. Согласно результатам 1–3, любое точечное преобразование с центром на междоузлии O' можно записать в виде $r_O = t_{\alpha'} r_O$, где O — узел и, очевидно, α — вектор решетки. Тогда r_O — преобразование симметрии и является элементом сингонии.
7. Рис. d) и e) на стр.98 дают картину узлов в плоскости, перпендикулярной оси C_n , $n=3,4,6$. Через проекцию базисного вектора \mathbf{a}_3 на эту плоскость опять должна проходить ось C_n , поэтому эта проекция попадает либо на узел в плоскости, либо в центр правильного треугольника (d) или квадрата (e). Во всех случаях отражение в плоскости, проходящей через $\mathbf{a}_1(\mathbf{a}_2)$ и ось C_n , является преобразованием симметрии решетки.
8. $C_{6v} \rightarrow C_{2v} \rightarrow C_2$, $C_{4v} \rightarrow C_{2v} \rightarrow C_2$.
10. Существует три группы класса C_2 : $P2$, $P2_1$, $B2$; четыре — C_s : Pm , Pb , Vm , Vb ; и шесть — C_{2h} : $P2/m$, $P2_1/m$, $B2/m$, $P2/b$, $P2_1/b$, $B2/b$.
11. $b_1 = 2\pi \mathbf{a}_2 \times (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) / |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|^2$, $b_2 = 2\pi \mathbf{a}_1 \times (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_1) / |\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2|^2$, типы прямой и обратной решетки совпадают.
12. Для решеток сингонии C_2 имеются два вида зон Бриллюэна (параллелограмм и шестиугольник).
16. Множества $k_i + k_i'$; $k_i + k_j$; $\{-k\}$.
18. Группа C_{3h} имеет только один класс фактор-систем, группы C_{2h} , C_{4h} , C_{6h} — два. Существует одно двумерное НП второго класса группы C_{2h} , два — C_{4h} и три — C_{6h} .
19. $\sum_{\mathbf{a}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{a}} = N^3 \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'+\mathbf{b}}$, $\sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{a}-\mathbf{a}')} = N^3 \delta_{\mathbf{a}\mathbf{a}'}$.
20. Всего имеется 21 двухцветная группа.

Раздел 7.

1. $q_1 p_1 = q_2 p_2 \rightarrow q_1^{-1} q_2 = p_1 p_2^{-1} = e.$

2. $\mu = c^2(e) = \sum_a c(a^{-1})c(a).$

3. Если $e = e_1 + e_2$, то $ee_1 e = e_1 = \lambda e$ в силу $e_1 e_2 = 0$ и $cxc \sim c$. Отсюда $\lambda e = e_1 = e_1^2 = \lambda^2 e$, т.е., $\lambda^2 = \lambda$, $\lambda = 0, 1$, так что $e = e + 0 = 0 + e$ единственно возможные разложения e .

4. $\varepsilon c = c$, т.к. $c_r c = r c r^{-1} = r \lambda c$, $\lambda = (c r^{-1} c)(e) = \sum_a c(a) c(r a^{-1}) = c^2(r) = \mu c(r)$, т.е., $c_r c = \mu c(r) r c$. Суммируя по r и разделив на μ^2 , получаем $\varepsilon c = c^2 / \mu = c$. Отсюда $\varepsilon c_r = c_r$, и $\varepsilon^2 = \varepsilon$.

$$\begin{array}{l} (1^3) \quad (12) \quad (3) \\ 6. \quad [3] \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad \Gamma_1 \\ \quad [21] \quad 3 \quad 1 \quad 0 \quad \Gamma_1 + \Gamma_3 \\ \quad [1^3] \quad 6 \quad 0 \quad 0 \quad \Gamma_1 + \Gamma_2 + 2\Gamma_3 \end{array}$$

7. $2\chi^{[422]} + 2\chi^{[44]} + 2\chi^{[62]} - \chi^{[332]} - \chi^{[611]}$; -1 11. $\chi^{[n-1, n]}(1^v l) = v - 1$

14. Базисные вектора:

$$e_{i_1 i_2 i_3}^{(0)} = e_{i_1 i_2 i_3} - \frac{n}{n^2 + n - 2} \left\{ \delta_{i_1 i_2} \left[(n+1)E_{i_3}^{(12)} - E_{i_3}^{(13)} - E_{i_3}^{(23)} \right] + \delta_{i_1 i_3} \left[(n+1)E_{i_2}^{(13)} - E_{i_2}^{(12)} - E_{i_2}^{(23)} \right] + \delta_{i_3 i_2} \left[(n+1)E_{i_1}^{(23)} - E_{i_1}^{(12)} - E_{i_1}^{(13)} \right] \right\}$$

где $Sp^{(lk)} e_{i_1 i_2 i_3} = \delta_{i_l i_k} \frac{1}{n} E_{i_j}^{(lk)}$, $j \neq l, k$.

