

Е. Вигнер

ТЕОРИЯ ГРУПП
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ
К КВАНТОМЕХАНИЧЕСКОЙ
ТЕОРИИ АТОМНЫХ
СПЕКТРОВ

Е. Вигнер

Теория групп и ее приложения к
квантомеханической теории атомных спектров

Е. Вигнер
**ТЕОРИЯ ГРУПП
И ЕЕ ПРИЛОЖЕНИЯ К КВАНТОВОМЕХАНИЧЕСКОЙ ТЕОРИИ
АТОМНЫХ СПЕКТРОВ**

Настоящая книга представляет собой одну из наиболее известных монографий, посвященных приложению теории групп к квантовой механике.

Собственно теория групп изложена с учетом использования ее в физических приложениях, причем наибольшее внимание уделено симметрической группе, группе вращений и важнейшему для приложений разделу — теории представлений.

Перед тем как перейти к приложениям, автор кратко излагает основные положения и аппарат квантовой механики и теорию атомных спектров.

Развитая в книге общая теория применяется к атомным спектрам в форме, позволяющей использовать ее для более широкого круга проблем—ядерных спектров, теории поля и элементарных частиц и т. п. В связи с этим изложены такие вопросы, как свойства коэффициентов векторной связи и коэффициентов Рака, а также обращение времени.

Книга рассчитана на научных работников и аспирантов физиков, особенно физиков-теоретиков, работающих в области атомной и ядерной спектроскопии, изучения структуры молекул, физики твердого тела, а также математиков, интересующихся физическими приложениями теории групп.

ОТ РЕДАКТОРА ПЕРЕВОДА

Среди множества книг по физике лишь редкие сохраняют свою ценность в течение десятилетий. К таким замечательным книгам следует отнести книги, написанные в начале 30-х годов физиками, создававшими новое для того времени здание квантовой механики: Дираком, Гейзенбергом, Зоммерфельдом, Фоком, Паули и др. К их числу принадлежит также и известный курс теории групп Вигнера, русский перевод которого становится теперь доступным советскому читателю.

Хотя с тех пор, как в 1931 г. вышло первое (немецкое) издание этой книги, появилось много книг, посвященных приложениям теории групп в квантовой механике, книга Вигнера не только не утратила своей ценности, но и до настоящего времени остается, по-видимому, лучшей монографией по этому вопросу. Поэтому в ее новом (американском) издании 1959 г., с которого и сделан настоящий перевод, автор мог ограничиться лишь небольшими добавлениями, касающимися, в частности, таких новых вопросов, как обращение времени и коэффициенты Рака (гл. 25—27). Перевод книги был сверен с немецким изданием, что помогло исправить ряд неточностей.

Написанная крупным теоретиком в его молодые годы, она может быть рекомендована всем, кто изучает эту область физики. Кроме того, она позволяет познакомиться с тем кругом идей, в котором создавалась квантовая механика, и демонстрирует строгий логический путь ее развития.

Следует иметь в виду, что в книге не рассматриваются проблемы, связанные с представлениями группы Лоренца и с теорией поля (например, *CPT*-теорема). Поэтому имеет смысл обратить внимание читателя на некоторые книги на русском языке по указанным вопросам. К ним относятся следующие книги: Г. Я. Любарский,

Теория групп и ее применение в физике, М., 1957; И. М. Гельфанд, Р. А. Минлос, З. Я. Шапиро, Представление группы вращений и группы Лоренца, М., 1958; А. П. Юцис, И. В. Левинсон, В. В. Ванслас, Математический аппарат теории момента количества движения, Вильнюс, 1960.

Я. Смородинский.

ПРЕДИСЛОВИЕ АВТОРА

Целью настоящей книги является применение теории групп к задачам квантовой механики, в особенности к теории атомных спектров. Точное решение квантовомеханических уравнений в общем случае настолько трудно, что с помощью прямых вычислений можно получить лишь грубые приближения к точным решениям. Поэтому оказывается весьма полезным вывести значительную часть квантовомеханических результатов из рассмотрения основных свойств симметрии.

Когда в 1931 г. вышло первое немецкое издание данной книги, в среде физиков существовало нежелание принимать аргументы теории групп и теоретико-групповую точку зрения. Автору приятно отметить, что с тех пор это нежелание фактически исчезло и что более молодое поколение не понимает причин и оснований такого нежелания. Из старшего поколения Макс Лауэ, по-видимому, первым осознал значение теории групп как естественного орудия для получения первой ориентации в квантовой механике. Поддержка со стороны Лауэ как автора, так и издателя сыграла существенную роль в появлении в свет этой книги. Хотелось бы упомянуть его вопрос о том, какой из результатов, полученных в настоящей книге, я считаю наиболее важным. Мой ответ заключался в том, что наиболее важным мне представляется объяснение правила Лапорта (понятие четности) и квантовомеханическая модель векторного сложения. За прошедшие годы я пришел к выводу, что должен согласиться с его замечанием, в котором наиболее замечательным результатом признавалось то, что почти все правила спектроскопии следуют из свойств симметрии задачи.

При переводе были добавлены три новые главы. Во второй половине гл. 24 излагаются работы Рака и его продолжателей. Гл. 24 немецкого издания теперь выступает как гл. 25; гл. 26 посвящена обращению времени — операции симметрии, которая еще не рассматривалась в то время, когда готовилось немецкое издание. Содержание последней части этой главы, так же как и гл. 27, ранее еще не было опубликовано. Гл. 27 помещена в конце книги из редакционных соображений; однако следует посоветовать читателю обращаться к ней при изучении соответствующих

понятий в гл. 17 и 24. Остальные главы представляют собой перевод с немецкого издания, выполненный Дж. Дж. Гриффином, которому автор весьма обязан за его любезную готовность принять ряд предложений и постоянное сотрудничество. Он заменил также левую систему координат, принятую в немецком издании книги, на правую и добавил Приложение, в котором приведены использованные в книге обозначения.

Общий характер книги — подробность изложения и ограничение лишь одним предметом, а именно, квантовомеханической теорией атомных спектров — остался без изменений. Основные результаты этой теории содержались в статьях, опубликованных впервые в «*Zeitschrift für Physik*» в 1926 г. и в начале 1927 г. Первоначально появление этих статей было стимулировано исследованиями Гейзенберга и Дирака по квантовой теории систем тождественных частиц. Вейль читал лекции в Цюрихе по близким вопросам в 1927/1928 учебном году. Они были в дальнейшем расширены и изложены в его известной книге.

Когда стало известно, что немецкое издание переводится на английский язык, было предложено много добавлений. К сожалению, большинство из них невозможно было принять без существенного изменения общего характера книги, а также ее объема. Тем не менее автор и переводчик благодарны за эти предложения, которые оказали им большую помощь в работе. Автор хотел бы также поблагодарить своих коллег за многочисленные полезные дискуссии о роли теории групп в квантовой механике, а также ряда более частных вопросов. Он хотел бы выразить свою глубокую благодарность д-ру Баргману, а также проф. И. фон Нейману, последнюю по счету, но не по важности.

Е. Вигнер.

Принстон, Нью-Джерси
Февраль 1959 г.

ВЕКТОРЫ И МАТРИЦЫ

Линейные преобразования

Совокупность n чисел $(v_1, v_2, v_3, \dots, v_n)$ называется n -мерным вектором, или вектором n -мерного пространства; сами эти числа являются компонентами этого вектора. Координаты точки в n -мерном пространстве могут быть истолкованы как вектор, соединяющий начало координат с рассматриваемой точкой. Векторы будут обозначаться жирными курсивными латинскими буквами; их компоненты будут иметь латинский индекс, указывающий на соответствующую координатную ось. Таким образом, v_k есть компонента вектора (число), а \boldsymbol{v} — вектор, т. е. совокупность n чисел.

Два вектора называются равными, если их соответствующие компоненты равны. Таким образом, равенство

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{w} \quad (1.1)$$

эквивалентно n соотношениям

$$v_1 = w_1, \quad v_2 = w_2, \quad \dots, \quad v_n = w_n.$$

Вектор называется нулевым, если все его компоненты обращаются в нуль. Произведение $c\boldsymbol{v}$ числа c на вектор \boldsymbol{v} является вектором, компоненты которого в c раз больше компонент \boldsymbol{v} , или $(c\boldsymbol{v})_k = cv_k$. Сложение векторов определяется правилом, согласно которому компоненты суммы векторов равны суммам соответствующих компонент, т. е. формулой

$$(\boldsymbol{v} + \boldsymbol{w})_k = v_k + w_k. \quad (1.2)$$

В математических задачах часто бывает целесообразно ввести новые переменные вместо первоначальных. В простейшем случае новые переменные x'_1, x'_2, \dots, x'_n являются линейными функциями старых переменных x_1, x_2, \dots, x_n . Иначе говоря,

$$\begin{aligned} x'_1 &= \alpha_{11}x_1 + \dots + \alpha_{1n}x_n, \\ x'_2 &= \alpha_{21}x_1 + \dots + \alpha_{2n}x_n, \\ &\dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ x'_n &= \alpha_{n1}x_1 + \dots + \alpha_{nn}x_n, \end{aligned} \quad (1.3)$$

или

$$x'_i = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} x_k. \quad (1.3a)$$

Такой способ введения новых переменных называется *линейным преобразованием*. Преобразование полностью определяется коэффициентами $\alpha_{11}, \dots, \alpha_{nn}$, и совокупность этих n^2 чисел, расположенных в форме квадратной таблицы, называется *матрицей* линейного преобразования (1.3):

$$\begin{pmatrix} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \dots & \alpha_{2n} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} \end{pmatrix}. \quad (1.4)$$

Мы будем записывать такую матрицу более кратко в виде (α_{ik}) или просто α .

Чтобы равенства (1.3) действительно представляли введение новых переменных, необходимо не только переменные x' выразить через x , но и выразить эти последние через x' . Иначе говоря, если мы рассматриваем x_i как неизвестные в уравнениях (1.3), должно существовать единственное решение этих уравнений, выражающее переменные x через x' . Необходимым и достаточным условием этого является неравенство нулю определителя, составленного из коэффициентов α_{ik} :

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} & \dots & \alpha_{1n} \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \cdot & & \cdot \\ \alpha_{n1} & \dots & \alpha_{nn} \end{vmatrix} \neq 0. \quad (1.4a)$$

Преобразования, матрицы которых имеют отличные от нуля определители, называются *собственными* преобразованиями, однако таблица коэффициентов вида (1.4) всегда называется матрицей, независимо от того, отвечает ли она собственному преобразованию или нет. Матрицы будем обозначать буквами, напечатанными жирным шрифтом, а элементы матриц — светлыми буквами с индексами, указывающими на соответствующие оси. Таким образом, α есть матрица, таблица n^2 чисел; α_{jk} есть элемент матрицы (число).

Две матрицы равны, если все их соответствующие коэффициенты равны. Следовательно, равенство

$$\alpha = \beta \quad (1.5)$$

эквивалентно n^2 равенствам

$$\alpha_{jk} = \beta_{jk} \quad (j, k = 1, 2, \dots, n).$$

Уравнениям

$$x'_i = \sum_{k=1}^n \alpha_{ik} x_k \quad (1.3a)$$

можно придать другое толкование, если рассматривать x'_i не как компоненты исходного вектора в новой системе координат, а как компоненты *нового вектора в исходной системе координат*. Тогда мы говорим, что матрица α преобразует вектор x в вектор x' , или что α , примененная к вектору x , дает вектор x' :

$$x' = \alpha x. \quad (1.3b)$$

Это уравнение полностью эквивалентно (1.3a).

Любая n -мерная матрица является *линейным оператором* по отношению к n -мерным векторам. Она представляет собой *оператор*, потому что она преобразует один вектор в другой; этот оператор является линейным, поскольку для произвольных чисел a и b и произвольных векторов r и v справедливо соотношение

$$\alpha(ar + bv) = a\alpha r + b\alpha v. \quad (1.6)$$

Для доказательства (1.6) достаточно выписать в явном виде правую и левую части равенства; k -я компонента вектора $ar + bv$ равна $ar_k + bv_k$, так что l -я компонента вектора в левой части равна

$$\sum_{k=1}^n \alpha_{lk} (ar_k + bv_k).$$

Но она совпадает с l -й компонентой вектора в правой части (1.6)

$$a \sum_{k=1}^n \alpha_{lk} r_k + b \sum_{k=1}^n \alpha_{lk} v_k.$$

Тем самым линейность матричных операторов установлена.

Отметим, что n -мерная матрица является *наиболее общим* линейным оператором в n -мерном векторном пространстве. Это значит, что всякий линейный оператор в этом пространстве эквивалентен матрице. Чтобы доказать это, рассмотрим произвольный линейный оператор O , преобразующий вектор $e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)$ в вектор $r_{.1}$, вектор $e_2 = (0, 1, 0, \dots, 0)$ в вектор $r_{.2}$ и, наконец, вектор $e_n = (0, 0, 0, \dots, 1)$ в вектор $r_{.n}$, где компоненты вектора $r_{.k}$ равны $r_{1k}, r_{2k}, \dots, r_{nk}$. Тогда матрица (r_{ik}) преобразует каждый из векторов e_1, e_2, \dots, e_n в те же векторы $r_{.1}, r_{.2}, \dots, r_{.n}$, что и оператор O . Кроме того, любой n -мерный вектор a является линейной комбинацией векторов e_1, e_2, \dots, e_n . Таким образом, как O , так и (r_{ik}) (поскольку они линейны) преобразуют любой произвольный вектор a в один и тот же вектор $a_1 r_{.1} + \dots + a_n r_{.n}$. Следовательно, матрица (r_{ik}) эквивалентна оператору O .

Это показывает, что комбинация двух линейных преобразований (1.7) и (1.3) с матрицами (β_{ik}) и (α_{ik}) представляет собой линейное преобразование, имеющее матрицу (γ_{ik}) .

Матрица (γ_{ik}) , определенная через матрицы (α_{ik}) и (β_{ik}) согласно равенству (1.9), называется *произведением* матриц (β_{ik}) и (α_{ik}) . Так как (α_{ik}) преобразует вектор r в вектор $r' = \alpha r$, а (β_{ik}) преобразует вектор r' в вектор $r'' = \beta r'$, то матрица (γ_{ik}) , представляющая по определению произведение матриц (α_{ik}) и (β_{ik}) , преобразует вектор r непосредственно в вектор $r'' = \gamma r$. Этот метод сочетания преобразований называется „матричным умножением“ и имеет ряд простых свойств, которые мы перечислим ниже в виде теорем.

Прежде всего мы замечаем, что формальное правило умножения матриц совпадает с правилом умножения определителей.

1. *Определитель произведения двух матриц равен произведению определителей каждого из двух сомножителей.*

При перемножении матриц соотношение

$$\alpha\beta = \beta\alpha \quad (1.E.1)$$

не является обязательно справедливым. Например, рассмотрим две матрицы

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \text{ и } \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Тогда

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

но

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{pmatrix}.$$

Этим устанавливается второе свойство матричного умножения.

2. *Произведение двух матриц зависит, вообще говоря, от порядка сомножителей.*

В том весьма частном случае, когда равенство (1.E.1) справедливо, матрицы α и β называются *коммутирующими*.

3. В противоположность перестановочному закону при перемножении матриц имеет место *сочетательный (ассоциативный) закон умножения*.

Иначе говоря,

$$\gamma(\beta\alpha) = (\gamma\beta)\alpha. \quad (1.10)$$

Таким образом, несущественно, умножается ли матрица γ на произведение матриц β и α или произведение матриц γ и β — на матрицу α . Чтобы доказать это, обозначим элемент с индексами i

и k матрицы в левой части (1.10) через ε_{ik} . Тогда

$$\varepsilon_{ik} = \sum_{j=1}^n \gamma_{ij} (\beta\alpha)_{jk} = \sum_{j=1}^n \sum_{l=1}^n \gamma_{ij} \beta_{jl} \alpha_{lk}. \quad (1.10a)$$

Элемент с индексами i и k в правой части (1.10) равен

$$\varepsilon'_{ik} = \sum_{l=1}^n (\gamma\beta)_{il} \alpha_{lk} = \sum_{l=1}^n \sum_{j=1}^n \gamma_{ij} \beta_{jl} \alpha_{lk}. \quad (1.10b)$$

Мы видим, что $\varepsilon_{ik} = \varepsilon'_{ik}$ и, следовательно, (1.10) доказано. Поэтому в обеих частях (1.10) можно просто писать $\gamma\beta\alpha$.

Справедливость сочетательного закона становится немедленно очевидной, если рассматривать матрицы как линейные операторы. Пусть α преобразует вектор r в вектор $r' = \alpha r$, β — вектор r' в $r'' = \beta r'$ и γ — вектор r'' в $r''' = \gamma r''$. Тогда объединение двух матриц в одну путем матричного умножения означает просто комбинацию двух операций. Произведение $\beta\alpha$ преобразует r непосредственно в r'' , а $\gamma\beta$ преобразует r' прямо в r''' . Таким образом, как $(\gamma\beta)\alpha$, так и $\gamma(\beta\alpha)$ преобразуют r в r''' , и обе эти операции эквивалентны.

4. Единичная матрица

$$\mathbf{1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

играет особую роль в матричном умножении, такую же как число 1 в обычном умножении. Для любой матрицы α

$$\alpha \cdot \mathbf{1} = \mathbf{1} \cdot \alpha.$$

Тем самым $\mathbf{1}$ коммутирует со всеми матрицами, и ее произведение на любую матрицу равно этой матрице. Элементы единичной матрицы обозначаются символом δ_{ik} , так что

$$\begin{aligned} \delta_{ik} &= 0 & (i \neq k), \\ \delta_{ik} &= 1 & (i = k). \end{aligned} \quad (1.12)$$

Величина δ_{ik} , определенная таким образом, называется дельта-символом Кронекера. Матрица $(\delta_{ik}) = \mathbf{1}$ производит тождественное преобразование, оставляющее переменные без изменения.

Если для заданной матрицы α существует такая матрица β , при которой

$$\beta\alpha = \mathbf{1}, \quad (1.13)$$

то β называется матрицей, *обратной* матрице α . Соотношение (1.13) означает, что существует преобразование с матрицей β , которое в сочетании с матрицей α дает тождественное преобразование. Если определитель матрицы α не равен нулю ($|\alpha_{ik}| \neq 0$), то обратное преобразование всегда существует (как уже упоминалось на стр. 10). Чтобы доказать это, выпишем n^2 уравнений (1.13) в явном виде:

$$\sum_{j=1}^n \beta_{ij} \alpha_{jk} = \delta_{ik} \quad (i, k = 1, 2, \dots, n). \quad (1.14)$$

Рассмотрим теперь n уравнений, в которых i имеет одно значение, например l . Эти уравнения составляют n линейных уравнений с n неизвестными $\beta_{l1}, \beta_{l2}, \dots, \beta_{ln}$. Следовательно, они имеют единственное решение, если только определитель $|\alpha_{jk}|$ не обращается в нуль. То же самое справедливо для остальных $n-1$ систем уравнений. Тем самым устанавливается пятое свойство.

5. Если определитель $|\alpha_{jk}|$ отличен от нуля, то существует одна и только одна такая матрица β , что $\beta\alpha = 1$.

Больше того, определитель $|\beta_{jk}|$ является обратным определителю $|\alpha_{jk}|$, поскольку, согласно теореме 1,

$$|\beta_{jk}| \cdot |\alpha_{jk}| = |\delta_{jk}| = 1. \quad (1.15)$$

Отсюда следует, что матрица α не имеет обратной, если $|\alpha_{ik}| = 0$, и что матрица β , обратная матрице α , также должна иметь обратную.

Теперь мы покажем, что если имеет место соотношение (1.13), то соотношение

$$\alpha\beta = 1 \quad (1.16)$$

также справедливо. Это значит, что если β является матрицей, обратной α , то одновременно α есть матрица, обратная β . Это проще всего показать путем умножения равенства (1.13) справа на матрицу β :

$$\beta\alpha\beta = \beta, \quad (1.17)$$

и, умножения полученного равенства слева на матрицу, обратную β , которую мы обозначим через γ . Тогда

$$\gamma\beta\alpha\beta = \gamma\beta,$$

и поскольку, согласно предположению, $\gamma\beta = 1$, последнее равенство совпадает с (1.16). Обратно, нетрудно показать, что (1.13) следует из (1.16). Таким образом, доказана теорема 6 (матрица, обратная α , обозначается через α^{-1}):

6. Если α^{-1} есть матрица, обратная матрице α , то матрица α также является обратной α^{-1} . Очевидно, что матрицы, обратные друг другу, коммутируют,

Правило. Матрица, обратная произведению $\alpha\beta\gamma\delta$, получается путем перемножения матриц, обратных отдельным сомножителям, в обратном порядке, т. е.

$$(\delta^{-1}\gamma^{-1}\beta^{-1}\alpha^{-1}) \cdot (\alpha\beta\gamma\delta) = 1.$$

Другой важной матрицей является нулевая матрица.

7. Нулевой матрицей называется матрица, каждый элемент которой равен нулю:

$$\mathbf{0} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.18)$$

Очевидно, что для любой матрицы α имеет место равенство

$$\alpha \cdot \mathbf{0} = \mathbf{0} \cdot \alpha = \mathbf{0}.$$

Нулевая матрица играет важную роль в другой операции с матрицами, а именно в сложении. Сумма γ двух матриц α и β есть матрица с элементами

$$\gamma_{ik} = \alpha_{ik} + \beta_{ik}. \quad (1.19)$$

При этом n^2 уравнений (1.19) эквивалентны уравнению

$$\gamma = \alpha + \beta \text{ или } \gamma - \alpha - \beta = \mathbf{0}.$$

Сложение матриц, очевидно, перестановочно:

$$\alpha + \beta = \beta + \alpha. \quad (1.20)$$

Кроме того, умножение на сумму подчиняется распределительному закону:

$$\gamma(\alpha + \beta) = \gamma\alpha + \gamma\beta.$$

$$(\alpha + \beta)\gamma = \alpha\gamma + \beta\gamma.$$

Далее, произведение матрицы α на число a определяется как матрица γ , каждый элемент которой равен произведению a на соответствующий элемент α :

$$\gamma_{ik} = a\alpha_{ik}. \quad (1.21)$$

Очевидным следствием являются формулы

$$(ab)\alpha = a(b\alpha), \quad a\alpha\beta = a\alpha\beta, \quad a(\alpha + \beta) = a\alpha + a\beta.$$

Так как целые степени матрицы α могут быть легко определены посредством последовательного умножения

$$\left. \begin{aligned} \alpha^2 &= \alpha \cdot \alpha, & \alpha^3 &= \alpha \cdot \alpha \cdot \alpha, \dots, \\ \alpha^{-2} &= \alpha^{-1} \cdot \alpha^{-1}, & \alpha^{-3} &= \alpha^{-1} \cdot \alpha^{-1} \cdot \alpha^{-1}, \dots, \end{aligned} \right\} \quad (1.22)$$

то можно также определить многочлены с положительными и отрицательными целыми степенями

$$\dots + a_{-n} \alpha^{-n} + \dots + a_{-1} \alpha^{-1} + a_0 \mathbf{1} + a_1 \alpha + \dots + a_n \alpha^n + \dots \quad (1.23)$$

Коэффициенты a в приведенном выражении являются числами, а не матрицами. *Функция от α типа (1.23) коммутирует со всякой другой функцией от α* (и, в частности, с самой матрицей α).

Еще одним часто встречающимся типом матрицы является диагональная матрица.

8. *Диагональная матрица — это матрица, все элементы которой, кроме тех, что лежат на главной диагонали, равны нулю:*

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} D_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & D_2 & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & D_n \end{pmatrix}. \quad (1.24)$$

Общий элемент этой диагональной матрицы может быть записан в виде

$$D_{lk} = D_l \delta_{lk}. \quad (1.25)$$

Все диагональные матрицы коммутируют, и произведение двух диагональных матриц есть снова диагональная матрица. Это можно видеть непосредственно из определения произведения:

$$(\mathbf{D}\mathbf{D}')_{lk} = \sum_j D_{lj} D'_{jk} = \sum_j D_l \delta_{lj} D'_j \delta_{jk} = D_l D'_l \delta_{lk}. \quad (1.26)$$

Обратно, если какая-либо матрица α коммутирует с диагональной матрицей \mathbf{D} , все диагональные элементы которой *различны*, сама α должна быть диагональной матрицей. Выписывая произведение

$$\alpha \mathbf{D} = \mathbf{D} \alpha,$$

$$(\alpha \mathbf{D})_{lk} = \alpha_{lk} D_k = (\mathbf{D} \alpha)_{lk} = D_l \alpha_{lk}, \quad (1.27)$$

находим

$$(D_l - D_k) \alpha_{lk} = 0; \quad (1.27a)$$

для недиагонального элемента ($l \neq k$) из $D_l \neq D_k$ следует, что α_{lk} равен нулю. Таким образом, α диагональна.

Сумма диагональных элементов матрицы называется ее *следом*:

$$\text{Tr } \alpha = \sum_j \alpha_{jj} = \alpha_{11} + \alpha_{22} + \dots + \alpha_{nn}. \quad (1.28)$$

След произведения матриц $\alpha\beta$ равен

$$\text{Tr } \alpha\beta = \sum_i (\alpha\beta)_{ii} = \sum_{jk} \alpha_{jk}\beta_{kj} = \text{Tr } \beta\alpha. \quad (1.29)$$

Это равенство устанавливает еще одно свойство матриц.

9. След произведения двух матриц не зависит от порядка перемножения матриц.

Это правило находит наиболее важное приложение в связи с преобразованием подобия матриц. Преобразование подобия — это такое преобразование, при котором преобразуемая матрица α умножается на преобразующую матрицу β справа и на матрицу, обратную β , слева. Матрица α при этом преобразуется в $\beta^{-1}\alpha\beta$. Преобразование подобия оставляет след матрицы без изменения, так как установленное выше правило показывает, что $\beta^{-1}\alpha\beta$ имеет тот же след, что и $\alpha\beta\beta^{-1} = \alpha$.

Важность преобразований подобия вытекает из следующего факта.

10. Матричное уравнение остается в силе, если каждую матрицу, входящую в него, подвергнуть одному и тому же преобразованию подобия.

Например, преобразование произведения матриц $\alpha\beta = \gamma$ дает

$$\sigma^{-1}\alpha\sigma\sigma^{-1}\beta\sigma = \sigma^{-1}\gamma\sigma,$$

и если

$$\alpha\beta = 1,$$

то

$$\sigma^{-1}\alpha\sigma\sigma^{-1}\beta\sigma = \sigma^{-1}1 \cdot \sigma = 1.$$

Нетрудно видеть, что соотношения между суммами матриц и произведениями матриц и чисел тоже сохраняются при преобразовании подобия. Так, из равенства

$$\gamma = \alpha + \beta$$

следует, что

$$\sigma^{-1}\gamma = \sigma^{-1}(\alpha + \beta) = \sigma^{-1}\alpha + \sigma^{-1}\beta$$

и

$$\sigma^{-1}\gamma\sigma = \sigma^{-1}\alpha\sigma + \sigma^{-1}\beta\sigma.$$

Аналогично, из равенства

$$\beta = a\alpha$$

следует

$$\sigma^{-1}\beta\sigma = a\sigma^{-1}\alpha\sigma.$$

Поэтому теорема 10 применима к любому матричному уравнению, в которое входят произведения матриц на числа или другие матрицы, целые (положительные или отрицательные) степени матриц и суммы матриц.

Эти десять теорем для операций с матрицами содержались уже в первых статьях по квантовой механике Борна и Йордана¹⁾ и, несомненно, уже известны многим читателям. Они приведены здесь еще раз потому, что уверенное владение этими основными правилами совершенно необходимо для понимания дальнейшего изложения и, в сущности, для всякого квантовомеханического расчета. Кроме того, ими очень часто пользуются в неявном виде, так как иначе даже простейшие доказательства становятся излишне громоздкими²⁾.

Линейная независимость векторов

Векторы $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_k$ называются линейно независимыми, если не существует соотношений вида

$$a_1 \boldsymbol{v}_1 + a_2 \boldsymbol{v}_2 + \dots + a_k \boldsymbol{v}_k = 0, \quad (1.30)$$

кроме случая, когда все a_1, a_2, \dots, a_k равны нулю. Таким образом, ни один из векторов линейно независимой системы не может быть выражен в виде линейной комбинации других векторов системы. В том случае, когда один из векторов, например \boldsymbol{v}_1 , является нулевым вектором, система не является более линейно независимой, поскольку соотношение

$$1 \cdot \boldsymbol{v}_1 + 0 \cdot \boldsymbol{v}_2 + \dots + 0 \cdot \boldsymbol{v}_k = 0$$

наверняка удовлетворяется вопреки условию линейной независимости.

В качестве примера линейной зависимости рассмотрим четырехмерные векторы $\boldsymbol{v}_1 = (1, 2, -1, 3)$, $\boldsymbol{v}_2 = (0, -2, 1, -1)$ и $\boldsymbol{v}_3 = (2, 2, -1, 5)$. Они линейно зависимы, так как

$$2\boldsymbol{v}_1 + \boldsymbol{v}_2 - \boldsymbol{v}_3 = 0.$$

С другой стороны, \boldsymbol{v}_1 и \boldsymbol{v}_2 линейно независимы.

Если k векторов $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_k$ линейно зависимы, то среди них могут быть k' векторов ($k' < k$), которые линейно независимы. Более того, все k векторов могут быть выражены в виде линейных комбинаций этих k' векторов.

Отыскивая k' линейно независимых векторов, мы исключаем все нулевые векторы, поскольку, как мы уже видели, нулевой

¹⁾ M. Born, P. Jordan, Zs. f. Phys., 34, 858 (1925).

²⁾ Например, ассоциативный закон умножения (теорема 3) используется неявно три раза при выводе коммутативности обратных матриц (теорема 6). Читателю предлагается повторить этот вывод с выписыванием всех скобок.

вектор никогда не может входить в систему линейно независимых векторов. Затем мы перебираем поочередно остальные векторы, отбрасывая все те, которые могут быть выражены в виде линейных комбинаций уже отобранных векторов. Следовательно, выбранные таким путем k' векторов будут линейно независимыми, так как если ни один из них не может быть представлен в виде линейной комбинации остальных, между ними не может существовать соотношение типа (1.30). Кроме того, каждый из отброшенных векторов (и таким образом все k первоначальных векторов) может быть выражен через них, поскольку это и было условием отбрасывания.

Линейная зависимость или независимость k векторов $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_k$ является также свойством векторов $\alpha\mathbf{v}_1, \dots, \alpha\mathbf{v}_k$, образуемых из них путем *собственного* преобразования α . Это значит, что из

$$a_1\mathbf{v}_1 + a_2\mathbf{v}_2 + \dots + a_k\mathbf{v}_k = 0 \quad (1.31)$$

следует, что

$$a_1\alpha\mathbf{v}_1 + a_2\alpha\mathbf{v}_2 + \dots + a_k\alpha\mathbf{v}_k = 0. \quad (1.31a)$$

Равенство (1.31a) получается применением преобразования α к обеим частям (1.31) и использованием его линейности. Наоборот, из (1.31a) следует (1.31). Очевидно также, что всякое линейное соотношение между \mathbf{v}_i имеет место и для $\alpha\mathbf{v}_i$, и наоборот.

Никакие более чем n n -мерных векторов не могут быть линейно независимыми. Чтобы показать это, заметим, что соотношение

$$a_1\mathbf{v}_1 + \dots + a_{n+1}\mathbf{v}_{n+1} = 0, \quad (1.32)$$

из которого следует линейная зависимость, эквивалентно n линейным однородным уравнениям для компонент этих векторов:

$$\begin{aligned} a_1(\mathbf{v}_1)_1 + \dots + a_n(\mathbf{v}_n)_1 + a_{n+1}(\mathbf{v}_{n+1})_1 &= 0, \\ \dots & \\ a_1(\mathbf{v}_1)_n + \dots + a_n(\mathbf{v}_n)_n + a_{n+1}(\mathbf{v}_{n+1})_n &= 0. \end{aligned} \quad (1.32a)$$

Если коэффициенты $a_1, a_2, \dots, a_n, a_{n+1}$ в этих уравнениях рассматриваются как неизвестные, то из того обстоятельства, что n линейных однородных уравнений с $n+1$ неизвестными всегда имеют нетривиальное решение, сразу следует, что соотношение (1.32) всегда выполняется. Таким образом, $n+1$ n -мерных векторов всегда линейно зависимы.

Непосредственным следствием вышеприведенной теоремы является утверждение, что *любые n линейно независимых n -мер-*

ных векторов образуют полную систему векторов; иначе говоря, произвольный n -мерный вектор \boldsymbol{w} может быть выражен в виде их линейной комбинации. В самом деле, теорема утверждает, что между n векторами и произвольным вектором имеет место некоторое соотношение

$$a_1 \boldsymbol{v}_1 + \dots + a_n \boldsymbol{v}_n + b \boldsymbol{w} = 0.$$

Кроме того, если $\boldsymbol{v}_1, \boldsymbol{v}_2, \dots, \boldsymbol{v}_n$ линейно независимы, коэффициент b не может быть равен нулю. Таким образом, всякий вектор \boldsymbol{w} может быть записан в виде линейной комбинации векторов, и, следовательно, последние образуют полную систему векторов.

Строка или столбец n -мерной матрицы могут рассматриваться как вектор. Например, компонентами вектора $\boldsymbol{\alpha}_k$, образующего k -й столбец, являются $\alpha_{1k}, \alpha_{2k}, \dots, \alpha_{nk}$, а компонентами вектора, образующего i -ю строку, будут $\alpha_{i1}, \alpha_{i2}, \dots, \alpha_{in}$. Нетривиальное линейное соотношение между векторами $\boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \boldsymbol{\alpha}_n$, образующими столбцы,

$$a_1 \boldsymbol{\alpha}_1 + \dots + a_n \boldsymbol{\alpha}_n = 0$$

дается просто ненулевым решением системы линейных однородных уравнений для a_1, a_2, \dots, a_n :

$$\begin{array}{l} a_1 \alpha_{11} + \dots + a_n \alpha_{1n} = 0, \\ \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ a_1 \alpha_{n1} + \dots + a_n \alpha_{nn} = 0. \end{array}$$

Обращение в нуль определителя $|\alpha_{ik}|$ является необходимым и достаточным условием существования такого решения. Поэтому, если этот определитель не обращается в нуль ($|\alpha_{ik}| \neq 0$), векторы $\boldsymbol{\alpha}_1, \dots, \boldsymbol{\alpha}_n$ линейно независимы и образуют полную систему векторов. Наоборот, если векторы $\boldsymbol{v}_1, \dots, \boldsymbol{v}_n$ линейно независимы, матрица, образуемая при использовании их в качестве столбцов, имеет отличный от нуля определитель. Разумеется, это рассуждение применимо в равной степени к векторам, образующим строки матрицы.

ОБОБЩЕНИЯ

1. Обобщим теперь результаты предыдущей главы. Первое обобщение совершенно формально; второе же имеет более существенную природу. Для обозначения компонент векторов и элементов матриц мы ставили индексы соответствующих координатных осей. До сих пор координатные оси обозначались номерами 1, 2, 3, ..., n . В дальнейшем мы будем обозначать координатные оси по элементам произвольного множества. Если G есть некоторое множество объектов g, h, l, \dots , то вектор \boldsymbol{v} в пространстве этого множества G является набором чисел v_g, v_h, v_l, \dots . Разумеется, можно приравнивать (складывать и т. д.) только векторы, определенные в одном и том же пространстве, так как только в этом случае компоненты соответствуют элементам одного и того же множества.

Аналогичная система обозначений будет использована для матриц. Чтобы матрица $\boldsymbol{\alpha}$ могла быть примененной к вектору \boldsymbol{v} с компонентами v_g, v_h, v_l, \dots , столбцы матрицы $\boldsymbol{\alpha}$ должны быть размечены (пронумерованы) элементами того же множества G , с помощью которого размечены компоненты вектора \boldsymbol{v} . В простейшем случае строки также именуется элементами g, h, l, \dots этого множества, и $\boldsymbol{\alpha}$ преобразует вектор \boldsymbol{v} в пространстве G в вектор $\boldsymbol{\alpha v}$ в том же пространстве. Таким образом,

$$v'_j = \sum_{l \in G} a_{jl} v_l, \quad (2.1)$$

где j — некоторый элемент множества G , и l пробегает все элементы этого множества.

Например, координатные оси могут быть обозначены тремя буквами x, y, z . Тогда величина \boldsymbol{v} с компонентами $v_x = 1, v_y = 0, v_z = -2$ является вектором и

$$\boldsymbol{\alpha} = \begin{pmatrix} x & y & z \\ 1 & 2 & 3 \\ 0 & 5 & -1 \\ -4 & -2 & 4 \end{pmatrix} \begin{matrix} x \\ y \\ z \end{matrix}$$

есть матрица. (Справа и сверху указаны символы строк и столбцов.) В этом примере $a_{xx} = 1$, $a_{xy} = 2$, $a_{xz} = 3$. Соотношение (2.1) означает, что x -компонента вектора $v' = \alpha v$ равна

$$v'_x = a_{xx}v_x + a_{xy}v_y + a_{xz}v_z = 1 \cdot 1 + 2 \cdot 0 + 3(-2) = -5.$$

Вышеприведенное простое обобщение является чисто формальным; оно вводит лишь другую систему обозначения координатных осей и компонент векторов и матриц. Две матрицы, действующие на векторы того же пространства, могут быть перемножены, как и матрицы в предыдущей главе. Выражение

$$\gamma = \beta \alpha \quad (2.2)$$

эквивалентно выражению

$$\gamma_{jk} = \sum_{l \in G} \beta_{jl} \alpha_{lk},$$

где j и k являются двумя элементами множества G , а l пробегает все элементы этого множества.

2. Дальнейшее обобщение заключается в том, что строки и столбцы помечаются элементами *различных множеств* F и G . Тогда из (2.1) находим

$$w_j = \sum_{l \in G} \alpha_{jl} v_l, \quad (2.1a)$$

где j — элемент множества F , а l пробегает все элементы множества G . Такая матрица, элементы которой помечены элементами различных множеств, называется *прямоугольной* матрицей, в отличие от квадратных матриц предыдущей главы; она преобразует вектор v в пространстве G в вектор w в пространстве F . В общем случае множество F не обязательно содержит то же число элементов, что и множество G . Если они содержат одно и то же число элементов, матрица имеет равное число строк и столбцов и называется „квадратной в более широком смысле слова“.

Пусть множество G содержит символы $*$, Δ , \square , а множество F — числа 1 и 2. Тогда

$$\alpha = \begin{pmatrix} * & \Delta & \square \\ 5 & 7 & 3 \\ 0 & -1 & -2 \end{pmatrix} \begin{matrix} 1 \\ 2 \end{matrix}$$

есть прямоугольная матрица. (Здесь снова сверху и справа указаны обозначения столбцов и строк.) Она преобразует вектор с компонентами $v_* = 1$, $v_\Delta = 0$, $v_\square = -2$ в вектор

$$w = \alpha v.$$

Компонентами w_1 и w_2 вектора w тогда будут

$$w_1 = \alpha_{1*}v_* + \alpha_{1\Delta}v_\Delta + \alpha_{1\square}v_\square = 5 \cdot 1 + 7 \cdot 0 + 3(-2) = -1,$$

$$w_2 = \alpha_{2*}v_* + \alpha_{2\Delta}v_\Delta + \alpha_{2\square}v_\square = 0 \cdot 1 + (-1)(0) + (-2)(-2) = 4.$$

разметка строк трех матриц α , β , γ должна быть одинаковой, как и разметка их столбцов. С другой стороны, для умножения матриц разметка столбцов первого сомножителя должна совпадать с разметкой строк второго; тогда (и только тогда) может быть составлено произведение матриц. Получающееся при этом произведение имеет разметку строк первого сомножителя и разметку столбцов второго.

Теорема 1. Мы можем говорить об определителе прямоугольной матрицы, если она имеет одинаковое число строк и столбцов, хотя они могут быть пронумерованы различным образом. Для матриц „квадратных в более широком смысле“, правило, по которому определитель произведения равен произведению определителей, по-прежнему справедливо.

Теоремы 2 и 3. Ассоциативный закон также имеет место для умножения прямоугольных матриц:

$$(\alpha\beta)\gamma = \alpha(\beta\gamma). \quad (2.3)$$

Ясно, что все умножения в правой части этого равенства могут действительно быть выполнены, если только это может быть сделано в левой части, и наоборот.

Теоремы 4, 5 и 6. Под матрицей **1** всегда будем понимать квадратную матрицу со строками и столбцами, размеченными с помощью элементов одного и того же множества. Умножение на нее всегда может быть опущено.

Матрицы, являющиеся квадратными в более широком смысле имеют обратные только в том случае, если их определитель не обращается в нуль. Для прямоугольных матриц с различным числом строк и столбцов обратная матрица не определена вовсе. Если α есть матрица, являющаяся квадратной лишь в широком смысле, то из равенства

$$\beta\alpha = 1$$

следует, что разметка столбцов β совпадает с разметкой строк матрицы α . Кроме того, разметка строк матрицы **1** должна совпадать с разметкой строк β , а ее столбцов — с разметкой столбцов α . Поскольку **1** является квадратной в собственном смысле слова, разметка столбцов α должна совпадать также с разметкой строк β .

Строки матрицы β , обратной матрице α , размечаются элементами того же множества, что и столбцы α ; ее столбцы — теми же элементами, что и строки α . Для всякой матрицы α , являющейся квадратной в широком смысле и имеющей отличный от нуля определитель, существует такая обратная матрица β , что

$$\beta\alpha = 1. \quad (2.4)$$

Кроме того,

$$\alpha\beta = 1. \quad (2.4a)$$

Следует, однако, заметить, что строки и столбцы матрицы 1 в (2.4) размечены иначе, чем матрицы 1 в (2.4a).

Теорема 7. Что касается сложения и нулевой матрицы, для прямоугольных и квадратных матриц справедливы одни и те же правила. Однако *степени прямоугольных матриц не могут быть построены*, так как умножение α на α предполагает, что разметка столбцов α совпадает с разметкой строк α , т. е. что матрица α является квадратной матрицей в узком смысле.

Теоремы 8, 9 и 10. Для прямоугольных матриц понятия диагональной матрицы и следа не имеют смысла; преобразование подобия также не определено. Рассмотрим соотношение

$$\sigma\alpha\sigma^{-1} = \beta.$$

Из него следует, что матрицы β и σ имеют одну и ту же разметку строк, которая совпадает с разметкой столбцов матрицы σ^{-1} и поэтому также и столбцов матрицы β . Следовательно, матрица β является квадратной в узком смысле; аналогично, матрица α , разметка строк которой должна соответствовать разметке столбцов матрицы σ и разметка столбцов — разметке строк σ^{-1} , должна быть квадратной в узком смысле.

С другой стороны, *сама матрица σ может быть квадратной в широком смысле: разметка строк и столбцов матрицы α отлична тогда от разметки строк и столбцов матрицы β* . Преобразования подобия, которые меняют нумерацию строк и столбцов, особенно важны. Теория преобразований в квантовой механике является примером таких преобразований.

Введение прямоугольных матриц весьма выгодно, несмотря на кажущиеся усложнения, к которым оно приводит, поскольку с их помощью можно достигнуть существенных упрощений. Вышеизложенное не следует рассматривать как жесткую схему; скорее оно приведено для того, чтобы приучить читателя мыслить в терминах этих величин. Использование подобных более сложных матриц будет всегда поясняться специально, за исключением случаев, когда разметка строк и столбцов очевидна из формы и определения элементов матриц, так что дальнейшие пояснения становятся излишними.

4. Довольно часто оказывается, что строки обозначаются не одним числом, а двумя или более числами, например:

$$\gamma = \begin{pmatrix} a_1b_1c_1d_1 & a_1b_1c_1d_2 & a_1b_1c_2d_1 & a_1b_1c_2d_2 \\ a_1b_2c_1d_1 & a_1b_2c_1d_2 & a_1b_2c_2d_1 & a_1b_2c_2d_2 \\ a_2b_1c_1d_1 & a_2b_1c_1d_2 & a_2b_1c_2d_1 & a_2b_1c_2d_2 \\ a_2b_2c_1d_1 & a_2b_2c_1d_2 & a_2b_2c_2d_1 & a_2b_2c_2d_2 \end{pmatrix}. \quad (2.E.1)$$

Первый столбец называется „столбец 1, 1“, второй — „столбец 1, 2“, третий — „столбец 2, 1“, четвертый — „столбец 2, 2“; строки обозначаются аналогичным образом. Элементами матрицы (2.Е.1) являются

$$\gamma_{ij; kl} = a_i b_j c_k d_l.$$

Для ясности записи точка с запятой отделяет индексы строк от индексов столбцов.

Среди таких матриц особенно важное значение имеет прямое произведение γ двух матриц (α_{ik}) и (β_{jl}) :

$$\gamma = \alpha \times \beta. \quad (2.5)$$

Равенство (2.5) равносильно равенству¹⁾

$$\gamma_{ij; kl} = \alpha_{ik} \beta_{jl}. \quad (2.6)$$

Если α имеет n_1 строк и n_2 столбцов, а матрица β — соответственно n'_1 строк и n'_2 столбцов, то матрица γ имеет точно $n_1 n'_1$ строк и $n_2 n'_2$ столбцов. В частности, если α и β обе являются квадратными матрицами, то прямое произведение $\alpha \times \beta$ есть квадратная матрица.

Теорема 1. Если $\alpha \bar{\alpha} = \bar{\alpha}$ и $\beta \bar{\beta} = \bar{\beta}$ и если $\alpha \times \beta = \gamma$ и $\bar{\alpha} \times \bar{\beta} = \bar{\gamma}$, то $\gamma \bar{\gamma} = \bar{\alpha} \times \bar{\beta}$ или

$$(\alpha \times \beta) (\bar{\alpha} \times \bar{\beta}) = \bar{\alpha} \times \bar{\beta}. \quad (2.7)$$

Иначе говоря, матричное произведение двух прямых произведений есть прямое произведение этих двух матричных произведений. Чтобы показать это, рассмотрим

$$(\alpha \times \beta)_{ik; i'k'} = \alpha_{li'} \beta_{kk'}, \quad (\bar{\alpha} \times \bar{\beta})_{l'k'; l''k''} = \bar{\alpha}_{l'l''} \bar{\beta}_{k'k''}$$

и

$$(\alpha \times \beta) (\bar{\alpha} \times \bar{\beta})_{ik; i''k''} = \sum_{l'k'} \alpha_{li'} \beta_{kk'} \bar{\alpha}_{l'l''} \bar{\beta}_{k'k''}. \quad (2.8)$$

Но

$$(\bar{\alpha})_{li''} = \sum_{l'} \alpha_{li'} \bar{\alpha}_{l'l''}, \quad (\bar{\beta})_{k'k''} = \sum_{k'} \beta_{kk'} \bar{\beta}_{k'k''}$$

и

$$(\bar{\alpha} \times \bar{\beta})_{ik; i''k''} = \sum_{l'} \alpha_{li'} \bar{\alpha}_{l'l''} \sum_{k'} \beta_{kk'} \bar{\beta}_{k'k''}. \quad (2.9)$$

Поэтому, из (2.8) и (2.9) следует теорема 1, а именно равенство (2.7).

¹⁾ Множители α и $\bar{\alpha}$ обычного произведения матриц пишутся рядом: $\alpha \bar{\alpha}$. Матрица же (2.Е.1) есть прямое произведение двух матриц:

$$\begin{pmatrix} a_1 c_1 & a_1 c_2 \\ a_2 c_1 & a_2 c_2 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} b_1 d_1 & b_1 d_2 \\ b_2 d_1 & b_2 d_2 \end{pmatrix} = \gamma.$$

Теорема 2. *Прямое произведение двух диагональных матриц есть снова диагональная матрица; прямое произведение двух единичных матриц есть единичная матрица.* Это легко видеть непосредственно из определения прямых произведений.

В формальных расчетах с матрицами необходимо проверять, действительно ли возможно обозначенное умножение. В гл. 1, где мы всюду имеем дело с квадратными матрицами с n строками и n столбцами, это, разумеется, всегда имело место. Однако в общем случае следует проверить, что разметка *строк* первого сомножителя в матричном произведении совпадает с разметкой *столбцов* второго, т. е. что они имеют одинаковые наименования индексов. Прямое произведение двух матриц всегда может быть построено с помощью (2.6).

Матрицы обобщенного типа с несколькими индексами М. Борн и Йордан назвали „суперматрицей“. Они рассматривают матрицу $(\alpha_{ij; kl})$ как матрицу (A_{lk}) , элементы которой A_{lk} сами являются матрицами. При этом A_{lk} есть та матрица, в которой число $\alpha_{ij; kl}$ встречается в j -й строке и l -м столбце:

$$(\alpha_{ij; kl}) = \alpha = (A_{lk}), \quad \text{где } (A_{lk})_{jl} = \alpha_{ij; kl}. \quad (2.10)$$

Теорема 3. *Если $\alpha = (A_{ll'})$ и $\beta = (B_{l'l''})$, то $\alpha\beta = \gamma = (C_{ll''})$,* где

$$C_{ll''} = \sum_{l'} A_{ll'} B_{l'l''}. \quad (2.11)$$

Правая часть (2.11) состоит из суммы произведений *матричных умножений*. Мы имеем

$$(\alpha\beta)_{lk; l''k''} = \sum_{l', k'} \alpha_{lk; l'k'} \beta_{l'k'; l''k''}$$

С другой стороны,

$$\gamma_{lk; l''k''} = (C_{ll''})_{kk''} = \sum_{l'} (A_{ll'} B_{l'l''})_{kk''}$$

и

$$(A_{ll'} B_{l'l''})_{kk''} = \sum_{k'} (A_{ll'})_{kk'} (B_{l'l''})_{k'k''} = \sum_{k'} \alpha_{lk; l'k'} \beta_{l'k'; l''k''}$$

Поэтому

$$(\alpha\beta)_{lk; l''k''} = \gamma_{lk; l''k''}$$

и теорема 3 доказана. Конечно, в правой части (2.11) следует соблюдать аккуратность в смысле порядка сомножителей, тогда как в соответствующем соотношении для умножения простых матриц в этом не было необходимости. С этим единственным ограничением суперматрицы можно умножать по правилам умножения простых матриц.

В простейшем случае рассмотрим две квадратные матрицы:

$$\left[\begin{array}{cc|ccc} \alpha_{11} & \alpha_{12} & \alpha_{13} & \alpha_{14} & \alpha_{15} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} & \alpha_{23} & \alpha_{24} & \alpha_{25} \\ \hline \alpha_{31} & \alpha_{32} & \alpha_{33} & \alpha_{34} & \alpha_{35} \\ \alpha_{41} & \alpha_{42} & \alpha_{43} & \alpha_{44} & \alpha_{45} \\ \alpha_{51} & \alpha_{52} & \alpha_{53} & \alpha_{54} & \alpha_{55} \end{array} \right] \quad \text{и} \quad \left[\begin{array}{cc|ccc} \beta_{11} & \beta_{12} & \beta_{13} & \beta_{14} & \beta_{15} \\ \beta_{21} & \beta_{22} & \beta_{23} & \beta_{24} & \beta_{25} \\ \hline \beta_{31} & \beta_{32} & \beta_{33} & \beta_{34} & \beta_{35} \\ \beta_{41} & \beta_{42} & \beta_{43} & \beta_{44} & \beta_{45} \\ \beta_{51} & \beta_{52} & \beta_{53} & \beta_{54} & \beta_{55} \end{array} \right]. \quad (2.12)$$

Их можно разбить на субматрицы, как показано пунктирными линиями, позаботясь о том, чтобы числа столбцов в субматрицах при разбиении первой матрицы (на 2 и 3) совпадали с числами строк в субматрицах при разбиении второй. Тогда обе матрицы (2.12) сокращенно можно записать в виде

$$\begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix}.$$

Произведение двух матриц (2.12) можно записать как

$$\begin{pmatrix} A_{11}B_{11} + B_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} \\ C_{21} & C_{22} \end{pmatrix}.$$

С другой стороны, выражение

$$\begin{pmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} \\ A_{21} & A_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_{11}A_{11} + B_{12}A_{21} & B_{11}A_{12} + B_{12}A_{22} \\ B_{21}A_{11} + B_{22}A_{21} & B_{21}A_{12} + B_{22}A_{22} \end{pmatrix}$$

не имеет смысла, поскольку число столбцов матрицы B_{11} , например, отлично от числа строк A_{11} .

ПРЕОБРАЗОВАНИЕ К ГЛАВНЫМ ОСЯМ

В гл. 1 мы установили одно очень важное свойство преобразований подобия. Эти преобразования не меняют след матрицы¹⁾: матрица α имеет тот же след, что и $\sigma^{-1}\alpha\sigma$. Но является ли след матрицы единственным инвариантом преобразования подобия? Очевидно, нет, так как, например, определитель $|\sigma^{-1}\alpha\sigma|$ также равен определителю $|\alpha|$. Для получения других инвариантов рассмотрим уравнение n -го порядка относительно λ , записанное в виде определителя

$$\begin{vmatrix} \alpha_{11} - \lambda & \alpha_{12} & \dots & \alpha_{1n} \\ \alpha_{21} & \alpha_{22} - \lambda & \dots & \alpha_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \alpha_{n1} & \alpha_{n2} & \dots & \alpha_{nn} - \lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (3.1)$$

или, короче,

$$|\alpha - \lambda \mathbf{1}| = 0. \quad (3.2)$$

Мы назовем это уравнение *секулярным уравнением* матрицы α . Секулярное уравнение матрицы $\beta = \sigma^{-1}\alpha\sigma$ имеет вид

$$|\beta - \lambda \mathbf{1}| = |\sigma^{-1}\alpha\sigma - \lambda \mathbf{1}| = 0. \quad (3.3)$$

Очевидно, что определитель $|\sigma^{-1}(\alpha - \lambda \mathbf{1})\sigma|$ также равен нулю; это можно записать следующим образом:

$$|\sigma^{-1}| \cdot |\alpha - \lambda \mathbf{1}| \cdot |\sigma| = 0. \quad (3.4)$$

Уравнение (3.4) показывает, что n корней секулярного уравнения $|\beta - \lambda \mathbf{1}| = 0$ совпадают²⁾ с n корнями секулярного уравнения

¹⁾ Матрица, над которой производится преобразование подобия, должна быть всегда квадратной. По этой причине мы снова нумеруем строки и столбцы числами 1, 2, ..., n .

²⁾ Величины $|\sigma^{-1}|$ и $|\sigma|$ являются числами!

Далее, n^2 уравнений (3.5а) можно кратко записать в форме

$$a\rho = \rho\Lambda, \quad (3.6)$$

или

$$\rho^{-1}a\rho = \Lambda, \quad (3.6a)$$

если матрица ρ имеет обратную матрицу.

Преобразование подобия с помощью некоторой матрицы, столбцы которой являются n собственными векторами, приводит исходную матрицу к диагональному виду; диагональные элементы являются собственными значениями этой матрицы. Две матрицы, имеющие одни и те же собственные значения, всегда могут быть преобразованы друг в друга, поскольку каждая из них может быть преобразована в одну и ту же матрицу. Собственные значения являются единственными инвариантами преобразования подобия.

Это, разумеется, верно лишь в том случае, если ρ имеет обратную, т. е. если n векторов r_1, r_2, \dots, r_n линейно независимы. Это, вообще говоря, имеет место, и всегда справедливо, если все собственные значения различны. Тем не менее имеются исключения, как видно, например, при рассмотрении матриц

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} 1 & i \\ i & -1 \end{pmatrix}.$$

Эти матрицы нельзя привести к диагональному виду каким-либо преобразованием типа преобразования подобия. С такими матрицами имеют дело в теории элементарных делителей; однако нет необходимости их рассматривать, поскольку мы всегда будем иметь дело с матрицами, которые могут быть приведены к диагональному виду (3.6а), например с унитарными и (или) эрмитовыми матрицами.

Условия коммутативности двух матриц весьма удобно рассмотреть снова с точки зрения изложенной здесь теории. Если две матрицы могут быть приведены к диагональному виду с помощью одного и того же преобразования, т. е. если они имеют одинаковые собственные векторы, они коммутируют¹⁾. Поскольку рассматриваемые матрицы являются диагональными, они, несомненно, коммутируют после того, как они подвергнуты преобразованию подобия; поэтому они должны коммутировать также и в своей первоначальной форме.

¹⁾ Заметим, что собственные значения могут отличаться произвольным образом.

В гл. 1 мы определили рациональную функцию матрицы

$$f(\alpha) = \dots a_{-3}\alpha^{-3} + a_{-2}\alpha^{-2} + a_{-1}\alpha^{-1} + a_0\mathbf{1} + a_1\alpha + \\ + a_2\alpha^2 + a_3\alpha^3 + \dots$$

Чтобы привести $f(\alpha)$ к диагональному виду, достаточно преобразовать α к диагональному виду $\Lambda = \sigma^{-1}\alpha\sigma$. Тогда, согласно теореме 10 (гл. 1),

$$\sigma^{-1}f(\alpha)\sigma = \sigma^{-1}(\dots a_{-2}\alpha^{-2} + a_{-1}\alpha^{-1} + a_0\mathbf{1} + a_1\alpha + \\ + a_2\alpha^2 + \dots)\sigma = \dots a_{-2}\Lambda^{-2} + a_{-1}\Lambda^{-1} + \\ + a_0\mathbf{1} + a_1\Lambda + a_2\Lambda^2 + \dots = f(\Lambda),$$

причем последняя матрица диагональна. Если λ_k — k -й диагональный элемент матрицы $\Lambda = (\Lambda_{ik}) = (\delta_{ik}\lambda_k)$, то $(\lambda_k)^p$ есть k -й диагональный элемент матрицы $(\Lambda)^p$ и

$$\dots a_{-2}\lambda_k^{-2} + a_{-1}\lambda_k^{-1} + a_0 + a_1\lambda_k + a_2\lambda_k^2 + \dots = f(\lambda_k)$$

есть k -й диагональный элемент $f(\Lambda)$.

Рациональную функцию $f(\alpha)$ матрицы α можно привести к диагональному виду с помощью того же преобразования, которое приводит α к диагональному виду. Диагональными элементами [собственными значениями матрицы $f(\alpha)$] являются соответствующие функции $f(\lambda_1), f(\lambda_2), \dots, f(\lambda_n)$ диагональных элементов $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ матрицы α . Мы примем, что это правило имеет место не только для рациональных функций, но и для произвольных функций $F(\alpha)$ от матрицы α , и будем рассматривать его в качестве *определения* общей функции матриц.

Специальные матрицы

Из квадратной матрицы α можно получить новую матрицу α^T , в которой строки и столбцы меняются ролями. Матрица α^T , образованная таким образом, называется *транспонированной* по отношению к α , и транспозиция обозначается значком „ T “. Тогда

$$\alpha_{ik}^T = \alpha_{ki}. \quad (3.7)$$

Правило. Матрица, транспонированная по отношению к произведению матриц $\alpha\beta\gamma\delta \dots \varepsilon$, равна произведению транспонированных матриц в обратном порядке:

$$(\alpha\beta\gamma \dots \varepsilon)^T = \varepsilon^T \dots \gamma^T\beta^T\alpha^T. \quad (3.7a)$$

Чтобы убедиться в этом, рассмотрим отдельно левую часть последнего равенства:

$$(\alpha\beta\gamma \dots \varepsilon)_{ki}^T = (\alpha\beta\gamma \dots \varepsilon)_{ik} = \sum_{\chi\lambda\mu \dots \zeta} \alpha_{i\chi} \beta_{\chi\lambda} \gamma_{\lambda\mu} \dots \varepsilon_{\zeta k}.$$

С другой стороны, правая часть равна

$$(\varepsilon^T \dots \gamma^T \beta^T \alpha^T)_{ki} = \sum_{\zeta \dots \mu\lambda\chi} \varepsilon_{k\zeta}^T \dots \gamma_{\mu\lambda}^T \beta_{\lambda\chi}^T \alpha_{\chi i}^T,$$

что и доказывает (3.7а).

Матрица, образованная путем замены каждого из n^2 элементов его комплексно-сопряженным, обозначается через α^* и называется комплексно-сопряженной по отношению к α . Если $\alpha = \alpha^*$, то все элементы матрицы вещественны.

Путем одновременной перестановки строк и столбцов и комплексного сопряжения получаем из матрицы α матрицу $\alpha^{*T} = \alpha^{T*}$. Эта матрица называется *эрмитово-сопряженной* по отношению к α и обозначается через α^\dagger :

$$\alpha^{*T} = \alpha^\dagger = \alpha^{T*}. \quad (3.8)$$

Матрица, комплексно-сопряженная по отношению к произведению матриц, является, очевидно, произведением комплексно-сопряженных:

$$(\alpha\beta\gamma \dots \varepsilon)^* = \alpha^* \beta^* \gamma^* \dots \varepsilon^*.$$

При эрмитовом сопряжении произведения матриц порядок сомножителей должен быть обратным:

$$\begin{aligned} (\alpha\beta\gamma \dots \varepsilon)^\dagger &= (\alpha\beta\gamma \dots \varepsilon)^{*T} = (\alpha^* \beta^* \gamma^* \dots \varepsilon^*)^T = \\ &= (\varepsilon^{*T} \dots \gamma^{*T} \beta^{*T} \alpha^{*T}) = \varepsilon^\dagger \dots \gamma^\dagger \beta^\dagger \alpha^\dagger. \end{aligned} \quad (3.8a)$$

Предполагая, что между матрицей α и эрмитово-сопряженной, транспонированной и обратной ей матрицей имеют место различные соотношения, получаем специальные виды матриц. Поскольку их названия часто встречаются в литературе, мы упоминаем их все; в дальнейшем мы будем использовать лишь *унитарные*, *эрмитовы* и *вещественные ортогональные* матрицы.

Если $\alpha = \alpha^*$ (т. е. $\alpha_{ik} = \alpha_{ik}^*$), то матрицу называют *вещественной*, и все n^2 элементов α_{ik} вещественны. Если $\alpha = -\alpha^*$ ($\alpha_{ik} = -\alpha_{ik}^*$), матрица является чисто мнимой.

Если $S = S^T$ ($S_{ik} = S_{ki}$), то матрица *симметрична*; если $S = -S^T$ ($S_{ik} = -S_{ki}$), то она *кососимметрична*, или *антисимметрична*.

Если $\mathbf{H} = \mathbf{H}^\dagger$ ($H_{lk} = H_{kl}^*$), то матрица называется *эрмитовой*, если же $\mathbf{A} = -\mathbf{A}^\dagger$, то она будет *косоэрмитовой*, или *антиэрмитовой*.

Если \mathbf{a} вещественна и симметрична одновременно, то \mathbf{a} также эрмитова и так далее.

Если $\mathbf{O}^T = \mathbf{O}^{-1}$, матрица \mathbf{O} является *комплексно ортогональной*. Матрица \mathbf{U} , для которой $\mathbf{U}^\dagger = \mathbf{U}^{-1}$, называют *унитарной* матрицей. Если $\mathbf{R}^\dagger = \mathbf{R}^{-1}$ и $\mathbf{R} = \mathbf{R}^*$ (вещественна), то $\mathbf{R}^T = \mathbf{R}^{*T} = = \mathbf{R}^\dagger = \mathbf{R}^{-1}$ и $\mathbf{R}^T = \mathbf{R}^{-1}$; тогда матрицу \mathbf{R} называют вещественной ортогональной, или просто *ортогональной*.

Унитарные матрицы и скалярное произведение

Прежде чем переходить к обсуждению унитарных матриц, нам следует ввести еще одно новое понятие. Уже в гл. 1 была определена сумма двух векторов и произведение вектора на число. Другим важным элементарным понятием является *скалярное произведение* двух векторов. Скалярное произведение вектора \mathbf{a} на вектор \mathbf{b} есть число. Мы будем различать *эрмитово-скалярное* произведение

$$a_1^* b_1 + a_2^* b_2 + \dots + a_n^* b_n = (\mathbf{a}, \mathbf{b}) \quad (3.9)$$

и простое скалярное произведение

$$a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_n b_n = ((\mathbf{a}, \mathbf{b})). \quad (3.9a)$$

Всюду, где противное не оговорено особо, будем подразумевать эрмитово-скалярное произведение, а не простое скалярное произведение. Если компоненты вектора a_1, a_2, \dots, a_n вещественны, то оба скалярных произведения совпадают.

Если $(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = 0 = (\mathbf{b}, \mathbf{a})$, то векторы \mathbf{a} и \mathbf{b} называются ортогональными друг другу. Если $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = 1$, то \mathbf{a} называют *единичным вектором*, или говорят, что он нормирован. Произведение $(\mathbf{a}\mathbf{a})$ всегда вещественно и положительно, и обращается в нуль только тогда, когда все компоненты вектора \mathbf{a} обращаются в нуль. Это верно только для эрмитово-скалярного произведения в противоположность простому скалярному произведению. Пусть, например, \mathbf{a} есть двумерный вектор $(1, i)$. Тогда $((\mathbf{a}, \mathbf{a})) = 0$, но $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = 2$. Действительно, из $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = 0$ следует, что $\mathbf{a} = 0$, однако это не следует из $((\mathbf{a}, \mathbf{a})) = 0$.

Свойства скалярного произведения:

1. При перестановке векторов в эрмитово-скалярном произведении

$$(\mathbf{a}, \mathbf{b}) = (\mathbf{b}, \mathbf{a})^*, \quad (3.10)$$

тогда как

$$((\mathbf{a}, \mathbf{b})) = ((\mathbf{b}, \mathbf{a})). \quad (3.10a)$$

2. Если c есть число, то

$$(a, cb) = c(a, b) \text{ и } ((a, cb)) = c((a, b)). \quad (3.11)$$

С другой стороны,

$$(ca, b) = c^*(a, b), \text{ тогда как } ((ca, b)) = c((a, b)).$$

3. Скалярное произведение линейно по второму множителю, так как

$$(a, bb + cc) = b(a, b) + c(a, c). \quad (3.12)$$

Однако оно „антилинейно“ по первому множителю:

$$(aa + bb, c) = a^*(a, c) + b^*(b, c). \quad (3.12a)$$

4. Далее, для произвольных векторов a и b и любой матрицы α имеет место важное правило, что

$$(a, \alpha b) = (\alpha^+ a, b) \text{ или } (\beta a, b) = (a, \beta^+ b). \quad (3.13)$$

Чтобы показать это, запишем

$$(a, \alpha b) = \sum_{k=1}^n a_k^* (\alpha b)_k = \sum_{k=1}^n a_k^* \sum_{\lambda=1}^n \alpha_{k\lambda} b_\lambda$$

и

$$(\alpha^+ a, b) = \sum_{\lambda=1}^n (\alpha^+ a)_\lambda^* b_\lambda = \sum_{\lambda=1}^n \sum_{k=1}^n (\alpha_{k\lambda}^* a_k)^* b_\lambda = \sum_{\lambda=1}^n \sum_{k=1}^n \alpha_{k\lambda} a_k^* b_\lambda.$$

Вместо применения матрицы α к одному множителю скалярного произведения, ее эрмитово-сопряженную α^+ можно применять к другому множителю.

Для простого скалярного произведения то же правило справедливо для транспонированных матриц, т. е.

$$((a, \alpha b)) = ((\alpha^T a, b)).$$

5. Выпишем теперь условие $U^+ = U^{-1}$ унитарности матрицы в несколько более явном виде: из $U^+ U = I$ следует, что

$$\sum_{j=1}^n (U^+)_{ij} U_{jk} = \sum_{j=1}^n U_{ji}^* U_{jk} = \delta_{ik}; \quad (U_{\cdot i}, U_{\cdot k}) = \delta_{ik}. \quad (3.14)$$

Если рассматривать n столбцов унитарной матрицы как векторы, они составляют n ортогональных единичных векторов. Аналогичным образом, из $U U^+ = I$ следует, что

$$\sum_j U_{ij} U_{kj}^* = \delta_{ik}, \quad (U_{k\cdot}, U_{l\cdot}) = \delta_{ik}. \quad (3.14a)$$

n строк унитарной матрицы также образуют n единичных векторов, которые взаимно ортогональны.

6. Унитарное преобразование оставляет эрмитово-скалярное произведение неизменным; иными словами, для произвольных векторов \mathbf{a} и \mathbf{b}

$$(\mathbf{U}\mathbf{a}, \mathbf{U}\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{U}^\dagger\mathbf{U}\mathbf{b}) = (\mathbf{a}, \mathbf{b}). \quad (3.15)$$

Наоборот, если соотношение (3.15) справедливо для некоторой матрицы \mathbf{U} и для каждой пары произвольных векторов \mathbf{a} и \mathbf{b} , то \mathbf{U} унитарна, поскольку тогда соотношение (3.15) справедливо также для $\mathbf{a} = \mathbf{e}_i$ и $\mathbf{b} = \mathbf{e}_k$, где $(\mathbf{e}_k)_l = \delta_{kl}$. В этом специальном случае (3.15) принимает вид

$$\begin{aligned} \delta_{ik} &= (\mathbf{e}_i, \mathbf{e}_k) = (\mathbf{U}\mathbf{e}_i, \mathbf{U}\mathbf{e}_k) = \sum_j (\mathbf{U}\mathbf{e}_i)_j^* (\mathbf{U}\mathbf{e}_k)_j = \\ &= \sum_j \left(\sum_l U_{jl} \delta_{il} \right)^* \cdot \sum_l U_{jl} \delta_{kl} = \sum_j U_{ji}^* U_{jk}, \end{aligned}$$

что совпадает с равенством (3.14). Таким образом, (3.15) есть необходимое и достаточное условие унитарности \mathbf{U} .

То же правило применимо к комплексно ортогональным матрицам относительно простого скалярного произведения.

7. Произведение \mathbf{UV} двух унитарных матриц \mathbf{U} и \mathbf{V} унитарно:

$$(\mathbf{UV})^\dagger = \mathbf{V}^\dagger \mathbf{U}^\dagger = \mathbf{V}^{-1} \mathbf{U}^{-1} = (\mathbf{UV})^{-1}. \quad (3.16)$$

Матрица \mathbf{U}^{-1} , обратная унитарной, также унитарна:

$$(\mathbf{U}^{-1})^\dagger = (\mathbf{U}^\dagger)^\dagger = \mathbf{U} = (\mathbf{U}^{-1})^{-1}. \quad (3.17)$$

Преобразование к главным осям для унитарных и эрмитовых матриц

Всякая унитарная матрица \mathbf{V} и всякая эрмитова матрица \mathbf{H} могут быть приведены к диагональному виду с помощью унитарной матрицы \mathbf{U} . Для таких матриц не может встретиться исключительный случай, упомянутый на стр. 32. Прежде всего отметим, что унитарная (или эрмитова) матрица остается унитарной (или эрмитовой) после унитарного преобразования. Будучи произведением трех унитарных матриц, $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{V}\mathbf{U}$ само унитарно. Матрица $\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U}$ также эрмитова, если только \mathbf{H} эрмитова, поскольку, согласно (3.17),

$$(\mathbf{U}^{-1}\mathbf{H}\mathbf{U})^\dagger = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U}^{-1\dagger} = \mathbf{U}^\dagger \mathbf{H} \mathbf{U} = \mathbf{U}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{U}. \quad (3.18)$$

Чтобы привести \mathbf{V} или \mathbf{H} к диагональному виду, определим некоторое собственное значение \mathbf{V} или \mathbf{H} . Пусть оно равно λ_1 ;

соответствующий собственный вектор $U_{\cdot 1} = (U_{11}, \dots, U_{n1})$ определяется только с точностью до постоянного множителя. Выберем этот постоянный множитель так, чтобы

$$(U_{\cdot 1}, U_{\cdot 1}) = 1.$$

Это всегда возможно, так как $(U_{\cdot 1}, U_{\cdot 1})$ никогда не может обратиться в нуль. Построим теперь унитарную матрицу U , первым столбцом которой будет $U_{\cdot 1}$ ¹⁾. С помощью этой унитарной матрицы мы преобразуем соответственно V и H в $U^{-1}VU$ и $U^{-1}HU$. Например, $U^{-1}VU$ имеет первый столбец

$$X_{r1} = (U^{-1}VU)_{r1} = (U^+VU)_{r1} = \sum_{\nu} U_{\nu r}^* \sum_{\mu} V_{\nu\mu} U_{\mu 1} = \sum_{\nu} U_{\nu r}^* \lambda_1 U_{\nu 1} = \delta_{r1} \lambda_1,$$

поскольку $U_{\cdot 1}$ уже является собственным вектором матрицы V . Мы видим, что λ_1 появляется в первой строке первого столбца, и что все остальные элементы первого столбца равны нулю.

Это верно, очевидно, не только для $U^{-1}VU$, но и для $U^{-1}HU$. Так как матрица $U^{-1}HU$ эрмитова, первая строка также состоит из нулей, за исключением первого элемента; таким образом, матрица $U^{-1}HU$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & & \\ \vdots & & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}. \quad (3.E.1)$$

Но $U^{-1}VU$ должно иметь точно такой же вид! Поскольку X — унитарная матрица, ее первый столбец $X_{\cdot 1}$ является единичным вектором, откуда следует, что

$$|X_{11}|^2 + |X_{21}|^2 + \dots + |X_{n1}|^2 = |\lambda_1|^2 = 1. \quad (3.E.2)$$

То же рассуждение применимо к первой строке $X_{\cdot 1}$ матрицы X . Сумма квадратов дается выражением

$$\begin{aligned} |X_{11}|^2 + |X_{12}|^2 + \dots + |X_{1n}|^2 &= \\ &= |\lambda_1|^2 + |X_{12}|^2 + |X_{13}|^2 + \dots + |X_{1n}|^2 = 1, \end{aligned}$$

из которого следует, что все $X_{12}, X_{13}, \dots, X_{1n}$ обращаются в нуль.

Следовательно, всякую унитарную или эрмитову матрицу можно привести к виду (3.E.1) с помощью унитарной матрицы. Матрица (3.E.1) не является еще диагональной и не может быть ею, так как мы использовали существование только одного собственного

¹⁾ См. лемму на стр. 39.

значения. Она, однако, больше похожа на диагональную матрицу, чем первоначальная матрица V или H . Естественно записать (3.Е.1) в виде суперматрицы

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & V_1 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & H_1 \end{pmatrix}, \quad (3.Е.3)$$

где матрицы V_1 или H_1 имеют только $n - 1$ строк и столбцов. Мы можем преобразовать затем (3.Е.3) с помощью другой унитарной матрицы

$$\begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1 \end{pmatrix},$$

где U_1 имеет только $n - 1$ строк и столбцов.

При этом матрица (3.Е.1) принимает вид

$$\begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1^\dagger V_1 U_1 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} \lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & U_1^\dagger H_1 U_1 \end{pmatrix}. \quad (3.Е.4)$$

Вышеуказанную процедуру можно применить снова, и U_1 можно выбрать так, чтобы $U_1^\dagger V_1 U_1$ или $U_1^\dagger H_1 U_1$ имели вид

$$\begin{pmatrix} \lambda_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & V_2 \end{pmatrix} \quad \text{или} \quad \begin{pmatrix} \lambda_2 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & H_2 \end{pmatrix},$$

где V_2 или H_2 имеет размерность только $n - 2$. Тогда $U_1^\dagger U^\dagger V U U_1$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} \Lambda_1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & V_2 \end{pmatrix}, \quad \text{где} \quad \Lambda_1 = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}.$$

Ясно, что повторение этой процедуры позволит привести матрицу V или H к *полностью диагональному виду*, и таким образом теорема доказана.

Эта теорема не имеет места для симметричных или комплексно ортогональных матриц, как показывает пример на стр. 32 (вторая матрица симметрична и комплексно ортогональна). Однако она справедлива для вещественных симметричных или вещественных ортогональных матриц, которые являются специальными случаями эрмитовых или унитарных матриц.

Лемма. Если $(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) = 1$, то может быть построена (многими различными способами) унитарная матрица, первым столбцом которой является $\mathbf{u}_1 = (u_{11}, u_{21}, \dots, u_{n1})$.

Сначала строим вообще некоторую матрицу с первым столбцом \mathbf{u}_1 , имеющую отличный от нуля определитель. Пусть второй

столбец этой матрицы равен $\mathbf{v}_2 = (v_{12}, v_{22}, \dots, v_{n2})$, третий — \mathbf{v}_3 и т. д.:

$$\begin{pmatrix} u_{11} & v_{12} & v_{13} & \dots & v_{1n} \\ u_{21} & v_{22} & v_{23} & \dots & v_{2n} \\ u_{31} & v_{32} & v_{33} & \dots & v_{3n} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ u_{n1} & v_{n2} & v_{n3} & \dots & v_{nn} \end{pmatrix}.$$

Тогда векторы $\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2, \mathbf{v}_3, \dots$ будут линейно независимы, так как определитель не обращается в нуль. Поскольку мы хотим, чтобы они были ортогональными, используем метод Шмидта для их ортогонализации. Сначала подставим $\mathbf{u}_2 = a_{21}\mathbf{u}_1 + \mathbf{v}_2$ вместо \mathbf{v}_2 ; это не изменит определителя. Затем положим

$$(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2) = 0 = a_{21}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2) = a_{21} + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2)$$

и определим отсюда a_{21} . Далее, напомним \mathbf{u}_3 вместо \mathbf{v}_3 с $\mathbf{u}_3 = a_{31}\mathbf{u}_1 + a_{32}\mathbf{u}_2 + \mathbf{v}_3$ и определим a_{31} и a_{32} так, чтобы

$$0 = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_3) = a_{31}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_3),$$

$$0 = (\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3) = a_{32}(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2) + (\mathbf{u}_2, \mathbf{v}_3).$$

Следуя этим путем, мы, наконец, напомним \mathbf{u}_n вместо \mathbf{v}_n , причем $\mathbf{u}_n = a_{n1}\mathbf{u}_1 + a_{n2}\mathbf{u}_2 + \dots + a_{n, n-1}\mathbf{u}_{n-1} + \mathbf{v}_n$, и определим $a_{n1}, a_{n2}, a_{n3}, \dots, a_{n, n-1}$ так, чтобы

$$0 = (\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_n) = a_{n1}(\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_1) + (\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_n),$$

$$0 = (\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_n) = a_{n2}(\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_2) + (\mathbf{u}_2, \mathbf{v}_n),$$

.....

$$0 = (\mathbf{u}_{n-1}, \mathbf{u}_n) = a_{n, n-1}(\mathbf{u}_{n-1}, \mathbf{u}_{n-1}) + (\mathbf{u}_{n-1}, \mathbf{v}_n).$$

Таким способом с помощью $\frac{1}{2}n(n-1)$ чисел a мы последовательно подставляем векторы \mathbf{u} вместо векторов \mathbf{v} . Векторы \mathbf{u} ортогональны и не являются нулевыми в силу линейной независимости векторов \mathbf{v} . Допустим, например, что $\mathbf{u}_n = 0$. Отсюда следует, что

$$a_{n1}\mathbf{u}_1 + a_{n2}\mathbf{u}_2 + \dots + a_{n, n-1}\mathbf{u}_{n-1} + \mathbf{v}_n = 0,$$

и так как векторы $\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n$ являются линейными комбинациями векторов $\mathbf{u}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_{n-1}$, можно выразить \mathbf{v}_n через $n-1$ этих векторов, в противоречии с их линейной независимостью.

Наконец, нормируем векторы $\mathbf{u}_2, \mathbf{u}_3, \dots, \mathbf{u}_n$, строя тем самым унитарную матрицу, первым столбцом которой является \mathbf{u}_1 .

Этот метод ортогонализации Шмидта показывает, как построить, исходя из любой совокупности линейно независимых векторов, ортогональную нормированную систему, в которой k -й единичный вектор является линейной комбинацией точно k исходных векторов. Если исходить из n n -мерных векторов, образующих полную систему векторов, получается полная ортогональная система.

Если унитарная матрица V или эрмитова матрица H приведены таким способом к диагональному виду, получающиеся при этом матрицы Λ_v или Λ_h также унитарны или эрмитовы. Следовательно,

$$\Lambda_v \Lambda_v^* = \mathbf{1} \quad \text{или} \quad \Lambda_h = \Lambda_h^\dagger. \quad (3.19)$$

Абсолютная величина каждого собственного значения унитарной матрицы¹⁾ равна 1; собственные значения эрмитовой матрицы вещественны. Это следует непосредственно из (3.19), устанавливающего, что для собственных значений λ_v унитарной матрицы $\lambda_v \lambda_v^* = 1$; а для эрмитовой матрицы $\lambda_h = \lambda_h^*$. Собственные векторы матриц V и H , являющиеся столбцами унитарной матрицы U , могут рассматриваться как ортогональные.

Вещественные ортогональные и симметричные матрицы

Наконец, рассмотрим следствия требований, чтобы V или H были комплексно ортогональными (или симметричными) и одновременно унитарными (или эрмитовыми) матрицами. В этом случае как V , так и H вещественны.

Из $U^\dagger V U = \Lambda_v$ мы получаем комплексно-сопряженное выражение $U^{*\dagger} V^* U^* = (U^*)^\dagger V U^* = \Lambda_v^*$. Так как собственные значения как корни секулярного уравнения не зависят от способа, с помощью которого матрица приведена к диагональному виду (т. е. посредством U или U^*), диагональная форма Λ_v может всегда быть записана как Λ_v^* . Таким образом, числа $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ совпадают с числами $\lambda_1^*, \lambda_2^*, \dots, \lambda_n^*$. Отсюда следует, что комплексные собственные значения вещественной ортогональной матрицы V встречаются комплексно-сопряженными парами. Кроме того, так как $V V^T = \mathbf{1}$, они все по абсолютной величине равны 1; вещественные собственные значения поэтому равны ± 1 . В матрицах нечетной размерности по крайней мере одно собственное значение должно быть вещественным.

Если \boldsymbol{v} есть собственный вектор, принадлежащий собственному значению λ , то \boldsymbol{v}^* есть собственный вектор, принадлежащий комплексно-сопряженному собственному значению λ^* . Чтобы показать

¹⁾ Как уже показывает соотношение (3.E.2).

это, запишем $V\boldsymbol{v} = \lambda\boldsymbol{v}$; тогда $V^*\boldsymbol{v}^* = \lambda^*\boldsymbol{v}^* = V\boldsymbol{v}^*$. Кроме того, если λ^* отлично от λ , то $(\boldsymbol{v}^*, \boldsymbol{v}) = 0 = ((\boldsymbol{v}, \boldsymbol{v}))$; простое скалярное произведение собственного вектора на самого себя обращается в нуль, если соответствующее собственное значение не является вещественным (не ± 1). Наоборот, вещественные собственные векторы (для которых простое скалярное произведение не обращается в нуль) соответствуют собственным значениям ± 1 . Кроме того, пусть \boldsymbol{v} есть собственный вектор для λ_1 , \boldsymbol{v}^* — для λ_1^* и \boldsymbol{z} — для λ_2 . Тогда, если $\lambda_1 \neq \lambda_2$, получаем

$$0 = (\boldsymbol{v}^*, \boldsymbol{z}) = ((\boldsymbol{v}, \boldsymbol{z})).$$

Простое скалярное произведение двух собственных векторов вещественной ортогональной матрицы всегда равно нулю, кроме случая, когда соответствующие собственные значения являются комплексно-сопряженными; когда собственные значения комплексно-сопряжены, соответствующие собственные векторы сами являются комплексно-сопряженными.

Определитель ортогональной матрицы равен ± 1 . Чтобы показать это, рассмотрим $VV^T = 1$; отсюда следует, что определитель матрицы V , умноженный на определитель V^T , должен дать 1. Однако определитель матрицы V равен определителю V^T , так что каждый из них должен быть равен $+1$ или -1 .

Если матрица H вещественна, система (3.5) вещественна, так как все λ_h вещественны. Собственные векторы вещественной эрмитовой матрицы можно считать вещественными. (Поскольку они определяются только с точностью до постоянного множителя, они могут быть также умножены на комплексный множитель.) Таким образом, унитарная матрица U в произведении $U^{-1}HU = \Lambda_h$ может считаться вещественной,

ЭЛЕМЕНТЫ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. До 1925 г. развитие квантовой механики было направлено главным образом на определение энергий стационарных состояний, т. е. на вычисление энергетических уровней. Более старая „теория разделения“ Эпштейна — Шварцшильда давала рецепты для определения уровней энергии, или термов, лишь для систем, движение которых с точки зрения классической механики имело очень частные свойства, а именно было периодическим или по крайней мере почти периодическим.

Гейзенберг, пытавшийся дать точную формулировку принципа соответствия Бора, высказал соображения относительно устранения этого недостатка. Решение было предложено независимо Борном и Йорданом, с одной стороны, и Дираком — с другой. Его сущность заключается в требовании, чтобы в вычислениях появлялись лишь те движения, которые позднее стали рассматриваться как разрешенные с квантовомеханической точки зрения. Проведение этой идеи привело авторов к введению матриц с бесконечным числом строк и столбцов для формального представления координат и импульсов и к формальным вычислениям с „ q -числами“, удовлетворяющими сочетательному, но не перестановочному законам.

Так, например, выражение для энергии \mathbf{H} линейного осциллятора

$$\mathbf{H} = \frac{1}{2m} \mathbf{p}^2 + \frac{K}{2} \mathbf{q}^2 \quad (4.1)$$

(где m — масса осциллирующей частицы, K — постоянный коэффициент, характеризующий силу, а \mathbf{q} и \mathbf{p} — координата и импульс частицы) получается формальной подстановкой матриц \mathbf{p} и \mathbf{q} вместо импульса p и координаты q в гамильтоновой формулировке классического выражения для энергии. Выдвигается требование, чтобы \mathbf{H} была диагональной матрицей. Диагональные элементы H_{nn} дают тогда возможные значения энергии, стационарные уровни системы. С другой стороны, квадраты абсолютных значений элементов q_{nk} матрицы \mathbf{q} пропорциональны вероятности спонтанного перехода из состояния с энергией H_{nn} в состояние с энергией H_{kk} .

Они дают, тем самым, интенсивность линии с частотой $\omega = (H_{nn} - H_{kk})/\hbar$. Все это следует из тех же рассуждений, с помощью которых вводятся матрицы \mathbf{p} и \mathbf{q} .

Чтобы полностью уточнить задачу, следовало ввести „перестановочное соотношение“ между \mathbf{p} и \mathbf{q} . Предполагалось, что оно имеет вид

$$\mathbf{p}\mathbf{q} - \mathbf{q}\mathbf{p} = \frac{\hbar}{i} \mathbf{1}, \quad (4.2)$$

где \hbar — постоянная Планка, деленная на 2π .

Вычисления с этими величинами (зачастую весьма утомительные) быстро привели к прекрасным и важным результатам, имеющим глубокий смысл. Таким путем стало возможным вычислить в согласии с опытом „правила отбора“ для момента количества движения и ряд „правил сумм“, определяющих относительные интенсивности зеемановских компонент линии. Для получения этих результатов „теории разделения“ было совершенно недостаточно.

Шредингер пришел к результатам, математически эквивалентным упомянутым выше, на пути, не зависящем от точки зрения Гейзенберга. Его метод имеет глубокое сходство с идеями де-Бройля. Все дальнейшее рассмотрение будет основано именно на шредингеровском подходе.

Рассмотрим многомерное пространство с числом измерений, равным числу координат, необходимых для описания положения системы. Всякое расположение частиц системы соответствует точке в этом многомерном „конфигурационном пространстве“. Эта точка будет двигаться с течением времени по кривой, которая может полностью описывать классически движение системы. Между классическим движением этой точки — изображающей точки в конфигурационном пространстве — и движением волнового пакета, также рассматриваемого в конфигурационном пространстве, имеется фундаментальное соответствие¹⁾, если только принять показатель преломления этих волн равным $[2m(E - V)]^{1/2}/E$. Здесь E — полная энергия системы, а V — потенциальная энергия как функция пространственных координат (конфигурации).

Соответствие заключается в том обстоятельстве, что чем меньше отношение длины волны этого волнового пакета к радиусу кривизны траектории в конфигурационном пространстве, тем точнее волновой пакет будет следовать этой траектории. С другой стороны, если волновой пакет содержит длины волн порядка классического радиуса кривизны траектории в конфигурационном пространстве, между двумя движениями возникают важные различия как следствие интерференции волн.

¹⁾ Данное изложение ближе следует идеям Шредингера, чем это принято в настоящее время. — *Прим. перев. издания 1959 г.*

Шредингер принимает, что движение изображающей точки в конфигурационном пространстве соответствует движению волн, а не классически вычисленному движению.

Если обозначить скалярную амплитуду волн через ψ , волновое уравнение записывается в виде

$$\frac{E - V}{E^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = \frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{1}{2m_f} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x_f^2}, \quad (4.3)$$

где x_1, x_2, \dots, x_f — координаты частиц рассматриваемой системы, m_1, m_2, \dots, m_f — соответствующие массы и $V(x_1, x_2, \dots, x_f)$ — потенциальная энергия как функция координат отдельных частиц x_1, x_2, \dots, x_f .

Полная энергия системы в явном виде входит в (4.3). С другой стороны, частота или период волн пока еще не определены. Шредингер принимает, что частота волны, связанной с движением системы, имеющей полную энергию E , дается выражением $\hbar\omega = E$. Поэтому он подставляет в (4.3)

$$\psi = \psi_E \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad (4.4)$$

где ψ_E не зависит от t . Таким образом он получает уравнение для определения собственных значений

$$\frac{1}{\hbar^2} (V - E) \psi_E = \frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{1}{2m_f} \frac{\partial^2 \psi_E}{\partial x_f^2}, \quad (4.5)$$

где ψ_E — функция пространственных координат x_1, x_2, \dots, x_f . Необходимо потребовать, чтобы ψ_E была квадратично интегрируемой, т. е. чтобы интеграл

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_E(x_1, x_2, \dots, x_f)|^2 dx_1 dx_2 \dots dx_f$$

по всему конфигурационному пространству был конечным. В частности, ψ должна обращаться в нуль на бесконечности. Значения E , для которых возможно определение такой функции ψ_E , называются *собственными значениями* уравнения (4.5); они дают возможные значения энергии системы. Соответствующее квадратично интегрируемое решение уравнения (4.5) называется *собственной функцией*, принадлежащей собственному значению E .

Уравнение (4.5) также записывается в виде

$$\mathbf{H}\psi_E = E\psi_E, \quad (4.5a)$$

где \mathbf{H} есть линейный оператор (гамильтониан, или оператор энергии)

$$\mathbf{H} = -\hbar^2 \left(\frac{1}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{1}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \dots + \frac{1}{2m_f} \frac{\partial^2}{\partial x_f^2} \right) + V(x_1, x_2, \dots, x_f). \quad (4.56)$$

Последний член означает умножение на $V(x_1, x_2, \dots, x_f)$.

Этот оператор преобразует одну функцию координат x_1, x_2, \dots, x_f в другую. Функция ψ в (4.4) удовлетворяет соотношению

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathbf{H}\psi. \quad (4.6)$$

Полная энергия системы не входит в явном виде в уравнение (4.6), так что это уравнение применимо в общем случае к любому движению, независимо от энергии системы; оно называется *зависящим от времени уравнением Шредингера*.

Уравнения (4.5) [или (4.5а), (4.5б)] и (4.6) являются основными уравнениями квантовой механики. Последнее из них определяет изменение волновой функции в конфигурационном пространстве со временем. Этому процессу, как мы увидим ниже, приписывается глубокий физический смысл; уравнение (4.5) [или (4.5а), (4.5б)] представляет собой уравнение для определения частоты $\omega = E/\hbar$, энергии E и периодической зависимости волновой функции ψ от времени. В самом деле, (4.5а) следует из (4.6) и предположения, что

$$\psi = \psi_E \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right).$$

2. Кратко изложим теперь наиболее важные свойства собственных значений и собственных функций оператора (4.5б). Для этой цели мы прежде всего определим скалярное произведение двух функций φ и g равенством

$$(\varphi, g) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int \varphi(x_1, \dots, x_f)^* g(x_1, \dots, x_f) dx_1 \dots dx_f = \int \varphi^* g. \quad (4.7)$$

Все простые правила вычислений, изложенные в гл. 3, применимы к этому скалярному произведению. Так, если a_1 и a_2 являются числовыми константами,

$$(\varphi, a_1 g_1 + a_2 g_2) = a_1 (\varphi, g_1) + a_2 (\varphi, g_2)$$

и

$$(\varphi, g) = (g, \varphi)^*.$$

Скалярное произведение (φ, φ) вещественно и положительно; оно обращается в нуль только при $\varphi = 0$. Если $(\varphi, \varphi) = 1$, то φ называется нормированной. Если интеграл

$$(\varphi, \varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x_1, \dots, x_f)|^2 dx_1 \dots dx_f = c^2$$

конечен, то φ всегда может быть нормирована путем умножения на некоторую постоянную $[1/c$ в вышеуказанном случае, так как $(\varphi/c, \varphi/c) = 1]$. Две функции ортогональны, если их скалярное произведение равно нулю.

Скалярное произведение, определяемое формулой (4.7), составлено исходя из соображений, что функции $\varphi(x_1, \dots, x_f)$, $g(x_1, \dots, x_f)$ от координат x_1, x_2, \dots, x_f рассматриваются как векторы, компоненты которых пронумерованы (размечены) непрерывными индексами. Функциональный вектор $\varphi(x_1, \dots, x_f)$ определен в f -кратно бесконечномерном пространстве. Каждый набор значений переменных x_1, \dots, x_f , т. е. каждая конфигурация соответствует одному измерению. Тогда скалярное произведение φ и g на векторном языке равно

$$(\varphi, g) = \sum_{x_1, \dots, x_f} \varphi(x_1, \dots, x_f)^* g(x_1, \dots, x_f),$$

что заменяется интегралом (4.7).

Определение линейной зависимости или независимости функций также соответствует понятиям, выведенным из обсуждения векторов. Линейное соотношение

$$a_1 \varphi_1 + a_2 \varphi_2 + \dots + a_k \varphi_k = 0$$

между функциями $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_k$ имеет место, если это уравнение справедливо для всех компонент векторов, т. е. для всех наборов значений x_1, \dots, x_f , при заданных постоянных a_1, a_2, \dots, a_k . Далее, оператор H называется линейным, если соотношение

$$H(a\varphi + bg) = aH\varphi + bHg \quad (4.8)$$

справедливо для всех функций φ и g . Вообще мы будем иметь дело лишь с линейными операторами. Линейные операторы для функций-векторов соответствуют матрицам для обычных векторов. И те и другие преобразуют векторы, к которым они применяются, в другие векторы. Условие линейности (4.8) справедливо для всех матриц. Мы видели, что всякий оператор, который можно применить к конечномерному вектору, эквивалентен матрице¹⁾. Бесконечномерные операторы также имеют матричную форму, но она часто сильно сингулярна.

Например, элементы матрицы q_1 , соответствующей оператору „умножения на x_1 “, равны

$$(q_1)_{x_1 x_2 \dots x_f; x'_1 x'_2 \dots x'_f} = x_1 \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f} \quad (4.E.1)$$

¹⁾ См. гл. 1, стр. 11,

Она преобразует вектор ψ в вектор $q_1\psi$ с компонентами

$$\begin{aligned} q_1\psi(x_1, x_2, \dots, x_f) &= \sum_{x'_1 \dots x'_f} (q_1)_{x_1 \dots x_f; x'_1 \dots x'_f} \psi(x'_1, \dots, x'_f) = \\ &= \sum_{x'_1 \dots x'_f} x_1 \delta_{x_1 x'_1} \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f} \psi(x'_1, \dots, x'_f) = x_1 \psi(x_1, \dots, x_f). \end{aligned}$$

Этим вектором является как раз функция $x_1\psi$, в которую ψ превращается операцией „умножения на x_1 “.

Матрица, соответствующая оператору „дифференцирования по x_1 “, обозначается через $(i/\hbar) p_1$, поскольку $(\hbar/i) (\partial/\partial x_1)$ соответствует p_1 :

$$\left(\frac{i}{\hbar} p_1\right)_{x_1 \dots x_f; x'_1 \dots x'_f} = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \left(\delta_{x_1 + \frac{1}{2}\Delta, x'_1} - \delta_{x_1 - \frac{1}{2}\Delta, x'_1} \right) \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f} \quad (4.F.2)$$

Она преобразует вектор ψ в

$$\begin{aligned} \sum_{x'_1 \dots x'_f} \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \left(\delta_{x_1 + \frac{1}{2}\Delta, x'_1} - \delta_{x_1 - \frac{1}{2}\Delta, x'_1} \right) \delta_{x_2 x'_2} \dots \delta_{x_f x'_f} \psi(x'_1, x'_2, \dots, x'_f) = \\ = \lim_{\Delta \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta} \left[\psi\left(x_1 + \frac{1}{2}\Delta, x_2, \dots, x_f\right) - \psi\left(x_1 - \frac{1}{2}\Delta, x_2, \dots, x_f\right) \right], \end{aligned}$$

а это и есть производная ψ по x_1 .

Говорят, что оператор H эрмитов, если $H = H^\dagger$, т. е. если

$$(v, Hw) = (H^\dagger v, w) = (Hv, w)$$

для произвольных векторов v и w . Другими словами, оператор H эрмитов, если он может быть перенесен с одного сомножителя скалярного произведения на другой. Эрмитова природа операторов *определяется* этим требованием.

Оператор H эрмитов, если для всех функций φ , g , удовлетворяющих определенным условиям (например, квадратичной интегрируемости, из которой следует, что функция обращается в нуль на бесконечности), имеет место равенство

$$(\varphi, Hg) = (H\varphi, g). \quad (4.9)$$

Суммы эрмитовых операторов и произведения последних на вещественные величины снова линейны и эрмитовы. То же справедливо для их степеней, обратных операторов и т. д.

Оператор Гамильтона (4.5б) эрмитов. Чтобы показать это, заметим прежде всего, что умножение на вещественную функцию

$V(x_1, x_2, \dots, x_f)$ приводит к эрмитовому выражению

$$\begin{aligned} (\varphi, Vg) &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x_1, \dots, x_f)^* V(x_1, \dots, x_f) \times \\ &\times g(x_1, \dots, x_f) dx_1 \dots dx_f = \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} (V(x_1, \dots, x_f) \times \\ &\times \varphi(x_1, \dots, x_f))^* g(x_1, \dots, x_f) dx_1 \dots dx_f = (V\varphi, g). \end{aligned} \quad (4.9a)$$

Оператор $(\hbar/i)(\partial/\partial x_k)$ также эрмитов. Путем интегрирования по частям получаем

$$\begin{aligned} \left(\varphi, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} g\right) &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} \varphi(x_1, \dots, x_f)^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} g(x_1, \dots, x_f) dx_1 \dots dx_f = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} -\frac{\hbar}{i} \left(\frac{\partial}{\partial x_k} \varphi(x_1, \dots, x_f)\right)^* g(x_1, \dots, x_f) dx_1 \dots dx_f = \\ &= \left(\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x_k} \varphi, g\right), \end{aligned} \quad (4.10)$$

поскольку ψ обращается в нуль при $x_k = \pm \infty$ и $i^* = -i$. Поэтому его квадрат $-\hbar^2 \partial^2 / \partial x_k^2$ тоже эрмитов, что может быть показано двукратным интегрированием по частям. Тогда все слагаемые оператора \mathbf{H} эрмитовы, так что сам \mathbf{H} эрмитов.

Известно, что уравнение для ψ

$$\mathbf{H}\psi = E\psi$$

имеет неисчезающие квадратично интегрируемые решения только при определенных значениях E . Значения, для которых такие решения существуют, называются *собственными значениями*; совокупность всех этих собственных значений называется *спектром* оператора \mathbf{H} .