15. ${}^4(S, D, F, G, I)$ ($v = 3$), 2F ($v = 1$), ${}^2(P, 2D, F, 2G, 2H, I, J, K)$ ($v = 3$)

16. $|{}^4S, 0, 3/2\rangle = |1^+ 0^+ - 1^+\rangle \sim [(10-1)-(01-1)-(-101)-(1-10)+(0-11)+(-110)] \cdot (+++)$, $|{}^2D, 2, 1/2\rangle = |1^+ 1^- 0^+\rangle \sim [(110)-(011)][2(+--+)-(++-)-(-++)] - [2(101)-(110)-(011)][(++-)-(-++)]$, $|{}^2P, 1, 1/2\rangle = (|1^+ 1^- - 1^+| - |1^+ 0^- 0^+|) / \sqrt{2} \sim [(11-1)-(-111)+(001)-(100)][2(+--+)-(++-)-(-++)] - [2(1-11)-(11-1)-(-111) + 2(010)-(100)-(001)][(++-)-(-++)]$.

Раздел 8.

3. $\det e^X = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(\det e^{X/n} \right)^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left[\det \left(1 + \frac{X}{n} \right) \right]^n = \lim_{n \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{1}{n} Sp X \right)^n.$

6. A^μ — чисто мнимые; $A^0 = A^0 * \lambda$, $A^i = -A^i * \lambda$, $\lambda = \det A = e^{i\alpha}$.

8. $\beta = \alpha \gamma^* + \beta \delta^*$, $d^{-2} = |\gamma|^2 + |\delta|^2$.

$$a) \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & A^i_j \end{pmatrix}, A^i_j = \frac{1}{\Delta} \left\{ \left[(A^0)^2 + \mathbf{A}^2 \right] \delta^i_j - 2A^i A^j + 2i\varepsilon_{ijk} A^k \right\},$$

$$9. b) A_0^0 = |A^0|^2 + \mathbf{A}\mathbf{A}^*, A_j^0 = A^0 A^j * + A^0 * A^j + i\varepsilon_{jkl} A^k * A^l,$$

$$A_0^i = A^0 A^i * + A^0 * A^i + i\varepsilon_{ikl} A^k A^l *, A_j^i = \left(|A^0|^2 - \mathbf{A}\mathbf{A}^* \right) \delta^i_j + (A^i * A^j + A^j * A^i) + i\varepsilon_{ijk} (A^0 A^k * - A^0 * A^k)$$

$$11. \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 + |\gamma|^2 + |\delta|^2) & \operatorname{Re}(\alpha\beta^* + \gamma\delta^*) & \operatorname{Im}(\alpha\beta^* + \gamma\delta^*) & \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\gamma|^2 - |\beta|^2 - |\delta|^2) \\ \operatorname{Re}(\alpha\gamma^* + \beta\delta^*) & \operatorname{Re}(\alpha\delta^* + \beta\gamma^*) & \operatorname{Im}(\alpha\delta^* - \beta\gamma^*) & \operatorname{Re}(\alpha\gamma^* - \beta\delta^*) \\ -\operatorname{Im}(\alpha\gamma^* + \beta\delta^*) & -\operatorname{Im}(\alpha\delta^* + \beta\gamma^*) & \operatorname{Re}(\alpha\delta^* - \beta\gamma^*) & -\operatorname{Im}(\alpha\gamma^* - \beta\delta^*) \\ \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\beta|^2 - |\gamma|^2 - |\delta|^2) & \operatorname{Re}(\alpha\beta^* - \gamma\delta^*) & \operatorname{Im}(\alpha\beta^* - \gamma\delta^*) & \frac{1}{2}(|\alpha|^2 + |\delta|^2 - |\beta|^2 - |\gamma|^2) \end{pmatrix}$$

$$12. \Lambda = h(\mathbf{b})u(\xi) = \left[\cosh \frac{b}{2} \cos \frac{\varphi}{2} - i(\mathbf{nn}') \sinh \frac{b}{2} \sin \frac{\varphi}{2} \right] \sigma_0 +$$

$$\sigma \cdot \left(\mathbf{n} \sinh \frac{b}{2} \cos \frac{\varphi}{2} - i\mathbf{n}' \cosh \frac{b}{2} \sin \frac{\varphi}{2} - i[\mathbf{n} \times \mathbf{n}'] \sinh \frac{b}{2} \sin \frac{\varphi}{2} \right)$$