Все собственные значения эрмитова оператора вещественны. Если $\mathbf{H}\psi_E = E\psi_E$, то скалярное произведение с ψ_E равно

$$(\psi_E, \mathbf{H}\psi_E) = (\psi_E, E\psi_E) = E(\psi_E, \psi_E). \quad (4.11)$$

Но в (4.11) $(\psi_E, \mathbf{H}\psi_E) = (\mathbf{H}\psi_E, \psi_E) = (\psi_E, \mathbf{H}\psi_E)^*$. Тогда, поскольку (ψ_E, ψ_E) вещественно, E также должно быть вещественным.

Эрмитов оператор может иметь как *дискретный*, так и *непрерывный* спектры. Собственные значения дискретного спектра являются дискретными числами (число их может быть конечным или бесконечным счетным); соответствующие собственные функции могут быть нормированы [в нашем случае это означает, что интеграл от квадрата ψ_E , т. е. (ψ_E, ψ_E) , конечен], и в дальнейшем

будем предполагать, что они уже нормированы. Собственные функции различаются друг от друга индексами: ψ_E, ψ_F, \dots . Обычно дискретные собственные значения охватывают наиболее интересную часть спектра. Там, где мы до сих пор говорили просто о „собственных значениях“, мы имели в виду дискретные собственные значения.

Решение уравнения для собственных значений, принадлежащее непрерывному спектру $\psi(x_1, x_2, \dots, x_f, E)$, не обладает конечным интегралом от квадрата ψ . Поэтому можно думать, что оно вовсе не принадлежит спектру. Однако, если мы составим так называемый „собственный дифференциал“

$$\int_E^{E+\Delta} \psi(x_1, x_2, \dots, x_f; E) dE = \psi(x_1, x_2, \dots, x_f; E, E + \Delta), \quad (4.E.3)$$

это решение становится квадратично интегрируемым, так что может быть нормировано. Это не имело бы места, если E в действительности не принадлежало бы к спектру. Собственный дифференциал (4.E.3) принадлежит интервалу между E и $E + \Delta$. Это показывает, что непрерывный спектр состоит не из точек, а из непрерывных областей. Решения $\psi(x_1, x_2, \dots, x_f, E)$ уравнения для собственных значений называются собственными функциями непрерывного спектра, хотя они и не могут быть нормированы. Они зависят от собственного значения E непрерывным образом; мы обычно вводим E как переменную, а не как индекс для различения разных собственных функций непрерывного спектра. Если непрерывный спектр разделить на определенные малые области длины Δ , то для каждой из них можно определить собственный дифференциал, который (после нормировки) предполагает свойства, все более и более сходные со свойствами собственных функций дискретного спектра, коль скоро Δ становится все меньше и меньше.

Собственные функции, принадлежащие различным собственным значениям дискретного спектра, ортогональны друг другу. Для доказательства заметим, что из $H\psi_E = E\psi_E$ следует, что

$$(\psi_F, H\psi_E) = (\psi_F, E\psi_E), \quad (H\psi_F, \psi_E) = E(\psi_F, \psi_E).$$

Аналогично, из $H\psi_F = F\psi_F$ с учетом вещественности собственных значений имеем

$$(H\psi_F, \psi_E) = (F\psi_F, \psi_E) = F^*(\psi_F, \psi_E) = F(\psi_F, \psi_E).$$

Вычитая, мы видим, что (ψ_E, ψ_F) должно равняться нулю при $E \neq F$. Дискретные собственные функции ортогональны также всем собственным дифференциалам, и собственные дифференциалы орто-

гональны друг другу, если только области, которым они принадлежат, не перекрываются.

Одному и тому же собственному значению, например, дискретного спектра может принадлежать более чем одна линейно независимая собственная функция. Если это имеет место, собственное значение называется „вырожденным“. Любая возможная линейная комбинация собственных функций в случае вырождения также является собственной функцией, принадлежащей тому же самому собственному значению. Из линейного набора собственных функций можно выбрать линейно независимый набор; тогда все собственные функции рассматриваемого собственного значения можно выразить в виде линейных комбинаций собственных функций этого линейно независимого набора. Этот набор можно ортогонализировать, например, с помощью метода Шмидта. Разумеется, процесс выбора остается произвольным; ясно, что метод Шмидта может дать много различных ортогональных систем в зависимости от порядка, в котором берутся собственные функции. Однако в настоящий момент это для нас не существенно.

В дальнейшем мы всегда будем предполагать, что из вырожденных собственных функций каким-либо образом выбран некоторый ортогональный набор. Тогда все собственные функции и собственные дифференциалы образуют *ортогональную систему*. Если ψ и ψ' являются двумя различными произвольными функциями этой системы, то

$$(\psi, \psi') = 0 \quad (4.12)$$

и

$$(\psi, \psi) = 1. \quad (4.12a)$$

Эта ортогональная система является также полной, если только непрерывный спектр разделен на достаточно тонкие участки (т. е. Δ достаточно мало). Другими словами, каждую функцию $\varphi(x_1, \dots, x_f)$, для которой сходится интеграл (φ, φ) , можно разложить в ряд

$$\varphi = \sum_{\alpha} g_{\alpha} \psi_{\alpha} + \sum_E g(E, \Delta) \psi(E, E + \Delta), \quad (4.13)$$

где индекс α пробегает все дискретные собственные значения, и E пробегает значение от нижней границы по всем собственным дифференциалам. Это разложение в ряд справедливо, в действительности, только для бесконечно малых Δ ; поэтому вторая сумма должна быть заменена интегралом

$$\varphi = \sum_{\alpha} g_{\alpha} \psi_{\alpha} + \int g(E) \psi(E) dE, \quad (4.13a)$$

где интегрирование производится по всей области непрерывного спектра. Если собственному значению непрерывного спектра принадлежат несколько линейно независимых собственных функций, то в (4.13а) будет несколько интегралов или даже — если число этих собственных функций бесконечно — один или более двойных или многократных интегралов. С другой стороны, если в рассматриваемой задаче нет непрерывного спектра, второй член в (4.13) и интеграл в (4.13а) опускаются. Составляя скалярное произведение функции ψ_x с (4.13), находим, что коэффициент g_x дается выражением

$$(\psi_x, \varphi) = g_x. \quad (4.14)$$

Аналогичным образом,

$$(\psi(E, E + \Delta), \varphi) = g(E, \Delta). \quad (4.14a)$$

В формальных расчетах непрерывный спектр часто опускается, и вычисления производятся так, как если бы существовал только дискретный спектр. Ясно, к какому изменению приводит существование непрерывного спектра: к суммам добавляются члены с интегралами.

Изложение в этой главе — особенно для случая непрерывного спектра — не является строгим. Строгая теория собственных значений для произвольных эрмитовых операторов была создана¹⁾ незадолго до написания первого (немецкого) издания настоящей книги. Мы резюмировали здесь лишь некоторую часть ее результатов. Строгая теория весьма сложна. Однако она может быть использована почти без изменений в изложенной здесь форме²⁾.

¹⁾ J. V. Neumann, Math. Ann., 102, 49 (1924).

²⁾ Теория спектрального разложения эрмитовых (точнее, „самосопряженных“) операторов дана в книге: M. H. Stone, Linear Transformations in Hilbert Space, New York, 1932. Несколько более краткое изложение содержится в книге: F. Riesz, B. Sz-Nagy, Functional Analysis, New York, 1955.

ТЕОРИЯ ВОЗМУЩЕНИЙ

1. Часто случается, что собственные значения и собственные функции определенной задачи известны, и нужно найти собственные значения и функции для близкой задачи, оператор энергии которой относительно мало, „возмущением“, отличается от оператора энергии решенной задачи. Теория возмущений имеет дело с методами решения задач такого рода. Один вариант теории возмущений был развит в матричной теории Борном, Гейзенбергом и Йорданом; в дальнейшем изложении мы, однако, будем следовать методу Релея — Шредингера.

Будем вести вычисления, как если бы система не имела непрерывного спектра, и примем, что возмущенная система также имеет лишь чисто точечный спектр. Некоторые осложнения, вызываемые наличием непрерывного спектра, будут обсуждаться в конце главы; сначала же теория излагается в простейшей форме.

Рассмотрим эрмитов оператор H с собственными значениями E_1, E_2, \dots и собственными функциями ψ_1, ψ_2, \dots :

$$H\psi_k = E_k\psi_k. \quad (5.1)$$

Требуется определить собственные значения F и собственные функции φ оператора $H + \lambda V$, где V также эрмитов и λ — малое число:

$$(H + \lambda V)\varphi_k = F_k\varphi_k. \quad (5.2)$$

Прежде всего разложим F и φ в степенной ряд по λ , ограничиваясь лишь членами не выше второй степени по λ :

$$F_k = E_k + \lambda E'_k + \lambda^2 E''_k + \dots, \quad (5.3a)$$

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \psi'_k + \lambda^2 \psi''_k + \dots = \psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l + \lambda^2 \sum_l b_{kl} \psi_l + \dots \quad (5.3b)$$

В (5.3a) и (5.3b) предполагается, что F_k и φ_k переходят в E_k и ψ_k при $\lambda = 0$; аналогично, ψ'_k и ψ''_k разлагаются в ряд по функциям ψ (как это обсуждалось в предыдущей главе) с коэффициентами a_{kl} и b_{kl} .

Подставим (5.3а) и (5.3б) в (5.2) и получим

$$\begin{aligned} \mathbf{H} \left[\psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l + \lambda^2 \sum_l b_{kl} \psi_l \right] + \lambda \mathbf{V} \left[\psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l \right] = \\ = (E_k + \lambda E'_k + \lambda^2 E''_k) \left(\psi_k + \lambda \sum_l a_{kl} \psi_l + \lambda^2 \sum_l b_{kl} \psi_l \right). \end{aligned} \quad (5.4)$$

Коэффициенты при одинаковых степенях λ в обеих частях (5.4) должны быть равны. Члены, не содержащие λ , сокращаются в силу (5.1). Равенство коэффициентов при λ и λ^2 дает

$$\sum_l a_{kl} E_l \psi_l + \mathbf{V} \psi_l = E'_k \psi_k + E_k \sum_l a_{kl} \psi_l, \quad (5.5а)$$

$$\sum_l b_{kl} E_l \psi_l + \sum_l a_{kl} \mathbf{V} \psi_l = E''_k \psi_k + E'_k \sum_l a_{kl} \psi_l + E_k \sum_l b_{kl} \psi_l. \quad (5.5б)$$

Соотношение (5.5а) позволяет найти E'_k и a_{kl} при $l \neq k$. Составляя скалярное произведение с ψ_k или ψ_l и используя соотношение ортогональности, получаем

$$a_{kk} E_k + (\psi_k, \mathbf{V} \psi_k) = E'_k + a_{kk} E_k, \quad (5.6)$$

$$a_{kl} E_l + (\psi_l, \mathbf{V} \psi_k) = E_k a_{kl} \quad (l \neq k). \quad (5.7)$$

Если здесь ввести сокращенное обозначение

$$V_{\alpha\beta} = (\psi_\alpha, \mathbf{V} \psi_\beta) = (\mathbf{V} \psi_\alpha, \psi_\beta) = (\psi_\beta, \mathbf{V} \psi_\alpha)^* = V_{\beta\alpha}^* \quad (5.8)$$

($V_{\alpha\beta}$ называется *матричным элементом* оператора \mathbf{V}), решения принимают вид

$$E'_k = (\psi_k, \mathbf{V} \psi_k) = V_{kk}, \quad (5.6а)$$

$$a_{kl} = \frac{(\psi_l, \mathbf{V} \psi_k)}{E_k - E_l} = \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \quad (l \neq k). \quad (5.7а)$$

Аналогично, умножая на ψ_k^* и интегрируя по всему конфигурационному пространству, из (5.5б) получаем

$$b_{kk} E_k + \sum_l a_{kl} (\psi_k, \mathbf{V} \psi_l) = E''_k + E'_k a_{kk} + E_k b_{kk}. \quad (5.9)$$

Разобьем сумму по l в левой части равенства (5.9) на две части, выписывая член с $l = k$ отдельно. Тогда можно подставить значение для E'_k из (5.6а) и значение для a_{kl} из (5.7а); в результате получим

$$E''_k = \sum_{l \neq k} \frac{(\psi_l, \mathbf{V} \psi_k) (\psi_k, \mathbf{V} \psi_l)}{E_k - E_l} = \sum_{l \neq k} \frac{|V_{lk}|^2}{E_k - E_l}.$$

Это дает новое собственное значение F_k с учетом членов порядка λ^2 :

$$F_k = E_k + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} \frac{|V_{lk}|^2}{E_k - E_l}. \quad (5.10)$$

Новая собственная функция φ_k дается выражением

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \psi_l + \lambda a_{kk} \psi_k,$$

учитывающим члены порядка λ . Заметим, что a_{kk} всегда выпадало из предыдущих уравнений. Это соответствует тому обстоятельству, что нормировочная константа функции φ_k не определена. Если положить $(\varphi_k, \varphi_k) = 1$, то найдем, что $a_{kk} = 0$, и собственная функция

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \psi_l \quad (5.11)$$

нормирована в пренебрежении членами порядка λ^2 .

Следует заметить, что при совпадении собственных значений E_k и E_l двух собственных функций ψ_l и ψ_k исходной задачи в суммах (5.10) и (5.11) могут появляться бесконечно большие члены. Вскоре мы увидим, что такие члены могут быть исключены, так что их появление не представляет серьезной трудности. После того как это сделано, появляющиеся в формулах суммирования могут быть выполнены в большинстве встречающихся на практике случаев.

Однако еще ничего не было сказано о сходимости всего метода в целом, т. е. рядов (5.3а) и (5.3б). Они вполне могут расходиться; во многих примерах уже один только третий член оказывается бесконечно большим! Кроме того, известно, что дискретное собственное значение, особенно, если оно перекрывается непрерывным спектром в исходной задаче, может „размыться“ под действием возмущения, т. е. полностью перейти в непрерывный спектр.

Тем не менее, функция (5.11) сохраняет вполне определенное значение: она описывает состояние, которое при малых λ , если и не абсолютно стационарно, то почти обладает этим свойством, распадаясь лишь после очень большого промежутка времени. Собственное значение F_k в (5.10) дает приближенную энергию, а после деления на \hbar — приближенную частоту для этого состояния. Если величина

$$a = (H + \lambda V - F_k) \varphi_k$$

образована с помощью (5.10) и (5.11), она оказывается величиной второго порядка по λ . Таким образом, если принимается, что волновая функция $\varphi(t)$ системы совпадает с φ_k при $t = 0$ [$\varphi(0) = \varphi_k$], то можно написать

$$\varphi(t) = \varphi_k \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right) + \chi(t). \quad (5.12)$$

Подставляя эту функцию в зависящее от времени уравнение Шредингера

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} &= F_k \varphi_k \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right) + i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = (H + \lambda V) \varphi(t) = \\ &= F_k \varphi_k \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right) + a \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right) + (H + \lambda V) \chi, \end{aligned}$$

получаем

$$i\hbar \frac{\partial \chi}{\partial t} = a \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right) + (H + \lambda V) \chi, \quad (5.13)$$

откуда можно вычислить $(\partial/\partial t)(\chi, \chi)$:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\chi, \chi) = -\frac{i}{\hbar} \left[\exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right) (\chi, a) - \exp\left(+i \frac{F_k}{\hbar} t\right) (a, \chi) \right].$$

Используя *неравенство Шварца* $|(\chi, a)|^2 \leq (\chi, \chi) \cdot (a, a)$, можно найти верхнюю границу этой производной по времени:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\chi, \chi) \leq \frac{2}{\hbar} \sqrt{(\chi, \chi)(a, a)},$$

или, поскольку a не зависит от времени,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sqrt{(\chi, \chi)} &\leq \frac{1}{\hbar} \sqrt{(a, a)}, \\ \sqrt{(\chi, \chi)} &\leq \frac{t}{\hbar} \sqrt{(a, a)} + c. \end{aligned} \quad (5.14)$$

Мы предположили, что $\chi = 0$ при $t = 0$; поэтому постоянная c также равна нулю. Тогда

$$(\chi, \chi) \leq (a, a) \frac{t^2}{\hbar^2}.$$

Это значит, что разница между $\varphi(t)$ и $\varphi_k \exp\left(-i \frac{F_k}{\hbar} t\right)$ всегда мала для t , малых по сравнению с $\hbar/\sqrt{(a, a)}$. Поскольку (a, a) пропорционально λ^4 , функция φ_k ведет себя как истинная собственная функция в течение сравнительно большого промежутка времени, если только λ мало.

2. Как мы уже упоминали, данное здесь изложение необходимо видоизменить, когда в исходной задаче имеет место вырождение, т. е. когда несколько линейно независимых собственных функций принадлежат одному и тому же собственному значению. Суммирование в (5.10) и (5.11) производится по *всем собственным функциям*, включая каждую собственную функцию, собственное значение которой E_l равно E_k . Поэтому эта сумма может быть составлена только в том случае, если $(\psi_l, \mathbf{V}\psi_k)$ обращается в нуль для всех собственных функций ψ_l с собственным значением $E_l = E_k$.

Тогда уравнение, определяющее $\alpha_{\mu\mu'}$, имеет вид

$$\sum_{\mu'} v_{\nu\mu'} \alpha_{\mu\mu'} = \alpha_{\mu\nu} v'_{\mu}, \quad (5.18)$$

где числа v'_{μ} являются собственными значениями матрицы v .

Мы снова будем вычислять собственные значения с учетом членов $\sim \lambda^2$, а собственные функции — с учетом членов $\sim \lambda$. На основании предшествующего абзаца предположим, что собственные функции $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \dots, \psi_{ks}$, принадлежащие собственному значению E , сдвиг которого мы хотим вычислить, таковы, что

$$(\psi_{k\nu}, \mathbf{V}\psi_{k\mu}) = V_{k\nu; k\mu} = V_{k\nu; k\nu} \delta_{\nu\mu} = v'_{\nu} \delta_{\nu\mu}. \quad (5.19)$$

Иными словами, с самого начала будем пользоваться функциями ψ' . Остальные собственные функции не нуждаются в двойных индексах: ψ_l принадлежит значению E_l , но не все E_l обязательно различны. Обозначим собственное значение оператора $\mathbf{H} + \lambda\mathbf{V}$, которому принадлежит собственная функция $\varphi_{k\nu}$, через $F_{k\nu}$; это обозначение будет указывать на то обстоятельство, что s -кратно вырожденное собственное значение¹⁾ E_k расщепляется в общем случае на s новых собственных значений.

Пусть

$$F_{k\nu} = E_k + \lambda E'_{k\nu} + \lambda^2 E''_{k\nu} + \dots \quad (5.20)$$

и

$$\begin{aligned} \varphi_{k\nu} = & \psi_{k\nu} + \lambda \sum_{\mu=1}^s \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \lambda \sum_{l \neq k} a_{k\nu; l} \psi_l + \\ & + \lambda^2 \sum_{\mu=1}^s \gamma_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} b_{k\nu; l} \psi_l. \end{aligned} \quad (5.20a)$$

Если выражения (5.20) и (5.20a) подставить в уравнение

$$(\mathbf{H} + \lambda\mathbf{V}) \varphi_{k\nu} = F_{k\nu} \varphi_{k\nu}$$

и опять приравнять коэффициенты при одинаковых степенях λ , то члены нулевого порядка обратятся в нуль, а члены порядка λ и λ^2 дадут

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} E_k \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_l a_{k\nu; l} \psi_l + \mathbf{V} \psi_{k\nu} = \\ = \sum_{\mu} E_k \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_l a_{k\nu; l} \psi_l + E'_{k\nu} \psi_{k\nu} \end{aligned} \quad (5.21)$$

¹⁾ Это собственное значение называется так потому, что ему принадлежат s линейно независимых собственных функций.

и

$$\begin{aligned} & \sum_{\mu} E_k \gamma_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_l b_{k\nu; l} \psi_l + \sum_{\mu} \beta_{k\nu; k\mu} V \psi_{k\mu} + \\ & + \sum_{l \neq k} a_{k\nu; l} V \psi_l = \sum_{\mu} E_k \gamma_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E_k b_{k\nu; l} \psi_l + \\ & + \sum_{\mu} E'_{k\nu} \beta_{k\nu; k\mu} \psi_{k\mu} + \sum_{l \neq k} E'_{k\nu} a_{k\nu; l} \psi_l + E''_{k\nu} \psi_{k\nu}. \end{aligned} \quad (5.21a)$$

Из этих уравнений неизвестные $E'_{k\nu}$, $E''_{k\nu}$, $a_{k\nu; l}$ и $\beta_{k\nu; k\mu}$ могут быть определены точно так же, как и в случае отсутствия вырождения. Для энергии $F_{k\nu}$ получаем

$$F_{k\nu} = E_k + \lambda V_{k\nu; k\nu} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} \frac{|V_{l; k\nu}|^2}{E_k - E_l}, \quad (5.22)$$

а соответствующая собственная функция равняется

$$\begin{aligned} \varphi_{k\nu} = & \psi_{k\nu} + \lambda \sum_{\mu \neq \nu} \sum_{l \neq k} \frac{V_{k\mu; l} V_{l; k\nu}}{(E_k - E_l)(V_{k\nu; k\nu} - V_{k\mu; k\mu})} \psi_{k\mu} + \\ & + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{l; k\nu}}{E_k - E_l} \psi_l. \end{aligned} \quad (5.23)$$

В этих выражениях использован тот факт, что функции ψ_{k1} , ψ_{k2} , ..., ψ_{ks} уже выбраны так, что $V_{k\nu; k\mu} = 0$ при $\nu \neq \mu$.

Если все $V_{k\nu; k\nu} = \sigma'_\nu$ при $\nu = 1, 2, \dots, s$ различны, то собственное значение E_k расщепляется в первом приближении на s новых собственных значений. Тогда все функции $\varphi_{k\nu}$ могут быть построены сразу, поскольку в (5.23) нет обращающихся в нуль знаменателей.

Однако, если некоторые из собственных значений матрицы \mathbf{v} , например $\sigma'_\nu = V_{k\nu; k\nu}$, равны, возмущенные собственные значения по-прежнему вырождены в первом порядке по λ . Соответствующие функции нулевого приближения $\psi_{k\nu}$ должны быть подвергнуты еще одному унитарному преобразованию. Чтобы получить $\varphi_{k\mu}$ с учетом членов первого порядка по λ , эти функции следует выбрать так, чтобы эрмитова матрица

$$\omega_{\mu\nu} = \sum_{l \neq k} \frac{V_{k\mu; l} V_{l; k\nu}}{E_k - E_l} \quad (5.24)$$

стала диагональной. Тогда члены с нулевыми знаменателями в (5.23) исчезают, и суммирование может быть выполнено. Все это происходит автоматически, если правильные собственные функции первого приближения (5.15) известны из других соображений и используются с самого начала.

С точностью до этого видоизменения метод теории возмущений, следовательно, по-прежнему применим, когда несколько собственных функций (хотя и не в бесконечном числе) соответствуют одному и тому же дискретному собственному значению. Эта ситуация будет предметом нашего исследования в значительной части дальнейшего изложения, и результаты, полученные в этой главе, составляют основу большинства квантовомеханических расчетов. Действительно, такие расчеты часто ограничены линейным членом в (5.22), т. е. членом, включающим V_{kv} ; $k_v = v'$. Этот член можно вычислять путем решения секулярного уравнения (5.18) или, более прямым путем, с помощью простой квадратуры, если только известна „правильная линейная комбинация“, для которой справедливы соотношения

$$v_{\nu\mu} = (\psi_{k\nu}, \mathbf{V}\psi_{k\mu}) = 0 \quad (\nu \neq \mu)$$

и

$$w_{\nu\nu'} = 0 \quad (\nu \neq \nu' \text{ и } v'_\nu = v'_\nu).$$

Эту „правильную линейную комбинацию“ можно часто определять непосредственно из теоретико-групповых соображений без решения секулярного уравнения. Такие определения являются одним из важных приложений теории групп к квантовомеханическим задачам.

ТЕОРИЯ ПРЕОБРАЗОВАНИЙ И ОСНОВАНИЯ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ИНТЕРПРЕТАЦИИ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

1. На ранней стадии развития квантовой механики основное внимание было уделено определению уровней энергии, вероятностей спонтанных переходов и т. д.; затем все большее внимание стало уделяться принципиальным вопросам и отысканию физического истолкования матриц, операторов и собственных функций. Такое истолкование дается *статистической интерпретацией квантовой механики*, в развитии которой существенную роль сыграли Борн, Дирак, Гейзенберг, Йордан и Паули.

В то время как в классической механике для описания системы с f степенями свободы необходимо $2f$ чисел (f пространственных координат и f импульсных координат), квантовая механика описывает состояние такой системы нормированной волновой функцией $\varphi(x_1, \dots, x_f)$ [$(\varphi, \varphi) = 1$], аргументами которой являются пространственные координаты. Точно так же, как классическая теория определяет состояние $2f$ произвольными числами, квантовая теория определяет состояние волновой функцией, удовлетворяющей одному ограничению:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \dots \int_{-\infty}^{\infty} |\varphi(x_1, x_2, \dots, x_f)|^2 dx_1 \dots dx_f = 1.$$

Это состояние может быть собственной функцией уравнения Шредингера или линейной комбинацией таких собственных функций. Таким образом, множество состояний гораздо обширнее в квантовой механике, чем в классической теории.

Эволюция системы во времени определяется в классической механике уравнениями движения Ньютона, а в квантовой механике — зависящим от времени уравнением Шредингера

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi, \quad (6.1)$$

где H — гамильтониан. В простейшем случае H имеет вид

$$H = - \sum_{k=1}^f \frac{\hbar^2}{2m_k} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + V(x_1, \dots, x_f). \quad (6.2)$$

Разумеется, точное определение оператора \mathbf{H} является наиболее важной задачей квантовой механики.

В классической механике $2f$ чисел, служащих для описания состояния, непосредственно дают координаты и скорости отдельных частиц, посредством которых можно без труда вычислить произвольные функции этих величин. В квантовой механике вопрос о положении частицы в общем случае не имеет смысла. Можно лишь говорить о вероятности, с которой частица может быть найдена в определенном месте. То же самое относится к импульсу и к функциям этих величин, как, например, энергии.

Всем величинам, имеющим физический смысл, соответствуют квантовомеханические эрмитовы операторы. Так, например, оператором, соответствующим координате x_k , является „умножение на x_k “, оператором импульса является $-i\hbar(\partial/\partial x_k)$, оператором энергии, согласно (6.2), является \mathbf{H} и т. д. Последний оператор играет особую роль, поскольку он входит в зависящее от времени уравнение Шредингера.

В общем случае эти операторы получаются путем замены в классическом выражении физической величины, как функции координат и импульсов, пространственных координат x_k оператором „умножения на x_k “, а импульсных координат p_k оператором $-i\hbar(\partial/\partial x_k)$. Например, энергия классического гармонического осциллятора равна

$$\frac{1}{2m}(p_1^2 + p_2^2 + p_3^2) + \frac{K}{2}(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2).$$

В квантовой механике она заменяется оператором

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial x_3^2}\right) + \frac{K}{2}(x_1 \cdot x_1 + x_2 \cdot x_2 + x_3 \cdot x_3).$$

Этот оператор имеет как раз вид (6.2).

Измерение некоторой величины (координаты, энергии) может в общем случае дать только такое значение, которое является собственным значением соответствующего оператора. Так, например, возможными уровнями энергии являются собственные значения оператора \mathbf{H} . Какова вероятность того, что величина, представляемая оператором \mathbf{G} , имеет значение λ_k , если система находится в состоянии $\varphi(x_1, \dots, x_f)$? Эта вероятность равна нулю, если λ_k не является собственным значением оператора \mathbf{G} ; с другой стороны, если λ_k есть собственное значение и если ψ_k есть соответствующая нормированная собственная функция, то

$$|(\varphi, \psi_k)|^2 = |(\psi_k, \varphi)|^2 \quad (6.3)$$

дает искомую вероятность.

Согласно статистической интерпретации, могут быть вычислены только вероятности возможных исходов измерений; результат изме-

рения или опыта в общем случае не может быть предсказан с достоверностью.

Если φ разложена по полной ортогональной системе собственных функций оператора \mathbf{G} , т. е.

$$\varphi = a_1\psi_1 + a_2\psi_2 + \dots, \quad (6.4)$$

и если

$$\mathbf{G}\psi_k = \lambda_k\psi_k, \quad (6.4a)$$

то (6.3) показывает, что вероятность того, что в результате измерения будет получено значение λ_k , равна как раз квадрату абсолютного значения $|a_k|^2$ величины

$$(\psi_k, \varphi) = a_k. \quad (6.5)$$

Конечно, сумма вероятностей всех возможных значений $\lambda_1, \lambda_2, \dots$, должна быть равна единице. Это значит, что

$$|a_1|^2 + |a_2|^2 + \dots = 1.$$

То, что это действительно имеет место, следует из нормировки функции φ :

$$\begin{aligned} (\varphi, \varphi) &= \left(\sum_k a_k \psi_k, \sum_l a_l \psi_l \right) = \sum_{k,l} a_k^* a_l (\psi_k, \psi_l) = \\ &= \sum_{k,l} a_k^* a_l \delta_{kl} = \sum_k |a_k|^2 = 1. \end{aligned}$$

Волновая функция $c\varphi$ ($|c| = 1$) соответствует тому же состоянию, что и волновая функция φ ; поэтому *волновая функция определяется физическим состоянием только с точностью до множителя с модулем единица*. Все вероятности, вычисленные с помощью волновой функции φ , совпадают с вероятностями, найденными с помощью волновой функции $c\varphi$, как это непосредственно видно из соотношений

$$|(\psi_k, c\varphi)|^2 = |c(\psi_k, \varphi)|^2 = |c|^2 |(\psi_k, \varphi)|^2 = |(\psi_k, \varphi)|^2.$$

Поскольку эти вероятности являются единственными физически реальными характеристиками состояния, то состояния, описываемые этими двумя волновыми функциями, с физической точки зрения совпадают.

Если одному и тому же собственному значению λ_k принадлежат несколько линейно независимых собственных функций $\psi_{k1}, \psi_{k2}, \psi_{k3}, \dots$ (которые предполагаются взаимно ортогональными), то вероятность для λ_k равна сумме квадратов коэффициентов разложения:

$$|(\psi_{k1}, \varphi)|^2 + |(\psi_{k2}, \varphi)|^2 + |(\psi_{k3}, \varphi)|^2 + \dots$$

Предшествующее обсуждение относится только к вероятностям дискретных собственных значений. Вероятность вполне определенного собственного значения непрерывного спектра всегда равна нулю, поскольку в непрерывном спектре только конечные области могут иметь конечные вероятности. Если рассматриваемая область достаточно мала, эта вероятность равна квадрату абсолютной величины коэффициента разложения нормированного собственного дифференциала, принадлежащего к этой области.

2. Только в одном случае выражение для вероятности, вычисленное с помощью квантовой механики, вырождается во вполне определенное утверждение; это тот случай, когда волновая функция состояния φ является собственной функцией оператора \mathbf{G} , соответствующего измеряемой физической величине, так что $\mathbf{G}\varphi = \lambda_k\varphi$. Тогда φ ортогональна всем собственным функциям оператора \mathbf{G} , не принадлежащим λ_k , и вероятность этих собственных значений равна нулю. Поэтому вероятность для λ_k равна 1. В этом случае измерение дает значение λ_k с достоверностью.

Если в результате измерения некоторой величины мы нашли, что она имеет определенное значение, мы должны получить то же самое значение при достаточно быстром повторении измерения. В противном случае утверждение, которое делается на основании измерения, что рассматриваемая величина имеет то или иное значение, не имело бы смысла. Вероятность при повторном измерении, а также *волновая функция*, существующая только для вычисления вероятностей, *меняются в течение измерения*¹⁾. В самом деле, волновая функция после измерения, давшего собственное значение λ_k для \mathbf{G} , должна быть собственной функцией оператора \mathbf{G} , принадлежащей к λ_k . Только в этом случае повторное измерение \mathbf{G} даст наверняка снова значение λ_k . При измерении величины, изображаемой оператором \mathbf{G} , волновая функция возмущается и переходит в некоторую собственную функцию оператора \mathbf{G} , в частности в ψ_k , если измерение имело результатом λ_k .

В общем случае невозможно предсказать с достоверностью, какой именно собственной функцией оператора \mathbf{G} станет волновая функция состояния системы; квантовая механика дает лишь вероятность $|\langle\psi_k, \varphi\rangle|^2$ для определенной собственной функции ψ_k и собственного значения λ_k . Так как вероятность перехода волновой функции φ в ψ_k при измерении величины \mathbf{G} может быть вычислена с помощью двух волновых функций φ и ψ_k выражением $|\langle\psi_k, \varphi\rangle|^2$,

¹⁾ Таким образом, волновая функция меняется двояким, существенно различным образом. Во-первых, она непрерывно меняется со временем, согласно дифференциальному уравнению (6.1), и, во-вторых, — скачком во время измерений, производимых над системой в определенные моменты времени, согласно законам теории вероятностей (см. последующее обсуждение).

эту величину называют вероятностью перехода из состояния φ в состояние ψ_k . Если известна вероятность перехода волновой функции во всякую функцию, то тем самым задана вероятность всех мыслимых опытов.

С точки зрения вышеизложенного особенно важно заметить, что вероятность перехода имеет физический смысл и поэтому должна иметь одно и то же значение при двух эквивалентных описаниях одной и той же системы.

3. *Переход к новой „системе координат“.* Пусть $G, G', G'' \dots$ — операторы, соответствующие различным физическим величинам, как энергии, импульсу, координате и т. д., а $\varphi_1, \varphi_2, \dots$ — волновые функции различных состояний. Тогда те же самые результаты, которые получаются с помощью этой системы операторов и волновых функций, можно получить с помощью системы операторов

$$\bar{G} = UGU^{-1}, \quad \bar{G}' = UG'U^{-1}, \quad \bar{G}'' = UG''U^{-1}, \dots$$

и волновых функций

$$\bar{\varphi}_1 = U\varphi_1, \quad \bar{\varphi}_2 = U\varphi_2, \quad \bar{\varphi}_3 = U\varphi_3, \dots$$

где U — произвольный унитарный¹⁾ оператор. Прежде всего, собственные значения, определяющие возможные результаты измерений величин G и $\bar{G} = UGU^{-1}$, совпадают, так как собственные значения не меняются при преобразовании подобия. Если λ_k есть некоторое собственное значение оператора G , а ψ_k — соответствующая собственная функция, то λ_k также является собственным значением оператора $\bar{G} = UGU^{-1}$, а соответствующая собственная функция равна $U\psi_k$. Чтобы показать это, заметим, что из $G\psi_k = \lambda_k\psi_k$ следует, что

$$\bar{G}U\psi_k = UGU^{-1}U\psi_k = UG\psi_k = U\lambda_k\psi_k = \lambda_k U\psi_k.$$

Кроме того, вероятности этого собственного значения λ_k для величины, соответствующей оператору G в первой „системе координат“ и оператору \bar{G} — во второй, равны для этих двух случаев. В первом случае эта вероятность равна

$$|(\psi_k, \varphi)|^2.$$

¹⁾ Унитарность оператора U определяется аналогично определению эрмитовости: требуется, чтобы для двух произвольных функций f и g

$$(f, g) = (Uf, Ug).$$

Если f и g являются векторами, то U есть матрица, и определение сводится к обычному (необходимому и достаточному) условию унитарности.

Во втором случае φ заменяется на $U\varphi$, а ψ_k — на собственную функцию оператора \bar{G} , соответствующую λ_k , т. е. функцию $U\psi_k$. Таким образом, для вероятности во второй „системе координат“ получаем

$$|(U\psi_k, U\varphi)|^2,$$

что совпадает с выражением, полученным выше, в силу унитарности оператора U . Аналогично, вероятности перехода между парами соответствующих состояний φ_1, φ_2 и $U\varphi_1, U\varphi_2$ также одинаковы в двух системах координат, так как из равенства

$$(U\varphi_1, U\varphi_2) = (\varphi_1, \varphi_2)$$

следует

$$|(U\varphi_1, U\varphi_2)|^2 = |(\varphi_1, \varphi_2)|^2.$$

Такой переход к другой системе координат путем преобразования подобия для операторов и одновременной замены волновой функции φ на $U\varphi$ называется *каноническим преобразованием*. Два описания, получающиеся одно из другого каноническим преобразованием, эквивалентны. Наоборот, в гл. 20 будет показано, что два квантовомеханических описания, которые эквивалентны друг другу, могут быть преобразованы друг в друга с помощью канонического преобразования (кроме случая, когда имеет место обращение времени, обсуждаемое в гл. 26).

4. Применение теории преобразований и статистической интерпретации мы проследим на одном примере. Возьмем для этой цели доказательство Шредингером физического значения квадрата абсолютной величины матричного элемента

$$(x_1 + x_2 + \dots + x_N)_{FE} = (\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N)\psi_E) = X_{FE}, \quad (6.6)$$

где $N = f/3$ — число электронов, а x_1, x_2, \dots, x_N — их x -координаты. Согласно матричной теории, этот матричный элемент определяет вероятность перехода, вызванного излучением, поляризованным вдоль оси x , из стационарного состояния ψ_E в стационарное состояние ψ_F . Индексы E и F обозначают энергии этих двух стационарных состояний:

$$H\psi_E = E\psi_E, \quad H\psi_F = F\psi_F. \quad (6.7)$$

Понятие о переходах, вызванных излучением, не имеет ничего общего с переходами, вызванными измерением и обсуждавшимися выше. Последние возникают в силу логической структуры статистической интерпретации и приводят к несколько парадоксально звучащей вероятности существования состояния φ' , если состояние системы есть φ . Она является безразмерной величиной. Излагаемые

здесь соображения дадут вероятность того, что в течение последующей секунды атом претерпит переход из состояния ψ_E в состояние ψ_F путем поглощения светового кванта с энергией $\hbar\omega = F - E$. Эта вероятность имеет размерность, обратную времени, и имеет смысл только для переходов между двумя стационарными состояниями (собственными функциями гамильтониана H), в то время как первая была определена для произвольных состояний φ и φ' . Поскольку вероятность индуцированного перехода относится к процессу, развивающемуся во времени, она должна подчиняться зависящему от времени уравнению Шредингера.

В действительности, последнее утверждение не вполне справедливо, так как зависящее от времени уравнение Шредингера не может объяснить спонтанного излучения. Согласно этому уравнению, атомы стабильны в течение сколь угодно долгого времени даже в возбужденных состояниях (таких, как ψ_F), потому что $\varphi = \psi_F \exp[-i(F/\hbar)t]$ является решением уравнения (6.1). Тем не менее уравнение Шредингера охватывает процесс поглощения (так же как и индуцированное излучение), так что мы должны получать правильные результаты, коль скоро спонтанное излучение не играет существенной роли, т. е. до тех пор, пока атом находится почти полностью в основном состоянии ψ_E . Мы увидим позднее, что то же предположение понадобится для завершения вычислений; оно справедливо, если атом первоначально находился в наимизшем состоянии ψ_E , если рассмотрение ограничено сравнительно короткими промежутками времени и если интенсивность падающего света не является слишком большой (что трудно осуществимо на практике).

Рассмотрим теперь процесс поглощения. Предположим, что в момент $t = 0$ система находилась в состоянии $\varphi(0) = \psi_E$; затем состояние меняется согласно уравнению

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H\varphi = (H_0 + H_1)\varphi, \quad (6.8)$$

где член H_0 — гамильтониан в отсутствие падающего излучения, а H_1 — дополнительный оператор, включающий излучение. Излучение является просто переменным электрическим полем

$$\mathcal{E}_x = P \sin \omega t, \quad \mathcal{E}_y = 0, \quad \mathcal{E}_z = 0. \quad (6.9)$$

Зависимостью напряженности поля от координат можно пренебречь в силу того, что размеры атома малы. Таким образом, потенциальная энергия в (6.2) должна быть заменена на

$$V + H_1 = V + e(x_1 + x_2 + \dots + x_N)P \sin \omega t. \quad (6.8a)$$

Зависимость волновой функции от времени, которая имела бы вид

$$\varphi = \psi_E \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad (6.10)$$

если бы P было равно нулю, видоизменяется дополнительным потенциалом, рассматриваемым как возмущение. Уравнение для φ записывается в виде

$$i\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = H_0 \varphi + (eP \sin \omega t)(x_1 + x_2 + \dots + x_N) \varphi. \quad (6.11)$$

Чтобы решить это уравнение, разложим φ по полной системе собственных функций оператора H_0 :

$$\varphi(t) = a_E(t) \psi_E + a_F(t) \psi_F + a_G(t) \psi_G + \dots, \quad (6.12)$$

где коэффициенты a_E, a_F, a_G, \dots не зависят от координат x_1, x_2, \dots, x_N , а функции $\psi_E, \psi_F, \psi_G, \dots$ не зависят от времени. Тогда состояние может быть охарактеризовано коэффициентами разложения a_E, a_F, a_G, \dots , вместо волновой функции φ .

Квадраты модулей этих величин, $|a_E|^2, |a_F|^2, |a_G|^2, \dots$ дают вероятности различных возбужденных состояний атома. Если атом не возбужден световой волной, эти вероятности не меняются во времени, и, поскольку вначале только $|a_E|^2 = 1$ было отличным от нуля, то же самое остается справедливым и все время. С другой стороны, если световая волна падает на атом, возбуждаются также более высокие состояния. Вычислим интенсивность такого возбуждения. Для этого предположим, что при $t = 0$

$$a_E(0) = 1, \quad a_F(0) = 0, \quad a_G(0) = 0, \dots$$

и что частота света ω приближенно дается частотой, соответствующей энергии перехода,

$$F - E = \hbar \omega. \quad (6.E.1)$$

Если выражение (6.12) для φ подставить в (6.11), получим дифференциальное уравнение для временной зависимости коэффициентов a_E, a_F, a_G, \dots . Так как мы интересуемся возбуждением первого возбужденного состояния ψ_F , составим скалярное произведение этого уравнения на ψ_F ; тогда в левой части остается лишь член с a_F в силу ортогональности собственных функций оператора H_0 [см. (4.12), (4.12a)], и мы получим

$$i\hbar \frac{da_F(t)}{dt} = F a_F + (Pe \sin \omega t)(X_{FE} a_E + X_{FF} a_F + X_{FG} a_G + \dots), \quad (6.13)$$

где мы подставили (6.6):

$$(\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N) \psi_E) = X_{FE}$$

Два члена в правой части (6.13) имеют совершенно различный порядок величины. Энергия E имеет порядок величины в несколько электронвольт. С другой стороны, лишь в очень интенсивном луче монохроматического света амплитуда электрического вектора P достигает величины 10^{-2} в/см. Матричные элементы величины X равны примерно 10^{-8} см, так что $PeX \approx 10^{-10}$ в. Поэтому мы можем написать

$$a_E = \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right), \quad a_F = 0, \quad a_G = 0, \dots$$

во втором члене в правой части (6.13). Поскольку этот член уже мал, подставим в него приближенную волновую функцию (6.10). Она в свою очередь получается при полном пренебрежении возмущением в правой части уравнения (6.13). Это дает

$$i\hbar \frac{\partial a_F(t)}{\partial t} = F a_F(t) + PeX_{FE} \sin \omega t \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right). \quad (6.14)$$

Для интегрирования этого уравнения мы сделаем подстановку

$$a_F(t) = b(t) \exp\left(-i \frac{F}{\hbar} t\right).$$

Тогда

$$\begin{aligned} \exp\left(-i \frac{E}{\hbar} t\right) i\hbar \frac{\partial b(t)}{\partial t} &= \\ &= \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \exp\left[-i \left(\frac{E}{\hbar} + \omega\right) t\right] - \exp\left[-i \left(\frac{E}{\hbar} - \omega\right) t\right] \right\}, \end{aligned}$$

откуда, умножая на $\exp\left(i \frac{E}{\hbar} t\right)$ и интегрируя, получаем

$$\begin{aligned} i\hbar b(t) &= \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \frac{\exp\left[-i \left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right]}{-i \left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)} - \right. \\ &\quad \left. - \frac{\exp\left[-i \left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right]}{-i \left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)} + C \right\}. \end{aligned}$$

Постоянная интегрирования определяется условием $b(0) = 0$. Тогда выражение для $b(t)$ может быть разбито на две части:

$$\begin{aligned} b(t) &= \frac{iPe}{2} X_{FE} \left\{ \frac{\exp\left[-i \left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right] - 1}{\hbar\omega - F + E} + \right. \\ &\quad \left. + \frac{\exp\left[-i \left(-\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right) t\right] - 1}{\hbar\omega + F - E} \right\}. \quad (6.15) \end{aligned}$$

Это выражение действительно обращается в нуль при $t=0$, как и следовало ожидать; мы видим также, что $b(t)$ является суммой двух периодических функций.

Если интенсивность света P^2 будет оставаться постоянной, а частота будет меняться, то первый член суммы (6.15) становится очень большим, когда энергия $\hbar\omega$ приближенно равна $F-E$. Заметное возбуждение происходит вообще только тогда, когда это условие соблюдено. Это объясняет условие частот Бора: частота света, осуществляющего заданный переход из состояния с энергией E в состояние с энергией F , должна удовлетворять условию (6.Е.1); а именно, $\hbar\omega \approx (F-E)$.

В силу этого условия в дальнейшем можно пренебречь вторым членом выражения (6.15) по сравнению с первым. Для вероятности $|a_F(t)|^2 = |b(t)|^2$ состояния F теперь получаем

$$|b(t)|^2 = \frac{P^2 e^2}{2} |X_{FE}|^2 \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2}. \quad (6.15a)$$

5. До сих пор мы предполагали, что световая волна, падающая на атом в момент $t=0$, имеет чисто синусоидальную форму. В действительности свет состоит обычно из суперпозиции синусоидальных волн с частотами, покрывающими интервал, примерно симметричный вокруг $\omega = (F-E)/\hbar$ и со случайно распределенными фазами. Ввиду случайности фаз можно предположить, что действие этих накладывающихся друг на друга волн складывается; тогда полная вероятность того, что в момент времени t атом окажется в состоянии F , равна

$$|b(t)|^2 = \sum_{\omega} |X_{FE}|^2 \frac{P_{\omega}^2 e^2}{2} \cdot \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2}, \quad (6.16)$$

где ω пробегает все частоты падающего света, а P_{ω} — амплитуда колебания с частотой ω .

Если частоты падающего излучения плотно группируются в малой области, симметричной относительно $(F-E)/\hbar = \omega$ и ограниченной, например, частотой ω_2 сверху и ω_1 снизу, то можно написать, что $P_{\omega}^2 = 4J d\omega$, где J — интенсивность (плотность энергии) света на единичный интервал частоты $\omega/2\pi$, а $d\omega$ — бесконечно малый интервал частоты ω . Тогда (6.16) становится интегралом.

$$|b(t)|^2 = 2e^2 J |X_{FE}|^2 \int_{\omega_1}^{\omega_2} \frac{1 - \cos\left(\omega - \frac{F-E}{\hbar}\right)t}{(\hbar\omega - F + E)^2} d\omega, \quad (6.16a)$$

который после введения новой переменной интегрирования

$$x = t \left(\omega - \frac{F-E}{\hbar} \right)$$

приводится к виду

$$|b(t)|^2 = \frac{2}{\hbar^2} e^{2Jt} |X_{FE}|^2 \int_{x_1}^{x_2} \frac{1 - \cos x}{x^2} dx. \quad (6.166)$$

Тогда новые пределы интегрирования будут равны

$$x_1 = t \left(\omega_1 - \frac{F-E}{\hbar} \right), \quad x_2 = t \left(\omega_2 - \frac{F-E}{\hbar} \right). \quad (6.E.2)$$

Однако, поскольку подынтегральное выражение в (6.166) дает наибольший вклад в узкой области около $x=0$, интегрирование может быть распространено на интервал от $-\infty$ до $+\infty$. Вероятность состояния с энергией F тогда приобретает вид

$$|b(t)|^2 = \frac{2\pi e^{2Jt}}{\hbar^2} |X_{FE}|^2. \quad (6.17)$$

Распространение области интегрирования на бесконечный интервал законно только в том случае, если x_1 и x_2 велики, откуда, согласно (6.E.2), следует, что падающий свет должен покрывать область частот с обеих сторон от $\omega = (F-E)/\hbar$, большую по сравнению с $1/t$. С другой стороны, наш расчет может считаться справедливым только для времен, малых по сравнению со временем жизни τ состояния F . Это значит, что ширина линии падающего света должна быть, по предположению, велика по сравнению с „естественной шириной“ \hbar/τ .

Вероятность того, что атом окажется в состоянии с энергией F , пропорциональна, согласно (6.17), интенсивности падающего света, квадрату матричного элемента $|X_{FE}|^2$ — что подтверждает предсказание матричной механики — и длительности t световой волны, как и следовало ожидать. Замечаем снова, что (6.17) справедливо лишь для времен, коротких по сравнению со временем жизни возбужденного состояния и длинных по сравнению с величиной, обратной ширине полосы частот падающего света.

Несмотря на это и на свою приближенность, соотношение (6.17) дает прекрасное подтверждение предположения, что $|a_F|^2$ является интенсивностью возбуждения состояния с энергией F . Вместе с понятием о волновых пакетах в конфигурационном пространстве, это выражение образует исключительно сильную основу для статистической интерпретации квантовой механики. Кроме того, (6.17)

также показывает, что величина

$$|X_{FE}|^2 = |(\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_N)\psi_E)|^2$$

пропорциональна вероятности перехода, вызванного светом, поляризованным вдоль оси x , из стационарного состояния ψ_E в стационарное состояние ψ_F . Эти результаты, которые были также получены при значительно более общих предположениях, чем рассмотренных здесь, образуют основу для вычисления интенсивностей (или отношений интенсивностей) спектральных линий.

АБСТРАКТНАЯ ТЕОРИЯ ГРУПП

Возьмем шесть матриц¹⁾

$$\begin{array}{cccccc}
 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} & & \\
 \text{E} & \text{A} & \text{B} & \text{C} & & \\
 & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} & & & \\
 & \text{D} & \text{F} & & & (7.E.1)
 \end{array}$$

и образуем таблицу умножения из 36 произведений, получающихся путем умножения каждой матрицы из (7.E.1) на каждую матрицу из (7.E.1.) согласно правилам матричного умножения. При этом каждая из 36 получающихся матриц совпадает с одной из матриц (7.E.1). Такая совокупность матриц называется *группой*. Эти свойства указанных матриц можно представить в виде таблицы, *групповой таблицы*:

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

¹⁾ Мы пользуемся символом E (единица) для представления единичного элемента группы.

Первый множитель берется в первом столбце, второй — в первой строке, а произведение появляется на пересечении соответствующих столбца и строки в таблице. Эта таблица объединяет все правила умножения матриц (7.Е.1).

Дадим строгое определение группы. Группа есть некоторая совокупность объектов (элементов группы), в которой определен один вид операции, называемый умножением. Это умножение указывает для всяких двух элементов группы (множителей) третий элемент группы, произведение¹⁾. Это групповое умножение, которое является свойством, присущим элементам группы, должно также обладать следующими свойствами.

1. Должен иметь место сочетательный закон. Если $AB = F$ и $BC = G$, то $FC = AG$. Если элементы группы являются матрицами и если под групповым умножением мы понимаем матричное умножение, то сочетательный закон всегда имеет место (согласно теореме 3 гл. 1). Группы, в которых выполняется также перестановочный закон умножения, т. е. в которых $AB = BA$, называются абелевыми группами.

2. Среди элементов есть один (и только один), который называется тождественным или единичным элементом E и который обладает тем свойством, что его произведение на любой другой элемент дает именно тот другой элемент, т. е. $EA = AE = A$.

3. Каждый элемент имеет обратный. Это значит, что для каждого элемента A существует такой элемент B , что $BA = E$. Тогда можно также показать (как в теореме 5 гл. 1), что $AB = E$. Действительно, из $BA = E$ следует $BAB = B$; тогда, если C есть элемент, обратный B , получаем, что $CBAB = CB$, т. е. $AB = E$. Элемент, обратный A , обозначается через A^{-1} .

Эти три свойства элементов группы и группового умножения являются определением группы. При формулировке их в этом (или каком-либо ином) виде о них говорят как о групповых аксиомах или групповых постулатах.

Правило. Элемент, обратный произведению $ABCD\dots$, образуется путем перемножения обратных отдельным множителям в обратном порядке (как это имеет место для матриц). Таким образом,

$$(ABCD\dots)^{-1} = \dots D^{-1}C^{-1}B^{-1}A^{-1}.$$

Это равенство может быть доказано сразу, так как

$$(\dots D^{-1}C^{-1}B^{-1}A^{-1})(ABCD\dots) = E.$$

Следует заметить, что из $AX = B$ и $AU = B$ вытекает, что $X = U$, поскольку как X , так и U , очевидно, равны $A^{-1}B$. Так же

¹⁾ В дальнейшем будем иметь в виду систему матриц с n строками.

из $XA = B$ и $YA = B$ следует $X = Y = BA^{-1}$. Если группа содержит лишь конечное число h элементов, она называется конечной группой, причем h называют *порядком* группы.

Теоремы для конечных групп¹⁾

Рассмотрим некоторый элемент X . Тогда можно образовать последовательность элементов

$$E, X, X^2, X^3, X^4, X^5, \dots \quad (7.E.2)$$

и т. д. Так как все элементы (7.E.2) являются элементами группы и полное число всех элементов конечно, то один из членов последовательности должен появиться второй раз после определенного числа степеней. Пусть первый повторяющийся элемент есть $X^n = X^k$ (с $k < n$). Тогда мы должны иметь $k = 0$ и $X^n = E$; в противном случае $X^{n-1} = X^{k-1}$ уже появилось бы ранее в последовательности (7.E.2) и X не было бы первым *повторяющимся* элементом. Если n есть наименьшее число, для которого $X^n = E$, то n называется *порядком* элемента X . Последовательность

$$E, X, X^2, X^3, \dots, X^{n-1} \quad (7.E.3)$$

называется *периодом* элемента X . Например, период элемента D в группе (7.E.1) есть $E, D, D^2 = F (D^3 = FD = E)$ и порядок D таким образом есть 3. Период элемента F есть $E, F, F^2 = D (F^3 = DF = E)$ и порядок F также равен 3. С другой стороны, порядок элемента A есть 2, поскольку сразу $A^2 = E$.

Период элемента X образует группу сам по себе (причем абелеву группу). Некоторая совокупность элементов группы, сама по себе составляющая группу, называется *подгруппой*. Например, (7.E.3) является абелевой подгруппой.

Теорема 1. Если \mathcal{H} есть группа порядка h с элементами E, A_2, A_3, \dots, A_h и если A_k — произвольный элемент этой группы, то каждый элемент встречается один и только один раз в последовательности $EA_k = A_k, A_2A_k, A_3A_k, \dots, A_hA_k$. Пусть X — любой элемент и пусть $XA_k^{-1} = A_r$; тогда $A_rA_k = X$ и X встречается в последовательности. С другой стороны, X не может встретиться дважды, потому что из $A_rA_k = X$ и $A_sA_k = X$ следует $A_r = A_s$.

Разумеется, то же имеет место для последовательности $A_kE, A_kA_2, A_kA_3, \dots, A_kA_h$. Теорема 1 выражает тот факт, что

¹⁾ Все теоремы для конечных групп рекомендуется проверить на группе (7.E.1). С этой целью следует воспользоваться групповой таблицей.

в каждом столбце групповой таблицы (так же как и в каждой строке) каждый элемент встречается один и только один раз. Эта теорема имеет следующее простейшее и наиболее важное приложение. Если $J_E, J_{A_2}, J_{A_3}, \dots, J_{A_h}$ — такие числа, что каждому элементу группы X соответствует число J („ J есть функция в пространстве группы“), то

$$\sum_{v=1}^h J_{A_v} = \sum_{v=1}^h J_{A_v X} = \sum_{v=1}^h J_{X A_v}. \quad (7.1)$$

Каждая сумма, очевидно, содержит одни и те же числа, но в различном порядке.

Пусть \mathcal{F} есть подгруппа группы \mathcal{H} , включающая элементы E, B_2, B_3, \dots, B_g . Совокупность g элементов $EX, B_2X, B_3X, \dots, B_gX$ называется *правым смежным классом* $\mathcal{F}X$, если только X не встречается в подгруппе¹⁾ (поскольку, если бы X принадлежало \mathcal{F} , элементы $\mathcal{F}X$ были бы элементами \mathcal{F} , как показывает теорема 1). *Смежный класс, конечно, не является группой*, так как он не может содержать ни единичного (тождественного) элемента E , ни какого-либо другого элемента подгруппы \mathcal{F} . Предположим, например, что $B_kX = B_l$; тогда $X = B_k^{-1}B_l$, т. е. X содержалось бы в подгруппе \mathcal{F} , и $\mathcal{F}X$ совпадало бы с \mathcal{F} . Аналогичным образом, элементы $XE = X, XB_2, XB_3, \dots, XB_g$ образуют *левый смежный класс* по подгруппе \mathcal{F} .

Теорема 2. *Два правых смежных класса по подгруппе \mathcal{F} либо содержат одни и те же элементы, либо не имеют общих элементов вовсе.* Пусть один смежный класс будет $\mathcal{F}X$, а другой — $\mathcal{F}Y$. Тогда из $B_kX = B_lY$ следует $YX^{-1} = B_l^{-1}B_k$, т. е. YX^{-1} содержится в \mathcal{F} . В таком случае по теореме 1, примененной к подгруппе \mathcal{F} , последовательность $EYX^{-1}, B_2YX^{-1}, \dots, B_gYX^{-1}$ совпадает с E, B_2, B_3, \dots, B_g с точностью до порядка. Таким образом, $EYX^{-1}X, B_2YX^{-1}X, B_3YX^{-1}X, \dots, B_gYX^{-1}X$ также совпало бы с $EX, B_2X, B_3X, \dots, B_gX$ с точностью до порядка. Но первые элементы являются членами смежного класса $\mathcal{F}Y = EY, B_2Y, B_3Y, \dots, B_gY$. Таким образом, элементы $\mathcal{F}Y$ совпадают с элементами $\mathcal{F}X$, если только совпадает один элемент. *Критерием совпадения является то, чтобы YX^{-1} содержался в \mathcal{F} .*

Например, одной из подгрупп группы (7.1) является период элемента A , т. е. два элемента E и A . Правый смежный класс по этой группе получается при умножении каждого элемента на какой-либо другой элемент, например B , справа. Таким образом, мы получаем смежный

¹⁾ Разумеется, X должно быть элементом группы \mathcal{H} .

класс $EB = B$, $AB = D$. Смежные классы также получаются умножением элементов E, A на каждый из остальных элементов C, D, F . Смежный класс, получаемый при умножении E, A

- на B , есть B, D ,
- на C , есть C, F ,
- на D , есть D, B ,
- на F , есть F, C .

Так, в этом случае смежные классы, полученные путем умножения на B и D (или C и F), совпадают. Заметим также, что $BD^{-1} = BF = A$ (или $CF^{-1} = GD = A$) содержится в подгруппе E, A .

Рассмотрим теперь все различные смежные классы по подгруппе \mathcal{H} . Пусть ими будут $\mathcal{H}X_2, \mathcal{H}X_3, \dots, \mathcal{H}X_l$. Каждый элемент группы \mathcal{H} встречается либо в \mathcal{H} , либо в одном из $l-1$ смежных классов. Так мы получаем все lg элементов. Поскольку каждый элемент встречается по крайней мере один раз и ни один из них не встречается дважды, lg должно равняться h . Это приводит к теореме 3.

Теорема 3. *Порядок g подгруппы является целочисленным делителем порядка h полной группы. Отношение $h/g = l$ называется индексом подгруппы \mathcal{H} относительно группы \mathcal{H} .*

Так как период каждого элемента есть подгруппа с числом элементов, равным его порядку, то, следовательно, *порядок каждого элемента есть делитель порядка группы.*

Признак подгрупп. Если некоторая совокупность элементов группы содержит все произведения AB всех элементов A и B , содержащихся в ней, то она образует группу, и, следовательно, подгруппу исходной группы. *Сочетательный закон* умножения имеет место для всех элементов группы, а тем самым и для рассматриваемой совокупности элементов. Вместе с каждым элементом A совокупность содержит также все его степени, и, следовательно, в ней встречается и *единичный элемент E* . Наконец, если n есть порядок элемента A , то $A^n = E$ и $A^{n-1} = A^{-1}$. *Обратная величина* каждого элемента также встречается в данной совокупности. Таким образом, все три групповых постулата выполнены.

Примеры групп

1. Группа, содержащая *лишь один* элемент, состоит из одного только элемента E .

2. Группа порядка 2 имеет следующую групповую таблицу умножения:

	E	A
E	E	A
A	A	E

Эта группа является *абелевой*. Мы назовем ее группой отражения, так как она составлена из тождественного преобразования и преобразования отражения $x' = -x$.

3. Группа порядка 3 может содержать наряду с единичным элементом только элемент порядка 3, так как ее порядок должен быть целым делителем трех (отличным от 1). Она состоит из одного периода. Ее элементами являются

$$E, A, A^2 (A^3 = E).$$

Таким образом, эта группа абелева.

То же самое имеет место для всякой группы, порядок которой является простым числом p . Элементы таких групп имеют вид

$$E, A, A^2, A^3, \dots, A^{p-1}.$$

Группы такого вида называются также *циклическими группами*, даже если p не является простым числом. Если ω является n -м простым корнем из единицы, (т. е. ω^n есть наименьшая степень ω , которая равна 1, как, например, для $\omega = \cos 2\pi/n + i \sin 2\pi/n$), то числа

$$1, \omega, \omega^2, \dots, \omega^{n-1} \quad (7.E.4)$$

образуют циклическую группу порядка n , если под групповым умножением понимать обычное числовое умножение. Все циклические группы *абелевы*. „Та же“ группа, что и (7.E.4), образуется числами

$$0, 1, 2, \dots, n-1, \quad (7.E.5)$$

если групповое умножение определено как *сложение по модулю n* (если, например, $n = 7$, то $5 \cdot 4 \doteq 2$, так как $5 + 4 = 9 = 7 + 2 = n + 2$). Элементы группы (7.E.5) можно сопоставить элементам (7.E.4) взаимно однозначным образом путем установления соответствия между k и ω^k . Это соответствие имеет то свойство, что с его помощью „*произведения преобразуются в произведения*“, т. е. из $k_1 \cdot k_2 = k_3$ следует $\omega^{k_1} \cdot \omega^{k_2} = \omega^{k_3}$. Такие две группы называются *изоморфными*¹⁾.

¹⁾ Чтобы показать, что не все из доказанных выше теорем тривиальны, упомянем их следствие для теории чисел. Если $n+1$ есть простое число, то числа $1, 2, 3, \dots, n$ образуют группу еще одним способом, если понимать под групповым умножением числовое умножение по модулю $n+1$. Если, скажем, $n+1 = 7$, то $3 \cdot 5 = 1$, так как $3 \cdot 5 = 15 = 2 \cdot 7 + 1$; при этом тождественным элементом будет 1. Тогда период каждого элемента является делителем n , порядка группы. Таким образом, мы обязательно имеем $A^n = 1$, если A есть элемент этой группы. Но это равносильно утверждению, что $a^n \equiv 1 \pmod{n+1}$, если a есть одно из чисел $1, 2, 3, \dots, n$. Это частный случай теоремы Ферма, которая, как следует признать, нетривиальна.

Две группы *изоморфны*, если элементам A одной из них можно сопоставить элементы \bar{A} другой, притом взаимно однозначно и так, что из $AB = C$ следует, что $\bar{A}\bar{B} = \bar{C}$, т. е. что $\overline{AB} = \bar{A}\bar{B}$. Изоморфные группы в сущности совпадают; лишь индивидуальные элементы пронумерованы по-разному.

4. Имеются две группы порядка 4, т. е. две группы, не изоморфные одна другой. Все остальные изоморфны одной из этих двух. Первая группа — это циклическая группа, например $1, i, -1, -i$ с групповым умножением, определенным как числовое умножение. Вторая группа — это так называемая *четыре-группа*. Ее групповая таблица такова:

	E	A	B	C
E	E	A	B	C
A	A	E	C	B
B	B	C	E	A
C	C	B	A	E

Все элементы этой группы (кроме E) порядка 2: она также абелева.

5. Четыре-группа является первым примером весьма обширного множества групп, а именно симметрических групп. Рассмотрим правильный n -угольник на плоскости XU . Пусть координаты n вершин равны $x_k = r \cos 2\pi k/n$, $y_k = r \sin 2\pi k/n$ ($k = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$), и рассмотрим все линейные подстановки

$$x' = \alpha x + \beta y, \quad y' = \gamma x + \delta y,$$

которые преобразуют правильный n -угольник „в самого себя“, т. е. для которого новые координаты вершин x'_k, y'_k могут быть снова записаны в виде

$$x'_k = r \cos \frac{2\pi x}{n}, \quad y'_k = r \sin \frac{2\pi x}{n}$$

($x = 0, 1, 2, 3, \dots, n-1$). Матрицы этих линейных подстановок образуют группу, так как произведение любых двух подстановок, подстановка, обратная любой из подстановок, а также единичный элемент E — все удовлетворяют условиям для элементов группы.

Подстановками, преобразующими n -угольник в самого себя, являются следующие. а) Вращения плоскости на углы $2\pi k/n$ ($k = 0, 1, 2, \dots, n-1$); соответствующие матрицы имеют вид

$$\begin{pmatrix} \cos \frac{2\pi k}{n} & \sin \frac{2\pi k}{n} \\ -\sin \frac{2\pi k}{n} & \cos \frac{2\pi k}{n} \end{pmatrix} = D_k. \tag{7.E.6}$$

Они образуют циклическую группу. б) Отражение плоскости в прямой и последующее вращение на угол $2\pi k/n$. Соответствующие матрицы равны

$$\begin{pmatrix} -\cos \frac{2\pi k}{n}, & \sin \frac{2\pi k}{n} \\ \sin \frac{2\pi k}{n}, & \cos \frac{2\pi k}{n} \end{pmatrix} = U_k. \quad (7.E.7)$$

Эти $2n$ матриц образуют группу порядка $2n$, известную как группу *диэдра*. Матрицы (7.E.6) образуют подгруппу этой группы, а матрицы (7.E.7) — смежный класс по этой подгруппе. 4-группа с $n=2$ является простейшим примером группы диэдра; n -угольник вырождается в две вершины, т. е. в отрезок прямой. В то время как 4-группа все еще является абелевой, другие диэдрические группы уже *не являются абелевыми*. Группа (7.E.1) есть диэдрическая группа правильного треугольника и является первой *неабелевой* группой; элементы E, F, D относятся к подгруппе, а A, B, C — к смежному классу.

Подстановки, преобразующие правильные многогранники в самих себя, являются важными и интересными группами, и известны как группы симметрии. Они обычно определяются с помощью правильных многогранников, которые они преобразуют в самих себя. Таким образом существует группа тетраэдра, группа октаэдра, группа икосаэдра и т. д. Они играют важную роль в кристаллофизике.

6. Весьма важны также *группы перестановок*. Рассмотрим числа от 1 до n : 1, 2, 3, ..., n . Всякий порядок $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ этих n чисел образует перестановку. Таким образом, всего существует $n!$ перестановок n предметов, обычно обозначаемых символом

$$\begin{pmatrix} 1, & 2, & 3, & \dots, & n \\ \alpha_1, & \alpha_2, & \alpha_3, & \dots, & \alpha_n \end{pmatrix}.$$

Объекты, которые должны быть переставлены, записываются в их естественном порядке в верхней строчке, а во второй строчке — в порядке, возникающем в результате рассматриваемой перестановки. Перемножение двух перестановок P_1 и P_2 производится таким образом, что те изменения, которые P_2 должна вызывать в естественном порядке, происходят с предметами в порядке P_1 . Так, если

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

то

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

Это значит, что, поскольку P_2 преобразует 1 в 3, 3 появляется в $P_1 P_2$ там, где 1 находится в P_1 . Аналогичным образом, так как P_2 преобразует 2 в 1, 1 появляется в $P_1 P_2$ там, где 2 находится в P_1 , и т. д.

Если P_1 переводит k в α_k , P_2 — α_k в β_k и P_3 — β_k в γ_k , то P_1P_2 переводит k в β_k , а P_2P_3 — α_k в γ_k . Таким образом, как $(P_1P_2) \cdot P_3$, так и $P_1 \cdot (P_2P_3)$ преобразуют α_k в γ_k ; следовательно, перемножение перестановок ассоциативно.

Совокупность всех $n!$ перестановок n объектов образует группу с тождественной перестановкой

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

в качестве единичного элемента. Эта группа называется *симметрической группой*¹⁾ степени n . Симметрическая группа третьей степени имеет порядок 6; она изоморфна группе (7.E.1) и, следовательно, группе диэдра с $n = 3$. Соответствие между ними следующее:

$$\begin{array}{ccc} \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} \\ E & A & B \\ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix} & \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} \\ C & D & F \end{array}$$

Симметрические группы также играют существенную роль в квантовой механике.

Сопряженные элементы и классы

Элемент XAX^{-1} называется элементом, *сопряженным* с A . Если два элемента A и B сопряжены с третьим элементом C , то они также сопряжены друг с другом: из $A = XCX^{-1}$ и $B = YCY^{-1}$ следует, что $X^{-1}AX = C$ и $B = YX^{-1}AXY^{-1} = (YX^{-1})A(YX^{-1})^{-1}$. Те элементы группы, которые сопряжены друг с другом, образуют *класс*. Класс определяется заданием одного из его элементов A ; весь класс может быть тогда получен путем построения последовательности

$$EAE^{-1} = A, \quad A_2AA_2^{-1}, \quad A_3AA_3^{-1}, \dots, A_hAA_h^{-1}.$$

Все элементы этой последовательности сопряжены с A и друг с другом; кроме того, каждый элемент, сопряженный с A (и, таким образом, каждый, сопряженный с любым элементом этой последовательности) встречается (и притом более, чем один раз) в этой

¹⁾ Ее часто также называют группой перестановок, но *никогда* не называют группой симметрии.

последовательности. Поэтому элементы группы могут быть разбиты на классы; каждый элемент встречается в одном и только в одном классе.

Тожественный элемент группы образует класс сам по себе, так как он не сопряжен ни с каким другим элементом: $XEX^{-1} = E$ для всех X . За исключением этого класса, состоящего только из одного элемента E , никакой класс не является подгруппой, потому что ни один из них не может содержать единицу E . В абелевых группах каждый класс состоит в точности из одного элемента, поскольку $XAX^{-1} = A$ для всех X .

Все элементы класса имеют один и тот же порядок. Если $A^n = E$, то $(XAX^{-1})^n$ также равно E , как это видно непосредственно:

$$\begin{aligned} (XAX^{-1})^n &= (XAX^{-1}) \cdot (XAX^{-1}) \dots (XAX^{-1}) = \\ &= XA^n X^{-1} = XEX^{-1} = E. \end{aligned}$$

В группе подстановок (группе матриц) все матрицы, принадлежащие одному и тому же классу, имеют одинаковый след. Чтобы показать это, рассмотрим α и β , принадлежащие одному классу. Тогда существует такой элемент группы, т. е. матрица γ , что

$$\beta = \gamma \alpha \gamma^{-1}.$$

Следовательно, $\text{Tr } \beta = \text{Tr } \gamma \alpha \gamma^{-1} = \text{Tr } \alpha$.

Например, образуем класс C в группе (7.E.1). Он состоит из элементов

$$\begin{aligned} ECE^{-1} = C, \quad ACA^{-1} = B, \quad BCB^{-1} = A, \quad CCC^{-1} = C, \\ DCD^{-1} = A, \quad FCF^{-1} = B. \end{aligned}$$

Класс C , таким образом, состоит из элементов A, B, C ; он также является классом A или B . Все три элемента A, B, C имеют порядок 2, и след матричного представления (7.E.1) этой группы равен 0 для всех трех элементов. Класс D содержит элементы

$$\begin{aligned} EDE^{-1} = D, \quad ADA^{-1} = F, \quad BDB^{-1} = F, \quad CDC^{-1} = F, \\ DDD^{-1} = D, \quad FDF^{-1} = D. \end{aligned}$$

Таким образом, класс D (или F) состоит из двух элементов D, F .

ИНВАРИАНТНЫЕ ПОДГРУППЫ

Подгруппа, состоящая исключительно из целых классов первоначальной группы, называется *инвариантной подгруппой*. Пусть $\mathcal{R} = E, N_2, \dots, N_n$ есть инвариантная подгруппа. Будучи группой, она должна содержать наряду с N_i и N_j также их произведение $N_i N_j$. Кроме того, она содержит $XN_i X^{-1}$, где X является *любым элементом полной группы*, поскольку инвариантная подгруппа содержит все элементы $XN_i X^{-1}$ некоторого класса, если она содержит один элемент N_i этого класса. Обычная подгруппа содержала бы $XN_i X^{-1}$ только в том случае, если бы наряду с N_i она содержала и X .

В обычной подгруппе, как во всякой группе, элементы

$$N_j E = N_j, \quad N_j N_2, \dots, N_j N_n \quad (8.E.1)$$

совпадают с элементами подгруппы с точностью до порядка. То же самое имеет место для последовательности

$$E N_j^{-1} = N_j^{-1}, \quad N_2 N_j^{-1}, \dots, N_n N_j^{-1} \quad (8.E.2)$$

и последовательности

$$N_j E N_j^{-1} = E, \quad N_j N_2 N_j^{-1}, \dots, N_j N_n N_j^{-1}, \quad (8.E.3)$$

образуемой из (8.E.2) при подстановке последовательности (8.E.1) вместо первого множителя в каждом члене (это лишь меняет порядок членов). Все N_i являются здесь элементами подгруппы.

С другой стороны, когда элементы E, N_2, \dots, N_n образуют инвариантную подгруппу, последовательность

$$X E X^{-1} = E, \quad X N_2 X^{-1}, \dots, X N_n X^{-1}, \quad (8.E.4)$$

где X — некоторый *произвольный* элемент *полной* группы, с точностью до порядка совпадает с элементами инвариантной подгруппы. Все элементы (8.E.4) встречаются в инвариантной подгруппе, так как они сопряжены с элементами подгруппы; как мы

сейчас покажем, все элементы инвариантной подгруппы встречаются в (8.Е.4). Чтобы найти некоторый элемент N_k в (8.Е.4), нужно лишь построить $X^{-1}N_kX$. Этот элемент должен быть среди элементов E, N_2, \dots, N_n . Пусть им будет N_i . Тогда $N_k = XN_iX^{-1}$ и N_k встречается в (8.Е.4) на i -м месте.

Каждая подгруппа абелевой группы является инвариантной подгруппой. Каждый элемент образует класс сам по себе; поэтому каждая подгруппа должна состоять целиком из полных классов. Симметрические группы имеют одну, и вообще только одну инвариантную подгруппу, состоящую из всех четных перестановок. Четные перестановки образуют подгруппу, так как произведение двух четных перестановок есть снова четная перестановка. Кроме того, элемент, сопряженный с четной перестановкой, должен быть четной перестановкой и поэтому также встречается в подгруппе (см. также гл. 13).

В примере (7.Е.1) элементы E, D и F составляют инвариантную подгруппу. Читателю предлагается проверить другие теоремы для специального случая этой группы.

Определение инвариантных подгрупп очень важно для изучения строения группы. Группы, не имеющие инвариантных подгрупп, называются *простыми* группами.

Фактор-группа

Рассмотрим теперь смежные классы по инвариантной подгруппе \mathcal{R} . Элементы $EU = U, N_2U, \dots, N_nU$ образуют правый смежный класс по \mathcal{R} . Они образуют также левый смежный класс, так как $U = UU^{-1}EU, N_2U = UN_2^{-1}UN_2U, \dots, N_nU = UN_n^{-1}UN_nU$ совпадают с элементами $U = UE, UN_2, \dots, UN_n$ с точностью до порядка. Иначе говоря, комплекс $\mathcal{R}U$ совпадает с комплексом $U\mathcal{R}$. Поэтому можно говорить просто о смежных классах по инвариантной подгруппе, не уточняя, являются ли эти смежные классы правыми или левыми¹⁾.

Перемножим все элементы одного смежного класса $\mathcal{R}U$ со всеми элементами другого смежного класса $\mathcal{R}V$. Тогда $N_jUN_iV = N_jUN_iU^{-1}UV = N_kUV$, так как и N_j и UN_iU^{-1} , а поэтому и их произведение N_k содержатся в \mathcal{R} . Процесс перемножения дает таким образом элементы единственного смежного класса $\mathcal{R}UV$.

¹⁾ В этом можно убедиться также другим способом. Чтобы U и V были в одном и том же правом смежном классе (см. стр. 76), надо, чтобы UV^{-1} входило в \mathcal{R} . Чтобы они были в одном и том же левом смежном классе, надо чтобы $V^{-1}U$ входило в \mathcal{R} . Но если \mathcal{R} является инвариантной подгруппой и содержит UV^{-1} , то она должна также содержать и $V^{-1} \cdot UV^{-1} \cdot V = V^{-1}U$. Поэтому два элемента встречаются в одном и том же левом смежном классе, если только они имеются в одном и том же правом смежном классе, и наоборот.

Если рассматривать смежные классы по инвариантной подгруппе как новые объекты и определить произведение двух смежных классов как смежный класс с элементами, получаемыми в результате перемножения элементов двух смежных классов, то *сами смежные классы образуют группу*. Эта группа называется *фактор-группой* инвариантной подгруппы. Единичным элементом фактор-группы является сама инвариантная подгруппа. Каждый элемент $N_j U$ смежного класса $\mathcal{R}U$ дает опять элемент смежного класса $\mathcal{R}U$ при умножении (справа или слева) на элемент N_l из \mathcal{R} . В явном виде это запишется так:

$$N_l \cdot N_j U = N_l N_j \cdot U = N_k \cdot U \text{ и } N_j \cdot U N_l = N_j \cdot U N_l U^{-1} U = N_k U.$$

Во-вторых, каждый смежный класс $\mathcal{R}U$ имеет обратный смежный класс $\mathcal{R}U^{-1}$. Это значит, что

$$N_j U \cdot N_l U^{-1} = N_j \cdot U N_l U^{-1} = N_k,$$

что дает нам элемент самой инвариантной подгруппы. Произведение $\mathcal{R}U$ и $\mathcal{R}U^{-1}$ сводится, таким образом, к \mathcal{R} , единичному элементу фактор-группы.

Порядок фактор-группы подгруппы \mathcal{R} равен числу смежных классов по \mathcal{R} , т. е. ее индексу. Не следует смешивать фактор-группу с подгруппой; элементы подгруппы являются элементами группы, тогда как *элементами фактор-группы являются смежные классы*.

Теоремы, доказанные выше, можно также получить еще проще с помощью символического метода, в котором совокупность элементов, их комплекс, обозначается одной буквой, скажем, \mathcal{E} . Произведение комплекса \mathcal{E} на элемент A опять является комплексом $\mathcal{E}A$, элементы которого получаются при умножении всех элементов комплекса \mathcal{E} на A справа (или слева, чтобы получить $A\mathcal{E}$). Произведение двух комплексов \mathcal{E} и \mathcal{D} есть комплекс $\mathcal{E}\mathcal{D}$, элементы которого получаются, когда все элементы \mathcal{E} умножаются справа на элементы \mathcal{D} . Легко видеть, что *ассоциативный закон* для такого вида умножения имеет место.

Если \mathcal{E} и \mathcal{D} содержат по n и n' элементов соответственно, то $\mathcal{E}\mathcal{D}$ содержит самое большое nn' элементов. Однако обычно оно содержит меньшее число различных элементов, так как некоторые элементы могут встретиться более чем один раз среди nn' произведений.

Условием того, чтобы \mathcal{E} было подгруппой, будет $\mathcal{E} \cdot \mathcal{E} = = \mathcal{E}^2 = \mathcal{E}$. Эта подгруппа является инвариантной подгруппой, если для каждого элемента U имеет место равенство $U^{-1}\mathcal{E}U = \mathcal{E}$. Правые смежные классы по \mathcal{E} являются все различными комплексами $\mathcal{E}U$. Если \mathcal{E} — инвариантная подгруппа, то $U^{-1}\mathcal{E}U = \mathcal{E}$,

так что $\mathcal{E}U = U\mathcal{E}$; правые смежные классы являются одновременно и левыми. Элементами фактор-группы будут различные комплексы $\mathcal{E}U$. Произведение двух комплексов $\mathcal{E}U$ и $\mathcal{E}V$, взятое в смысле перемножения в фактор-группе, совпадает с произведением, взятым в смысле умножения комплексов:

$$\mathcal{E}U \cdot \mathcal{E}V = \mathcal{E} \cdot U\mathcal{E} \cdot V = \mathcal{E} \cdot \mathcal{E}U \cdot V = \mathcal{E}^2UV = \mathcal{E}UV.$$

Изоморфизм и гомоморфизм

В предыдущей главе мы познакомились с понятием *изоморфизма* двух групп. Две группы изоморфны, если между их элементами имеется *взаимнооднозначное* соответствие, притом такое, что произведения соответствуют произведениям. Элементам A или B одной группы соответствуют элементы \bar{A} или \bar{B} изоморфной группы, и произведению AB соответствует произведение $\bar{A} \cdot \bar{B} = \overline{AB}$. Ясно, что изоморфные группы должны быть одного и того же порядка.

Менее точное соответствие между двумя группами будет при простом *гомоморфизме*, который напоминает изоморфизм за тем исключением, что от соответствия не требуется, чтобы оно было взаимнооднозначным. Группа \mathcal{S} гомоморфна на другую группу \mathcal{H} , если один и только один элемент группы \mathcal{H} соответствует каждому элементу группы \mathcal{S} и если по крайней мере один элемент группы \mathcal{S} соответствует каждому элементу группы \mathcal{H} , а также если соответствие таково, что произведение A и B из группы \mathcal{S} соответствует произведению $\bar{A} \cdot \bar{B} = \overline{AB}$ соответствующих элементов \bar{A} и \bar{B} группы \mathcal{H} ¹⁾. При гомоморфизме один элемент \bar{A} группы \mathcal{H} может соответствовать нескольким различным элементам, скажем, A и A' группы \mathcal{S} . В соответствии с этим гомоморфизм не является взаимным свойством. Если \mathcal{S} гомоморфна \mathcal{H} , то \mathcal{H} не обязательно гомоморфна на \mathcal{S} . Число элементов группы \mathcal{S} должно быть *равно или больше*, чем число элементов группы \mathcal{H} ; если число элементов равно, то гомоморфизм становится изоморфизмом, который уже является взаимным.

Тождественный элемент E группы \mathcal{S} соответствует тождественному элементу \bar{E} группы \mathcal{H} , так как из $E \cdot E = E$ следует

¹⁾ Соответствие, которое называется здесь гомоморфизмом группы \mathcal{S} на группу \mathcal{H} , у большинства немецких авторов обозначается как гомоморфизм группы \mathcal{S} группе \mathcal{H} . Заметим также, что выражения „гомоморфизм“ и „изоморфизм“ используются как синонимы в некоторых текстах. (В русской литературе говорят также о гомоморфном отображении группы \mathcal{S} на группу \mathcal{H} . Мы оставляем более краткую терминологию автора. — Прим. ред.)

$\bar{E} \cdot \bar{E} = \bar{E}$, причем это имеет место только для тождественного элемента группы. Аналогично, обратные элементы группы \mathcal{G} соответствуют обратным элементам группы \mathcal{H} .

Рассмотрим все элементы E, E_2, \dots, E_n группы \mathcal{G} , соответствующие тождественному элементу \bar{E} группы \mathcal{H} , и обозначим этот комплекс через \mathcal{E} . Так как $E_k \cdot E_l$ соответствует произведению $\bar{E} \cdot \bar{E} = \bar{E}$, комплекс \mathcal{E} также содержит $E_k \cdot E_l$, так что \mathcal{E} является группой. Кроме того, всякий элемент $U^{-1}E_kU$, сопряженный с E_k , соответствует элементу \bar{E} , поскольку $\bar{U}^{-1} \cdot \bar{E} \cdot \bar{U} = \bar{U}^{-1}\bar{E}\bar{U} = \bar{E}$; поэтому группа \mathcal{E} является *инвариантной подгруппой* группы \mathcal{G} . Аналогичным образом, элементы комплекса \mathcal{A} , которым соответствует один и тот же элемент \bar{A} группы \mathcal{H} , образуют смежный класс по подгруппе \mathcal{E} . Пусть A_j и A_l — два элемента комплекса \mathcal{A} ; тогда $\bar{A}_j = \bar{A}_l = \bar{A}$. Всякому элементу $A_j A_l^{-1}$ соответствует элемент $\bar{A}_j \bar{A}_l^{-1} = \bar{A}_j \bar{A}_l^{-1} = \bar{A} \bar{A}^{-1} = \bar{E}$; иначе говоря, $A_j A_l^{-1}$ содержится в \mathcal{E} , что является условием того, что A_j и A_l принадлежат одному и тому же смежному классу по подгруппе \mathcal{E} .

Смежные классы по подгруппе \mathcal{E} находятся во взаимнооднозначном соответствии с элементами группы \mathcal{H} ; поэтому произведение двух смежных классов $\mathcal{E}U$ и $\mathcal{E}V$ соответствует произведению $\bar{U}\bar{V} = \overline{UV}$ соответствующих двух элементов \bar{U} и \bar{V} . Так как смежные классы являются элементами фактор-группы подгруппы \mathcal{E} , *эта фактор-группа изоморфна группе \mathcal{H}* .

Если \mathcal{G} гомоморфна на \mathcal{H} , то фактор-группа группы \mathcal{G} изоморфна группе \mathcal{H} . Порядок группы \mathcal{G} является целым кратным порядка группы \mathcal{H} . Если гомоморфизм является в действительности изоморфизмом, то рассматриваемая инвариантная подгруппа \mathcal{E} вырождается в единственный тождественный элемент E .

С помощью надлежащей перенумерации элементов групп можно построить следующее соответствие между элементами групп \mathcal{G} и \mathcal{H} .

$$\underbrace{E, G_2, \dots, G_n}_{\bar{E}}, \underbrace{G_{n+1}, G_{n+2}, \dots, G_{2n}}_{H_2}, \dots, \underbrace{G_{(h-1)n+1}, \dots, G_{hn}}_{H_h}.$$

Мы видим, что единственный элемент группы \mathcal{H} соответствует каждому элементу группы \mathcal{G} . Наоборот, определенные элементы группы \mathcal{G} соответствуют каждому элементу группы \mathcal{H} ; это соответствие не является, однако, одно-однозначным, а n -однозначным, так как каждый элемент \mathcal{H} соответствует точно n элементам \mathcal{G} . Элементы E, G_2, \dots, G_n образуют инвариантную подгруппу \mathcal{E} (ранее они были обозначены через E, E_2, E_3, \dots, E_n); каждый из других комплексов, обозначенных скобкой, образует один из

смежных классов по этой подгруппе, соответствующей каждому одному элементу группы \mathcal{H} .

Умножение некоторого элемента группы \mathcal{G} , соответствующего H_i , на элемент, соответствующий H_j , дает элемент, который соответствует $H_i \cdot H_j$. Перемножение всех n элементов, соответствующих H_i , со всеми n элементами, соответствующими H_j , дает n элементов, которые соответствуют $H_i \cdot H_j$, каждый n раз. Группа \mathcal{H} в сущности совпадает с фактор-группой инвариантной подгруппы E, G_2, \dots, G_n . Она изоморфна этой фактор-группе.

Всякая группа, очевидно, изоморфна сама себе. Всякая группа также гомоморфна на группу, состоящую из одного лишь тождественного элемента \bar{E} . Элементу A соответствует тождественный элемент \bar{E} , а элементу B — также тождественный элемент \bar{E} . Таким образом, произведение AB соответствует также произведению $\bar{E}\bar{E} = \bar{E}$. В этом случае инвариантная подгруппа охватывает всю группу.

Всякая группа подстановок гомоморфна некоторой абелевой группе. Этот гомоморфизм может быть построен, если каждой подстановке поставить в соответствие ее определитель. Что это дает в случае группы (7.E.1) предыдущей главы?

На этом мы заканчиваем изложение абстрактной теории конечных групп; затем мы перейдем к теории представлений групп. Далее мы обсудим непрерывные группы. Наше рассмотрение было ограничено началами абстрактной теории групп, которая необычайно проста в своей аргументации. Подробное изложение можно найти в „Теории конечных групп“ Спайзера и в „Алгебре“ Вебера. Здесь мы рассмотрели только те вопросы, которые существенны для дальнейшего изложения и для приобретения навыков при использовании теории групп¹⁾, и не будем далее обсуждать эти вопросы.

¹⁾ Из более поздних руководств по теории групп можно указать книгу: H. Zassenhaus, Theory of Groups, New York, 1958.

ОБЩАЯ ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Представление ¹⁾ группы есть группа матриц ²⁾, которой гомоморфна представляемая группа. Таким образом, оно состоит в сопоставлении *каждому элементу* группы A такой *матрицы* $D(A)$ или просто A , что

$$D(A)D(B) = D(AB) \quad (9.1)$$

имеет место для всех матриц D . Если все матрицы, сопоставленные различным элементам группы, различны, то *группа матриц изоморфна группе, которую она представляет, и представление называется точным*. С другой стороны, если более чем один элемент группы соответствует одной и той же матрице, то те элементы, которые соответствуют той же матрице, что и тождественный элемент, образуют инвариантную подгруппу (как было отмечено в предыдущей главе). Тогда рассматриваемое представление является точным представлением фактор-группы этой инвариантной подгруппы, но неточным представлением всей группы в целом.

Наоборот, неточное представление полной группы может быть построено из любого представления фактор-группы. Элементами фактор-группы являются смежные классы по инвариантной подгруппе. Приписывая всем элементам определенного смежного класса группы одну и ту же матрицу, представляющую этот смежный класс как элемент фактор-группы, получаем неточное представление полной группы.

Всякая группа матриц является, очевидно, своим собственным точным представлением. Ясно также, что каждому элементу группы

¹⁾ Точнее: „представление линейными преобразованиями“.

²⁾ Под „группой матриц“ мы понимаем здесь группу квадратных матриц, т. е. матриц; строки и столбцы которых пронумерованы одинаковым образом; эта нумерация должна также быть одинаковой для всех матриц данного представления. Эти правила будут соблюдаться для всех матриц представлений.

можно сопоставить матрицу (1) и получить тривиальный гомоморфизм любой группы на группу, содержащую только тождественный элемент. В примере (7.Е.1) мы имеем точное представление симметрической группы трех объектов. Еще одно, но неточное, представление той же самой группы получается при сопоставлении каждому элементу группы — матрицы, записанной под ним:

$$\begin{array}{cccccc} E & A & B & C & D & F. \\ (1) & (-1) & (-1) & (-1) & (1) & (1) \end{array} \quad (9.Е.1)$$

Фактически — это точное представление фактор-группы инвариантной подгруппы E, D, F . Эта фактор-группа состоит из двух элементов: инвариантной подгруппы E, D, F и ее смежного класса A, B, C . Матрица (1) сопоставляется первому элементу фактор-группы, а матрица (-1) — второму.

Число строк и столбцов матрицы представления называется *размерностью* представления. Исходя из заданного представления, можно составить новые, применяя одно и то же преобразование подобия ко всем матрицам группы. Поскольку преобразования подобия не затрагивают свойств матриц относительно умножения, природа представления в целом при этом не меняется. Два представления, которые получаются одно из другого этим способом или, иначе говоря, которые могут быть преобразованы одно в другое, называются *эквивалентными*. Эквивалентные представления рассматриваются по существу как одинаковые.

Из двух представлений можно составить одно новое, притом различными способами. Наиболее простым является, по-видимому, способ, при котором два представления просто сливаются в одно. Из представления $D(A_1), D(A_2), \dots, D(A_h)$ и другого представления $D'(A_1), D'(A_2), \dots, D'(A_h)$ получаем этим способом новое представление, состоящее из суперматриц

$$\begin{pmatrix} D(A_1) & 0 \\ 0 & D'(A_1) \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} D(A_2) & 0 \\ 0 & D'(A_2) \end{pmatrix}, \dots, \begin{pmatrix} D(A_h) & 0 \\ 0 & D'(A_h) \end{pmatrix}. \quad (9.Е.2)$$

Преобразование подобия этого нового представления может замаскировать то обстоятельство, что оно было составлено первоначально из двух представлений. Представление, получающееся из представления вида (9.Е.2) с помощью такого преобразования подобия, называется *приводимым*. Ясно, что приводимые представления могут быть всегда приведены к виду (9.Е.2) с помощью некоторого преобразования подобия; иначе говоря, приводимые представления эквивалентны представлениям вида (9.Е.2). Представления, для которых это невозможно, называются *неприводимыми*.

Представление, которое может быть приведено к виду (9.Е.2) одновременным переобозначением строк и столбцов всех его матриц, является, разумеется, приводимым. Действительно, такая перенумерация может быть выполнена с помощью преобразования подобия. Чтобы превратить \bar{j} -ые строку и столбец в j -ые строку и столбец, выберем в качестве S матрицу $S_{ki} = \delta_{k\bar{i}}$; тогда $(S^{-1})_{jm} = \delta_{\bar{j}m}$ и

$$\sum_i S_{ki} (S^{-1})_{ij} = \sum_i \delta_{k\bar{i}} \delta_{\bar{i}j} = \delta_{kj},$$

а преобразование над S действительно достигает желаемого изменения нумерации:

$$\bar{A} = S^{-1}AS, \quad \bar{A}_{jl} = \sum_{mk} \delta_{\bar{j}m} A_{mk} \delta_{k\bar{l}} = A_{\bar{j}\bar{l}}.$$

Рассмотрим разделение строк и столбцов системы матриц на две группы, скажем „помеченные“ (чертой наверху) и „непомеченные“. Любая система матриц, для которой это разделение можно произвести таким образом, чтобы на пересечениях „помеченных“ строк с „непомеченными“ столбцами и „непомеченных“ строк с „помеченными“ столбцами были бы только нулевые элементы, является либо приводимой, либо уже находится в приведенном виде. Чтобы показать это, достаточно заметить, что „помеченные“ строки и столбцы можно перенести в верхнюю левую часть матриц, приведя представление к виду (9.Е.2).

В дальнейшем мы будем иметь дело с матрицами представлений, имеющими *отличные от нуля определители*. Тогда каждая матрица $D(A)$ имеет обратную. Так как умножение любого элемента группы A на тождественный элемент группы E дает A , умножение всякой матрицы представления $D(A)$ на матрицу $D(E)$, сопоставленную тождественному элементу, дает $D(A)$. Следовательно,

$$D(A)D(E) = D(A), \quad D(E) = (1). \quad (9.2)$$

Единичная матрица сопоставляется тождественному элементу группы. Произведение матриц $D(A)$ и $D(A^{-1})$, соответствующих обратным элементам группы, равно $D(E) = 1$. Поэтому

$$D(A)D(A^{-1}) = D(E) = 1, \quad D(A^{-1}) = [D(A)]^{-1}, \quad (9.3)$$

откуда следует, что

$$D(A^{-1}) = D(A)^\dagger \quad (9.3a)$$

для представления унитарными матрицами.

Теорема 1. *Всякое представление матрицами с отличными от нуля определителями может быть с помощью преобразования подобия преобразовано в представление унитарными матрицами.*

Пусть матрицами представления группы порядка h будут A_1, A_2, \dots, A_h . (Если представление не является точным, не все элементы A_1, A_2, \dots, A_h различны.) Образует эрмитову матрицу H путем суммирования по всем элементам группы

$$H = \sum_x A_x A_x^\dagger. \quad (9.4)$$

Доказательство сводится к диагонализации матрицы H и нахождению обратной величины корня квадратного из нее. Будет показано, что последовательные преобразования подобия матриц A_x с помощью матрицы U , диагонализующей H , и с помощью $d^{1/2}$ (квадратного корня из диагональной формы матрицы H) приводят к представлению \bar{A}_x , являющемуся унитарным.

Эрмитова матрица H может быть приведена к диагональному виду d с помощью унитарной матрицы U :

$$d = U^{-1} H U = \sum_x U^{-1} A_x A_x^\dagger U = \sum_x U^{-1} A_x U (U^{-1} A_x U)^\dagger = \sum_x \bar{A}_x \bar{A}_x^\dagger. \quad (9.5)$$

Все диагональные элементы матрицы d вещественны и положительны, так как, например,

$$d_{kk} = \sum_x \sum_j (\bar{A}_x)_{kj} (\bar{A}_x)_{kj}^* = \sum_x \sum_j |(\bar{A}_x)_{kj}|^2$$

может обратиться в нуль только в том случае, если для данного k матричные элементы представления $(\bar{A}_x)_{kj}$ равны нулю для всех j (и x). Однако в таком случае целая строка матрицы \bar{A}_x состояла бы из нулей. Следовательно, ее определитель, а тем самым и определитель матрицы A_x , обратился бы в нуль в противоречии с исходным предположением. Поэтому $d^{1/2}$ и $d^{-1/2}$ могут быть однозначно построены из d путем взятия соответственно положительных значений квадратных корней или степеней $-1/2$ от диагональных элементов; $d^{1/2}$ и $d^{-1/2}$ являются вещественными диагональными матрицами: $d^{1/2\dagger} = d^{1/2}$, $d^{-1/2\dagger} = d^{-1/2}$.

Покажем теперь, что представление

$$\bar{A}_\lambda = d^{-1/2} \bar{A}_\lambda d^{1/2} = d^{-1/2} U^{-1} A_\lambda U d^{1/2}$$

является унитарным. Из (9.5) получаем

$$1 = d^{-1/2} \sum_x \bar{A}_x \bar{A}_x^\dagger d^{-1/2}.$$

Используя это выражение для единичной матрицы, можно написать

$$\begin{aligned}\bar{A}_\lambda \bar{A}_\lambda^\dagger &= \mathbf{d}^{-1/2} \bar{A}_\lambda \mathbf{d}^{1/2} \cdot \left(\mathbf{d}^{-1/2} \sum_x \bar{A}_x \mathbf{A}_x^\dagger \mathbf{d}^{-1/2} \right) \mathbf{d}^{1/2} \bar{A}_\lambda^\dagger \mathbf{d}^{-1/2} = \\ &= \mathbf{d}^{-1/2} \sum_x \bar{A}_\lambda \bar{A}_x \bar{A}_x^\dagger \bar{A}_\lambda^\dagger \mathbf{d}^{-1/2}.\end{aligned}\quad (9.6)$$

В силу групповых свойств матрицы \bar{A}_x произведения $\bar{A}_\lambda \bar{A}_x$ для $x = 1, 2, \dots, h$ являются как раз матрицами \bar{A}_x в другом порядке¹⁾, так что

$$\sum_x \bar{A}_\lambda \bar{A}_x (\bar{A}_\lambda \bar{A}_x)^\dagger = \sum_x \bar{A}_x \bar{A}_x^\dagger$$

и, следовательно,

$$\bar{A}_\lambda \bar{A}_\lambda^\dagger = \mathbf{d}^{-1/2} \sum_x \bar{A}_x \bar{A}_x^\dagger \mathbf{d}^{-1/2} = \mathbf{1}.\quad (9.7)$$

Этим доказывается, что представление \bar{A}_x унитарно, и, следовательно, теорема 1 доказана.

Теорема 2. Матрица, коммутирующая со всеми матрицами неприводимого представления, является постоянной матрицей (т. е. кратной единичной матрице).