$$13. \begin{pmatrix} n_x^2 + (1 - n_x'^2) \cos \varphi & n'_x n'_y (1 - \cos \varphi) - n'_z \sin \varphi & n'_x n'_z (1 - \cos \varphi) + n'_y \sin \varphi \\ n'_x n'_y (1 - \cos \varphi) + n'_z \sin \varphi & n_y^2 + (1 - n_y'^2) \cos \varphi & n'_y n'_z (1 - \cos \varphi) - n'_x \sin \varphi \\ n'_x n'_z (1 - \cos \varphi) - n'_y \sin \varphi & n'_y n'_z (1 - \cos \varphi) + n'_x \sin \varphi & n_z^2 + (1 - n_z'^2) \cos \varphi \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \cosh b & n_x \sinh b & n_y \sinh b & n_z \sinh b \\ n_x \sinh b & 1 + n_x^2 (\cosh b - 1) & n_x n_y (\cosh b - 1) & n_x n_z (\cosh b - 1) \\ n_y \sinh b & n_x n_y (\cosh b - 1) & 1 + n_y^2 (\cosh b - 1) & n_y n_z (\cosh b - 1) \\ n_z \sinh b & n_x n_z (\cosh b - 1) & n_y n_z (\cosh b - 1) & 1 + n_z^2 (\cosh b - 1) \end{pmatrix}$$

$$14. b^0 = \frac{1}{2} a^0 - \frac{1}{2} a^1 \coth \frac{b}{2}, b^1 = \frac{1}{2} a^1 - \frac{1}{2} a^0 \coth \frac{b}{2}.$$

$$15. D_{m_1' m_2', m_1 m_2}^{(j_1 j_2)}(\Lambda) = D_{m_1' m_1}^{(j_1)}(\Lambda) D_{m_2' m_2}^{(j_2)} * (\Lambda), D_{m' m}^{(j)} \text{ дается формулой (4.25),}$$

где следует заменить α^* на δ , $(-\beta^*)$ на γ .

$$17. A_i = \sigma_i/2, B_i = 0 \quad \text{для спиноров первого рода}$$

$$A_i = 0, B_i = -\sigma_i^*/2 \quad \text{для пунктирных спиноров}$$

$$19. J_3, N_1 - J_2, -J_1 - N_2;$$

$$[J_1 + N_2, J_2 - N_1] = 0, [J_3, J_1 + N_2] = i(J_2 - N_1), [J_3, J_2 - N_1] = -i(J_1 + N_2)$$

$W^0 = -J_3, W^3 = -J_3, W^1 = -J_1 - N_2, W^2 = N_1 - J_2$ на состояниях $|p_0, \zeta\rangle$

$W^0 = -J_3, W^3 = -J_3, W^1 = k_2, W^2 = k_1; W^2 = -k^2.$

Раздел 9.

1. f_{abc} приведены в (9.9); $d_{118} = d_{228} = d_{338} = -d_{888} = \frac{1}{\sqrt{3}};$

$$d_{146} = d_{157} = -d_{247} = d_{256} = d_{344} = d_{355} = -d_{366} = -d_{377} = \frac{1}{2};$$

$$d_{448} = d_{558} = d_{668} = d_{778} = -\frac{1}{2\sqrt{3}}.$$

2. Указание: применить тождества

$$[[AB]C] + [[BC]A] + [[CA]B] = 0, [A\{BC\}] - \{[AB]C\} - \{[AC]B\} = 0.$$

к операторам λ_a и воспользоваться соотношениями (9.3) – (9.6).

4. Для нормированных согласно (9.3) операторов :

$$O_{l_1 m_1} O_{l_2 m_2} = \sum_{l_3 < l_{\max}, m_3} (-1)^{l_1 - l_2 + m_3} \sqrt{2l_3 + 1} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & -m_3 \end{pmatrix} O_{l_3 m_3}.$$

6. $Y = \pm 2, I = 1; Y = \pm 1, I = 3/2, 1/2; Y = 0, I = 0, 1, 2;$ размерность 27, схема Юнга [42].

7. $(11) \times (11) = (22) + (30) + (03) + 2(11) + (00), (11) \times (10) = (21) + (02) + (10), (11) \times (30) = (41) + (22) + (30) + (11)$

Аминов Линар Кашипович

ТЕОРИЯ СИММЕТРИИ

КОНСПЕКТЫ ЛЕКЦИЙ И ЗАДАЧИ

Технический редактор *А.В.Широбоков*

Корректор *М.А.Ложкина*

Подписано к печати 08.06.02. Формат 60×84/16.

Усл. печ. л. 11,16. Уч. изд. л. 9,76.

Гарнитура Таймс. Бумага офсетная №1.

Печать офсетная. Заказ №

АНО «Институт компьютерных исследований»,

426034, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

Лицензия на издательскую деятельность ЛУ №084 от 03.04.00.

<http://rcd.ru> E-mail: borisov@rcd.ru