Можно предположить, что представление имеет унитарную форму, так как преобразование подобия не меняет, разумеется, матриц, кратных единичной матрице. Пусть теперь матрица \mathbf{M} коммутирует со всеми $\mathbf{A}_1, \mathbf{A}_2, \dots, \mathbf{A}_h$. Иначе говоря,

$$\mathbf{A}_x \mathbf{M} = \mathbf{M} \mathbf{A}_x \quad (x = 1, 2, \dots, h).\quad (9.8)$$

В таком случае достаточно рассмотреть только эрмитовы матрицы \mathbf{M} , как мы сейчас покажем. Беря эрмитово-сопряженное соотношение (9.8), получаем

$$\mathbf{M}^\dagger \mathbf{A}_x^\dagger = \mathbf{A}_x^\dagger \mathbf{M}^\dagger.$$

Умножая справа и слева на \mathbf{A}_x и замечая, что $\mathbf{A}_x \mathbf{A}_x^\dagger = \mathbf{A}_x^\dagger \mathbf{A}_x = \mathbf{1}$, находим

$$\mathbf{A}_x \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger \mathbf{A}_x \quad (x = 1, 2, \dots, h).\quad (9.9)$$

Тогда не только \mathbf{M} , но и \mathbf{M}^\dagger коммутирует со всеми \mathbf{A} . Поэтому $\mathbf{M} + \mathbf{M}^\dagger = \mathbf{H}_1$ и $i(\mathbf{M} - \mathbf{M}^\dagger) = \mathbf{H}_2$, будучи эрмитовыми, коммутируют со всеми \mathbf{A} . В силу этого достаточно показать, что всякая эрмитова матрица, коммутирующая со всеми \mathbf{A} , является постоянной матрицей, поскольку, если \mathbf{H}_1 и \mathbf{H}_2 должны быть кратными единичной матрице, тем же свойством должна обладать и $2\mathbf{M} = \mathbf{H}_1 - i\mathbf{H}_2$.

¹⁾ См. теорему 1, стр. 75.

Если матрица \mathbf{M} в соотношении (9.8) эрмитова, она может быть приведена к диагональному виду \mathbf{d} с помощью матрицы \mathbf{V} , так что $\mathbf{d} = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{V}$. Запишем $\bar{\mathbf{A}}_x = \mathbf{V}^{-1}\mathbf{A}_x\mathbf{V}$ (матрицы $\bar{\mathbf{A}}_x$ сохраняют унитарность матриц \mathbf{A}_x); тогда из (9.8) следует

$$\bar{\mathbf{A}}_x \mathbf{d} = \mathbf{d} \bar{\mathbf{A}}_x \quad (x = 1, 2, \dots, h). \quad (9.10)$$

Если не все элементы диагональной матрицы \mathbf{d} равны, то все $\bar{\mathbf{A}}_x$ должны иметь нули на пересечении строк и столбцов, диагональные элементы которых различны. Это значит, что из

$$(\bar{\mathbf{A}}_x)_{kj} d_{jj} = d_{kk} (\bar{\mathbf{A}}_x)_{kj}$$

следует, что матричные элементы представления $(\bar{\mathbf{A}}_x)_{kj}$ равны нулю для $d_{jj} \neq d_{kk}$; тогда представление было бы приводимым, как это следует из обсуждения на стр. 91. Так как это не имеет места, то все d_{kk} равны. Это значит, что \mathbf{d} и, следовательно, $\mathbf{V} \mathbf{d} \mathbf{V}^{-1} = \mathbf{M}$ являются постоянными матрицами, коммутирующими со всякой матрицей. Этим доказывается теорема 2, известная как лемма Шура.

Вывод теоремы 2 показывает не только то, что представление должно быть приводимым, если непостоянная матрица коммутирует со всеми матрицами представления, но также и то, как это представление может быть приведено или преобразовано к виду (9.Е.2). Это достигается тем же самым преобразованием подобия, которое приводит „коммутирующую матрицу“ к диагональному виду.

Обратно, если представление приводимо, наверняка существуют непостоянные матрицы, коммутирующие со всеми матрицами этого представления. В этом случае такое представление может быть приведено к виду (9.Е.2) с помощью преобразования подобия с соответствующим образом выбранной матрицей \mathbf{S} . Но все матрицы \mathbf{M} вида

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} a1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & a'1 \end{pmatrix}$$

с произвольными a и a' коммутируют с матрицами вида (9.Е.2). Если \mathbf{M} преобразуется с помощью \mathbf{S}^{-1} , она коммутирует с матрицами того представления, которое получено преобразованием представления вида (9.Е.2) с помощью матрицы \mathbf{S}^{-1} .

Если существует непостоянная матрица, коммутирующая со всеми матрицами представления, то представление приводимо; если таких матриц не существует, оно неприводимо.

Теорема 3. *Рассмотрим два неприводимых представления одной и той же группы $\mathbf{D}^{(1)}(A_1), \mathbf{D}^{(1)}(A_2), \dots, \mathbf{D}^{(1)}(A_h)$ и $\mathbf{D}^{(2)}(A_1), \mathbf{D}^{(2)}(A_2), \dots, \mathbf{D}^{(2)}(A_h)$ с размерностями l_1 и l_2 . Если*

существует такая матрица \mathbf{M} с l_2 строками и l_1 столбцами, что

$$\mathbf{M}\mathbf{D}^{(1)}(A_x) = \mathbf{D}^{(2)}(A_x)\mathbf{M} \quad (x = 1, 2, \dots, h), \quad (9.11)$$

то при $l_1 \neq l_2$ матрица \mathbf{M} является нулевой матрицей; при $l_1 = l_2$ матрица \mathbf{M} является либо нулевой матрицей, либо матрицей с не обращающимся в нуль определителем. В последнем случае \mathbf{M} имеет обратную, и два рассматриваемых неприводимых представления эквивалентны.

С самого начала можно предположить, что представления уже приведены к унитарному виду. Если бы это было не так, можно было бы сделать их унитарными путем преобразования их с помощью матриц \mathbf{S} и \mathbf{R} . Тогда (9.11) примет вид

$$\left. \begin{aligned} \mathbf{R}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{S} \cdot \mathbf{S}^{-1}\mathbf{D}^{(1)}(A_x)\mathbf{S} &= \mathbf{R}^{-1}\mathbf{D}^{(2)}(A_x)\mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{S}, \\ \mathbf{R}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{S} \cdot \bar{\mathbf{D}}^{(1)}(A_x) &= \bar{\mathbf{D}}^{(2)}(A_x) \cdot \mathbf{R}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{S}, \end{aligned} \right\} \quad (9.12)$$

и $\mathbf{R}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{S}$ можно было бы просто заменить символом \mathbf{M} .

Примем далее, что $l_1 \leq l_2$. Если $l_1 > l_2$, мы просто-транспонировем соотношение (9.11), после чего дальнейшие рассуждения применимы без изменений. Замечая, что в силу унитарности матриц $\mathbf{D}^{(1)}(A_x)^\dagger = \mathbf{D}^{(1)}(A_x)^{-1} = \mathbf{D}^{(1)}(A_x^{-1})$ и $\mathbf{D}^{(2)}(A_x)^\dagger = \mathbf{D}^{(2)}(A_x^{-1})$, и беря от (9.11) сопряженное, получаем

$$\mathbf{D}^{(1)}(A_x^{-1})\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}^\dagger\mathbf{D}^{(2)}(A_x^{-1}). \quad (9.13)$$

Поскольку соотношения (9.11) имеют место для всех элементов группы и, в том числе, для A_x^{-1} , умножение (9.13) слева на \mathbf{M} дает

$$\mathbf{M}\mathbf{D}^{(1)}(A_x^{-1})\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger\mathbf{D}^{(2)}(A_x^{-1}), \quad (9.14)$$

$$\mathbf{D}^{(2)}(A_x^{-1})\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = \mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger\mathbf{D}^{(2)}(A_x^{-1}). \quad (9.15)$$

Таким образом, эрмитова матрица $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger$ коммутирует со всеми матрицами $\mathbf{D}^{(2)}(A_1)$, $\mathbf{D}^{(2)}(A_2)$, ..., $\mathbf{D}^{(2)}(A_h)$ второго неприводимого представления. Следовательно, согласно теореме 2, она является кратной единичной матрице:

$$\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = c\mathbf{1}. \quad (9.16)$$

Если размерности двух представлений $\mathbf{D}^{(1)}$ и $\mathbf{D}^{(2)}$ одинаковы, то имеются две возможности. Либо $c \neq 0$ и тогда определитель $|c\mathbf{1}| = c^l$ не равен нулю, откуда следует, что определитель матрицы \mathbf{M} не равен нулю и что \mathbf{M} имеет обратную; либо $c = 0$ и тогда $\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger = 0$, так что \mathbf{M} является нулевой матрицей. Чтобы проверить это, выпишем

$$(\mathbf{M}\mathbf{M}^\dagger)_{ij} = \sum_k M_{ik}M_{jk}^* = 0 \quad (9.17)$$

и положим $l=j$; тогда получим

$$\sum_k |M_{lk}|^2 = 0, \quad (9.18)$$

откуда следует, что $M_{lk} = 0$, так как ни одна из величин $|M_{lk}|^2$ не может быть отрицательной, а соотношение (9.18) запрещает какому-либо из них быть положительным. Тем самым доказывается теорема в случае $l_1 = l_2$.

С другой стороны, если размерности двух представлений различны, матрица M является не квадратной, а прямоугольной. Однако ее можно сделать квадратной путем дополнения нулями:

$$N = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} & \dots & M_{1a} & 0 & \dots & 0 \\ M_{21} & M_{22} & \dots & M_{2a} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ M_{b1} & M_{b2} & \dots & M_{ba} & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}. \quad (9.19)$$

При этом соотношение $MM^\dagger = NN^\dagger$ сохраняется. Определитель матрицы N , а также и матрицы $NN^\dagger = MM^\dagger$, разумеется, равен нулю. Тогда c в (9.16) обращается в нуль, так что (9.17) и (9.18) снова остаются справедливыми. Этим теорема 3 полностью доказана.

Теорема 1А. Если два произвольных представления одной и той же группы A_1, A_2, \dots, A_h и B_1, B_2, \dots, B_h унитарны и эквивалентны, т. е. существуют такие матрицы *любого вида* M , что

$$MA_x M^{-1} = B_x \quad (x = 1, 2, \dots, h), \quad (9.20)$$

то эти два представления могут быть преобразованы одно в другое с помощью *унитарного* преобразования. Иначе говоря, существует такая *унитарная* матрица U , что

$$UA_x U^{-1} = B_x \quad (x = 1, 2, \dots, h). \quad (9.21)$$

Чтобы доказать эту теорему, найдем такую матрицу K , коммутирующую со всеми B_x , чтобы произведение $U = KM$ также было унитарной матрицей. Если такая матрица найдена, то, согласно (9.20),

$$B_x = KB_x K^{-1} = KMA_x M^{-1}K^{-1} = (KM)A_x(KM)^{-1} = UA_x U^{-1} \quad (9.21a)$$

и теорема будет доказана.

Согласно (9.20),

$$MA_x = B_x M \quad (x = 1, 2, \dots, h), \quad (9.22)$$

откуда, как и ранее, следует, что MM^\dagger коммутирует со всеми матрицами второго представления:

$$B_x MM^\dagger = MM^\dagger B_x \quad (x = 1, 2, \dots, h). \quad (9.22a)$$

Следовательно, преобразование подобия с матрицей MM^\dagger не меняет второго представления. Отсюда видно, что матрица MM^\dagger или некоторая

родственная матрица могут удовлетворить требованиям, налагаемым на K . Требование унитарности матрицы KM имеет вид

$$M^+K^+KM = 1, \quad \text{т. е.} \quad K^+K = (M^+)^{-1}(M)^{-1} = (MM^+)^{-1}. \quad (9.23)$$

Поэтому не сама матрица MM^+ , а ее степень $-1/2$ должна быть равна K .

При построении матрицы $(MM^+)^{-1/2}$ мы воспользуемся методом, использованным при доказательстве теоремы 1. Прежде всего приведем MM^+ к диагональному виду с помощью унитарной матрицы V :

$$V^{-1}MM^+V = d, \quad MM^+ = VdV^{-1}. \quad (9.24)$$

Это приведение всегда может быть выполнено, так как матрица MM^+ эрмитова; более того, все диагональные элементы матрицы d вещественны и положительны¹⁾. Теперь можно построить матрицу $d^{-1/2}$, которая также диагональна и имеет положительные вещественные элементы. Наконец, выполнив преобразование с помощью V^{-1} , получим K :

$$K = Vd^{-1/2}V^{-1}. \quad (9.25)$$

Покажем теперь, что K коммутирует со всеми B_x и что KM унитарно. В силу (9.22a) и (9.24)

$$B_xVdV^{-1} = VdV^{-1}B_x, \quad V^{-1}B_xVd = dV^{-1}B_xV, \quad (9.26)$$

т. е. диагональная матрица d коммутирует со всеми $V^{-1}B_xV$. Поэтому во всех $V^{-1}B_xV$ лишь нули могут появляться на пересечениях тех строк и столбцов, для которых диагональные элементы в d различны. Тогда эти матрицы также коммутируют с $d^{-1/2}$, так как в $d^{-1/2}$ различны только те диагональные члены, которые были различны в d . Поэтому

$$V^{-1}B_xVd^{-1/2} = d^{-1/2}V^{-1}B_xV, \quad B_xK = KB_x \quad (9.27)$$

и K действительно коммутирует со всеми матрицами представления B_1, B_2, \dots, B_n .

Рассмотрим далее

$$UU^+ = KMM^+K^+ = Vd^{-1/2}V^{-1}MM^+V^{-1}d^{-1/2}V^+. \quad (9.28)$$

В силу (9.24) и так как V унитарно, $d^{-1/2}$ эрмитово (вещественная диагональная матрица), имеем

$$UU^+ = Vd^{-1/2}dd^{-1/2}V^+ = VV^+ = 1, \quad (9.29)$$

так что U унитарна. Таким образом, теорема 1a доказана.

Значение этой теоремы заключается в том, что можно ограничиться унитарными преобразованиями подобия, если представления унитарны. Заметим, что если все представления в (9.20) унитарны и неприводимы, M с необходимостью унитарна, если отвлечься от численного множителя. Это следует из теоремы 2, если применить ее к (9.22a).

¹⁾ См. доказательство теоремы 1, стр. 92.

Теорема 4. Четвертая, наиболее важная для практики теорема касается соотношения ортогональности для коэффициентов неприводимого представления. *Если*

$$D^{(1)}(E), D^{(1)}(A_2), \dots, D^{(1)}(A_h)$$

и

$$D^{(2)}(E), D^{(2)}(A_2), \dots, D^{(2)}(A_h)$$

— два неэквивалентные неприводимые унитарные представления одной и той же группы, то соотношение

$$\sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\nu}^* D^{(2)}(R)_{\alpha\beta} = 0 \quad (9.30)$$

имеет место для всех элементов с индексами $\mu\nu$ и $\alpha\beta$, где, как это указано в формуле, суммирование распространяется на все элементы группы E, A_1, A_2, \dots, A_h . Для элементов одного унитарного неприводимого представления мы имеем

$$\sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\nu}^* D^{(1)}(R)_{\mu'\nu'} = \frac{h}{l_1} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}, \quad (9.31)$$

где h — порядок группы, а l_1 — размерность представления.

Теорема 4 справедлива потому, что групповые свойства представления позволяют легко построить много матриц M , удовлетворяющих соотношениям (9.11) или (9.8). Тогда равенства (9.30) и (9.31) показывают, что матрица, удовлетворяющая соотношению (9.11), должна быть *нулевой матрицей*, а матрица, удовлетворяющая соотношению (9.8), — *кратной единичной матрице*.

В силу групповых свойств все матрицы вида

$$M = \sum_R D^{(2)}(R) X D^{(1)}(R^{-1})$$

удовлетворяют соотношению (9.11) для произвольных матриц X с l_2 строками и l_1 столбцами. Из групповых свойств вытекает, что

$$\sum_R D^{(2)}(SR) X D^{(1)}(SR)^{-1} = \sum_R D^{(2)}(R) X D^{(1)}(R)^{-1} = M,$$

так как одни и те же матрицы появляются в левой и правой частях, но в различном порядке. Следовательно,

$$\begin{aligned} D^{(2)}(S) M &= \sum_R D^{(2)}(S) D^{(2)}(R) X D^{(1)}(R)^{-1} = \\ &= \sum_R D^{(2)}(SR) X D^{(1)}(SR)^{-1} D^{(1)}(S) \end{aligned}$$

или, короче,

$$D^{(2)}(S) M = M D^{(1)}(S). \quad (9.11a)$$

¹⁾ В дальнейшем R и S всегда будут обозначать элементы группы E, A_2, \dots, A_h .

Тогда теорема 3 утверждает, что \mathbf{M} должна быть нулевой матрицей, т. е. для произвольных $X_{\lambda\lambda}$

$$M_{\alpha\mu} = \sum_{\lambda} \sum_R D^{(2)}(R)_{\alpha\lambda} X_{\lambda\lambda} D^{(1)}(R^{-1})_{\lambda\mu} = 0.$$

Полагая все матричные элементы $X_{\lambda\lambda}$, кроме $X_{\beta\beta} = 1$, равными нулю, получаем обобщенную форму соотношения (9.30):

$$\sum_R D^{(2)}(R)_{\alpha\beta} D^{(1)}(R^{-1})_{\nu\mu} = 0, \quad (9.30a)$$

где $\mathbf{D}^{(2)}(R)$ и $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ должны быть неприводимыми, но не обязательно унитарными. Если матрицы $\mathbf{D}^{(2)}(R)$ и $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ унитарны,

$$\mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}) = [\mathbf{D}^{(1)}(R)]^{-1} = \mathbf{D}^{(1)}(R)^\dagger,$$

и (9.30a) сводится к (9.30).

Чтобы доказать (9.31), воспользуемся выражением

$$\mathbf{M} = \sum_R \mathbf{D}^{(1)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}),$$

где \mathbf{X} — произвольная матрица. Матрица \mathbf{M} коммутирует со всеми $\mathbf{D}^{(1)}(S)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}^{(1)}(S) \mathbf{M} &= \sum_R \mathbf{D}^{(1)}(S) \mathbf{D}^{(1)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}) = \\ &= \sum_R \mathbf{D}^{(1)}(SR) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(1)}[(SR)^{-1}] \mathbf{D}^{(1)}(S) = \mathbf{M} \mathbf{D}^{(1)}(S). \end{aligned}$$

Таким образом, теорема 3 требует, чтобы матрица \mathbf{M} была кратной единичной матрице, т. е.

$$\sum_{\lambda} \sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\lambda} X_{\lambda\lambda} D^{(1)}(R^{-1})_{\lambda\mu'} = c \delta_{\mu\mu'},$$

где c не зависит от μ и μ' , но может по-прежнему зависеть от $X_{\lambda\lambda}$. Если снова выбрать одно определенное $X_{\nu\nu} = 1$ и положить остальные $X_{\lambda\lambda}$ равными нулю, то получим

$$\sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\nu} D^{(1)}(R^{-1})_{\nu\mu'} = c_{\nu\nu} \delta_{\mu\mu'},$$

где $c_{\nu\nu}$ — постоянная для этой частной системы $X_{\lambda\lambda}$.

Чтобы определить постоянную $c_{\nu\nu}$, положим $\mu = \mu'$ и просуммируем по μ от 1 до l_1 . Тогда получаемое выражение становится равным сумме произведений $\mathbf{D}^{(1)}(R) \mathbf{D}^{(1)}(R^{-1}) = \mathbf{D}^{(1)}(E) = (\delta_{\nu\nu})$:

$$\sum_{\mu} \sum_R D^{(1)}(R^{-1})_{\nu\mu} D^{(1)}(R)_{\mu\nu} = \sum_R D^{(1)}(E)_{\nu\nu} = h \delta_{\nu\nu} = \sum_{\mu} c_{\nu\nu} \delta_{\mu\mu} = c_{\nu\nu} l_1.$$

Таким образом, $c_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'} (h/l_1)$. Поэтому мы получаем несколько обобщенную форму соотношения (9.31):

$$\sum_R D^{(1)}(R)_{\mu\nu} D^{(1)}(R^{-1})_{\nu'\mu'} = \frac{h}{l_1} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}, \quad (9.31a)$$

которая для унитарных представлений сводится к (9.31).

Числа

$$D^{(1)}(A_1)_{\mu\nu} = \nu_{A_1}^{(\mu\nu)}, \quad D^{(1)}(A_2)_{\mu\nu} = \nu_{A_2}^{(\mu\nu)}, \quad \dots, \quad D^{(1)}(A_h)_{\mu\nu} = \nu_{A_h}^{(\mu\nu)}$$

могут рассматриваться как компоненты h -мерного вектора $\nu^{(\mu\nu)}$, пронумерованные элементами группы. Тогда (9.31) означает, что эрмитова длина этого вектора равна $\sqrt{h/l_1}$ и что каждая пара этих l_1^2 векторов ортогональна. Кроме того, согласно (9.30), векторы ν ортогональны векторам ω , получаемым аналогичным образом с помощью некоторого неэквивалентного неприводимого представления:

$$\omega_{A_1}^{(\alpha\beta)} = D^{(2)}(A_1)_{\alpha\beta}, \quad \dots, \quad \omega_{A_h}^{(\alpha\beta)} = D^{(2)}(A_h)_{\alpha\beta}.$$

Представление симметрической группы трех объектов, которое уже рассматривалось здесь несколько раз,

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, & \mathbf{D}(A) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, & \mathbf{D}(B) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, \\ \mathbf{D}(C) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}, & \mathbf{D}(D) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{1}{2}\sqrt{3} \\ -\frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, & (7.E.1) \\ \mathbf{D}(F) &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{1}{2}\sqrt{3} \\ \frac{1}{2}\sqrt{3} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

неприводимо. Если бы оно было приводимым, все его матрицы могли бы быть приведены к диагональному виду одним и тем же преобразованием подобия, и поэтому все матрицы должны были бы коммутировать, так как они коммутировали бы в диагональном виде. Это, однако, не имеет места, как можно видеть, например, из соотношений

$$\mathbf{D}(A)\mathbf{D}(B) = \mathbf{D}(D), \quad \mathbf{D}(B)\mathbf{D}(A) = \mathbf{D}(F) \neq \mathbf{D}(D).$$

Согласно теореме 2, только матрица, кратная единичной, может коммутировать со всеми матрицами (7.E.1). Из этого простого примера сразу видно, что только диагональная матрица может коммутировать с $\mathbf{D}(A)$, в то время как диагональная матрица может коммутировать с $\mathbf{D}(B)$ только в том случае, если два ее диагональных элемента равны. Таким

образом, уже коммутативность с $\mathbf{D}(A)$ и $\mathbf{D}(B)$ ограничивает нас матрицами, кратными единичной. Согласно (9.31), четыре вектора $\mathbf{v}^{(11)}$, $\mathbf{v}^{(12)}$, $\mathbf{v}^{(21)}$ и $\mathbf{v}^{(22)}$ с компонентами:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_E^{(11)} &= 1, & \mathbf{v}_A^{(11)} &= 1, & \mathbf{v}_B^{(11)} &= -\frac{1}{2}, & \mathbf{v}_C^{(11)} &= -\frac{1}{2}, \\ & & \mathbf{v}_D^{(11)} &= -\frac{1}{2}, & \mathbf{v}_F^{(11)} &= -\frac{1}{2}; \\ \mathbf{v}_E^{(12)} &= 0, & \mathbf{v}_A^{(12)} &= 0, & \mathbf{v}_B^{(12)} &= \frac{1}{2}\sqrt{3}, & \mathbf{v}_C^{(12)} &= -\frac{1}{2}\sqrt{3}, \\ & & \mathbf{v}_D^{(12)} &= \frac{1}{2}\sqrt{3}, & \mathbf{v}_F^{(12)} &= -\frac{1}{2}\sqrt{3}; \\ \mathbf{v}_E^{(21)} &= 0, & \mathbf{v}_A^{(21)} &= 0, & \mathbf{v}_B^{(21)} &= \frac{1}{2}\sqrt{3}, & \mathbf{v}_C^{(21)} &= -\frac{1}{2}\sqrt{3}, \\ & & \mathbf{v}_D^{(21)} &= -\frac{1}{2}\sqrt{3}, & \mathbf{v}_F^{(21)} &= \frac{1}{2}\sqrt{3}; \\ \mathbf{v}_E^{(22)} &= 1, & \mathbf{v}_A^{(22)} &= -1, & \mathbf{v}_B^{(22)} &= \frac{1}{2}, & \mathbf{v}_C^{(22)} &= \frac{1}{2}, \\ & & \mathbf{v}_D^{(22)} &= -\frac{1}{2}, & \mathbf{v}_F^{(22)} &= -\frac{1}{2}, \end{aligned}$$

должны быть взаимно ортогональны. Так, например,

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}^{(11)}, \mathbf{v}^{(12)}) &= 1 \cdot 0 + 1 \cdot 0 + \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \left(\frac{1}{2}\sqrt{3}\right) + \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{1}{2}\sqrt{3}\right) + \\ &+ \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \frac{1}{2}\sqrt{3} + \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot \left(-\frac{1}{2}\sqrt{3}\right) = 0. \end{aligned}$$

К тому же длины этих векторов должны быть равны $\sqrt{h^{-1}} = \sqrt{6/2} = \sqrt{3}$ так, например, для вектора $\mathbf{v}^{(21)}$:

$$(\mathbf{v}^{(21)}, \mathbf{v}^{(21)}) = 0^2 + 0^2 + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} = 3.$$

В качестве примера соотношения (9.30) рассмотрим очевидно непригодное представление (9.Е.1) той же группы, данное на стр. 90:

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{D}}(E) &= (1), & \bar{\mathbf{D}}(A) &= (-1), & \bar{\mathbf{D}}(B) &= (-1), \\ \bar{\mathbf{D}}(C) &= (-1), & \bar{\mathbf{D}}(D) &= (1), & \bar{\mathbf{D}}(F) &= (1), \end{aligned} \quad (9.Е.1)$$

и тривиальное представление одной лишь единичной матрицей

$$\begin{aligned} \bar{\bar{\mathbf{D}}}(E) &= (1), & \bar{\bar{\mathbf{D}}}(A) &= (1), & \bar{\bar{\mathbf{D}}}(B) &= (1), \\ \bar{\bar{\mathbf{D}}}(C) &= (1), & \bar{\bar{\mathbf{D}}}(D) &= (1), & \bar{\bar{\mathbf{D}}}(F) &= (1). \end{aligned} \quad (9.Е.3)$$

Все четыре вектора \mathbf{v} должны быть ортогональны вектору $\mathbf{w}_R = \bar{\mathbf{D}}(R)_{11}$, а также вектору $\mathbf{z}_R = \bar{\bar{\mathbf{D}}}(R)_{11} = 1$. Например,

$$\begin{aligned} (\mathbf{v}^{(22)}, \mathbf{w}) &= 1 \cdot 1 + (-1) \cdot (-1) + \frac{1}{2} \cdot (-1) + \frac{1}{2} \cdot \\ &\times (-1) + \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot 1 + \left(-\frac{1}{2}\right) \cdot 1 = 0 \end{aligned}$$

Рассмотрим теперь все неэквивалентные неприводимые представления некоторой группы. Матрица $D^{(1)}(R)$ имеет размерность l_1 , матрица $D^{(2)}(R)$ — размерность l_2 , ..., матрица $D^{(c)}(R)$ — размерность l_c ; все представления предполагаются унитарными. Тогда (9.30) и (9.31) могут быть записаны в виде одной формулы:

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{\mu\nu} \sqrt{\frac{l_j}{h}} D^{(j')}(R)_{\mu'\nu'}^* \sqrt{\frac{l_{j'}}{h}} = \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'} \quad (9.32)$$

($\mu, \nu = 1, 2, \dots, l_j$; $\mu', \nu' = 1, 2, \dots, l_{j'}$; $j, j' = 1, 2, \dots, c$).

Все h -мерные векторы (их число равно $l_1^2 + l_2^2 + \dots + l_c^2$) в пространстве элементов группы взаимно ортогональны:

$$v_R^{(j, \mu, \nu)} = D^{(j)}(R)_{\mu\nu}.$$

Поскольку в пространстве h измерений может существовать самое большее h ортогональных векторов, то, следовательно, сумма квадратов размерностей всех неэквивалентных неприводимых представлений $l_1^2 + l_2^2 + \dots + l_c^2$ равна самое большее порядку представляемой группы. Действительно, можно показать, что сумма квадратов $l_1^2 + l_2^2 + \dots + l_c^2 = h$ в точности равна порядку этой группы. Однако мы опустим здесь доказательство этой теоремы (см. стр. 140).

Преобразуем теперь соотношение (9.32). Обозначим сумму диагональных элементов, или след, матрицы $D^{(j)}(R)$ через $\chi^{(j)}(R)$, так что

$$\chi^{(j)}(R) = \sum_{\mu=1}^{l_j} D^{(j)}(R)_{\mu\mu}.$$

Совокупность чисел, включающая h величин $\chi^{(j)}(E), \chi^{(j)}(A_2), \dots, \dots, \chi^{(j)}(A_h)$, называется *характером* представления $D^{(j)}(R)$. Задание некоторого представления с помощью характера имеет то преимущество, что он *инвариантен относительно преобразований подобия*. Согласно (9.32),

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{\mu\mu} D^{(j')}(R)_{\mu'\mu'}^* = \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{\mu\mu'}.$$

Суммируя по μ от 1 до l_j и по μ' от 1 до $l_{j'}$, получаем

$$\sum_R \chi^{(j)}(R) \chi^{(j')}(R)^* = \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \sum_{\mu=1}^{l_j} \sum_{\mu'=1}^{l_{j'}} \delta_{\mu\mu'} = \frac{h}{l_j} \delta_{jj'} \sum_{\mu=1}^{l_j} 1 = h \delta_{jj'}. \quad (9.33)$$

Характеры $\chi^{(j)}(R)$ неприводимых представлений образуют ортогональную систему векторов в пространстве элементов группы. Отсюда следует, что два неэквивалентных неприводимых представления не могут обладать одним и тем же характером и что неприводимые представления с равными характерами эквивалентны.

Соотношение (9.33) можно записать в несколько более развернутом виде, если сравнить характеры $\chi^{(j)}(R)$ и $\chi^{(j)}(S)$, принадлежащие двум элементам R и S одного и того же класса. Тогда существует такой элемент группы T , который преобразует R в S . Но если $T^{-1}RT = S$, то $\mathbf{D}^{(j)}(T^{-1}) \mathbf{D}^{(j)}(R) \mathbf{D}^{(j)}(T) = \mathbf{D}^{(j)}(S)$, так что $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ может быть преобразовано в $\mathbf{D}^{(j)}(S)$. Следовательно, след $\chi^{(j)}(R)$ матрицы $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ равен следу $\chi^{(j)}(S)$ матрицы $\mathbf{D}^{(j)}(S)$. В заданном представлении *элементы одного и того же класса имеют равные характеры.*

Таким образом, при задании совокупности характеров достаточно указать характер одного элемента из каждого класса группы. Это число может рассматриваться как характер класса. Если вся группа, представление которой рассматривается, состоит из k классов, скажем C_1, C_2, \dots, C_k и если эти классы имеют g_1, g_2, \dots, g_k элементов соответственно ($g_1 + g_2 + \dots + g_k = h$), то характер представления полностью определяется k числами $\chi^{(j)}(C_1), \chi^{(j)}(C_2), \dots, \chi^{(j)}(C_k)$. Можно ввести эти числа в (9.33) вместо $\chi^{(j)}(R)$. Когда это сделано, мы можем выполнить суммирование по элементам группы, суммируя сначала по g_p элементам одного и того же класса (соответствующие g_p членов все равны), а затем — по всем k классам:

$$\sum_{p=1}^k \chi^{(j)}(C_p) \chi^{(j')}(C_p)^* g_p = h \delta_{jj'}$$

или

$$\sum_{p=1}^k \chi^{(j)}(C_p) \sqrt{\frac{g_p}{h}} \cdot \chi^{(j')}(C_p)^* \sqrt{\frac{g_p}{h}} = \delta_{jj'}. \quad (9.34)$$

Нормированные характеры $\chi^{(j)}(C_p) \sqrt{g_p/h}$ образуют ортогональную систему векторов в k -мерном пространстве классов.

Соотношения (9.30), (9.31), (9.33) и (9.34) являются наиболее важными равенствами теории представлений, и к ним мы будем обращаться неоднократно

Характеры представлений (7 Е.1), (9.Е.1) и (9.Е.3) равны

$$\begin{aligned} \chi^{(E)} &= 2, & \chi^{(A)} &= 0, & \chi^{(B)} &= 0, & \chi^{(C)} &= 0, & \chi^{(D)} &= -1, & \chi^{(F)} &= -1, \\ \bar{\chi}^{(E)} &= 1, & \bar{\chi}^{(A)} &= -1, & \bar{\chi}^{(B)} &= -1, & \bar{\chi}^{(C)} &= -1, & \bar{\chi}^{(D)} &= 1, & \bar{\chi}^{(F)} &= 1, \\ \bar{\bar{\chi}}^{(E)} &= 1, & \bar{\bar{\chi}}^{(A)} &= 1, & \bar{\bar{\chi}}^{(B)} &= 1, & \bar{\bar{\chi}}^{(C)} &= 1, & \bar{\bar{\chi}}^{(D)} &= 1, & \bar{\bar{\chi}}^{(F)} &= 1. \end{aligned}$$

Так как D , F и A , B , C относятся к одинаковым классам, их характеры совпадают. Поэтому характеры можно записать кратко следующим образом:

$$\begin{aligned} \chi^{(E)} &= 2, & \chi^{(A, B, C)} &= 0, & \chi^{(D, F)} &= -1, \\ \bar{\chi}^{(E)} &= 1, & \bar{\chi}^{(A, B, C)} &= -1, & \bar{\chi}^{(D, F)} &= 1, \\ \overline{\overline{\chi}}^{(E)} &= 1, & \overline{\overline{\chi}}^{(A, B, C)} &= 1, & \overline{\overline{\chi}}^{(D, F)} &= 1. \end{aligned}$$

Нормированные характеры $\sqrt{g_\rho/h} \cdot \chi^{(l)}(C_\rho)$ взаимно ортогональны. Например, для χ и $\bar{\chi}$

$$\sqrt{\frac{1}{6}} 2 \cdot \sqrt{\frac{1}{6}} 1 + \sqrt{\frac{3}{6}} 0 \cdot \sqrt{\frac{3}{6}} (-1) + \sqrt{\frac{2}{6}} (-1) \sqrt{\frac{2}{6}} 1 = 0.$$

Так как существует самое большее k ортогональных k -мерных векторов, то число c неэквивалентных неприводимых представлений равно самое большее числу k классов представляемой группы. Действительно, можно показать, что число неэквивалентных неприводимых представлений группы в точности равно числу классов этой группы; иначе говоря, $c = k$.

Мы уже приводили пример этого в трех представлениях симметрической группы трех объектов, данных на стр. 100—101. Эта группа состоит из трех классов E ; A , B , C и D , F и не может иметь иных неприводимых представлений, кроме упомянутых выше. Размерности этих представлений равны 2, 1, 1; при этом $2^2 + 1^2 + 1^2 = 6$ действительно равно порядку группы.

Приведение представления. В предыдущем изложении мы имели дело частично с приводимыми, частично — с неприводимыми представлениями. Теоремы 1 и 1а относятся к произвольным представлениям; теоремы 2—4 [и соотношения (9.30), (9.31), (9.33) и (9.34)] — к неприводимым представлениям.

Важность неприводимых представлений объясняется тем обстоятельством, что всякое представление может быть разложено на неприводимые единственным образом. Это значит, что всякое приводимое представление может быть приведено к виду

$$\left(\begin{array}{cccc} \mathbf{D}^{(1)}(R) & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}^{(2)}(R) & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{D}^{(s)}(R) \end{array} \right) \quad (9.E.4)$$

путем преобразования подобия с соответствующим образом выбранной „приводящей“ матрицей, где $\mathbf{D}^{(j)}(R)$ являются теперь неприводимыми представлениями, неприводимыми компонентами исходного представления. Таким образом, если представление не

является уже неприводимым, оно может быть преобразовано к виду

$$\bar{\mathbf{D}}(A_x) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}'(A_x) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}''(A_x) \end{pmatrix}; \quad (9.E.2)$$

это значит, что все его матрицы могут быть преобразованы к этому виду. Тогда либо обе части $\mathbf{D}'(A_x)$ и $\mathbf{D}''(A_x)$ неприводимы, либо, скажем, \mathbf{D}'' приводимо. В последнем случае $\bar{\mathbf{D}}(A_x)$ можно подвергнуть дальнейшему преобразованию с помощью матрицы

$$\begin{pmatrix} \mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T} \end{pmatrix},$$

которое дает

$$\bar{\bar{\mathbf{D}}}(A_x) = \begin{pmatrix} \mathbf{S}^{-1}\mathbf{D}'(A_x)\mathbf{S} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{T}^{-1}\mathbf{D}''(A_x)\mathbf{T} \end{pmatrix}.$$

Если \mathbf{D}'' приводимо, то \mathbf{T} можно выбрать так, чтобы $\mathbf{T}^{-1}\mathbf{D}''(A_x)\mathbf{T}$ имело вид (9.E.2). Тогда $\bar{\bar{\mathbf{D}}}(A_x)$ приобретает вид

$$\begin{pmatrix} \mathbf{D}'(A_x) & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}'''(A_x) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{D}''''(A_x) \end{pmatrix}.$$

Это выражение может быть подвергнуто дальнейшему приведению, если хотя бы одно из трех представлений \mathbf{D}' , \mathbf{D}''' , \mathbf{D}'''' по-прежнему приводимо.

Так как это представление имеет конечную размерность, должно быть возможным привести в конце концов его этим способом к виду (9.E.4), в котором все представления $\mathbf{D}^{(1)}$, $\mathbf{D}^{(2)}$, ..., $\mathbf{D}^{(s)}$ неприводимы. Поскольку несколько последовательных преобразований подобия могут всегда быть заменены одним, рассматриваемое представление можно привести непосредственно к виду (9.E.4) с помощью одного-единственного преобразования подобия. Этот процесс называется *приведением*, а (9.E.4) называют *приведенной формой*.

Можно предполагать, что по окончании процесса приведения неприводимые части $\mathbf{D}^{(1)}(R)$, $\mathbf{D}^{(2)}(R)$, ..., $\mathbf{D}^{(s)}(R)$ не определяются однозначно (с точностью до преобразования подобия), а что $\mathbf{D}(R)$ может быть приведено различными способами. Мы можем показать, что это не так. Точно так же, как целое число может быть единственным способом разложено на произведение простых чисел, неприводимые компоненты приводимого представления определяются однозначно, разумеется, с точностью до порядка.

Если в результате приведения произвольное приводимое представление разлагается на a_1 неприводимых представлений $D^{(1)}(R)$ [с характером $\chi^{(1)}(R)$], a_2 представлений $D^{(2)}(R)$ [с характером $\chi^{(2)}(R)$] и т. д., то ясно, что

$$\chi(R) = \sum_{j=1}^c a_j \chi^{(j)}(R) \quad (R = E, A_2, A_3, \dots, A_h) \quad (9.35)$$

дает характер рассматриваемого приводимого представления. Но h соотношений (9.35) полностью определяют числа a_1, a_2, \dots, a_c . Если вычислить скалярное произведение (9.35) на $\chi^{(j')}(R)$ (т. е. умножить его на $\chi^{(j')}(R)^*$ и просуммировать по всем элементам группы), то, используя (9.33), получаем

$$\sum_R \chi(R) \chi^{(j')}(R)^* = \sum_R \sum_j a_j \chi^{(j)}(R) \chi^{(j')}(R)^* = h a_{j'}, \quad (9.36)$$

так что целое число $a_{j'}$ дается однозначно выражением

$$a_{j'} = \frac{1}{h} \sum_R \chi(R) \chi^{(j')}(R)^*. \quad (9.37)$$

Согласно (9.37), характер представления определяет, сколько раз неприводимое представление появляется в приведенной форме представления. Так, в частности, неприводимые компоненты не зависят от способа, использованного при приведении.

Кроме того, мы видим, что два представления эквивалентны, если они имеют один и тот же характер. Это значит, что они оба будут иметь одну и ту же форму после приведения и, тем самым, будут совпадать, с точностью до порядка, в котором будут появляться матрицы $D^{(j)}(R)$. Следовательно, два представления с равными характерами могут быть преобразованы к эквивалентным приведенным формам, а поэтому они сами эквивалентны.

С другой стороны, равенство характеров необходимо для эквивалентности двух представлений. Таким образом, оно является необходимым и достаточным условием их эквивалентности (т. е. они могут быть преобразованы одно в другое с помощью преобразования подобия).

Две отдельно взятые матрицы могут быть преобразованы одна в другую только в том случае, если равны их собственные значения. Равенство следов, т. е. равенство сумм их собственных значений недостаточно. Для двух представлений, однако, из предшествующего рассмотрения следует, что если сумма собственных значений одинакова для всех h пар соответствующих матриц, соответствующие собственные значения будут также попарно равны. Достаточно даже несколько меньшего. Так как характеры всех элементов группы одного и того же класса равны во всяком

представлении, равенство k пар чисел $\chi(C_1) = \chi'(C_1)$, $\chi(C_2) = \chi'(C_2)$, ... \dots , $\chi(C_k) = \chi'(C_k)$ достаточно для эквивалентности двух представлений с характеристиками χ и χ' .

Выведем еще одну формулу, относящуюся к числам неприводимых компонент, содержащихся в представлении. Если умножить (9.35) скалярно само на себя, то получим

$$\begin{aligned} \sum_R |\chi(R)|^2 &= \sum_R \sum_J a_J \chi^{(J)}(R) \sum_{J'} a_{J'} \chi^{(J')}(R)^* = \\ &= \sum_J \sum_{J'} h \delta_{JJ'} a_J a_{J'} = h \sum_J a_J^2. \end{aligned} \quad (9.38)$$

Квадрат абсолютной величины характера представления равен порядку группы h , умноженному на сумму квадратов чисел a_J , показывающих, сколько раз отдельные неприводимые представления встречаются в этом представлении. Для некоторого неприводимого представления сумма

$$\sum_R |\chi(R)|^2 = h \quad (9.38a)$$

имеет наименьшее значение h ; наоборот, если соотношение (9.38a) справедливо, то представление со следами $\chi(R)$ неприводимо, поскольку, согласно (9.38), оно содержит после приведения лишь одну компоненту.

В некоторых случаях вышеприведенные общие теоремы достаточны для нахождения неприводимых представлений. Особенно полезны для этой цели теоремы, частично доказанные на стр. 102 и 103 и дающие число неэквивалентных представлений (равное числу классов) и сумму квадратов их размерностей (равную порядку группы). Разумеется, в большинстве случаев необходимо еще и более подробное, специальное исследование.

В качестве частного случая заметим, что каждый элемент абелевой группы образует класс сам по себе, так что группа имеет столько классов, сколько в ней элементов. Так как сумма квадратов размерностей всех представлений группы равна ее порядку, размерность каждого неприводимого представления равна единице.

Кроме того, следует заметить, что каждое представление фактор-группы также является представлением полной группы, как было подчеркнуто в начале данной главы. Например, рассмотрим еще раз симметрическую группу трех объектов. Эта группа имеет одну инвариантную подгруппу E, D, F ; ее фактор-группа имеет порядок 2. Поэтому фактор-группа является абелевой и имеет два представления единичной размерности. Так как полная группа имеет только три класса, то она может иметь лишь еще одно неприводимое представление, которое должно быть двумерным, чтобы имело место равенство $1^2 + 1^2 + 2^2 = 6 = h$.

Различные неприводимые представления играют важную роль в квантовой механике, поскольку они служат для характеристики наборов состояний, имеющих одни и те же правила отбора, поведение во внешних полях и т. п. С точки зрения чистой математики изложенная выше теория, основы которой были заложены в работах Фробениуса, Бернсайда и Шура, является одним из наиболее изящных разделов алгебры. Характеристики представлений имеют также отношение к некоторым интересным проблемам теории чисел, которые в настоящей монографии не обсуждаются.

НЕПРЕРЫВНЫЕ ГРУППЫ

1. До сих пор мы имели дело только с конечными группами, т. е. с группами с конечным числом элементов. Наши три групповых постулата (ассоциативность, существование тождественного элемента и обратных элементов) можно также применить к бесконечным группам, т. е. к бесконечным множествам элементов. Например, трехмерные вещественные ортогональные матрицы, представляющие вращения в пространстве, составляют систему объектов, удовлетворяющих групповым постулатам, если только в качестве группового умножения берется матричное умножение; в этой системе объектов два последовательных вращения снова дают вращение, произведение первых двух. Подобная группа состоит из всех трехмерных матриц с определителем 1 или с определителями ± 1 и т. д. Все эти группы называются *бесконечными* группами, в противоположность *конечным* группам, рассмотренным ранее.

Если не требовать ничего больше, кроме свойств групп, обсуждавшихся выше, то понятие бесконечной группы включает с точки зрения наших целей слишком много. Например, все двумерные матрицы с определителем 1, элементами которых являются рациональные числа, образуют такую группу. Но такая система лишена свойств непрерывности, которые мы хотим предположить. Поэтому мы ограничим наше обсуждение бесконечных групп непрерывными группами. *Непрерывная группа* есть система объектов, называемых элементами группы, которые могут характеризоваться параметрами, изменяющимися непрерывно в некоторой области. Всякий набор значений этих параметров внутри этой области определяет элемент группы; и, наоборот, каждому элементу группы соответствует набор значений параметров внутри определенной области. Эти области называются *пространством группы*; между элементами группы и точками в пространстве группы имеется взаимнооднозначное соответствие.

Элементы группы, параметры которых незначительно отличаются друг от друга, называются „соседними“. Если параметр меняется непрерывно, то мы говорим, что элемент группы меняется

непрерывно. Три групповых постулата остаются справедливыми, будучи дополненными требованием непрерывности, в силу которого постулируется, что произведения и обратные элементы соседних элементов также должны быть соседними.

Примем, далее, что параметры $p_1(RS), p_2(RS), \dots, p_n(RS)$ произведения являются по крайней мере *кусочно непрерывными и дифференцируемыми* функциями параметров $p_1(R), p_2(R), \dots, p_n(R)$ и $p_1(S), p_2(S), \dots, p_n(S)$ двух сомножителей R и S . Это также требуется от зависимости параметров $p_1(R^{-1}), p_2(R^{-1}), \dots, p_n(R^{-1})$ от параметров элементов R .

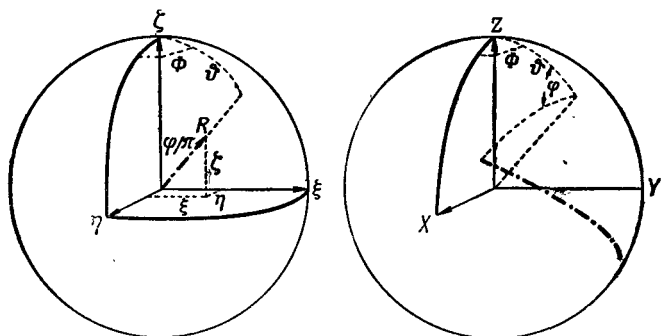
Группы, элементы которых могут быть заданы n параметрами, называются n -параметрическими группами. Область изменения параметров может быть односвязной или многосвязной или может распадаться на несколько несвязанных областей. В последнем случае мы говорим о *смешанной непрерывной группе*, в противоположность *просто непрерывной группе*, для которой область изменения параметров связна.

Рассмотрим, например, группу вращений в трехмерном пространстве — трехмерную группу вращений. Элемент группы — вещественная трехмерная ортогональная матрица — может быть характеризован, разумеется, заданием ее девяти элементов. Однако они не могут рассматриваться в качестве параметров, так как они не меняются независимо, но связаны некоторыми соотношениями. С другой стороны, если вращения характеризовать азимутальным углом Φ , полярным углом θ оси вращения и углом вращения φ , то каждой тройке значений этих чисел, лежащих в определенных областях ($0 \leq \Phi \leq 2\pi$, $0 \leq \theta \leq \pi$, $0 \leq \varphi \leq \pi$), соответствует некоторое вращение. Обратно, каждому вращению соответствует набор значений этих параметров¹⁾.

Единственным исключением является вращение с $\varphi = 0$, т. е. вращение, которое, собственно говоря, не является вовсе вращением, а представляет неизменное положение, или тождественный элемент группы. Оно соответствует всякой тройке параметров $\Phi, \theta, 0$, так что соответствие между этими параметрами и таким элементом группы не является однозначным. Для преодоления этой трудности можно было бы считать, что область изменения других параметров, Φ и θ , сжимается до нуля при $\varphi = 0$. Аналогичным образом следует положить $\Phi = 0$ при $\theta = 0$. Тогда соответствие между вращениями и тройками параметров становится однозначным. Рассмотрим, однако, непрерывную последовательность вращений на все меньшие и меньшие углы вокруг произвольной оси, т. е. вращения с параметрами $\Phi = \Phi_0$, $\theta = \theta_0$, $\varphi = t\varphi_0$, где t изменяется непрерывно.

1) Точка R пространства параметров соответствует не операции вращения, а ее результату. Поэтому вращение полностью определяется начальным и конечным положениями на сфере. Если нужно описать эту операцию, т. е. путь, по которому происходит вращение, следует указать все промежуточные положения сферы. Таким образом, для описания вращения как операции, т. е. пути, по которому достигается конечное положение, нужна кривая в пространстве параметров, или непрерывная последовательность $R(t)$ „вращений“, принимающая значение $R(0) = E$ при $t = 0$ и переходящая в $R(1) = R$.

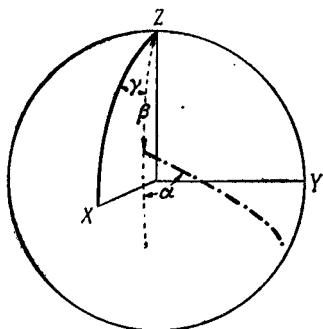
Если при $t = 0$ углы Φ и θ должны обращаться в нуль, возникает разрыв. Поэтому наивное требование, чтобы $\Phi = 0$ и $\theta = 0$ при $\varphi = 0$, неприемлемо, и следует найти другое средство для преодоления этой трудности.



Фиг. 1. Соответствие между точками в пространстве параметров и вращениями.

На схеме слева конец стрелки соответствует вращению, которое преобразует дугу, изображенную сплошной линией на схеме справа, в дугу, показанную штрихпунктирной линией.

Наиболее удобными параметрами являются, по-видимому, декартовы координаты ξ , η , ζ точки с полярными координатами φ/π , θ , Φ , причем $\xi = (\varphi/\pi) \sin \theta \cos \Phi$, $\eta = (\varphi/\pi) \sin \theta \sin \Phi$ и $\zeta = (\varphi/\pi) \cos \theta$. Преобразование покоя, тождественный элемент группы, которое раньше соответствовало параметрам Φ , θ , 0 , соответствует теперь одной-единственной точке $\xi = \eta = \zeta = 0$ — началу системы координат. Соответствие между точками



Фиг. 2. Вращение на фиг. 1, которое переводит дугу, изображенную сплошной линией, в дугу, проведенную штрихпунктирной линией, может также описываться углами Эйлера α , β и γ .

в пространстве параметров и вращениями показано на фиг. 1. Каждое вращение соответствует одной точке внутри единичной сферы в пространстве $\xi\eta\zeta$.

В этой параметризации имеется также исключение, так что соответствие элементов группы тройкам параметров не является взаимнооднозначным. Две противоположные точки сферической поверхности должны отождествляться, и переход из какой-либо точки сферической поверхности в пространстве $\xi\eta\zeta$ в противоположную ей точку не следует рассматривать как разрыв пути.

Таким образом, пространство параметров стало *многосвязным*, а соответствие между элементами группы и точками в пространстве параметров — взаимнооднозначным. Эти параметры особенно удобны поэтому для рассмотрения *принципиальных* вопросов, относящихся к группе вращения.

Само собой разумеется, что это ни в какой мере не препятствует выбору других параметров для формальных расчетов (например, углов Эйлера, фиг. 2), для которых соответствие не является взаимнооднозначным, но с помощью которых явные формулы могут быть записаны проще.

2. Часть группы, соседняя с тождественным элементом, известна как *инфинитезимальная группа*. Фундаментальная работа С. Ли¹⁾ относилась к инфинитезимальным группам групп преобразований. Мы можем коснуться этих исследований лишь поверхностно и ограничиться основными фактами, опуская все доказательства существования и сходимости. В случае интересующих нас групп доказательства существования могут быть заменены явным указанием „инфинитезимальных элементов“.

В дальнейшем h будет означать бесконечно малое число. Пусть параметры тождественного элемента группы будут $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_n$. Тогда рассмотрим n элементов F_1, E_2, \dots, F_n , причем параметры F_k заданы в виде $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_k + h, \pi_{k+1}, \dots, \pi_n$. Элементы $E, F_k, F_k^2, F_k^3, \dots$ все лежат в одной и той же окрестности, если h достаточно мало, и, таким образом, образуют почти непрерывный набор элементов группы. Чтобы отойти на какое-то расстояние от единичного элемента группы, нужно переходить к очень высоким степеням элемента F_k . Такое однопараметрическое семейство (коммутирующих!) элементов группы соответствует периоду элементов конечной группы.

Просто непрерывная однопараметрическая группа всегда абелева, так как она состоит из одного-единственного периода.

В параметризации трехмерной группы вращений, показанной на фиг. 1, параметрами тождественного элемента являются $\xi = \eta = \zeta = 0$; три бесконечно малых элемента $\{h, 0, 0\}$, $\{0, h, 0\}$ и $\{0, 0, h\}$ являются тремя бесконечно малыми углами вращений вокруг трех координатных осей

Рассмотрим теперь n -параметрическое семейство $F_1^{p_1}, F_2^{p_2}, \dots, F_n^{p_n}$. Ограничимся при этом теми значениями h и p_1, p_2, \dots, p_n , для которых все элементы семейства лежат в окрестности тождественного элемента; эти элементы охватывают тогда всю инфинитезимальную группу, поскольку она является n -параметрической. Удобно, по крайней мере, для инфинитезимальных групп, вводить p_1, p_2, \dots, p_n в качестве параметров. Все n параметров тожде-

¹⁾ S. Lie, Vorlesungen über kontinuierliche Gruppen mit geometrischen und anderen Anwendungen, Leipzig, 1893.

ственного элемента равны нулю; параметры элементов инфинитезимальной группы очень малы.

Элементы инфинитезимальной группы коммутируют. Если параметры двух сомножителей R и S являются величинами порядка малого числа ε , то разность между параметрами элементов RS и SR будет порядка ε^2 . Рассмотрим элементы $R(t)$ и $S(t')$ с параметрами tr_1, tr_2, \dots, tr_n и $t's_1, t's_2, \dots, t's_n$, где t и t' — непрерывные переменные. Иначе говоря, $E = R(0) = S(0)$, и t и t' — величины порядка ε . Параметры элементов $R(t)S(t')$ и $S(t')R(t)$ можно разложить в ряды Маклорена по t и t' . Ряды для n параметров элементов $R(t)S(t')$ и $S(t')R(t)$ будут иметь вид

$$u_1 + tv_1 + t'\omega_1 + \dots, u_2 + tv_2 + t'\omega_2 + \dots, \dots, \\ u_n + tv_n + t'\omega_n + \dots$$

и

$$\bar{u}_1 + t\bar{v}_1 + t'\bar{\omega}_1 + \dots, \bar{u}_2 + t\bar{v}_2 + t'\bar{\omega}_2 + \dots, \dots, \\ \bar{u}_n + t\bar{v}_n + t'\bar{\omega}_n + \dots$$

Чтобы определить u и \bar{u} , положим $t = t' = 0$. Тогда оба произведения $R(0)S(0)$ и $S(0)R(0)$ равны E , и все u и \bar{u} равны нулю:

$$u_1 = u_2 = \dots = u_n = \bar{u}_1 = \bar{u}_2 = \dots = \bar{u}_n = 0.$$

Чтобы определить v и \bar{v} , положим лишь $t' = 0$; тогда $R(t)S(0) = R(t)E = R(t)$ и $S(0)R(t) = ER(t) = R(t)$. Поэтому $v_1 = \bar{v}_1 = r_1$, $v_2 = \bar{v}_2 = r_2, \dots, v_n = \bar{v}_n = r_n$. Аналогичным образом, полагая $t = 0$, получаем $\omega_1 = \bar{\omega}_1 = s_1, \omega_2 = \bar{\omega}_2 = s_2, \dots, \omega_n = \bar{\omega}_n = s_n$. Это показывает, что параметры рассматриваемых двух произведений одинаковы в пределах рассматриваемых членов. Разница проявляется только в членах, пропорциональных t^2, tt' и t'^2 , а все эти члены являются величинами порядка ε^2 .

Коммутативность бесконечно малых элементов с учетом членов первого порядка опирается на тот факт, что для произвольных R и $S = E$, а также для произвольных S и $R = E$ коммутативность имеет место точно. Если R лишь слегка отличается от E , коммутативность сохраняется приближенно; аналогично приближенная коммутативность будет иметь место при $S \sim E$. Но если одновременно $R \sim E$ и $S \sim E$, то коммутативность выполняется особенно хорошо.

Эта теорема принимает очень простой вид для матричных групп. Элементы в окрестности тождественного элемента имеют вид $1 + \varepsilon a$. Тогда

$$(1 + \varepsilon a)(1 + \varepsilon b) = 1 + \varepsilon(a + b) + \varepsilon^2 ab$$

и

$$(1 + \varepsilon b)(1 + \varepsilon a) = 1 + \varepsilon(b + a) + \varepsilon^2 ba,$$

а эти выражения различаются лишь членами порядка ε^2 .

Вышеуказанный выбор параметров, при котором элементам $F_1^{p_1}, F_2^{p_2}, \dots, F_n^{p_n}$ соответствуют параметры p_1, p_2, \dots, p_n , имеет то специальное свойство, что параметры произведения двух элементов инфинитезимальной группы могут быть получены, если пренебречь членами высших порядков, путем простого сложения параметров отдельных множителей.

3. В смешанной непрерывной группе все те элементы, которые могут быть получены непрерывным образом из тождественного элемента E , образуют подгруппу, являющуюся просто непрерывной. В утверждении, что некоторый элемент может быть получен непрерывным образом из тождественного, подразумевается, что существует непрерывное множество элементов $R(t)$, начинающееся с $R(0) = E$ и кончающееся на $R(1) = R$ при $t = 1$. Если R и S — два элемента этого множества, и если $R(t)$ и $S(t)$ — два соответствующих пути, то и произведение $R(1)S(1) = RS$ может быть также получено из тождественного элемента непрерывным образом. Соответствующий путь может быть $R(t)S(t)$. То же самое имеет место для элемента, обратного R , а соответствующий путь есть $R(t)^{-1}$. Поэтому элементы, достижимые непрерывным образом из тождественного элемента, образуют подгруппу, являющуюся простой непрерывной, так как соответствующая область пространства параметров односвязна.

Элементы, достижимые непрерывным образом из тождественного элемента, образуют даже *инвариантную подгруппу* смешанной непрерывной группы. Действительно, если R может быть достигнуто непрерывным образом из тождественного элемента, то это будет справедливо также для $X^{-1}RX$, скажем, по пути $X^{-1}R(t)X$. Смежными классами этой инвариантной подгруппы являются другие несвязные части пространства параметров. Таким образом, факторгруппу можно считать конечной группой порядка, равного числу несвязных частей пространства параметров.

Введем для дальнейшего обозначение $\{r_1, r_2, \dots, r_n\}$ для элемента группы с параметрами r_1, r_2, \dots, r_n . Тогда между обозначениями имеются тождественные соотношения

$$p_k(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) = r_k \text{ и } \{p_1(R), p_2(R), \dots, p_n(R)\} = R.$$

4. Представление непрерывной группы определяется точно так же, как и для конечной группы. Между каждым элементом группы и матрицей $D(R)$ существует соответствие, так что $D(R)D(S) = D(RS)$. Единственным дополнительным требованием является непрерывность представления. Оно заключается в том, чтобы для двух соседних элементов группы R и S все l^2 элементов матрицы $D(R)_{\gamma\lambda}$ отличались бесконечно мало от соответствующих элементов матрицы $D(S)_{\gamma\lambda}$. Здесь мы также ограничимся представлениями с отличными от нуля определителями.

Распространим теоремы для представлений конечных групп на представления непрерывных групп. При этом можно начать с того обстоятельства, что в первых четырех теоремах и, в частности, при доказательстве соотношений ортогональности (9.30) и (9.31), мы пользовались лишь одним свойством группы, а именно тем, что можно составить сумму $\sum_R J_R$, для которой

$$\sum_R J_R = \sum_R J_{SR}, \quad (10.1)$$

где суммирование распространяется на все элементы группы. Здесь J_R — совершенно произвольные числа (или матрицы), соответствующие каждому элементу группы R , причем соотношение (10.1) справедливо для любого элемента S . В обеих суммах в (10.1) содержатся одни и те же члены, но в различном порядке.

С помощью одной из таких сумм, а именно $\sum_R \mathbf{D}(R) \mathbf{D}(R)^\dagger$, мы показали (гл. 9, теорема 1), что представление может быть сделано унитарным. Соотношение ортогональности (гл. 9, теорема 4) также было доказано путем рассмотрения суммы

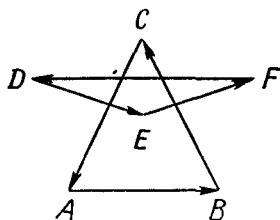
$$\sum_R \mathbf{D}^{(j)}(R) \mathbf{X} \mathbf{D}^{(j')}(R^{-1}).$$

Теоремы 2 и 3 имели большую связь с теорией матриц. Для их распространения на представления непрерывных групп не требуется привлечения новых групповых свойств.

Если бы можно было определить что-то аналогичное сумме $\sum_R J_R$ для непрерывных групп (естественно, это был бы интеграл, взятый по всей области изменения параметров), то четыре теоремы теории представлений конечных групп могли бы быть перенесены на непрерывные группы.

5. В случае конечных групп соотношение (10.1) основано на том факте, что последовательность $SE, SA_2, SA_3, \dots, SA_h$ для произвольного S совпадает, с точностью до порядка, с последовательностью E, A_2, A_3, \dots, A_h . Мы приходим к следующему заключению, тривиальному для случая конечных групп. Если группа параметризована по аналогии со случаем непрерывных групп, то эти две последовательности обладают тем свойством, что одно и то же число элементов группы (один) соответствует каждому элементу объема в пространстве параметров (в этом случае „элементы объема“ являются просто точками, соответствующими дискретному набору значений параметров). Поэтому возможность распространить соотношение (10.1) на непрерывный случай зависит от того, сможем ли мы сохранить это свойство в нашем обобщении,

На фиг. 3 приведена схема действия умножения на F слева всех элементов группы перестановок трех объектов (7.E.1). Такое умножение преобразует каждый элемент в элемент, указываемый стрелкой, идущей от рассматриваемого элемента. Эта схема иллюстрирует тот факт, что совокупность элементов FR совпадает с совокупностью элементов R , если последняя образует группу.



Фиг. 3. Схематическое представление умножения каждого элемента группы перестановок трех объектов (7.E.1) на элемент F слева.

То же самое имеет место не только для F , но и для всех элементов S группы. Соотношение (10.1) является прямым следствием этого обстоятельства.

Такое же соотношение можно было бы сразу установить для непрерывных групп, если бы в них можно было выбрать множества элементов со сходными свойствами и если последовательность этих множеств могла бы быть выбрана так, чтобы плотность элементов группы в множествах увеличивалась всюду при переходе от одного множества последовательности к другому. Иными словами, соотношение (10.1) могло бы быть легко установлено для непрерывных групп, если бы можно было задать последовательность конечных подгрупп, элементы которых образуют все более и более плотное многообразие в пространстве группы. К сожалению, это невозможно (за исключением абелевых групп); непрерывные группы не могут рассматриваться в общем случае как предельный случай конечных групп. Так, например, наиболее обширной конечной подгруппой трехмерной группы вращений, элементы которой распределены по всему пространству группы, является группа симметрии икосаэдра, имеющая лишь 60 элементов. (Трехмерная группа вращений имеет конечные подгруппы порядка более 60. Они являются, однако, группами симметрии плоских правильных многоугольников и вовсе не заполняют пространство группы равномерно.)

Поскольку большинство непрерывных групп не может рассматриваться как предельные случаи конечных групп, аналоги сумм, входящих в (10.1), должны находиться другим способом. Плотное заполним пространство группы точками. Если обозначить эти точки через R_1, R_2, \dots , то в общем случае невозможно добиться того, чтобы множество точек SR_1, SR_2, \dots совпадало с множеством точек

R_1, R_2, \dots для всех S , которые сами расположены плотно в пространстве группы. Однако точки R_1, R_2, \dots в пространстве группы можно расположить таким образом, чтобы *плотность* точек SR_1, SR_2, \dots была такой же во всех частях пространства группы, как и *плотность* точек R_1, R_2, \dots в тех же частях пространства группы. Это позволит нам определить интеграл по группе, для которого имеет место соотношение, являющееся аналогом (10.1). Таким образом, схема на фиг. 3 заменяется другой схемой, в которой концы (острия) стрелок, изображающих точки SR_1, SR_2, \dots , не совпадают с их началами, т. е. точками R_1, R_2, \dots . Однако плотность концов стрелок будет всюду равна плотности точек R_1, R_2, \dots , из которых они исходят. При таком „инвариантном“ распределении“ для любой непрерывной функции в пространстве параметров $J(R)$ равенство

$$\sum_i J(R_i) = \sum_i J(SR_i) \quad (10.2)$$

(где R пробегает все пространство группы) имеет место для непрерывных функций в пространстве группы, так как число элементов группы в правой части (10.2), соответствующее элементу объема в пространстве параметров около $SR_i = Q_i$, совпадает с числом элементов группы R_i , содержащихся в том же элементе объема.

Для удобства вычислений сумма в левой части (10.2) заменяется интегралом

$$\int J(R) dR = \int J(R) g(R) dp_1 dp_2 \dots dp_n, \quad (10.2a)$$

где p_1, p_2, \dots, p_n — параметры элемента R , а интегрирование распространяется на все значения этих параметров, которые определяют элементы группы, т. е. на все пространство группы. Весовая функция $g(R)$ является просто плотностью точек R_i в сумме (10.2) в окрестности элемента R . Левая часть (10.2a) представляет собой сокращенное обозначение интеграла в правой части; он называется *интегралом Гурвица*, или инвариантным интегралом по пространству группы. Из инвариантной природы плотности $g(R)$ следует, что равенство

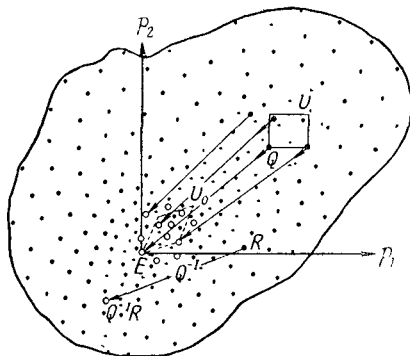
$$\int J(SR) dR = \int J(R) dR \quad (10.2b)$$

справедливо для всякой непрерывной функции J в пространстве группы (всякой непрерывной функции параметров группы) и для каждого элемента группы S .

Остается лишь показать, что в пространстве группы действительно можно построить инвариантную плотность, и определить эту плотность. Мы пойдем обратным путем: сначала найдем плотность из предположения об ее инвариантности, а затем покажем

инвариантный характер полученного распределения. Прежде чем находить инвариантное распределение, следует заметить, что оно может быть определено только с точностью до постоянного множителя; ясно, что если плотность $g(R)$ инвариантна, то всякая плотность, кратная ей, будет также инвариантна. Плотность вблизи одной из точек может быть выбрана произвольно; мы примем, что плотность в окрестности единичного элемента $g(E)$ равна g_0 .

Рассмотрим теперь малый элемент объема U в окрестности элемента группы Q (см. фиг. 4). Если величину этого элемента



Фиг. 4. Точки на схеме являются точками суммирования R_i в (10.2); положения, в которые эти отдельные точки переводятся при умножении слева на Q^{-1} , показаны светлыми кружками. В окрестности тождественного элемента плотности точек и кружков равны.

объема обозначить через V , то в нем имеются $g(Q)V$ точек суммирования. Применим теперь постулат инвариантности распределения по отношению к умножению слева на Q^{-1} . Тогда элемент объема U преобразуется в элемент объема U_0 (см. фиг. 4), содержащий все точки $Q^{-1}R$, причем R находится в U . Обозначим величину элемента объема U_0 через V_0 ; тогда число точек суммирования в U_0 должно быть равно g_0V_0 , поскольку U_0 находится в окрестности единичного элемента. Число точек суммирования $Q^{-1}R_i$ в том же самом объеме равно, однако, $g(Q)V$, так что требование инвариантности дает $g(Q)V = g_0V_0$, или

$$g(Q) = \frac{V_0}{V} g_0.$$

Весовая функция $g(Q)$ пропорциональна увеличению, которое элемент объема вблизи Q испытывает при проектировании на окрестность единичного элемента путем умножения слева на Q^{-1} .

Чтобы вычислить V_0/V , допустим, что U состоит из элементов группы, первый параметр которых лежит между q_1 и $q_1 + \Delta_1$, второй — между q_2 и $q_2 + \Delta_2$, ..., n -й параметр лежит между q_n и $q_n + \Delta_n$, где q_1, q_2, \dots, q_n — параметры элемента Q . Тогда объем U равен

$$V = \Delta_1 \Delta_2 \dots \Delta_n.$$

Если предположить, что параметры элемента $E = Q^{-1} \{q_1, q_2, \dots, q_n\}$ равны нулю, то объем области U_0 при пренебрежении членами более высоких порядков относительно Δ будет равен

$$V_0 = \left| \begin{array}{cccc} p_1(Q^{-1}\{q_1+\Delta_1, q_2, \dots, q_n\}) & \dots & \dots & p_n(Q^{-1}\{q_1+\Delta_1, q_2, \dots, q_n\}) \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ p_1(Q^{-1}\{q_1, q_2, \dots, q_n+\Delta_n\}) & \dots & \dots & p_n(Q^{-1}\{q_1, q_2, \dots, q_n+\Delta_n\}) \end{array} \right| = \\ = \Delta_1 \Delta_2 \dots \Delta_n \times \\ \times \frac{\partial [p_1(Q^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}), p_2(Q^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}), \dots, p_n(Q^{-1}\{r_1, \dots, r_n\})]}{\partial [r_1, r_2, \dots, r_n]},$$

причем последнее выражение вычисляется при $r_1 = p_1(Q) = q_1, r_2 = p_2(Q) = q_2, \dots, r_n = p_n(Q) = q_n$. Напомним, что $\{q_1, \dots, q_n\}$ — элемент группы с параметрами q_1, \dots, q_n и что $p_i(R)$ есть i -й параметр элемента группы R . При дифференцировании по q_i элемент группы Q должен рассматриваться постоянным; переменными являются только r_i ¹⁾.

Это равенство дает для $g(Q)$ якобиан

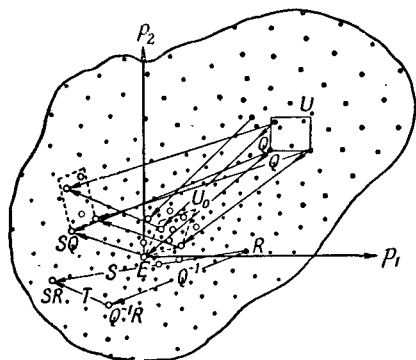
$$g(Q) = g_0 \frac{\partial [p_1(Q^{-1}\{q_1, \dots, q_n\}), \dots, p_n(Q^{-1}\{q_1, \dots, q_n\})]}{\partial [q_1, \dots, q_n]}, \quad (10.3)$$

вычисляемый при $q_1 = p_1(Q), \dots, q_n = p_n(Q)$ и являющийся явной формулой для плотности, которую следует принять в окрестности элемента Q с тем, чтобы подстановка $Q^{-1}R_i$ вместо R_i не меняла числа элементов группы в окрестности тождественного элемента. Наоборот, это выражение можно рассматривать как плотность вблизи Q после подстановки QE вместо E , если плотность вблизи тождественного элемента была равна g_0 до подстановки.

Если плотность точек R_i дается выражением (10.3) в каждой точке Q , то плотность точек $Q^{-1}R_i$ будет равна g_0 в окрестности единичного элемента для любого Q . Кроме того, плотность точек QR_i будет даваться выражением (10.3) в окрестности Q , если плотность точек R_i равна g_0 в окрестности E , так как преобразование $R_i \rightarrow QR_i$ лишь возвращает точки туда, откуда они „пришли“. Это справедливо также для любого Q . Однако следует еще показать, что плотность точек SR_i дается выражением (10.3) во всякой точке $T = SQ$, если плотность точек R_i равна (10.3) во всякой точке Q . Чтобы доказать это, разобьем преобразование S на два множителя: $S = (SQ)Q^{-1}$. Согласно первому замечанию, плотность точек $Q^{-1}R_i$ в окрестности единичного элемента будет равна g_0 .

¹⁾ Значения $p_k(Q)$ для r_k вводятся после дифференцирования. Формула (10.3) является выражением вида „ $(\partial/\partial x)f(x, y)$ при $x = y$ “. Если, например, $f(x, y) = x^2y^3$, то $df(x, y)/dx = 2y^3$ при $x = y$.

Следовательно, второе замечание можно применить к распределению $Q^{-1}R_i$. Это осуществляется заменой Q на $SQ = T$ и показывает, что плотность точек $(SQ)Q^{-1}R_i$ дается выражением (10.3). В силу ассоциативности группового умножения точки $(SQ)Q^{-1}R_i$ являются точками SR_i ; таким образом, мы показали, что плотность этих точек дается выражением (10.3) в произвольной точке T , если плотность точек R_i выражается тем же равенством. Фиг. 5 иллюстрирует это доказательство, основанное, как легко заметить, на свойстве ассоциативности умножения.



Фиг. 5. Схема (в тех же обозначениях, что и на Фиг. 4) разделения подстановки SR вместо R на два этапа: на подстановку $Q^{-1}R$ вместо R и подстановку $SQQ^{-1}R$ для окончательной точки.

Следует заметить, что если $J(R)$ нигде не отрицательно (т. е. ни для одного R), то выражение (10.2а) может обращаться в нуль только в том случае, если $J(R)$ всюду равно нулю. Это обстоятельство существенно для нового вывода теоремы 1 предыдущей главы.

Рассмотрим теперь явное выражение инвариантного интеграла Гурвица и покажем еще раз путем прямого вычисления, что выбор функции плотности, определенной выражением (10.3), действительно сводит (10.2б) к тождеству. Интеграл в правой части (10.2б) равен

$$\int J(R) dR = \int \dots \int J(\{r_1, \dots, r_n\}) g(\{r_1, \dots, r_n\}) dr_1 \dots dr_n, \quad (10.4)$$

где интегрирование распространяется на всю область изменения параметров. Покажем, что равенство

$$\begin{aligned} \int J(R) dR &\equiv \int \dots \int J(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) g(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) \times \\ &\times dr_1 \dots dr_n = \int J(SR) dR = \int \dots \int J(S\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) \times \\ &\times g(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) dr_1 \dots dr_n \end{aligned} \quad (10.5)$$

имеет место для всех элементов S , если только $g(R)$ задается выражением (10.3).

Сначала введем новые переменные в интеграле в правой части (10.5), а именно, параметры $x_1, x_2, x_3, \dots, x_n$ произведения

$$X = \{x_1, x_2, \dots, x_n\} = SR = S\{r_1, r_2, \dots, r_n\}.$$

Иначе говоря,

$$x_k = p_k(S\{r_1, r_2, \dots, r_n\}), \quad (10.6)$$

$$r_k = p_k(S^{-1}\{x_1, x_2, \dots, x_n\}). \quad (10.6a)$$

Область интегрирования не меняется, так как SR , так же как и R , пробегает всю группу. Тогда получаем

$$\begin{aligned} \int J(SR) dR &= \int \dots \int J(S\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) g(\{r_1, r_2, \dots, r_n\}) \times \\ &\times dr_1 \dots dr_n = \int \dots \int J(\{x_1, x_2, \dots, x_n\}) \times \\ &\times g(R) \frac{\partial(r_1, r_2, \dots, r_n)}{\partial(x_1, x_2, \dots, x_n)} dx_1 \dots dx_n, \end{aligned}$$

где R и параметры r_i рассматриваются как функции параметров x_i , согласно (10.6a). Если теперь взять $g(R)$ из (10.3), то можно скомбинировать последние два множителя подынтегрального выражения, согласно теореме о якобианах неявных функций¹⁾:

$$\begin{aligned} g_0 \frac{\partial[\dots p_k(R^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}) \dots]}{\partial[\dots r_k \dots]} \frac{\partial(r_1, \dots, r_n)}{\partial(x_1, \dots, x_n)} &= \\ = g_0 \frac{\partial[\dots p_k(R^{-1}\{r_1, \dots, r_n\}) \dots]}{\partial[\dots x_k \dots]} &; \quad (10.7) \end{aligned}$$

при этом якобиан вычисляется при $r_1 = p_1(R), \dots, r_n = p_n(R)$, где R^{-1} рассматривается постоянным при дифференцировании по x_i , так же как и в (10.3), а параметры r_k считаются функциями (10.6a) от x_i . Следовательно, если $\{r_1, r_2, \dots, r_n\} = S^{-1} \cdot \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ подставлено в равенство (10.7), то (в силу $R^{-1}S^{-1} = X^{-1}$) получаем соотношение

$$g_0 \frac{\partial[\dots p_k(X^{-1}\{x_1, \dots, x_n\}) \dots]}{\partial[\dots x_k \dots]} = g(\{x_1, \dots, x_n\}),$$

которое вычислено²⁾ при $x_1 = p_1(X), \dots, x_n = p_n(X)$. Таким образом, правая часть равенства (10.5) действительно совпадает с левой с точностью до обозначений переменных интегрирования.

¹⁾ Если (10.7) имеет место для произвольных значений параметров r_k , то это равенство справедливо также для значения $r_k = p(R)$, требуемого для (10.3).

²⁾ Значения $p_k(X)$ переменных x_k подставляются здесь после дифференцирования.

Формулу (10.3) можно переписать с использованием равенства $Q^{-1} \cdot \{q_1, q_2, \dots, q_n\} = \{e_1, e_2, \dots, e_n\} = E$, с помощью которого вводятся новые переменные e вместо переменных q , рассматриваемых на какой-то момент как свободно меняющиеся (тогда как Q является постоянным элементом группы). Теорема о якобианах неявных функций дает

$$\frac{\partial [\dots p_k (\{e_1, e_2, \dots, e_n\}) \dots]}{\partial [\dots e_k \dots]} = \frac{\partial [\dots p_k (Q^{-1} \{q_1, \dots, q_n\}) \dots]}{\partial [\dots q_k \dots]} \frac{\partial (\dots q_k \dots)}{\partial (\dots e_k \dots)},$$

где q_k — функции от e_k , т. е. $q_k = p_k(Q \{e_1, e_2, \dots, e_n\})$. Так как $p_k(\{e_1, e_2, \dots, e_n\}) = e_k$, левая часть последнего равенства просто равна 1 и, выражая q_k через e_k , мы получаем

$$\begin{aligned} \frac{\partial [\dots p_k (Q^{-1} \{q_1, \dots, q_n\}) \dots]}{\partial [\dots e_k \dots]} &= \left[\frac{\partial (\dots q_k \dots)}{\partial (\dots e_k \dots)} \right]^{-1} = \\ &= \left[\frac{\partial [\dots p_k (Q \{e_1, \dots, e_n\}) \dots]}{\partial [\dots e_k \dots]} \right]^{-1}. \end{aligned} \quad (10.8)$$

Значение выражения в левой части при $q_k = p_k(Q)$ равно значению выражения в правой части при $e_k = p_k(E)$. Тогда для (10.3) можно написать

$$g(Q) = g_0 \left[\frac{\partial [p_1(Q \{e_1, \dots, e_n\}), \dots, p_n(Q \{e_1, \dots, e_n\})]}{\partial [e_1, \dots, e_n]} \right]^{-1}, \quad (10.9)$$

причем $e_1 = p_1(E), \dots, e_n = p_n(E)$ (см. пример на стр. 182).

Фактический расчет функции плотности $g(R)$ для интеграла Гурвица часто весьма трудоемок, если непосредственно вычислять величины в (10.3) или (10.9). Для многих целей (в частности, для вывода соотношений ортогональности гл. 9 применительно к непрерывным группам) требуется лишь знать, что инвариантный интеграл *существует*.

6. Для смешанных непрерывных групп интеграл Гурвица может быть выражен через интеграл Гурвица для той части группы, которая связана с единичным элементом. Обозначим область, связанную с единичным элементом, через \mathfrak{G}_1 , а остальные связанные области — через $\mathfrak{G}_2, \mathfrak{G}_3, \dots, \mathfrak{G}_\rho$.

Элементы области \mathfrak{G}_1 образуют подгруппу (фактически, инвариантную подгруппу), причем \mathfrak{G}_ν являются смежными классами по этой подгруппе, как мы уже видели на стр. 119. Если взять по одному элементу, например A_ν , из каждой области \mathfrak{G}_ν , то путем умножения на A_ν область \mathfrak{G}_1 можно спроектировать на \mathfrak{G}_ν . Так

как веса областей, которые могут быть спроектированы одна на другую, равны, то интеграл

$$\int_{\mathfrak{G}_1} [J(R) + J(A_2R) + \dots + J(A_pR)] dR = \\ = \int_{\mathfrak{G}_1} [J(SR) + J(SA_2R) + \dots + J(SA_pR)] dR, \quad (10.10)$$

взятый по \mathfrak{G}_1 , инвариантен относительно умножения элементов группы на произвольный элемент группы S . Таким образом, интеграл Гурвица для полной группы инвариантен, если $\int_{\mathfrak{G}_1} \dots dR$ означает интеграл Гурвица для просто непрерывной подгруппы \mathfrak{G}_1 .

Так как $A_\nu R$ пробегает все элементы смежного класса \mathfrak{G}_ν , когда R пробегает подгруппу \mathfrak{G}_1 , то для каждого смежного класса по \mathfrak{G}_1 в левой части (10.10) появляется по одному члену. Но правая часть (10.10) также включает по одному члену для каждого смежного класса; смежный класс $\mathfrak{G}_\nu = A_\nu \mathfrak{G}_1$ представлен членом, в который входит $SA_\mu R$, если $\mathfrak{G}_\mu = A_\mu \mathfrak{G}_1$ является смежным классом, содержащим $S^{-1}A_\nu$. Покажем, что

$$\int_{\mathfrak{G}_1} J(A_\nu R) dR = \int_{\mathfrak{G}_1} J(SA_\mu R) dR, \quad (10.11)$$

откуда следует, что соответствующие члены в правой и левой частях (10.10) равны.

Пусть $S^{-1}A_\nu$ содержится в смежном классе $A_\mu \mathfrak{G}_1$. Пусть также $A_\mu T = S^{-1}A_\nu$, т. е. $A_\mu = S^{-1}A_\nu T^{-1}$, где T содержится в подгруппе \mathfrak{G}_1 . Тогда подстановка этого выражения в (10.11) дает

$$\int_{\mathfrak{G}_1} J(A_\nu R) dR = \int_{\mathfrak{G}_1} J(S \cdot S^{-1}A_\nu T^{-1}R) dR = \int_{\mathfrak{G}_1} J(A_\nu T^{-1}R) dR.$$

Это соотношение, очевидно, справедливо, так как его правая часть отличается от левой только тем, что вместо R стоит $T^{-1}R$, а, согласно гипотезе, интеграл Гурвица по \mathfrak{G}_1 инвариантен относительно такой подстановки (T^{-1} является элементом \mathfrak{G}_1).

Это показывает эквивалентность выражения (10.10) интегралу Гурвица для полной смешанной непрерывной группы и одновременно сводит его к интегралу, взятому по той части группы, которая просто связана с тождественным элементом. (Вся эта аргументация справедлива, разумеется, не только для \mathfrak{G}_1 , но и для любой подгруппы с конечным индексом.)

7. Из соотношения (10.5) следует точно так же, как и для конечных групп, что всякое представление можно преобразовать в унитарное (гл. 9, теорема 1), если только сходится интеграл

$$\int D(R)_{\alpha\lambda} D(R)_{\mu\lambda}^* dR.$$

Это всегда выполняется, если только объем группы $\int dR$ конечен, как, например, в случае группы вращения. Соотношение ортогональности для коэффициентов представлений (гл. 9, теорема 4) принимает вид

$$\int D^{(\nu)}(R)_{\alpha\lambda}^* D^{(\nu')}(R)_{\alpha'\lambda'} dR = \frac{\delta_{\nu\nu'} \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\lambda\lambda'}}{l_\nu} \int dR, \quad (10.12)$$

где l_ν — размерность представления $D^{(\nu)}(R)$. В соответствии с этим соотношение ортогональности (9.33) для характеров принимает вид

$$\int \chi^{(\nu)}(R)^* \chi^{(\nu')}(R) dR = \delta_{\nu\nu'} \int dR. \quad (10.13)$$

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ И СОБСТВЕННЫЕ ФУНКЦИИ

1. Рассмотрим уравнение Шредингера $H\psi = E\psi$ для системы, состоящей из двух *тождественных частиц*. Примем ради простоты, что каждая частица имеет одну степень свободы; пусть их координатами будут x и y . Тогда

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi(x, y) + V(x, y) \psi(x, y) = E\psi(x, y), \quad (11.1)$$

где m — масса каждой из частиц. Так как частицы тождественны, потенциальная энергия должна быть одинаковой как в случае, когда первая частица находится в положении a , а вторая — в положении b , так и в случае, когда первая находится в b , а вторая — в a . Иначе говоря, для всех значений a и b

$$V(a, b) = V(b, a). \quad (11.2)$$

Предположим, что (11.1) имеет дискретный спектр и что $\psi_x(x, y)$ принадлежит дискретному собственному значению E_x . Примем также, что этому собственному значению не принадлежат другие линейно независимые собственные функции; тогда наиболее общее решение дифференциального уравнения для ψ_x :

$$H\psi_x = E_x\psi_x, \quad (11.3)$$

обращающееся в нуль при стремлении x или y к $+\infty$ или $-\infty$, является произведением ψ_x на константу.

Рассмотрим функцию $P\psi_x = \bar{\psi}_x$, определенную таким образом, что

$$P\psi_x(a, b) = \bar{\psi}_x(a, b) = \psi_x(b, a) \quad (11.4)$$

для всех значений a и b . Покажем, что $\bar{\psi}_x(a, b)$ также является решением дифференциального уравнения (11.3). Временно обозначим производную функции $f(x, y)$ по первой переменной через

$f^{(1)}(x, y)$, а по второй переменной — через $f^{(2)}(x, y)$. Иначе говоря

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} &= f^{(1)}(x, y), & \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} &= f^{(2)}(x, y), \\ \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} &= \frac{\partial f^{(1)}(x, y)}{\partial x} = f^{(1)(1)}(x, y) \end{aligned} \quad (11.5)$$

и т. д. Аналогичным образом

$$\frac{\partial f(y, x)}{\partial x} = f^{(2)}(y, x), \quad \frac{\partial f(y, x)}{\partial y} = f^{(1)}(y, x).$$

Тогда дифференцирование функции (11.4) по a и b дает

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_x^{(1)}(a, b) &= \psi_x^{(2)}(b, a), & \bar{\psi}_x^{(1)(1)}(a, b) &= \psi_x^{(2)(2)}(b, a), \\ \bar{\psi}_x^{(2)}(a, b) &= \psi_x^{(1)}(b, a), & \bar{\psi}_x^{(2)(2)}(a, b) &= \psi_x^{(1)(1)}(b, a). \end{aligned} \quad (11.6)$$

Вычислим теперь

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\bar{\psi}_x(x, y) &= -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \bar{\psi}_x(x, y) + V(x, y) \bar{\psi}_x(x, y) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\bar{\psi}_x^{(1)(1)}(x, y) + \bar{\psi}_x^{(2)(2)}(x, y)] + V(x, y) \bar{\psi}_x(x, y). \end{aligned} \quad (11.7)$$

Используя (11.6), (11.4), (11.2) и (11.3), получаем уравнение

$$\begin{aligned} \mathbf{H}\bar{\psi}_x(x, y) &= -\frac{\hbar^2}{2m} [\psi_x^{(2)(2)}(y, x) + \psi_x^{(1)(1)}(y, x)] + V(y, x) \psi_x(y, x) = \\ &= E_x \psi_x(y, x) = E_x \bar{\psi}_x(x, y). \end{aligned} \quad (11.8)$$

Таким образом, $\mathbf{P}\psi_x(x, y) = \bar{\psi}_x(x, y)$ также является решением дифференциального уравнения (11.3), удовлетворяющим тем же граничным условиям на $\pm \infty$. Оно должно быть, следовательно, кратным функции $\psi_x(x, y)$:

$$\bar{\psi}_x(x, y) = c\psi_x(x, y). \quad (11.9)$$

Чтобы определить постоянную c , заметим, что в силу (11.4),

$$c\psi_x(a, b) = \bar{\psi}_x(a, b) = \psi_x(b, a) \quad (11.10)$$

для всех значений a и b . Если записать (11.10) сначала для пары значений y, x , а затем для пары x, y

$$c\psi_x(y, x) = \psi_x(x, y), \quad c\psi_x(x, y) = \psi_x(y, x), \quad (11.11)$$

то получим

$$c^2\psi_x(x, y) = \psi_x(x, y);$$

так как $\psi_x(x, y)$ не равна тождественно нулю, $c^2 = 1$ и $c = \pm 1$. Таким образом, при всех x и y

$$\bar{\psi}_x(x, y) = \psi_x(y, x) = \pm \psi_x(x, y). \quad (11.12)$$

Собственная функция $\psi_x(x, y)$ в точке x, y имеют либо значение, равное значению в точке y, x , либо значение, противоположное по знаку. Из общих соображений нельзя определить, имеет ли место первый случай или второй; однако для всякой функции $\psi_x(x, y)$, удовлетворяющей упомянутым выше условиям (т. е. для всякого определенного собственного значения), может осуществляться лишь одна из двух возможностей. Собственные значения и собственные функции, для которых в (11.12) следует брать знак „+“, называются *симметричными собственными значениями* и *собственными функциями*; а те, для которых следует брать знак „—“, называются *антисимметричными*. Таким образом мы получаем качественную классификацию собственных значений и собственных функций уравнения Шредингера на классы в зависимости от того, подчиняются ли они соотношению (11.12) со знаком „+“, или „—“.

Вполне аналогичные и даже несколько более простые аргументы применимы к уравнению для собственных значений

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi(x)}{\partial x^2} + V(x) \psi(x) = E \psi(x), \quad (11.13)$$

где

$$V(x) = V(-x), \quad (11.14)$$

если определить

$$P\psi(x) = \psi(-x). \quad (11.15)$$

Тогда вместо (11.12) получим

$$\psi(x) = \pm \psi(-x). \quad (11.16)$$

Это является просто констатацией того хорошо известного факта, что все собственные функции являются либо четными, либо нечетными функциями от x .

Распространим эти соображения на более общий случай дискретного собственного значения с несколькими (но в конечном числе) линейно независимыми собственными функциями¹⁾. При этом вычисления мы будем заменять, где это возможно, качественными рассуждениями; ясно, что конкретный вид оператора Гамильтона (11.1) и (11.13) не является существенным и что в первом случае играет роль тождественность двух частиц, а во втором —

¹⁾ Здесь важен не столько дискретный характер собственных значений, сколько конечное число собственных функций, принадлежащих данному собственному значению. Вся теория может быть распространена почти без всяких изменений на „дискретные комплексные собственные значения“, с которыми имеет дело гамовская теория α -распада ядер, хотя они и не являются дискретными в указанном выше смысле, так как интегралы от квадратов соответствующих собственных функций расходятся.

Таким образом, P_R есть оператор, заменяющий x'_i на x_i . Однако, так как в подобном словесном определении различие между операцией P_R и обратной к ней не вполне ясно, то по существу во всех расчетах будут использоваться формальные определения, выраженные соотношениями (11.19) и (11.18a) или (11.18б).

Если теперь две точки x_1, x_2, \dots, x_n и x'_1, x'_2, \dots, x'_n конфигурационного пространства, которые преобразуются друг в друга с помощью заданного преобразования R , являются физически эквивалентными (т. е. они отличаются лишь перестановкой положений двух тождественных частиц), то и две функции ψ и $P_R \psi$ также эквивалентны (в $P_R \psi$ вторая частица просто играет ту же роль, которую первая играла в ψ , и наоборот). Если ψ — волновая функция стационарного состояния, то этим свойством обладает и $P_R \psi$, и обе они относятся к одной и той же энергии. Из уравнения $H\psi = E\psi$ следует, что $HP_R \psi = EP_R \psi$ и H инвариантно относительно операции P_R .

Преобразования R , которые преобразуют эквивалентные точки друг в друга, образуют группу — „группу уравнения Шредингера“, так как произведения таких преобразований и их обратные также преобразуют одни эквивалентные точки в другие (т. е. принадлежат этой группе). Тождественным элементом группы является тождественное преобразование, переводящее каждую точку в саму себя. Сама эта группа называется группой симметрии конфигурационного пространства.

Аналогичные соображения применимы к оператору P_R . Легко видеть, что $P_S \cdot P_R = P_{SR}$. Преобразование R переводит x в x' , так что $P_R f(x'_i) = f(x_i)$, а S переводит x' в x'' , так что $P_S g(x''_i) = g(x'_i)$, и, следовательно, для $g(x) = P_R f(x)$

$$P_S P_R f(x''_i) = P_R f(x'_i) = f(x_i).$$

Но SR преобразует x непосредственно в x'' , так что

$$P_{SR} f(x''_i) = f(x_i),$$

что дает соотношение, определяющее $P_{SR} f$. Так как f является произвольной функцией, то отсюда следует, что

$$P_{SR} = P_S \cdot P_R. \quad (11.22)$$

Группа P_R изоморфна группе R .

Определение (11.19) функции $P_R f$ может быть также записано в виде

$$P_R f(x_1, \dots, x_n) = f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n), \quad (11.19a)$$

где

$$\bar{x}_i = \sum_j (R^{-1})_{ij} x_j.$$

Следовательно, при вычислении $P_S P_R f$ имеется искушение действовать следующим образом:

$$P_S P_R f(x_1, \dots, x_n) = P_S f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n), \quad (*)$$

$$P_S f(\bar{x}_1, \dots, \bar{x}_n) = f(\bar{\bar{x}}_1, \dots, \bar{\bar{x}}_n),$$

где

$$\bar{\bar{x}}_l = \sum_i (S^{-1})_{li} \bar{x}_i,$$

и поэтому

$$\bar{\bar{x}}_l = \sum_{ij} (S^{-1})_{li} (R^{-1})_{ij} x_j = \sum_j (S^{-1} R^{-1})_{lj} x_j = \sum_j ((RS)^{-1})_{lj} x_j. \quad (**)$$

Тогда можно найти, что

$$P_S P_R f(x_1, \dots, x_n) = f(\bar{\bar{x}}_1, \dots, \bar{\bar{x}}_n).$$

Так как, в силу (11.19а), это равенство служит определением $P_{RS} f$, можно заключить, что $P_S P_R f = P_{RS} f$.

Тогда возникает вопрос о том, какое из этих двух вычислений правильно; то, которое приводит к (11.20), или последнее. Как читатель уже подозревает, правильным является расчет, приводящий к (11.20). Ошибка последнего вычисления содержится в соотношении (*). Представляется, что это равенство следует из (11.19а) [или (11.19)], если применить к обеим частям P_S . Однако операторы можно применять только к функциям, а две части равенства (11.19а) представляют значения функций (числа) для определенных значений аргумента. Функцию $P_R f$ можно обозначить через \bar{f} ; тогда $P_S (P_R f) = P_S \bar{f}$. Получив это равенство, можно подставить любые значения аргументов, и получающиеся при этом соотношения будут правильными. Такое рассуждение приведет к (11.20). С другой стороны, нельзя применять P_S к числам.

Предположим, например, что равенство $f(x) = g(x')$ выполняется для всех значений x , если $x' = x + 1$, и что P_S является операцией замены переменной на ее обратную величину. Тогда можно заключить, что

$$P_S f(x) = P_S g(x'),$$

или

$$f\left(\frac{1}{x}\right) = g\left(\frac{1}{x'}\right),$$

при $x' = x + 1$. Ясно, что такое равенство неправильно.

Мысль о возможности перехода от (*) к (**) не возникает, если помнить, что $P_S P_R f = P_S (P_R f)$ является функцией. Если бы такая запись не была слишком непривычной, целесообразнее было бы писать выражение $(P_S P_R f)(x_1, \dots, x_n)$ для значения этой функции в точке x_1, \dots, x_n , показывая, что $P_S P_R f$ является символом функции, каким являются часто F , g и т. д.

Следует заметить также, что определение, следующее из (11.19), (11.18а), является естественным. Конфигурация с координатами x'_i в штрихованной системе и конфигурация с координатами x_i в нештрихованной системе физически тождественны. В этом заключается смысл (11.18а).

Тогда смысл (11.19) состоит в том, что волновая функция $P_{\mathbf{R}}f$ штрихованной системы и волновая функция f в нештрихованной системе имеют одни и те же значения для одной и той же конфигурации.

3. *Операторы P линейны.* Подстановка x вместо x' в сумме равносильна выполнению той же операции в каждом из отдельных слагаемых; далее, умножение функции, в которой сделана такая подстановка, на постоянный множитель дает тот же результат, что и умножение и последующая подстановка. Иначе говоря,

$$P(af + bg) = aPf + bPg. \quad (11.21)$$

Так как оператор P представляет собой просто преобразование к новой ортогональной системе координат в конфигурационном пространстве, P должен быть унитарным, т. е. для двух произвольных функций f и g скалярное произведение не меняется:

$$(f, g) = (Pf, Pg).$$

Резюмируя, можно сказать, что при сделанных нами весьма общих предположениях P является унитарным линейным оператором.

В рассматриваемом частном случае P обладает также свойством

$$Pfg = Pf \cdot Pg, \quad (11.22)$$

которое следует непосредственно из его определения. Это свойство оператора P не является таким общим, как его линейность и унитарность.

4. В большинстве случаев группа уравнения Шредингера может быть определена *из общих физических соображений*.

Рассмотрим систему из n электронов, причем координаты k -го электрона обозначим через x_k, y_k, z_k ¹⁾. Тогда уравнение Шредингера инвариантно относительно двух типов преобразований. Первое из них описывает перестановку электронов и имеет вид

$$\begin{aligned} x_1 &= x_{\alpha_1}, & y_1 &= y_{\alpha_1}, & z_1 &= z_{\alpha_1}, \\ x_2 &= x_{\alpha_2}, & y_2 &= y_{\alpha_2}, & z_2 &= z_{\alpha_2}, \\ \dots & & \dots & & \dots & \\ x_n &= x_{\alpha_n}, & y_n &= y_{\alpha_n}, & z_n &= z_{\alpha_n}, \end{aligned} \quad (11.E.1)$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n$ — произвольная перестановка чисел $1, 2, 3, \dots, n$. Инвариантность относительно таких преобразований следует из физической эквивалентности всех электронов. Разумеется, то же самое

¹⁾ Таким образом, мы имеем $3n$ переменных $x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n$ вместо n переменных x_1, x_2, \dots, x_n .

симметричными по отношению к преобразованиям P_R , а группа называется группой симметрии физической величины. Группа перестановок тождественных частиц и вращений системы координат является группой симметрии энергии.

5. В (11.12) или (11.16) мы установили тот факт, что функция $P\psi$ должна быть кратна ψ , так как она принадлежит собственному значению функции ψ . В более общем случае, когда рассматривается собственное значение с l линейно независимыми собственными функциями $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$, этого вывода уже сделать нельзя. Можно только сказать, что все функции $P_R\psi_1, P_R\psi_2, \dots, P_R\psi_l$ могут быть записаны в виде линейных комбинаций функций $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$ (поскольку каждая собственная функция этого собственного значения обладает этим свойством). Обозначим соответствующие коэффициенты через $D(R)_{xy}$, так что ¹⁾

$$P_R\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \sum_{x=1}^l D(R)_{xy} \psi_x(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \quad (11.23)$$

Если S также принадлежит группе уравнения Шредингера, имеем

$$P_S\psi_x = \sum_{\lambda=1}^l D(S)_{\lambda x} \psi_\lambda.$$

Подвергая переменные в (11.23) преобразованию S , т. е. применяя оператор P_S к обеим частям, получаем (P_S — линейный оператор и $D(R)_{xy}$ являются постоянными!)

$$P_S \cdot P_R\psi_y = P_S \cdot \sum_{x=1}^l D(R)_{xy} \psi_x = \sum_{x=1}^l D(R)_{xy} P_S\psi_x = \sum_{x=1}^l D(R)_{xy} \sum_{\lambda=1}^l D(S)_{\lambda x} \psi_\lambda = \sum_{\lambda=1}^l \sum_{x=1}^l D(S)_{\lambda x} D(R)_{xy} \psi_\lambda. \quad (11.24)$$

С другой стороны, $P_S \cdot P_R\psi_y = P_{SR}\psi_y$, так что

$$P_S \cdot P_R\psi_y = P_{SR}\psi_y = \sum_{\lambda=1}^l D(SR)_{\lambda y} \psi_\lambda.$$

Отсюда, приравнявая коэффициенты этого разложения соответствующим коэффициентам в (11.24), находим

$$D(SR)_{\lambda y} = \sum_{x=1}^l D(S)_{\lambda x} D(R)_{xy}. \quad (11.25)$$

¹⁾ Индексы xy написаны в таком порядке, чтобы, согласно (11.25), сами матрицы $D(R)$, а не их транспонированные $D(R)^T$, могли образовать представление,

Образованные из коэффициентов, входящих в (11.23), l -мерные матрицы $D(R)$ превращают собственные функции ψ_y , принадлежащие некоторому собственному значению, в преобразованные собственные функции $P_R \psi_y$. Поскольку они удовлетворяют соотношениям $D(SR) = D(S)D(R)$, эти матрицы образуют представление группы, относительно которой $H\psi = E\psi$ инвариантно. Размерность представления равна числу l линейно независимых собственных функций $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$, принадлежащих рассматриваемому собственному значению.

Общие соображения также мало говорят как о том, коэффициенты какого представления входят в (11.23), так и о знаках в соотношении (11.12); соотношение (11.23) допускает различные возможности (фактически несколько), так же как и (11.12). Следует снова предполагать, что для различных собственных значений могут иметь место различные представления.

Скомбинируем далее (11.23) с уравнением, определяющим P_R :

$$P_R \psi_y(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) = \psi_y(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \quad (11.18в)$$

Если заменить R на R^{-1} , роли штрихованных и нештрихованных переменных поменяются. Поэтому мы получаем формулы преобразования для функций ψ_y :

$$\begin{aligned} \psi_y(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= P_{R^{-1}} \psi_y(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \\ &= \sum_{x=1}^l D(R^{-1})_{xy} \psi_x(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \end{aligned} \quad (11.26)$$

Они связывают значения собственных функций в физически эквивалентных точках конфигурационного пространства.

Группа, относительно которой (11.1) инвариантно, состоит из тождественного преобразования и преобразования R , соответствующего взаимной замене x и y . Так как собственное значение было простым (по предположению), мы должны получить одномерное представление группы отражений. Поскольку P_E является тождественным оператором, то

$$P_E \psi = \psi = 1 \cdot \psi.$$

Иначе говоря, тождественный элемент группы соответствует матрице (1). Далее (11.12) утверждает, что

$$P_R \psi = \bar{\psi} = \pm \psi = \pm 1 \cdot \psi. \quad (11.12а)$$

Некоторым собственным значениям соответствует верхний знак; для них матрица (1) соответствует элементу R , который переставляет две частицы. Другим же собственным значениям отвечает нижний знак; для них элементу группы R соответствует матрица (-1) . Таким образом мы получаем два одномерных представления симметрической группы из двух элементов. Одно состоит из соответствия $D(E) = (1)$, $D(R) = (1)$; другое — из $D(E) = (1)$, $D(R) = (-1)$.

6. Если выбрать новые линейно независимые функции ψ'_1, \dots, ψ'_l вместо ψ_1, \dots, ψ_l , где

$$\psi'_\mu = \sum_{\nu=1}^l \alpha_{\nu\mu} \psi_\nu, \quad (11.27)$$

то получим в (11.23) другое представление группы операторов \mathbf{P} . Тогда возникает вопрос о том, как связаны эти два представления.

Пусть

$$\psi_x = \sum \beta_{\lambda x} \psi'_\lambda, \quad (11.28)$$

где β есть матрица, обратная α . Тогда, в силу линейности операторов \mathbf{P}_R , имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R \psi'_\mu &= \sum_{\nu} \alpha_{\nu\mu} \mathbf{P}_R \psi_\nu = \sum_{\nu} \sum_x \alpha_{\nu\mu} D(R)_{x\nu} \psi_x = \\ &= \sum_{\nu} \sum_x \sum_{\lambda} \alpha_{\nu\mu} D(R)_{x\nu} \beta_{\lambda x} \psi'_\lambda = \sum_{\lambda} \left(\sum_{x\nu} \beta_{\lambda x} D(R)_{x\nu} \alpha_{\nu\mu} \right) \psi'_\lambda. \end{aligned} \quad (11.29)$$

Матрица $\bar{\mathbf{D}}(R)$, которая преобразует ψ' в $\mathbf{P}_R \psi'$, получается из $\mathbf{D}(R)$ путем преобразования подобия с помощью матрицы α :

$$\bar{\mathbf{D}}(R) = \alpha^{-1} \mathbf{D}(R) \alpha. \quad (11.30)$$

Иной выбор линейно независимых собственных функций для данного собственного значения вызывает лишь преобразование подобия соответствующего представления: *представление группы уравнения Шредингера, принадлежащее определенному собственному значению, определяется однозначно с точностью до преобразования подобия.*

Если мы хотим иметь собственные функции, преобразующиеся не с помощью $\mathbf{D}(R)$, а с помощью эквивалентного ему представления, то следует образовать новые линейные комбинации собственных функций, пользуясь матрицей α , преобразующей представление $\mathbf{D}(R)$ к желательному для нас виду $\bar{\mathbf{D}}(R)$.

Однозначно определенное (с точностью до преобразования подобия) представление является качественной характеристикой, с помощью которой могут отличаться различные типы собственных значений. Представление, принадлежащее синглетному уровню S , отличается от представления, принадлежащего, например, триплетному уровню P или синглетному уровню D , тогда как все представления, принадлежащие триплетным уровням P , эквивалентны. Эти представления практически всегда будут неприводимыми, что и является одной из причин особой важности неприводимых представлений.

7. Если l собственных функций ψ_1, \dots, ψ_l взаимно ортогональны (мы всегда будем предполагать, что это так), то соответствующее представление унитарно. Из унитарности оператора \mathbf{P}_R следует, что l функций $\mathbf{P}_R\psi_1, \dots, \mathbf{P}_R\psi_l$ также ортогональны:

$$(\mathbf{P}_R\psi_x, \mathbf{P}_R\psi_y) = (\psi_x, \psi_y) = \delta_{xy}, \quad (11.31)$$

или, с использованием (11.23),

$$\begin{aligned} \delta_{xy} &= (\mathbf{P}_R\psi_x, \mathbf{P}_R\psi_y) = \left(\sum_{\lambda} D(R)_{\lambda x} \psi_{\lambda}, \sum_{\mu} D(R)_{\mu y} \psi_{\mu} \right) = \\ &= \sum_{\lambda} \sum_{\mu} D(R)_{\lambda x}^* D(R)_{\mu y} (\psi_{\lambda}, \psi_{\mu}) = \sum_{\lambda} D(R)_{\lambda x}^* D(R)_{\lambda y}, \end{aligned} \quad (11.32)$$

т. е.

$$\mathbf{1} = \mathbf{D}(R)^{\dagger} \mathbf{D}(R).$$

Таким образом, $\mathbf{D}(R)$ является унитарной матрицей¹⁾. Следовательно, сразу можно заключить, что соотношения ортогональности гл. 9 имеют место для $\mathbf{D}(R)$, если только это представление неприводимо.

Соотношению (11.26) можно также придать вид

$$\begin{aligned} \psi_y(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= \\ &= \sum_x D(R^{-1})_{xy} \psi_x(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \\ &= \sum_x D(R)_{yx}^* \psi_x(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n). \end{aligned} \quad (11.26a)$$

Отсюда также видно, что мы будем иметь дело только с представлениями с отличными от нуля определителями

¹⁾ Поскольку собственные функции всегда можно выбрать так, чтобы они были ортогональными, это дает особенно простое доказательство того, что представления всегда могут быть сделаны унитарными.

АЛГЕБРА ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Изложим теперь некоторые алгебраические соображения, связанные с результатами предыдущих глав. Сначала выведем некоторые чисто математические теоремы.

1. Пусть $\mathbf{D}^{(J)}(R)$ — неприводимое унитарное представление размерности l_j группы унитарных операторов \mathbf{P}_R , и пусть $f_1^{(J)}, f_2^{(J)}, \dots, f_{l_j}^{(J)}$ представляют собой l_j собственных функций, для которых имеет место уравнение

$$\mathbf{P}_R f_\mu^{(J)} = \sum_{\lambda=1}^{l_j} D^{(J)}(R)_{\lambda\mu} f_\lambda^{(J)} \quad (\mu = 1, 2, \dots, l_j) \quad (12.1)$$

при всех \mathbf{P}_R . Говорят, что функция $f_x^{(J)}$ принадлежит x -й строке неприводимого представления $\mathbf{D}^{(J)}(R)$, если существуют такие функции-„партнеры“ $f_1^{(J)}, f_2^{(J)}, \dots, f_{x-1}^{(J)}, f_{x+1}^{(J)}, \dots, f_{l_j}^{(J)}$, что все $f_\lambda^{(J)}$ удовлетворяют (12.1). Это утверждение является вполне определенным только в том случае, если представления $\mathbf{D}^{(J)}(R)$ заданы полностью, а не с точностью до преобразования подобия.

Умножая (12.1) на $D^{(J')}(R)_{\lambda'x'}^*$ и суммируя (или интегрируя — в случае непрерывной группы) по всей группе, на основе свойства ортогональности элементов представления находим, что

$$\begin{aligned} \sum_R D^{(J')}(R)_{\lambda'x'}^* \mathbf{P}_R f_x^{(J)} &= \sum_R \sum_\lambda D^{(J')}(R)_{\lambda'x'}^* D^{(J)}(R)_{\lambda x} f_\lambda^{(J)} = \\ &= \sum_\lambda \frac{\hbar}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{\lambda\lambda'} \delta_{xx'} f_\lambda^{(J)} = \frac{\hbar}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{xx'} f_\lambda^{(J)}. \end{aligned} \quad (12.2)$$

Отсюда, в частности, имеем

$$\sum_R D^{(J)}(R)_{xx}^* \mathbf{P}_R f_x^{(J)} = \frac{\hbar}{l_j} f_x^{(J)} \quad (12.3)$$

для каждой функции $f_x^{(j)}$, принадлежащей x -й строке неприводимого представления $D^{(j)}(R)$. Наоборот, для любой функции $f_x^{(j)}$, удовлетворяющей (12.3), может быть найден набор таких функций-партнеров $f_1^{(j)}, f_2^{(j)}, \dots, f_{x-1}^{(j)}, f_{x+1}^{(j)}, \dots, f_l^{(j)}$, что (12.1) имеет место для всего набора. Соотношение (12.3) является необходимым и достаточным условием того, что $f_x^{(j)}$ принадлежит x -й строке неприводимого представления $D^{(j)}(R)$.

Из (12.2) следует, что если у $f_x^{(j)}$ имеются функции-партнеры, то они должны задаваться выражением

$$f_\lambda^{(j)} = \frac{l_j}{h} \sum_S D^{(j)}(S)_{\lambda x}^* P_S f_x^{(j)}. \quad (12.3a)$$

Мы рассматриваем это равенство в качестве определения $f_1^{(j)}, \dots, f_{x-1}^{(j)}, f_{x+1}^{(j)}, \dots, f_l^{(j)}$. Кроме того, по предположению, (12.3a) справедливо и для частного случая $\lambda = x$, так что оно применимо ко всем $f_\lambda^{(j)}$. Непосредственная подстановка правой части (12.3a) вместо $f_\mu^{(j)}$ и $f_\lambda^{(j)}$ в (12.1) показывает, что (12.1) справедливо, если только

$$P_R \frac{l_j}{h} \sum_S D^{(j)}(S)_{\mu x}^* P_S f_x^{(j)} = \sum_\lambda D^{(j)}(R)_{\lambda \mu} \frac{l_j}{h} \sum_S D^{(j)}(S)_{\lambda x}^* P_S f_x^{(j)}.$$

Но это равенство выполняется тождественно, как легко видеть, применяя $P_{R^{-1}}$ к обеим его частям и подставляя $D^{(j)}(R)_{\lambda \mu} = D^{(j)}(R^{-1})_{\mu \lambda}^*$. Поскольку $D^{(j)}$ образуют представление, это дает

$$\begin{aligned} \sum_S D^{(j)}(S)_{\mu x}^* P_S f_x^{(j)} &= \sum_S \sum_\lambda P_{R^{-1}} P_S D^{(j)}(R^{-1})_{\mu \lambda}^* D^{(j)}(S)_{\lambda x}^* f_x^{(j)} = \\ &= \sum_S P_{R^{-1}S} D^{(j)}(R^{-1}S)_{\mu x}^* f_x^{(j)}, \end{aligned}$$

и суммирование справа можно выполнять по $R^{-1}S$ вместо суммирования по S . Поэтому для всякой $f_x^{(j)}$, удовлетворяющей (12.3), равенство (12.3a) определяет функции-партнеры, так что (12.1) удовлетворяется для всего набора.

2. Линейная комбинация $af_x^{(j)} + bg_x^{(j)}$ функций $f_x^{(j)}$ и $g_x^{(j)}$, каждая из которых принадлежит x -строке представления $D^{(j)}$, также принадлежит той же строке этого представления. Это следует непосредственно из линейности выражения (12.3) или из определения (12.1).

3. Если $D^{(1)}(R), D^{(2)}(R), \dots, D^{(c)}(R)$ — все неприводимые представления группы операторов P_R , то каждая функция F , к кото-

рой применяется оператор P_R , может быть записана в виде суммы

$$F = \sum_{j=1}^c \sum_{x=1}^{l_j} f_x^{(j)}, \quad (12.4)$$

где $f_x^{(j)}$ принадлежит x -й строке представления $D^{(j)}(R)$.

Чтобы показать это, рассмотрим h функций $F = P_E F$, $P_{A_1} F$, $P_{A_2} F$, ..., $P_{A_h} F$, получающихся в результате применения h операторов группы P_R к функции F . Если эти функции не являются линейно независимыми, можно опустить столько из них, чтобы остающиеся функции F , F_2 , ..., $F_{h'}$ были линейно независимыми. Эти h' функций „натягивают“ представление группы операторов P_R . Если применить один из операторов P_R к этим функциям, то получающаяся при этом функция может быть представлена в виде линейной комбинации функций F , F_2 , ..., $F_{h'}$. Пусть, например, $F_k = P_T F$; тогда $P_R P_T F = P_{RT} F$, и либо это одна из функций F_i , либо она может быть представлена в виде их линейной комбинации. Следовательно,

$$P_R F_k = \sum_{i=1}^{h'} \Delta(R)_{ik} F_i, \quad (12.5)$$

и матрицы $\Delta(R)$ образуют представление группы операторов P_R . Это соответствует свойству собственных функций порождать представление, которое обсуждалось в конце предыдущей главы. В явном виде

$$\begin{aligned} \sum_n \Delta(SR)_{nk} F_n &= P_{SR} F_k = P_S P_R F_k = P_S \sum_l \Delta(R)_{lk} F_l = \\ &= \sum_l \sum_n \Delta(R)_{lk} \Delta(S)_{nl} F_n \end{aligned}$$

и, так как функции F_n линейно независимы,

$$\Delta(S) \Delta(R) = \Delta(SR).$$

Такой метод порождения представления будет играть существенную роль в дальнейшем в явном определении неприводимых представлений симметрической группы. Путем специального выбора начальных функций F может быть получено много типов представлений, которые будут полезны для нахождения неприводимых представлений.

Если представление в (12.5) не является неприводимым, оно может быть приведено с помощью преобразования подобия, а именно с помощью преобразования, которое приводит все

матрицы $\Delta(R)$ одновременно к виду

$$\begin{pmatrix} D^{(1)}(R) & 0 & \dots \\ 0 & D^{(2)}(R) & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \\ \cdot & \cdot & \dots \end{pmatrix} = \alpha^{-1} \Delta(R) \alpha, \quad (12.E.1)$$

где все D являются унитарными неприводимыми представлениями. Тогда, согласно п. 6 гл. 11, с помощью матрицы α можно построить линейные комбинации функций F_k , которые преобразуются операторами P_R с матрицами (12.E.1) и которые, следовательно, принадлежат различным строкам неприводимых представлений $D^{(1)}, D^{(2)}, \dots$. Наоборот, поскольку матрица α имеет обратную, функции F_k , а тем самым и F , могут быть выражены через эти линейные комбинации. Это доказывает, что произвольная функция может быть представлена в виде суммы (12.4).

Чтобы вычислить функции $f_x^{(j)}$, входящие в (12.4) в явном виде, применим P_R к (12.4), умножим на $D^{(j)}(R)_{xx}^*$ и просуммируем по всем R . Тогда получим

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{xx}^* P_R F = \sum_{j'} \sum_{x'} \sum_R D^{(j)}(R)_{xx}^* P_R f_{x'}^{(j')} = \frac{\hbar}{I_j} f_x^{(j)}. \quad (12.6)$$

Последнее равенство в (12.6) следует из (12.3).

Равенство (12.6) показывает, что $\sum_R D^{(j)}(R)_{xx}^* P_R \cdot F$ принадлежит x -й строке представления $D^{(j)}(R)$ для совершенно произвольной функции F ; это можно проверить, представляя это выражение для $f_x^{(j)}$ в соотношении (12.3), которое приобретает вид

$$\frac{\hbar}{I_j} \sum_S D^{(j)}(S)_{xx}^* P_S \left(\sum_R D^{(j)}(R)_{xx}^* P_R F \right) = \sum_R D^{(j)}(R)_{xx}^* P_R F.$$

Подставляя $SR = T$ в левую часть и суммируя по T вместо S , мы видим, что левая часть совпадает с правой:

$$\sum_S D^{(j)}(S)_{xx}^* P_S \cdot \left(\sum_R D^{(j)}(R)_{xx}^* P_R F \right) = \sum_{T, R} D^{(j)}(TR^{-1})_{xx}^* P_T D^{(j)}(R)_{xx}^* F,$$

$$\sum_{T, R, \lambda} D^{(j)}(T)_{x\lambda}^* D^{(j)}(R^{-1})_{\lambda x}^* D^{(j)}(R)_{xx}^* P_T F = \frac{\hbar}{I_j} \left(\sum_T D^{(j)}(T)_{xx}^* P_T F \right).$$

Здесь суммирование по R было проведено в (9.31a).

Тождество

$$F = \sum_J \sum_x \sum_R \frac{l_J}{h} D^{(J)}(R)_{xx}^* P_R F \quad (12.6a)$$

имеет место для совершенно произвольной функции F , т. е. при произвольных значениях h величин $P_R F$. Это возможно только в том случае, если

$$\sum_{j=1}^c \sum_{x=1}^{l_j} \frac{l_j}{h} D^{(j)}(R)_{xx}^* = \begin{cases} 1 & \text{при } R = E, \\ 0 & \text{при } R \neq E. \end{cases}$$

При $R = E$, поскольку $D^{(j)}(E)_{xx} = 1$, это дает

$$\sum_{j=1}^c \sum_{x=1}^{l_j} \frac{l_j}{h} = \sum_{j=1}^c \frac{l_j^2}{h} = 1.$$

Это значит, что сумма квадратов размерностей всех неприводимых представлений равна порядку представляемой группы. Эта теорема была сформулирована, но не доказана на стр. 102.

4. Две функции $f_x^{(j)}$ и $g_{x'}^{(j')}$, которые принадлежат различным неприводимым представлениям или различным строкам одного и того же представления, ортогональны. Для функций $f_x^{(j)}$ и $g_{x'}^{(j')}$ существуют такие функции-партнеры $f_1^{(j)}$, $f_2^{(j)}$, $f_3^{(j)}$, ... и $g_1^{(j')}$, $g_2^{(j')}$, $g_3^{(j')}$, ..., что, по определению,

$$P_R f_x^{(j)} = \sum_{\lambda} D^{(j)}(R)_{\lambda x} f_{\lambda}^{(j)}, \quad P_R g_{x'}^{(j')} = \sum_{\lambda'} D^{(j')}(R)_{\lambda' x'} g_{\lambda'}^{(j')}.$$

Так как P_R — унитарный оператор

$$\begin{aligned} (f_x^{(j)}, g_{x'}^{(j')}) &= (P_R f_x^{(j)}, P_R g_{x'}^{(j')}) = \\ &= \sum_{\lambda} \sum_{\lambda'} D^{(j)}(R)_{\lambda x}^* D^{(j')}(R)_{\lambda' x'} (f_{\lambda}^{(j)}, g_{\lambda'}^{(j')}). \end{aligned} \quad (12.7)$$

Суммируя в этом равенстве по всем операторам группы P_R , получаем

$$h(f_x^{(j)}, g_{x'}^{(j')}) = \frac{h}{l_j} \delta_{j j'} \delta_{x x'} \sum_{\lambda} (f_{\lambda}^{(j)}, g_{\lambda}^{(j')}). \quad (12.8)$$

Отсюда следует, во-первых, фундаментальная теорема, сформулированная выше, о том, что $(f_x^{(j)}, g_{x'}^{(j')})$ обращается в нуль при $j \neq j'$ или $x \neq x'$, и, во-вторых, что $(f_x^{(j)}, g_x^{(j)})$ одинаковы для всех партнеров, т. е. не зависят от x .

5. В предыдущей главе мы говорили об операторах, которые симметричны относительно P_R ; например, оператор Гамильтона \mathbf{H}

был симметричен относительно операций (11.Е.1) и (11.Е.2). Это значит, что P_R вызывают только такие не сказывающиеся на H изменения функций, как перестановка тождественных частиц и т. д.

Теперь мы несколько уточним это понятие. Симметричные операторы, которые мы рассматриваем, всегда эрмитовы и соответствуют физическим величинам, как, например, энергии. Операторы P_R , относительно которых некоторый оператор симметричен, являются унитарными операторами. Однако они не соответствуют физическим величинам; вместо этого они преобразуют волновую функцию заданного состояния в волновую функцию другого состояния. Оператор S называется симметричным, если он действует на все $P_R\varphi$ так же, как и на φ . Мы сразу увидим, что это определение совпадает с определением предыдущей главы.

Утверждение о том, что S — некоторый оператор, симметричный относительно P_R , и что ψ — одна из его собственных функций, т. е. $S\psi = s\psi$, означает, что в состоянии ψ измерение величины, которой соответствует S , с определенностью дает значение s . Тогда это должно выполняться и для $P_R\psi$, т. е. $P_R\psi$ также должна быть собственной функцией оператора S , принадлежащей собственному значению s .

Применяя P_R к обеим частям уравнения $S\psi = s\psi$, находим $P_R S\psi = P_R s\psi = s P_R\psi$. Отсюда с учетом уравнения $S P_R\psi = s P_R\psi$ имеем $S P_R\psi = P_R S\psi$; это соотношение должно выполняться для каждой собственной функции оператора S , так как собственное значение не входит в последнее равенство. Это соотношение линейно и поэтому применимо ко всякой линейной комбинации собственных функций, а следовательно, ко всем функциям. Поэтому отсюда следует операторное тождество $S P_R = P_R S$: оператор, симметричный относительно P_R , коммутирует со всеми P_R . Нет никакой разницы, в каком порядке S и P_R применяются к функции. Говорят, что S инвариантен относительно P_R .

Применяя оператор S к (12.1), мы видим, что если $f_x^{(j)}$ принадлежит x -й строке представления $D^{(j)}$, то той же строке принадлежит и $S f_x^{(j)}$. Тогда из (12.8) следует, что

$$(f_x^{(j)}, S g_{x'}^{(j')}) = \delta_{jj'} \delta_{xx'} (f_x^{(j)}, S g_{x'}^{(j')}) \quad (12.8a)$$

обращается в нуль при $j \neq j'$ или $x \neq x'$; при $j = j'$, $x = x'$ это выражение не зависит от x .

Хотя эти теоремы имеют весьма общую природу, они широко известны только для простейших групп операторов. Одна группа, для которой эти теоремы привычны, состоит из тождественного оператора P_E и оператора (11.15) гл. 11:

$$P_R f(x) = f(-x), \quad P_R^2 = P_E$$

Группа P_E, P_R является группой отражений. Она имеет два неприводимых представления, причем оба одномерны:

$$D^{(1)}(E) = (1), \quad D^{(1)}(R) = (1) \quad \text{и} \quad D^{(2)}(E) = (1), \quad D^{(2)}(R) = (-1).$$

Для функций, принадлежащих первому представлению (оно имеет лишь одну строку), (12.1) приобретает вид

$$P_R f^{(1)}(x) = f^{(1)}(-x) = 1 \cdot f^{(1)}(x).$$

Это четные функции x . Для функций, которые принадлежат второму представлению, (12.1) запишется следующим образом:

$$P_R f^{(2)}(x) = f^{(2)}(-x) = -1 \cdot f^{(2)}(x).$$

Это нечетные функции. Уравнение (12.3) для $f^{(1)}(x)$ имеет вид

$$\begin{aligned} D^{(1)}(E) P_E f^{(1)}(x) + D^{(1)}(R) P_R f^{(1)}(x) &= \\ &= 1 \cdot f^{(1)}(x) + 1 \cdot f^{(1)}(-x) = \frac{2}{1} f^{(1)}(x), \end{aligned}$$

а для $f^{(2)}(x)$ — вид

$$\begin{aligned} D^{(2)}(E) P_E f^{(2)}(x) + D^{(2)}(R) P_R f^{(2)}(x) &= \\ &= 1 \cdot f^{(2)}(x) - 1 \cdot f^{(2)}(-x) = \frac{2}{1} f^{(2)}(x). \end{aligned}$$

Обратно, из этих уравнений следует, что $f^{(1)}(x)$ — четная функция, а $f^{(2)}(x)$ — нечетная. Конечно, известно, что всякая функция может быть разложена на четную и нечетную части и что всякая четная функция ортогональна всякой нечетной.

6. До сих пор мы должны были предполагать, что представления определены некоторым произвольным образом. Тот же произвол имеется в определении функций $f_x^{(j)}$: функция, принадлежащая x -й строке неприводимого представления, не принадлежит в общем случае x -й строке эквивалентного представления. Теоремы, которые мы приведем ниже, не зависят от частного вида представления.

Для всякой функции $f_x^{(j)}$, которая принадлежит x -й строке неприводимого представления $D^{(j)}(R)$, согласно (12.2), имеет место

$$\sum_R D^{(j)}(R)_{\lambda\lambda}^* P_R f_x^{(j)} = \frac{\hbar}{l_j} \delta_{x\lambda} f_x^{(j)}. \quad (12.2a)$$

Суммируя по λ от 1 до l_j , находим

$$\sum_R \chi^{(j)}(R)^* P_R f_x^{(j)} = \frac{\hbar}{l_j} f_x^{(j)} \quad (\text{при } x = 1, 2, \dots, l_j). \quad (12.9)$$

Поскольку в (12.9) x уже несущественно, это равенство удовлетворяется всеми функциями, принадлежащими произвольным строкам представления $D^{(j)}(R)$, а также произвольными линейными ком-

бинациями таких функций. О функции, удовлетворяющей (12.9) говорят, что она принадлежит представлению $D^{(j)}(R)$. Этот факт, так же как и характер, не зависит от специального вида представления. Наоборот, всякая функция, удовлетворяющая (12.9), является линейной комбинацией функций, каждая из которых принадлежит одной из строк представления $D^{(j)}(R)$. Согласно (12.9),

$$\frac{h}{l_j} f^{(j)} = \sum_R \chi^{(j)}(R) P_R f^{(j)} = \sum_{\lambda} \sum_R D^{(j)}(R)_{\lambda\lambda}^* P_R f^{(j)}. \quad (12.10)$$

Но, в соответствии с (12.3), всякая функция вида $\sum_R D^{(j)}(R)_{\lambda\lambda}^* P_R F$ принадлежит λ -й строке представления $D^{(j)}(R)$.

Из (12.10) также следует, что функции, принадлежащие эквивалентным неприводимым представлениям, ортогональны друг другу. Кроме того, каждая функция F может быть представлена в виде суммы

$$F = \sum_{j=1}^c f^{(j)}, \quad (12.11)$$

где $f^{(j)}$ принадлежит представлению $D^{(j)}(R)$. Чтобы показать это, достаточно лишь переписать (12.4) в виде

$$F = \sum_{j=1}^c f^{(j)}, \quad (12.4a)$$

$$f^{(j)} = \sum_{\alpha=1}^{l_j} f_{\alpha}^{(j)}.$$

Функции, принадлежащие заданному неприводимому представлению, имеют, таким образом, свойства, вполне аналогичные свойствам функций, принадлежащих строке неприводимого представления. Линейная комбинация функций определенного рода есть снова функция того же рода; произвольная функция может быть записана в виде суммы функций, по одной из каждого рода; две функции различного рода всегда взаимно ортогональны; наконец, оператор S , инвариантный относительно P_R , преобразует функцию некоторого данного рода в другую функцию того же рода.

Сформулированные здесь общие теоремы о функциях можно резюмировать, если сказать, что функции различного рода (принадлежащие различным неприводимым представлениям или различным строкам одного и того же неприводимого представления) принадлежат различным собственным значениям некоторого эрмитова оператора, который, так же как все P и функции от них, коммутирует со всеми инвариантными операторами S .

Оператор O_{Jx} , преобразующий F в

$$O_{Jx}F = \sum_R D^{(j)}(R)_{xx}^* P_R F, \quad (12.12)$$

или, в случае, рассматриваемом в настоящем разделе, в

$$O_J F = \sum_R \chi^{(j)}(R)^* P_R F \quad (12.12a)$$

имеет два собственных значения: 0 и h/l_j . Все функции, принадлежащие x -й строке представления $D^{(j)}(R)$ или просто представлению $D^{(j)}(R)$, соответствуют собственному значению h/l_j . Функции, которые принадлежат другим строкам неприводимого представления $D^{(j)}(R)$ (или другим представлениям), соответствуют собственному значению 0.

Указанные выше теоремы дают не что иное, как *соотношения ортогональности и полноты* собственных функций операторов (12.12), (12.12a). Разница между ними и обычными эрмитовыми операторами возникает лишь в силу того обстоятельства, что (12.12), (12.12a) являются операторами с бесконечной кратностью вырождения, так как каждому собственному значению принадлежит бесконечное число линейно независимых собственных функций. В математической литературе операторы $l_j O_j / h$ называются также идемпотентными или проекционными операторами, так как $(l_j O_j / h)^2 = l_j O_j / h$.

7. Возвратимся теперь к уравнению Шредингера $H\psi = E\psi$. В предыдущей главе мы видели, что однозначно определенное (с точностью до преобразования подобия) представление группы P_R принадлежит каждому собственному значению оператора H . С другой стороны, мы знаем также, что это преобразование подобия находится в нашем полном распоряжении, поскольку оно состоит просто в выборе определенной линейной комбинации собственных функций.

Со многих точек зрения целесообразно предполагать, что представления отдельных собственных значений, поскольку они не являются неприводимыми, находятся в приведенном виде,

$$\Delta(R) = \begin{pmatrix} D^{(1)}(R) & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D^{(2)}(R) & \dots & \mathbf{0} \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & D^{(s)}(R) \end{pmatrix}. \quad (12.13)$$

Здесь $D^{(1)}(R), \dots, D^{(s)}(R)$ просто неприводимые представления (не обязательно различные), являющиеся с неприводимыми компонентами представления $\Delta(R)$. Пусть их размерности будут l_1, l_2, \dots, l_s . Обозначим через

$$\psi_1^{(1)}, \psi_2^{(1)}, \dots, \psi_{l_1}^{(1)}, \psi_1^{(2)}, \psi_2^{(2)}, \dots, \psi_{l_2}^{(2)}, \dots, \psi_1^{(s)}, \psi_2^{(s)}, \dots, \psi_{l_s}^{(s)}$$

те линейные комбинации собственных функций, которые соответствуют этому виду представления для рассматриваемого собственного значения. Запишем теперь соотношение (11.23) предыдущей главы для этого собственного значения:

$$P_R \psi_x^{(j)} = \sum_y D^{(j)}(R)_{yx} \psi_y^{(j)}. \quad (12.14)$$

[Учитывая нули в (12.13), сразу можно выразить $P_R \psi_x^{(j)}$ в виде линейных комбинаций функций ψ_y с одним и тем же верхним индексом.] Но из (12.14) следует, что $\psi_y^{(j)}$ удовлетворяет (12.3). Собственная функция $\psi_x^{(j)}$ принадлежит x -й строке представления $D^{(j)}$, а ее партнерами являются $\psi_1^{(j)}$, $\psi_2^{(j)}$, ..., $\psi_l^{(j)}$.

Вид формулы преобразования (12.14) показывает, что мы рассматриваем собственные значения матрицы (12.13) как s случайно совпавших собственных значений. Собственные функции $\psi_1^{(1)}$, $\psi_2^{(1)}$, ..., $\psi_{l_1}^{(1)}$ принадлежат первому собственному значению; $\psi_1^{(2)}$, $\psi_2^{(2)}$, ..., $\psi_{l_2}^{(2)}$ — второму; ...; и $\psi_1^{(s)}$, $\psi_2^{(s)}$, ..., $\psi_{l_s}^{(s)}$ — последнему. Каждому из этих собственных значений принадлежит одно неприводимое представление. Следовательно, если рассматривать таким образом весь спектр собственных значений, можно утверждать, что одно неприводимое представление соответствует каждому собственному значению, и одна строка неприводимого представления соответствует каждой собственной функции; партнерами собственной функции являются другие собственные функции, принадлежащие тому же самому собственному значению.

В общем случае всякому заданному представлению будет соответствовать очень много собственных значений. Поэтому можно провести дальнейшую стандартизацию формул для представлений, беря представления в одинаковом виде для всех уровней, которым они принадлежат.

Когда несколько собственных функций, являющихся партнерами, принадлежат одному собственному значению, мы говорим о „нормальном вырождении“. Если к тому же совпадают несколько собственных значений, как это было в случае собственного значения в (12.13), мы относим это к случайному вырождению. Будем считать, что такая ситуация является весьма необычной и что в важном случае уравнения Шредингера она может встретиться лишь в виде исключения.

8. Чтобы привыкнуть к введенным выше понятиям, применим их теперь для рассмотрения теории возмущений Рэлея — Шредингера. Начнем с собственного значения E „невозмущенной“ задачи,

которое не имеет случайного вырождения. Соответствующее представление группы уравнения Шредингера является тогда неприводимым, и собственные функции $\psi_{E1}, \psi_{E2}, \dots, \psi_{El}$ принадлежат различным строкам неприводимого представления. Добавим к первоначальному оператору Гамильтона H „симметричное возмущение“ λV , обладающее тем свойством, что оно не нарушает симметрию группы оператора H , т. е. являющееся симметричным оператором в смысле, введенном в этой главе. Чтобы сформулировать секулярное уравнение для первого приближения к сдвигу энергии ΔE , мы должны вычислить матричные элементы $(\psi_{E\alpha}, V\psi_{E\alpha'})$. Согласно (12.8а), они все равны нулю при $\alpha \neq \alpha'$ и все равны между собой при $\alpha = \alpha'$. Если обозначить их общее значение через v_E , то секулярное уравнение принимает вид

$$\begin{vmatrix} \lambda v_E - \Delta E & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \lambda v_E - \Delta E & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \lambda v_E - \Delta E \end{vmatrix} = 0$$

и имеет l -кратный корень λv_E . Таким образом, в первом приближении собственные значения не расщепляются. Более того, они не могут расщепиться в сколь угодно высоком приближении, так как при расщеплении, скажем, на два собственных значения E_1 и E_2 с l_1 и l_2 собственными функциями ($l_1 + l_2 = l$), l_1 собственных функций уровня E_1 преобразуются одна в другую под действием P , и им должно соответствовать представление размерности l_1 . Это представление не может содержать первоначальное неприводимое представление невозмущенного собственного значения, так как $l_1 < l$. Тогда эти l_1 собственных значений уровня E_1 были бы ортогональны всем l собственным функциям уровня E и не могли бы быть получены из них или из линейных комбинаций каким-либо непрерывным образом. При „симметричном возмущении“ собственное значение с неприводимым представлением сохраняет это представление и не может расщепиться.

9. Рассмотрим теперь собственное значение, представление которого $\Delta(R)$ содержит $D^{(1)}(R), D^{(2)}(R), \dots$ соответственно a_1, a_2, \dots раз. По поводу рассмотрения в п. 7 настоящей главы можно также сказать, что a_1 собственных значений с представлением $D^{(1)}(R)$, a_2 — с представлением $D^{(2)}(R)$ и т. д. совпадают случайно. Если теперь вводится симметричное возмущение λV , то наибольшим изменением, к которому оно может привести, является расщепление случайно вырожденных собственных значений. Тогда

при наличии возмущения будет a_1 собственных значений с представлением $D^{(1)}(R)$, a_2 собственных значений с представлением $D^{(2)}(R)$ и т. д. В общем случае *эти $a_1 + a_2 + \dots$ собственных значений будут различными*. То, что после введения возмущения должны появиться в точности a_1 собственных значений с представлением $D^{(1)}(R)$, следует из того факта, что число собственных функций $a_1 l_1$, принадлежащих представлению $D^{(1)}(R)$, не может измениться. Изменение этого числа означало бы, что изменилось соответствие собственных функций неприводимым представлениям. Выше мы видели, что это не может произойти непрерывным образом.

В п. 8 настоящей главы мы рассмотрели собственное значение с неприводимым представлением. Несмотря на то, что ему принадлежит l собственных функций, оно не может быть расщеплено симметричным возмущением. Это оправдывает название „естественное вырождение“, которое описывает соответствие этих l линейно независимых собственных функций одному собственному значению.

О собственном значении, которое, как и рассмотренное выше, соответствует приводимому представлению, говорят, что оно состоит из a_1 собственных значений представления $D^{(1)}(R)$, a_2 собственных значений представления $D^{(2)}(R)$ и т. д. Совпадение этих a_1, a_2, \dots собственных значений называется случайным вырождением, так как его появление в отсутствие возмущения связано со специфической природой гамильтониана задачи. Оно не следует из симметрии задачи, лежащей в его основе.

10. То обстоятельство, что собственные функции оператора $H + \lambda V$ могут рассматриваться как принадлежащие одной строке одного неприводимого представления, справедливо не только для точных собственных функций, но и для каждого из последовательных приближений теории возмущений. Прежде всего, ясно, что оно справедливо для точных собственных функций, т. е. для всего степенного ряда по λ . Однако, если оно выполняется для всякого ряда и при произвольных значениях λ , оно должно быть справедливо и для каждого члена в отдельности.

В частности, „правильные линейные комбинации“ для первого приближения к собственным функциям заданного собственного значения E могут быть выбраны таким образом, чтобы они были комбинациями только собственных функций уровня E , принадлежащих одной и той же строке одного и того же неприводимого представления. Если представление для E содержит данное неприводимое представление $D^{(j')}(R)$ только один раз, то имеет лишь одну собственную функцию $\psi_x^{(j')}$, которая принадлежит, скажем, x -й строке представления $D^{(j')}(R)$, и $\psi_x^{(j')}$ является тогда уже

„правильной линейной комбинацией“. Соответствующее собственное значение равно

$$(\psi_x^{(j')}, (H + \lambda V) \psi_x^{(j')}).$$

Если представление для E содержит неприводимое представление $D^{(j)}(R)$ несколько раз, скажем, a_j раз, то E имеет a_j собственных функций $\psi_{x_1}^{(j)}, \psi_{x_2}^{(j)}, \psi_{x_3}^{(j)}, \dots, \psi_{x_{a_j}}^{(j)}$, принадлежащих одной и той же (x -й) строке представления $D^{(j)}(R)$. Правильные линейные комбинации являются тогда линейными комбинациями этих a_j собственных функций; их нельзя полностью определить без вычислений.

Тем не менее полезно использовать во всех случаях с самого начала те линейные комбинации $\psi_{x\rho}^{(j)}$ собственных функций уровня E , которые принадлежат одной строке некоторого неприводимого представления. Тогда, в силу (12.8а), выражение

$$(\psi_{x\rho}^{(j)}, V \psi_{x'\rho'}^{(j')}) = V_{j x \rho; j' x' \rho'} = \delta_{j j'} \delta_{x x'} v_{\rho \rho'},$$

должно обращаться в нуль при $j \neq j'$ или $x \neq x'$. Поэтому секулярное уравнение для E

$$|V_{j x \rho; j' x' \rho'} - \Delta E \cdot \mathbf{1}| = 0$$

существенно упрощается. Оно распадается, как показывает ближайшее рассмотрение, на отдельные малые „неприводимые секулярные уравнения“, размерности которых a_j указывают, сколько раз одно и то же неприводимое представление содержится в представлении для собственного значения E .

Изменение собственных значений и собственных функций представления $D^{(j)}(R)$ может быть вычислено даже в высших приближениях с использованием собственных значений и собственных функций только этого представления. Достаточно даже рассматривать только собственные функции, принадлежащие заданной строке этого представления. Согласно (5.22), например, второе приближение равно

$$F_{k\nu} = E_k + \lambda (\psi_{k\nu}, V \psi_{k\nu}) + \lambda^2 \sum_{E_l \neq E_k} \frac{|\langle \psi_l, V \psi_{k\nu} \rangle|^2}{E_k - E_l}.$$

Если теперь ψ_l принадлежит представлению, отличному от $D^{(j)}(R)$, или строке представления $D^{(j)}$, отличной от той, которой принадлежит $\psi_{k\nu}$, член $(\psi_l, V \psi_{k\nu})$ обращается в нуль и может быть просто исключен из рассмотрения.

11. Если возмущение λV оператора H инвариантно не относительно полной группы оператора P , а только относительно под-

группы, то должны быть введены собственные функции, принадлежащие неприводимым представлениям этой подгруппы. Будем предполагать, что собственные значения и собственные функции оператора H соответствуют неприводимым представлениям полной группы P . Матрицы, соответствующие элементам подгруппы, могут тогда быть истолкованы как представление этой подгруппы. Для всех P и, в частности, для оператора P_R этой подгруппы, мы имеем

$$P_R \psi_x^{(j)} = \sum_{\lambda} D^{(j)}(R)_{\lambda x} \psi_{\lambda}^{(j)}.$$

Однако матрицы $D^{(j)}(R)$ для элементов R подгруппы не обязательно должны быть неприводимыми; но чтобы получить функции, принадлежащие неприводимым представлениям подгруппы, эти матрицы должны быть приведены. Числа и типы неприводимых компонент представления $D^{(j)}(R)$ как представления подгруппы дают нам числа и типы собственных значений, на которые может расщепиться рассматриваемое собственное значение.

Мы видим, что для характеристики собственных значений уравнения Шредингера существенным является знание неприводимых представлений симметрической группы из n элементов и трехмерной группы вращений. Поэтому мы перейдем к определению этих представлений.

12. Во всей этой главе относительно операторов P_R достаточно было предполагать, что они образуют группу и что они линейны и унитарны [например, не было использовано соотношение (11.22)]. Кроме того, было лишь предположено, что P_R преобразуют собственные функции, принадлежащие некоторому собственному значению оператора H , в собственные функции, принадлежащие тому же собственному значению. Фактически из этих предположений уже следуют уравнение преобразования (11.23) (которое мы использовали в качестве отправной точки соответствующего изложения) и то обстоятельство, что входящие в него коэффициенты образуют представление группы операторов P_R .

Заметим здесь, что для операторов, играющих роль P_R для собственных функций с учетом спина (они будут обозначаться через O_R), соотношение (11.22) уже не имеет места. Более того, группа симметрии конфигурационного пространства не изоморфна группе этих операторов, а лишь гомоморфна. Тогда коэффициенты соотношения (11.23) будут образовывать представление группы операторов O_R , а не группы симметрии конфигурационного пространства. Все остальные теоремы этой главы, такие, как теорема об ортогональности собственных функций, принадлежащих различным неприводимым представлениям, остаются без изменений.

СИММЕТРИЧЕСКАЯ ГРУППА

1. Элементами симметрической группы n -й степени являются перестановки n объектов. Порядок этой группы равен $n!$ Перестановка, заменяющая 1 на α_1 , 2 на α_2 , ..., и, наконец, n на α_n ,

обозначается через $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$. Это та же перестановка, что

и $\begin{pmatrix} k_1 & k_2 & \dots & k_n \\ \alpha_{k_1} & \alpha_{k_2} & \dots & \alpha_{k_n} \end{pmatrix}$, так как обе преобразуют каждое k в α_k .

Здесь k_1, k_2, \dots, k_n является произвольным размещением чисел 1, 2, 3, ..., n . Под произведением двух перестановок

$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$ и $B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \beta_1 & \beta_2 & \dots & \beta_n \end{pmatrix}$ мы понимаем их последовательное применение. Перестановка A преобразует k в α_k ,

а B преобразует это число в β_{α_k} , так что AB преобразует k в β_{α_k} .

Преобразования (11.Е.1) образуют группу, изоморфную симметрической группе n -й степени; эти преобразования переводят точку x_1, x_2, \dots, x_n в точку $x_{\alpha_1}, x_{\alpha_2}, \dots, x_{\alpha_n}$; поэтому они соответствуют упомянутой выше перестановке A .

Существует другое обозначение перестановок. При этом перестановки „разделяются на циклы“. Цикл $(r_1 r_2 \dots r_\lambda)$ является перестановкой, которая заменяет элемент r_k следующим за ним элементом r_{k+1} , за исключением того, что последний элемент цикла r_λ заменяется первым элементом r_1 . Цикл $(r_1 r_2 \dots r_\lambda)$ то-

ждествен перестановке и $\begin{pmatrix} r_1 & r_2 & \dots & r_\lambda \\ r_2 & r_3 & \dots & r_1 \end{pmatrix}$. Он также эквивалентен

циклу $(r_2 r_3 \dots r_\lambda r_1)$ или $(r_3 r_4 \dots r_\lambda r_1 r_2)$.

Циклы, не имеющие общих элементов, коммутируют. Например,

$$(1 \ 3 \ 5) (2 \ 4 \ 6 \ 7) = (2 \ 4 \ 6 \ 7) (1 \ 3 \ 5) = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 & 2 & 4 & 6 & 7 \\ 3 & 5 & 1 & 4 & 6 & 7 & 2 \end{pmatrix}.$$

Разложение перестановки на циклы является его разложением на произведение коммутирующих циклов; порядок отдельных циклов, а также начальный элемент каждого цикла, остаются пока произвольными. Разложение на циклы может быть достигнуто, если начать, скажем, с элемента 1 и поместить после него элемент, в который преобразуется 1, а затем — тот, в который преобразуется предыдущий, и т. д. Наконец, появляется элемент, преобразуемый в 1; это последний элемент первого цикла. После этого выбирается произвольно иной элемент, еще не включенный в первый цикл, и повторяется тот же процесс. Эта процедура продолжается до тех пор, пока не будет исчерпана вся перестановка.

Например, перестановка

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 4 & 6 & 2 & 5 & 1 \end{pmatrix}$$

разделяется на циклы в виде (1 3 6) (2 4) (5), и это равно (3 6 1) (2 4) (5), а также (2 4) (5) (1 3 6), так как порядок циклов не имеет никакого значения.

Две перестановки, имеющие одинаковые числа циклов и циклы которых имеют равную длину, содержатся в одном и том же классе. Две перестановки

$$R = (r_1 r_2 \dots r_{\mu_1}) (r_{\mu_1+1} r_{\mu_1+2} \dots r_{\mu_2}) \dots (r_{\mu_{p-1}+1}, \dots, r_{\mu_p})$$

и

$$S = (s_1 s_2 \dots s_{\mu_1}) (s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2}) \dots (s_{\mu_{p-1}+1}, \dots, s_{\mu_p})$$

могут быть преобразованы одна в другую с помощью

$$T = \begin{pmatrix} s_1 s_2 \dots s_{\mu_1} s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2} \dots s_{\mu_{p-1}+1} \dots s_{\mu_p} \\ r_1 r_2 \dots r_{\mu_1} r_{\mu_1+1} r_{\mu_1+2} \dots r_{\mu_2} \dots r_{\mu_{p-1}+1} \dots r_{\mu_p} \end{pmatrix}$$

и

$$T^{-1} = \begin{pmatrix} r_1 r_2 \dots r_{\mu_1} r_{\mu_1+1} r_{\mu_1+2} \dots r_{\mu_2} \dots r_{\mu_{p-1}+1} \dots r_{\mu_p} \\ s_1 s_2 \dots s_{\mu_1} s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2} \dots s_{\mu_{p-1}+1} \dots s_{\mu_p} \end{pmatrix}.$$

Это значит, что $S = TRT^{-1}$. Наоборот, длины циклов любой перестановки, получающейся из R путем преобразования с помощью T , снова равны $\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_p$.

Поэтому, если мы хотим решить вопрос, входят ли две перестановки в один и тот же класс, можно поместить наиболее длинный цикл в каждой из них впереди, далее следующий по длине и т. д., пока наиболее короткий цикл не окажется на последнем месте. Если в двух рассматриваемых перестановках длины всех

циклов $\lambda_1 = \mu_1, \lambda_2 = \mu_2 - \mu_1, \dots, \lambda_p = \mu_p - \mu_{p-1}$ (при $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$ и $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = \mu_p = n$) одинаковы, то эти перестановки принадлежат одному и тому же классу; в противном случае это не так. Поэтому число классов равно числу различных возможных длин циклов, числу последовательностей чисел $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$, удовлетворяющих условиям $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_p$ и $\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = n$. Это число, число возможных разбиений числа n на целые положительные слагаемые независимо от порядка¹⁾, называется „числом подразделений“ числа n . Согласно гл. 9, число различных неприводимых представлений равно числу классов и, следовательно, числу подразделений числа n .

Например, симметрическая группа четвертой степени (порядка 24) имеет пять различных классов. Каждый из следующих элементов представляет один класс: $E = (1)(2)(3)(4)$; $(1\ 2)(3)(4)$; $(1\ 2)(3\ 4)$; $(1\ 2\ 3)(4)$; $(1\ 2\ 3\ 4)$. Поэтому эта группа должна иметь пять неприводимых представлений. Симметрическая группа третьей степени имеет три класса: $E = (1)(2)(3)$; $(1\ 2)(3)$; $(1\ 2\ 3)$, соответствующих трем неприводимым представлениям, уже обсуждавшимся в гл. 9.

Единичные циклы часто опускаются. Например, $(1\ 2)(3)(4)$ записывается в виде $(1\ 2)$.

2. Простейшими перестановками, если не считать тождества, являются те, которые просто меняют местами два элемента. Такая перестановка называется *транспозицией*; с помощью циклов ее можно записать в виде (kl) . Каждую перестановку можно записать в виде произведения некоторого числа транспозиций. Например, перестановку, состоящую только из одного цикла, можно записать в виде

$$(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_\lambda) = (\alpha_1 \alpha_2)(\alpha_1 \alpha_3) \dots (\alpha_1 \alpha_\lambda).$$

Ясно, что то же самое верно для произведения нескольких циклов и, следовательно, для всякой перестановки.

Понятие о *четных и нечетных перестановках* играет важную роль в теории определителей. Значение определителя

$$\begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{vmatrix}$$

равно сумме $n!$ произведений:

$$|a_{ik}| = \sum \varepsilon_{(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n)} a_{1\alpha_1} a_{2\alpha_2} \dots a_{n\alpha_n},$$

¹⁾ Ясно, что для числа систем чисел λ безразлично, игнорируется ли порядок или рассматривается только один порядок.

где $\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_n$ пробегает все $n!$ перестановок чисел $1, 2, \dots, n$ и $\varepsilon_{(\alpha_1 \dots \alpha_n)}$ равно $+1$ или -1 в зависимости от того, является ли перестановка $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$ четной или нечетной, т. е. в зависимости от того, может ли она быть записана в виде четного или нечетного числа транспозиций. (Перестановку можно разложить на транспозиции различными способами, но разложение определенной перестановки приводит либо всегда к четному числу, либо всегда к нечетному числу транспозиций.)

Произведение двух четных перестановок есть снова четная перестановка, так как ясно, что она может быть записана в виде произведения такого числа транспозиций, какое содержат обе перестановки вместе. Четные перестановки образуют подгруппу, *знакопеременную группу*. Индекс знакопеременной группы равен 2, поскольку между четными или нечетными перестановками можно установить взаимнооднозначное соответствие, например, путем умножения на транспозицию $(1\ 2)$. Знакопеременная группа является инвариантной подгруппой симметрической группы; элементы, сопряженные четным перестановкам P , снова представляют собой четные перестановки $S^{-1}PS$, так как они могут быть записаны как произведение удвоенного числа транспозиций, входящих в S , и числа транспозиций, равного их числу в P .

Цикл $(\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_\lambda) = (\alpha_1 \alpha_2)(\alpha_1 \alpha_3) \dots (\alpha_1 \alpha_\lambda)$ может быть записан как произведение $\lambda - 1$ транспозиций. Поэтому перестановка с длинами циклов

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p \quad (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = n)$$

может быть записана в виде произведения $\lambda_1 - 1 + \lambda_2 - 1 + \dots + \lambda_p - 1$ транспозиций. Для всех элементов знакопеременной группы среди чисел $\lambda_p - 1$ должно встречаться четное число нечетных чисел, а, следовательно, среди чисел $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ должно быть четное число четных чисел. Перестановки знакопеременной группы содержат четное число циклов четной длины (циклов с двумя, четырьмя и т. д. элементами).

Фактор-группа знакопеременной группы имеет порядок 2. Исходя из ее двух неприводимых представлений, можно получить два представления полной симметрической группы путем сопоставления матрицы (1) как элементам знакопеременной группы, так и элементам ее смежного класса (нечетным перестановкам) или путем сопоставления матрицы (1) элементам знакопеременной группы и матрицы (-1) элементам ее смежного класса. Первое соответствие дает *тождественное представление* $D^{(0)}(R) = (1)$, второе — представление $D(E) = (1)$, $D(S) = (-1)$, называемое

антисимметричным представлением $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R) = (\epsilon_R)$. Как тождественное, так и антисимметричное представления одномерны.

3. Все остальные представления симметрической группы имеют размерность больше единицы. В одномерном представлении транспозиция (1 2) должна соответствовать либо матрице (1), либо (-1), так как квадрат этой матрицы должен быть единичной матрицей (1). Однако в первом случае каждая транспозиция в представлении соответствует (1), а во втором — каждая соответствует (-1), так как все транспозиции находятся в одном и том же классе и должны поэтому иметь один и тот же характер во всяком представлении. Но матрицы, соответствующие транспозициям, определяют все представление, так как все элементы группы можно записать в виде произведения транспозиций. Таким образом, в первом случае должно быть получено тождественное представление, а во втором — антисимметричное.

Абелева фактор-группа знакопеременной группы позволяет установить весьма важное соответствие между парами неприводимых представлений. Если мы рассмотрим неприводимое представление $\mathbf{D}^{(k)}(R)$, то из него можно построить иное представление — присоединенное представление $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$, если оставить все матрицы, соответствующие знакопеременной группе, без изменения, а все остальные умножить на -1. Полученные таким образом матрицы образуют представление группы, так как $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$ есть прямое произведение $\mathbf{D}^{(k)}(R)$ и антисимметричного представления $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R)$ (которое является одномерным, так что его матрицы представляют собой просто числа):

$$\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R) = \mathbf{D}^{(k)}(R) \times \bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R) = \epsilon_R \mathbf{D}^{(k)}(R).$$

Присоединенные представления играют важную роль как в квантовой механике, так и в теории неприводимых представлений, и мы воспользуемся ими для вывода интересующих нас представлений.

Число различных неприводимых представлений симметрической группы равно числу подразделений числа n . Таково также число существенно различных собственных значений. Однако оказывается, что только собственные значения определенных представлений соответствуют реальным энергетическим уровням в атоме. Собственные значения других представлений не соответствуют существующим в действительности стационарным состояниям, а запрещены принципом, не зависящим от уравнения для собственных значений, принципом Паули. Хотя все неприводимые представления симметрической группы могут быть получены исполь-

зованным здесь методом, проведем вычисления только для тех представлений, собственные значения которых не запрещены принципом Паули. Мы не будем давать здесь точной формулировки этого принципа, но метод, с помощью которого будут определены интересующие нас представления, включает точно те же соображения, которые потребуются позднее для применения принципа Паули.

4. Если мы имеем систему переменных, которые могут принимать лишь одно значение, скажем, 1, то область их изменения содержит лишь одну точку, и каждая функция полностью определяется, когда ее значение в этой точке задано. В этом пространстве никакие две функции не могут быть линейно независимыми; всякая функция постоянна во „всей области изменения“ и, следовательно, она кратна любой другой функции. Всякая функция в этом пространстве остается неизменной, если значения координат меняются местами, так как это означает просто замену 1 на 1. Все функции в этом пространстве принадлежат тождественному представлению.

Если мы рассмотрим n переменных s_1, s_2, \dots, s_n , каждая из которых может принимать два значения, например $+1$ и -1 , то все пространство состоит из 2^n точек, и мы можем иметь 2^n линейно независимых функций, т. е. таких, которые имеют значение 1 в одной из этих 2^n точек и нулевое значение во всех остальных точках. Скалярное произведение двух функций φ и g в этом пространстве равно

$$\sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_n=\pm 1} \varphi(s_1, \dots, s_n) g(s_1, \dots, s_n) = (\varphi, g).$$

В пространстве одного s_k (оно состоит только из двух точек $s = +1$ и $s = -1$) две функции $\delta_{s_k, -1}$ и $\delta_{s_k, +1}$ образуют „полную ортогональную систему“; 2^n произведений этих функций $\delta_{s_1, \sigma_1} \delta_{s_2, \sigma_2} \dots \delta_{s_n, \sigma_n}$ ($\sigma_1 = \pm 1, \sigma_2 = \pm 1, \dots, \sigma_n = \pm 1$) образуют полную ортогональную систему в n -мерном пространстве переменных s_1, s_2, \dots, s_n . Нижеследующие формулы можно записать в более удобном виде, если использовать вместо функций $\delta_{s_k, +1}$ и $\delta_{s_k, -1}$ две функции 1 и s_k , которые ортогональны:

$$(1, s_k) = \sum_{s_k=\pm 1} 1 \cdot s_k = 1 \cdot -1 + 1 \cdot 1 = 0.$$

Тогда полная система функций в пространстве s_1, s_2, \dots, s_n состоит из 2^n функций $s_1^{\gamma_1} s_2^{\gamma_2} \dots s_n^{\gamma_n}$ (причем γ_k равны 0 или 1);

они могут быть расположены следующим образом:

1,

$s_1, s_2, \dots, s_n,$

$s_1s_2, s_1s_3, \dots, s_1s_n, s_2s_3, s_2s_4, \dots, s_2s_n, \dots, s_{n-1}s_n,$ (13.1)

$s_1s_2s_3, \dots, s_{n-2}s_{n-1}s_n,$

.....

$s_1s_2s_3 \dots s_n.$

Имеется¹⁾ $1 + \binom{n}{1} + \binom{n}{2} + \binom{n}{3} + \dots + \binom{n}{n} = 2^n$ функций.

Если оператор \mathbf{P}_R , соответствующий перестановке R , применяется к одной из этих функций, то он порождает новую функцию от s_1, s_2, \dots, s_n , которая может быть выражена в виде линейной комбинации этих 2^n функций (как это может быть сделано для любой функции этих переменных). Коэффициенты этого разложения дадут 2^n -мерное представление симметрической группы. Это представление $\Delta(R)$ не является неприводимым, но содержит несколько неприводимых компонент. Поскольку рассматриваемые функции определены в такой узко ограниченной области, можно ожидать, что $\Delta(R)$ не включает все неприводимые представления симметрической группы и что поэтому оно может быть приведено более просто, чем совершенно произвольное представление. Тем не менее *только его неприводимые компоненты и их присоединенные представления являются представлениями, которые нужны в физических задачах, связанных с электронами.*

Если оператор \mathbf{P}_R применяется к одной из функций (13.1), например $s_a s_b s_c$, где R — произвольная перестановка, т. е. если производится „перестановка переменных“, то результат является снова произведением трех s , скажем $s_{a'} s_{b'} s_{c'}$, и, следовательно, функцией, входящей в ту же (третью)²⁾ строку таблицы (13.1), что и функция $s_a s_b s_c$. Если желательно выразить $\binom{n}{k}$ функций, получающихся при применении оператора \mathbf{P}_R ко всем функциям k -й строки (13.1), то потребуются только функции k -й строки. Поэтому эти функции образуют представление $\Delta^{(k)}(R)$ симметрической группы с размерностью $\binom{n}{k}$. Так как каждая функция

¹⁾ Символом $\binom{n}{k}$ мы, как обычно, обозначаем биномиальный коэффициент $\binom{n}{k} = \frac{n!}{k!(n-k)!}$, который дает число сочетаний из n элементов по k .

²⁾ Мы начинаем нумерацию строк (13.1) с нуля; последняя строка является n -й.

k -й строки преобразуется при перестановке в одну из других функций k -й строки, $\Delta^{(k)}(R)$ имеет один элемент в каждой строке, равный 1, и все остальные элементы, равные 0. Поэтому представление $\Delta(R)$ распадается на представления $\Delta^{(0)}(R), \Delta^{(1)}(R), \dots, \Delta^{(n)}(R)$, матрицы которых имеют только что упомянутое свойство. Используя это обстоятельство, мы вычислим теперь след $\Delta^{(k)}(R)$.

След матрицы $\Delta^{(k)}(R)$ равен числу функций k -й строки (13.1), которые остаются неизменными при применении \mathbf{P}_R . В столбцах матрицы $\Delta^{(k)}(R)$, соответствующих этим функциям, единицы появляются на главной диагонали; во всех остальных строках они появляются в иных местах, так что на главной диагонали стоят нули. Вычислим теперь это число.

Пусть R является перестановкой с длинами циклов $\lambda_1 = \mu_1, \lambda_2 = \mu_2 - \mu_1, \dots, \lambda_p = \mu_p - \mu_{p-1}$ ($\mu_p = n$), например перестановкой $(1, 2, \dots, \mu_1)(\mu_1 + 1, \dots, \mu_2) \dots (\mu_{p-1} + 1, \mu_{p-1} + 2, \dots, \mu_p)$. Если она должна оставлять функции $s_1^{\alpha_1} \cdot s_2^{\alpha_2} \dots s_n^{\alpha_n}$ без изменения, то показатели переменных $s_1, s_2, \dots, s_{\mu_1}$ должны быть все равны, так же как и показатели переменных $s_{\mu_1+1}, s_{\mu_1+2}, \dots, s_{\mu_2}$ и т. д., и наконец показатели переменных $s_{\mu_{p-1}+1}, s_{\mu_{p-1}+2}, \dots, s_{\mu_p} = s_n$ должны быть все равны. Поэтому из всех возможных функций при применении \mathbf{P}_R не будут меняться те, которые можно записать в виде

$$(s_1 s_2 \dots s_{\mu_1})^{\gamma_1} (s_{\mu_1+1} s_{\mu_1+2} \dots s_{\mu_2})^{\gamma_2} \dots (s_{\mu_{p-1}+1} \dots s_{\mu_p})^{\gamma_p} \quad (13.2)$$

(все γ_k равны 0 или 1). Нас интересует число функций k -й строки таблицы (13.1), имеющих вид (13.2). Так как эти функции находятся к k -й строке, должно иметь место соотношение

$$\begin{aligned} \mu_1 \gamma_1 + (\mu_2 - \mu_1) \gamma_2 + \dots + (\mu_p - \mu_{p-1}) \gamma_p &= \\ &= \lambda_1 \gamma_1 + \lambda_2 \gamma_2 + \dots + \lambda_p \gamma_p = k. \end{aligned} \quad (13.3)$$

Следовательно, имеется столько таких функций, сколько уравнение (13.3) имеет решений, в которых неизвестные $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_p$ принимают только значения 0 и 1. Это след R в $\Delta^k(R)$, а также след всякой другой перестановки, имеющей длины циклов $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$, поскольку они все входят в один класс и поэтому имеют одинаковые следы. Полное число решений (13.3) при заданном k равно коэффициенту при x^k в полиноме

$$(1 + x^{\lambda_1})(1 + x^{\lambda_2}) \dots (1 + x^{\lambda_p}), \quad (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = n), \quad (13.4)$$

так как этот коэффициент есть как раз полное число способов, которыми можно получить k , складывая показатели степени x

отдельных множителей (с коэффициентами 1 или 0). Следовательно, коэффициент при k -й степени x в многочлене (13.4) является следом матрицы $\Delta^{(k)}(R)$.

След $\Delta^{(k)}(E)$ должен быть равен размерности $\binom{n}{k}$ этого представления. Так как для E все длины циклов равны 1, $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_p = 1$, то выражение (13.4) равно $(1+x)^n$ и тогда коэффициент при x^k действительно равен $\binom{n}{k}$. След матрицы, соответствующей транспозиции $(1\ 2) \cdot (3) \cdot (4) \dots (n)$ является коэффициентом при x^k в выражении $(1+x^2)(1+x) \dots (1+x) = (1+x^2)(1+x)^{n-2}$.

Произведя вычисления, находим, что он равен

$$\sum_x \Delta^{(k)}(R)_{xx} = \binom{n-2}{k} + \binom{n-2}{k-2}.$$

Ясно, что $\Delta^{(k)}(R)$ не является неприводимым представлением, так как линейные комбинации, преобразующиеся при применении оператора P_R в соответствии с $\Delta^{(k-1)}(R)$, могут быть образованы из $\binom{n}{k}$ функций k -й строки таблицы (13.1), что было бы невозможно в неприводимом представлении.

Особенно простой пример линейной комбинации функций k -й строки можно использовать для доказательства приводимости матриц $\Delta^{(k)}(R)$. Этим примером является сумма всех функций k -й строки. Ясно, что эта сумма преобразуется сама в себя при всякой перестановке. Поэтому линейная комбинация функций k -й строки, приводящая к $\binom{n}{k}$ новым функциям, из которых эта сумма является первой, вызовет такое преобразование подобия матриц $\Delta^{(k)}(R)$, что они все должны иметь вид

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

Но представление, которое можно привести к этому виду с помощью преобразования подобия, по определению является приводимым.

Линейными комбинациями функций k -й строки (13.1), которые преобразуются как функции $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$ $(k-1)$ -й строки, будут

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}}, \quad (13.5)$$

где $s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ означает сумму всех $n-k+1$ переменных, которые не встречаются среди $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$. При применении P_R к функции s_{a_i} она преобразуется в s_{b_i} . Таким образом, $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$ преобразуется в $s_{b_1}, s_{b_2}, \dots, s_{b_{k-1}}$. Величина s_c не являющаяся одной из переменных $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$, преобразу-

зуется в одну из переменных s_a , отличную от всех s_b , в которые преобразуются s_a . Поэтому сумма всех $n - k + 1$ переменных s , не встречающихся среди $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$, преобразуется в сумму всех $n - k + 1$ переменных, которые не встречаются среди переменных s_b . Это значит, что $s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ преобразуется в $s_{b_1 b_2 \dots b_{k-1}}$. Поэтому и величины $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ действительно преобразуются точно так же, как произведение $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_{k-1}}$ ($k-1$)-й строки.

В приложении к настоящей главе мы покажем, что при $k \leq \frac{1}{2}n$ $\binom{n}{k-1}$ функций $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ образуют линейно независимую систему. Поэтому можно выбрать такие линейные комбинации этих функций $F_1, F_2, \dots, F_{\binom{n}{k-1}}$, которые ортогональны, а также линейно независимы. Чтобы завершить построение полной системы $\binom{n}{k}$ функций, из $\binom{n}{k}$ функций $s_{a_1}, s_{a_2}, \dots, s_{a_k}$ (когда $k \leq \frac{1}{2}n$) можно образовать

$$l_k = \binom{n}{k} - \binom{n}{k-1} \quad (13.6)$$

линейных комбинаций ¹⁾ g_1, g_2, \dots, g_{l_k} , которые вместе с функциями F_x образуют полную ортогональную систему. Тогда все функции $s_{a_1} s_{a_2} s_{a_3} \dots s_{a_k}$ можно выразить через функции этой системы и, наоборот. Поэтому представление $\Delta^{(k)}(R)$ будет рассматриваться в виде $\bar{\Delta}^{(k)}(R)$, который оно принимает после введения этой полной системы $F_1, F_2, \dots, F_{\binom{n}{k-1}}, g_1, g_2, \dots, g_{l_k}$ вместо системы $s_{a_1}, s_{a_2}, s_{a_3}, \dots, s_{a_k}$; эта подстановка осуществляет лишь преобразование подобия матриц $\Delta^{(k)}(R)$.

Поскольку каждая функция F_x является линейной комбинацией функций $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$, функции $P_R F_x$ являются линейными комбинациями функций $P_R F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ и, следовательно, функций $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ или функций F_x , т. е.

$$P_R F_x = \sum_{\lambda=1}^{\binom{n}{k-1}} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R)_{\lambda x} F_\lambda. \quad (13.7)$$

Мы обозначили здесь коэффициенты через $\bar{\Delta}^{(k-1)}(R)$, так как они образуют представление, эквивалентное представлению $\Delta^{(k-1)}(R)$.

¹⁾ Одним из примеров такой функции является $(s_1 - s_2)(s_3 - s_4) \dots (s_{2k-1} - s_{2k})$.

Функции g_x в (13.7) все имеют нулевые коэффициенты; следовательно, $\bar{\Delta}^{(k)}(R)$ имеет вид

$$\bar{\Delta}^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R) & A(R) \\ \mathbf{0} & D^{(k)}(R) \end{pmatrix}.$$

Кроме того, полная система $F_1, F_2, \dots, F_{\binom{n}{k-1}}$, g_1, g_2, \dots, g_{l_k} ортогональна; поэтому матрицы $\bar{\Delta}^{(k)}(R)$ унитарны:

$$\bar{\Delta}^{(k)}(R) = \bar{\Delta}^{(k)}(R^{-1})^\dagger.$$

Это значит, что

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R) & A(R) \\ \mathbf{0} & D^{(k)}(R) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R^{-1}) & A(R^{-1}) \\ \mathbf{0} & D^{(k)}(R^{-1}) \end{pmatrix}^\dagger = \\ &= \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R^{-1})^\dagger & \mathbf{0} \\ A(R^{-1})^\dagger & D^{(k)}(R^{-1})^\dagger \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Таким образом, $A(R) = \mathbf{0}$, и

$$\bar{\Delta}^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} \bar{\Delta}^{(k-1)}(R) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & D^{(k)}(R) \end{pmatrix}. \quad (13.8)$$

Следовательно, при $k \leq \frac{1}{2}n$ представление $\Delta^{(k)}(R)$ распадается на два представления, $\bar{\Delta}^{(k-1)}(R)$ и $D^{(k)}(R)$, с размерностями $\binom{n}{k-1}$ и $l_k = \binom{n}{k} - \binom{n}{k-1}$, причем первое из них эквивалентно представлению $\Delta^{(k-1)}(R)$. Далее, $\bar{\Delta}^{(k-1)}(R)$ может быть разбито на два представления, $\bar{\Delta}^{(k-2)}(R)$ и $D^{(k-1)}(R)$; затем $\bar{\Delta}^{(k-2)}$ может быть снова разбито на два и т. д. В конечном счете $\bar{\Delta}^{(k)}$ разлагается на $D^{(0)} + D^{(1)} + \dots + D^{(k)}$. Функция k -й строки таблицы (13.1), которая преобразуется с помощью $D^{(0)}$ (т. е. инвариантна), являлась ранее суммой всех функций k -й строки.

Это имеет место при $k \leq \frac{1}{2}n$. При $k > \frac{1}{2}n$ все $\binom{n}{k} = \binom{n}{n-k}$ функций, в которых $n-k$ переменных встречаются в первой степени, а k переменных — в нулевой, преобразуются точно так же, как рассмотренные выше функции (в которых те же $n-k$ переменных оказывались в нулевой степени и те же k переменных — в первой). Конкретный выбор ортогональной системы функций s не играет никакой роли. Вместо 1, s можно было бы использовать $s, 1$. Поэтому $\Delta^{(k)}$ эквивалентно представлению $\Delta^{(n-k)}$ и

может быть разложено на те же самые компоненты. Таким образом, разложение матриц $\Delta(R)$ принимает при четных n следующий вид (при $n=4$):

$$\Delta(R) = \begin{cases} \Delta^{(0)}(R) = D^{(0)} & = D^{(0)}, \\ \Delta^{(1)}(R) = \Delta^{(0)} + D^{(1)} & = D^{(0)} + D^{(1)}, \\ \Delta^{(2)}(R) = \Delta^{(1)} + D^{(2)} & = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)}, \\ \Delta^{(3)}(R) \sim \Delta^{(1)} & = D^{(0)} + D^{(1)}, \\ \Delta^{(4)}(R) \sim \Delta^{(0)} & = D^{(0)}, \end{cases}$$

а при нечетных n (например, при $n=5$)

$$\Delta(R) = \begin{cases} \Delta^{(0)}(R) = D^{(0)} & = D^{(0)}, \\ \Delta^{(1)}(R) = \Delta^{(0)} + D^{(1)} & = D^{(0)} + D^{(1)}, \\ \Delta^{(2)}(R) = \Delta^{(1)} + D^{(2)} & = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)}, \\ \Delta^{(3)}(R) \sim \Delta^{(2)} & = D^{(0)} + D^{(1)} + D^{(2)}, \\ \Delta^{(4)}(R) \sim \Delta^{(1)} & = D^{(0)} + D^{(1)}, \\ \Delta^{(5)}(R) \sim \Delta^{(0)} & = D^{(0)}. \end{cases}$$

Покажем, что полученные выше представления $D^{(0)}, D^{(1)}, \dots, D^{(\frac{1}{2}n)}$ (или $D^{(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2})}$) неприводимы и различны. Доказательство будем проводить методом индукции. Предположим, что представления, полученные тем же путем для симметрической группы $(n-1)$ -й степени, $'D^{(0)}(R'), \dots, 'D^{(k)}(R')$ [$k \leq \frac{1}{2}(n-1)$] неприводимы и различны, и примем, что их размерности ¹⁾ равны $l'_k = \binom{n-1}{k} - \binom{n-1}{k-1}$.

Главный момент доказательства состоит в том, что $D^{(k)}$, рассматриваемое только для тех R' , которые не затрагивают s_n , является представлением симметрической группы $(n-1)$ -й степени и что его неприводимыми частями являются $'D^{(k-1)}$ и $'D^{(k)}$. Отсюда и следует неприводимость и различие представлений $D^{(k)}$.

5. Функции g_1, \dots, g_{l_k} , будучи линейными относительно переменных s_n , могут быть представлены в виде сумм

$$g_x = g'_x s_n + h'_x \quad (13.9)$$

¹⁾ Штрихованные переменные всегда относятся к симметрической группе $(n-1)$ -й степени или к функциям $n-1$ переменных s_1, s_2, \dots, s_{n-1} .

таким образом, что s_n встречается в нулевой степени как в g'_x , так и в h'_x ; тогда g'_x и h'_x могут рассматриваться как функции только переменных s_1, s_2, \dots, s_{n-1} ; g'_x имеет $(k-1)$ -ю степень, а h'_x — k -ю степень.

Может оказаться возможным образовать линейные комбинации функций g_x , не содержащих членов, пропорциональных s_n . Если имеются l'' таких линейно независимых линейных комбинаций, они могут быть ортогонализированы методом Шмидта; обозначим их через \bar{g}_{0x} :

$$\bar{g}_{0x} = \bar{h}'_{0x} \quad (\text{при } x = 1, 2, \dots, l''). \quad (13.9a)$$

Все штрихованные функции не будут зависеть от s_n . Естественно, что l'' могло бы оказаться нулем, но в дальнейшем выяснится, что в общем случае это не так. Остальные g_x могут быть затем сделаны ортогональными \bar{g}_{0x} и между собой, так что

$$\bar{g}_{1x} = \bar{g}'_{1x} s_n + \bar{h}'_{1x} \quad (\text{при } x = 1, 2, \dots, l_k - l''). \quad (13.9б)$$

Полученные таким способом функции \bar{g}'_{1x} линейно независимы. В противном случае можно было бы получить иные функции \bar{g} , не содержащие s_n . Представление симметрической группы, применимое к \bar{g} , будет эквивалентным представлению $\mathbf{D}^{(k)}$, так как все \bar{g} являются линейными комбинациями функций g . Оно будет унитарным, так как \bar{g} ортогональны. Исследуем поведение функций $\bar{g}_{0x}, \bar{g}_{1x}$ при перестановках $\mathbf{P}_{R'}$, оставляющих s_n неизменной. Эти перестановки образуют группу, изоморфную симметрической группе степени $n-1$. При этом оказывается, что \bar{g}_{0x} принадлежат представлению $\mathbf{D}^{(k)}$ этой группы, а \bar{g}_{1x} — представлению $\mathbf{D}^{(k-1)}$. Заметим, что сумма размерностей этих двух представлений равна l_k :

$$\begin{aligned} l'_k + l'_{k-1} &= \binom{n-1}{k} - \binom{n-1}{k-1} + \binom{n-1}{k-1} - \binom{n-1}{k-2} = \\ &= \binom{n}{k} - \binom{n}{k-1} = l_k. \end{aligned} \quad (13.10)$$

Как только это установлено, неприводимость $\mathbf{D}^{(k)}$ будет простым следствием этого.

Рассмотрим сначала функции \bar{g}_{1x} . Каждая \bar{g}_{1x} ортогональна всем функциям $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$, и в частности функции

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n} = s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-2}} s_n s_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}.$$

Так как \bar{h}'_{1x} содержит s_n в нулевой степени, эта функция ортогональна также $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}$; следовательно, тем же свойством обладает и $\bar{g}'_{1x} s_n$. Поэтому \bar{g}'_{1x} ортогональна всякой функции $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-2}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}$. Но эта ортогональность является определением l'_{k-1} функций s_1, s_2, \dots, s_{n-1} степени $k-1$, преобразующихся при перестановке этих переменных в соответствии с представлением $'D^{(k-1)}$, которое неприводимо по предположению. Так как имеется только l'_{k-1} функций s_1, s_2, \dots, s_{n-1} степени $k-1$, обладающих этим свойством (или ортогональных $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-2}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-2} n}$), не может существовать более l'_{k-1} функций \bar{g}'_{1x} . Действительно, имеется в точности l'_{k-1} таких функций, и они преобразуются при тех перестановках R' , которые оставляют s_n неизменным, в соответствии с $'D^{(k-1)}$. Чтобы убедиться в этом, применим $P_{R'}$ к (13.9б) и, так как эта перестановка не затрагивает s_n , получим

$$P_{R'} \bar{g}'_{1x} = s_n P_{R'} \bar{g}'_{1x} + P_{R'} \bar{h}'_{1x}. \quad (13.11)$$

Когда эти функции выражены в виде линейных комбинаций функций \bar{g}'_{0x} и \bar{g}'_{1x} , сравнение коэффициентов при s_n показывает, что $P_{R'} \bar{g}'_{1x}$ являются линейными комбинациями самих \bar{g}'_{1x} . Поскольку функции \bar{g}'_{1x} принадлежат неприводимому представлению $'D^{(k-1)}$, это возможно только в том случае, если имеется либо l'_{k-1} линейно независимых функций \bar{g}'_{1x} , либо ни одной. Последняя возможность может быть исключена, так как в этом случае все \bar{g}' , а следовательно, и все g' , не зависели бы от s_n . Так как n не играет какой-либо особой роли по сравнению с другими индексами при выборе g' , это невозможно. Поэтому мы имеем

$$P_{R'} \bar{g}'_{1x} = \sum_{\lambda=1}^{l'_{k-1}} 'D^{(k-1)}(R')_{\lambda x} \bar{g}'_{1\lambda} \quad (x=1, 2, \dots, l'_{k-1}) \quad (13.11a)$$

и $l_k - l'' = l'_{k-1}$. Если $l_k = l'_{k-1}$, то не существует функций типа (13.9а), т. е. в этом случае все g'_x в (13.9) линейно независимы. Однако, как это будет показано позднее, $l_k = l'_{k-1}$ только при $k = \frac{1}{2} n$.

Если $l_k > l'_{k-1}$, рассмотрим функции (13.9а). Любая перестановка R' первых $n-1$ переменных в $\bar{g}'_{0x} = \bar{h}'_{0x}$ из (13.9а) снова приводит к функции, не зависящей от s_n . Следовательно, если

функции $P_{R'} \bar{g}_{0x}$ выражены через \bar{g} , коэффициент при $\bar{g}_{1\lambda}$ должен обращаться в нуль. Поскольку функции $\bar{g}'_{1\lambda}$ линейно независимы, линейная комбинация функций $\bar{g}'_{1\lambda}$ из (13.9б) может быть независимой от s_n только в том случае, если коэффициенты каждой из этих функций обращаются в нуль. Значит $P_{R'} \bar{g}_{0x}$ являются линейными комбинациями одних только \bar{g}_{0x} ; эти функции принадлежат представлению симметрической группы степени $n-1$, состоящей из операторов перестановок $P_{R'}$, оставляющих s_n неизменной. Чтобы найти это представление, заметим, что функции g_x , а следовательно, и \bar{g}_{0x} , ортогональны всем $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$. Рассмотрим в этом случае те F , индексы которых не содержат n . Они могут быть записаны в виде

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} (s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1} n} + s_n).$$

В \bar{g}_{0x} функция s_n входит в нулевой степени. Поэтому она ортогональна $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} s_n$ и должна быть также ортогональна $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1} n}$. Она имеет степень k . Но это является как раз определением функций от s_1, s_2, \dots, s_{n-1} , принадлежащих представлению $'D^{(k)}$ (это представление также неприводимо по предположению). Поэтому функции \bar{g}_{0x} должны принадлежать представлению группы операторов $P_{R'}$, и для $x = 1, 2, \dots, l' = l'_k$ имеем

$$P_{R'} \bar{g}_{0x} = \sum_{\lambda=1}^{l'_k} 'D^{(k)}(R')_{\lambda x} \bar{g}_{0\lambda}. \quad (13.11б)$$

Соотношения (13.11а) и (13.11б) позволяют найти матрицы представления $D^{(k)}(R)$, по крайней мере, для тех $R = R'$, которые оставляют s_n неизменной. Искомые выражения упрощаются, если нумерация строк и столбцов матриц $D^{(k)}$ соответствует нумерации функций \bar{g} из (13.9а) и (13.9б):

$$P_{R'} \bar{g}_{0x} = \sum_{\lambda=1}^{l'_k} D^{(k)}(R)_{0\lambda; 0x} \bar{g}_{0\lambda} + \sum_{\lambda=1}^{l'_{k-1}} D^{(k)}(R)_{1\lambda; 0x} \bar{g}_{1\lambda}, \quad (13.12а)$$

$$P_{R'} \bar{g}_{1x} = \sum_{\lambda=1}^{l'_k} D^{(k)}(R)_{0\lambda; 1x} \bar{g}_{0\lambda} + \sum_{\lambda=1}^{l'_{k-1}} D^{(k)}(R)_{1\lambda; 1x} (\bar{g}'_{1\lambda} s_n + \bar{h}'_{1\lambda}). \quad (13.12б)$$

Тогда $D^{(k)}$ является суперматрицей

$$D^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} D_{00}^{(k)}(R) & D_{01}^{(k)}(R) \\ D_{10}^{(k)}(R) & D_{11}^{(k)}(R) \end{pmatrix}. \quad (13.12)$$

При тех $R = R'$, которые оставляют s_n неизменной, сравнение (13.12а) с (13.11б) в силу линейной независимости всех \bar{g} дает

$$D^{(k)}(R')_{0\lambda; 0\alpha} = {}'D^{(k)}(R')_{\lambda\alpha}, \quad D^{(k)}(R')_{1\lambda; 0\alpha} = 0. \quad (13.13а)$$

Так как $P_{R'}$ не затрагивает s_n , то для сравнения (13.11а) с (13.12б) первое из этих выражений можно подставить в выражение для $P_{R'}\bar{g}'_{1\alpha}$, получающееся из (13.9б):

$$P_{R'}\bar{g}'_{1\alpha} = s_n P_{R'}\bar{g}'_{1\alpha} + P_{R'}\bar{h}'_{1\alpha} = \sum_{\lambda=1}^{l'_{k-1}} {}'D^{(k-1)}(R')_{\lambda\alpha} \bar{g}'_{1\lambda} s_n + P_{R'}\bar{h}'_{1\alpha}.$$

Так как все $\bar{g}'_{1\lambda} s_n$ линейно независимы и ортогональны всем $\bar{g}'_{0\lambda}$, $\bar{h}'_{1\lambda}$ и $P_{R'}\bar{h}'_{1\alpha}$ (содержащим s_n в нулевой степени), сравнение последнего соотношения с (13.12б) дает

$$D^{(k)}(R')_{1\lambda; 1\alpha} = {}'D^{(k-1)}(R')_{\lambda\alpha}. \quad (13.13б)$$

Поэтому для тех R' , которые не затрагивают s_n ,

$$D^{(k)}(R') = \begin{pmatrix} D^{(k)}(R') & 0 \\ B(R') & {}'D^{(k-1)}(R') \end{pmatrix},$$

где $B(R')$ пока что неизвестно. Однако матрицы $D^{(k)}$ унитарны, поскольку \bar{g} ортогональны, так что $B(R')$ должно обращаться в нуль. Отсюда вытекает, что представление $D^{(k)}(R)$, рассматриваемое как представление симметрической группы $(n-1)$ -й степени, распадается на две различные неприводимые компоненты (кроме случая, когда $l_k = l'_{k-1}$). Матрицы, соответствующие перестановкам R' , оставляющим s_n без изменения, имеют вид

$$D^{(k)}(R') = \begin{pmatrix} D^{(k)}(R') & 0 \\ 0 & {}'D^{(k-1)}(R') \end{pmatrix}. \quad (13.13)$$

Теперь мы можем рассмотреть и случай $l_k = l'_{k-1}$. Это может иметь место только при $k = \frac{1}{2}n$. Это следует проще всего из тождества (13.10), согласно которому

$$l_k - l'_{k-1} = \binom{n-1}{k} - \binom{n-1}{k-1};$$

но это выражение может быть равно нулю только при $k + (k-1) = n-1$. Исключительность этого случая можно было бы предвидеть, так как $'D^{(k)}$ определено только при $k \leq \frac{1}{2}(n-1)$, а это

неравенство не выполняется при $k = \frac{1}{2}n$. Однако неприводимость матриц $\mathbf{D}^{(k)}$ в этом случае следует сразу; вместо (13.13) при этом можно написать равенство $\mathbf{D}^{(k)}(R') = {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R')$. Таким образом, $\mathbf{D}^{(\frac{1}{2}n)}(R)$ неприводимо в силу того обстоятельства, что матрицы, соответствующие подгруппе, оставляющей s_n неизменной, уже являются неприводимыми.

В общем случае рассмотрим матрицу

$$\begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_2 \\ \mathbf{M}_3 & \mathbf{M}_4 \end{pmatrix}, \quad (13.14)$$

коммутирующую со всеми $\mathbf{D}^{(k)}(R)$. Пусть подразделение строк и столбцов в (13.14) будет тем же, что и в (13.13). В частности, (13.14) должна также коммутировать с ${}'\mathbf{D}^{(k)}(R')$ из (13.13):

$$\begin{pmatrix} {}'\mathbf{D}^{(k)}(R') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_2 \\ \mathbf{M}_3 & \mathbf{M}_4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{M}_1 & \mathbf{M}_2 \\ \mathbf{M}_3 & \mathbf{M}_4 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} {}'\mathbf{D}^{(k)}(R') & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \end{pmatrix}.$$

Поэтому для всех матриц неприводимых представлений ${}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R')$ или ${}'\mathbf{D}^{(k)}(R')$ симметрической группы $(n-1)$ -й степени, изоморфной перестановкам величин s_1, \dots, s_{n-1} , должны выполняться следующие соотношения:

$$\begin{aligned} {}'\mathbf{D}^{(k)}(R') \mathbf{M}_1 &= \mathbf{M}_1 {}'\mathbf{D}^{(k)}(R'), \\ {}'\mathbf{D}^{(k)}(R') \mathbf{M}_2 &= \mathbf{M}_2 {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R'), \\ {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \mathbf{M}_3 &= \mathbf{M}_3 {}'\mathbf{D}^{(k)}(R'), \\ {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R') \mathbf{M}_4 &= \mathbf{M}_4 {}'\mathbf{D}^{(k-1)}(R'). \end{aligned}$$

Но отсюда, согласно теоремам 2 и 3 гл. 9, следует, что \mathbf{M}_2 и \mathbf{M}_3 должны быть нулевыми матрицами, а \mathbf{M}_1 и \mathbf{M}_4 — кратными единичной матрице. Тогда, в силу одной лишь коммутативности с (13.13), (13.14) должна иметь вид

$$\begin{pmatrix} m_1 \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & m_4 \mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (13.14a)$$

Рассмотрим далее перестановку R , которая не оставляет величину s_n неизменной, а преобразует ее в другую s_i , встречающуюся в первой степени в какой-либо функции \bar{h}'_{0x} . В линейном представлении функций $\mathbf{P}_{R\bar{h}'_{0x}}$ должна быть использована по крайней мере

одна из функций \bar{g}_{1x} . Поэтому, если мы запишем $D^{(k)}(R)$ в виде

$$D^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}, \quad (13.146)$$

где C наверняка не является нулевой матрицей. Тогда (13.14а) может коммутировать с (13.146) только в том случае, если $m_1 = m_4$, так что (13.14а) является постоянной матрицей. Но это является достаточным условием неприводимости $D^{(k)}(R)$, которая тем самым установлена.

В том, что представления $D^{(0)}, D^{(1)}, \dots, D^{(\frac{1}{2}n)}$ (или $D^{(\frac{1}{2}n - \frac{1}{2})}$) все различны, можно убедиться с помощью (13.13); матрицы для перестановок R' величин s_1, s_2, \dots, s_{n-1} не эквивалентны во всех этих представлениях. Поэтому и сами представления должны быть неэквивалентными.

6. Нам еще остается вычислить характер $\chi^{(k)}(R)$ неприводимого представления $D^{(k)}(R)$. Так как $\Delta^{(k)}(R)$ может быть преобразовано таким образом, что

$$\Delta^{(k)}(R) = \begin{pmatrix} \Delta^{(k-1)}(R) & 0 \\ 0 & D^{(k)}(R) \end{pmatrix}, \quad (13.8)$$

то $\chi^{(k)}(R)$ равно разности характеров матриц $\Delta^{(k)}(R)$ и $\Delta^{(k-1)}(R)$. Согласно (13.4), характер матрицы $\Delta^{(k)}(R)$ равен коэффициенту при x^k многочлена $(k \leq \frac{1}{2}n)$

$$(1 + x^{\lambda_1})(1 + x^{\lambda_2}) \dots (1 + x^{\lambda_p}), \quad (\lambda_1 + \lambda_2 + \dots + \lambda_p = n). \quad (13.14)$$

Характер матрицы $\Delta^{(k-1)}(R)$ равен коэффициенту при x^{k-1} в этом выражении или коэффициенту при x^k в произведении (13.4) на x ; характер $\chi^{(k)}(R)$ дается разностью этих двух коэффициентов, т. е. коэффициентом при x^k в выражении

$$(1 - x)(1 + x^{\lambda_1})(1 + x^{\lambda_2}) \dots (1 + x^{\lambda_p}) = \sum x^k \chi^k(R), \quad (13.15)$$

где $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_p$ — длины циклов перестановки R .

Для присоединенных представлений $\bar{D}^{(k)}(R)$ применимо то же самое выражение с тем же или с противоположным знаком в зависимости от того, является ли перестановка R четной или нечетной, т. е. в зависимости от того, четно или нечетно число $\lambda_1 - 1 + \lambda_2 - 1 + \dots + \lambda_p - 1 = n - \rho$. Характер $\bar{\chi}^{(k)}(R)$ равен коэффициенту при x^k в выражении

$$(-1)^{n-\rho} (1 - x)(1 + x^{\lambda_1})(1 + x^{\lambda_2}) \dots (1 + x^{\lambda_p}) = \sum_k x^k \bar{\chi}^{(k)}(R). \quad (13.15a)$$

Представление $\mathbf{D}^{(0)}(R)$ является тождественным, а $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R)$ — антисимметричным.

Как уже упоминалось выше, предшествующее рассмотрение дает не все неприводимые представления симметрической группы, а лишь те, которые играют роль в атомной спектроскопии. В математической теории неприводимых представлений (основоположниками этой теории были А. Юнг и Г. Фробениус) отдельные представления соответствуют не определенным индексам k , а различным разбиениям числа n на положительные целые слагаемые, полное число которых равно числу всех неприводимых представлений. Представления $\mathbf{D}^{(k)}(R)$ соответствуют разделению n на два слагаемых $(n-k) + k$ (в силу ограничения $n-k \geq k$ имеем $k \leq \frac{1}{2}n$); представления $\bar{\mathbf{D}}^{(k)}(R)$ соответствуют разбиению n на суммы единиц и двоек, $2 + 2 + \dots + 2 + 1 + 1 + 1 = n$, где имеется $n - 2k$ единиц и k двоек.

То обстоятельство, что собственные функции, осуществляющиеся в природе, преобразуются, согласно этим представлениям, при перестановках координат электронов, связано с тем фактом, что спин электрона во внешнем магнитном поле может иметь лишь две различные ориентации. Если возможны три ориентации (как, например, в случае ядра азота, спин которого равен единице), появляются также представления, соответствующие разбиению числа n на три слагаемых, а также их присоединенные представления, соответствующие разбиению n на суммы чисел 1, 2 и 3. Наоборот, если возможно только одно квантованное направление (например, для ядра гелия, спин которого равен нулю), то в физических задачах могут встречаться только симметричные представления, соответствующие разбиению n на одно слагаемое $n = n$, а также антисимметричные представления, соответствующие разбиению этого числа на одни единицы, $n = 1 + 1 + \dots + 1$.

Сравним результаты этой главы с неприводимыми представлениями (7.E.1), (9.E.1) и (9.E.3) симметрической группы третьей степени, данными на стр. 100 и 101. Представление одной лишь матрицей (1) является тождественным представлением $\mathbf{D}^{(0)}(R)$ ($n = 3 + 0$); его присоединенное представление есть антисимметричное представление $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R)$ ($n = 1 + 1 + 1$). Третьим представлением является $\mathbf{D}^{(1)}(R)$ ($n = 2 + 1$); его присоединенное представление есть $\bar{\mathbf{D}}^{(1)}(R)$ ($n = 2 + 1$), причем последние два представления эквивалентны.

Для симметрической группы четвертой степени имеем представления:

$\mathbf{D}^{(0)}(R)$ ($n = 4$) и $\bar{\mathbf{D}}^{(0)}(R)$ ($n = 1 + 1 + 1 + 1$), размерности $\binom{4}{0} - \binom{4}{-1} = 1$,

$\mathbf{D}^{(1)}(R)$ ($n = 3 + 1$) и $\bar{\mathbf{D}}^{(1)}(R)$ ($n = 2 + 1 + 1$), размерности $\binom{4}{1} - \binom{4}{0} = 3$,

$\mathbf{D}^{(2)}(R)$ ($n = 2 + 2$), эквивалентное $\bar{\mathbf{D}}^{(2)}(R)$ ($n = 2 + 2$),

размерности $\binom{4}{2} - \binom{4}{1} = 2$.

Всего имеется пять неэквивалентных неприводимых представлений, соответствующих пяти классам группы. Очевидно, что сумма квадратов их размерностей равна порядку группы: $1^2 + 1^2 + 3^2 + 3^2 + 2^2 = 24 = 4! = h$. Для этой группы, как и для симметрической группы третьей степени, рассматриваемые представления включают все неприводимые представления.

При $n = 5$ мы получим таким способом шесть неприводимых представлений $[(D^{(2)}(R) \text{ не эквивалентно } \bar{D}^{(2)}(R))]$, но так как группа имеет семь классов, то это не все неприводимые представления. При больших n все меньшая часть полного числа всех неприводимых представлений оказывается среди $D^{(k)}(R)$ и $\bar{D}^{(k)}(R)$. Тем не менее в силу принципа Паули мы приходим к заключению, что остальные представления не играют никакой роли в теории атомных спектров. Они могут быть получены тем же способом, каким мы получили рассмотренные представления, за тем исключением, что следует рассматривать функции n переменных, могущие принимать более чем те два значения, которые мы приняли в нашем рассмотрении.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Лемма о симметрической группе

Здесь будет показано, что при $k \leq \frac{1}{2}n$ все $\binom{n}{k-1}$ функций

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_{k-1}} s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} \quad (13.5)$$

(где $a_1 < a_2 < \dots < a_{k-1}$ и $s_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ является суммой всех тех переменных s , индексы которых не встречаются среди чисел a_1, a_2, \dots, a_{k-1}) линейно независимы. Только в том случае, если это имеет место, можно заключить, что не более чем $\binom{n}{k} - \binom{n}{k-1}$ линейных комбинаций произведений $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_k}$ ортогональны всем $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$. Функции $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ являются линейными комбинациями произведений $s_{a_1} s_{a_2} \dots s_{a_k}$:

$$F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}} = \sum_b m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} s_{b_1} s_{b_2} \dots s_{b_k}, \quad (13.16)$$

где можно принять $b_1 < b_2 < \dots < b_k$ и

$$m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} = \begin{cases} 1, & \text{если все } a_1, a_2, \dots, a_{k-1} \text{ встречаются} \\ & \text{среди } b_1, b_2, \dots, b_k, \\ 0, & \text{во всех остальных случаях.} \end{cases} \quad (13.17)$$

В сумме в (13.16) числа b_1, b_2, \dots, b_k пробегает все $\binom{n}{k}$ комбинаций чисел $1, 2, \dots, n$. Если между $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ имеется

линейное соотношение вида

$$\sum_a c_{a_1 \dots a_{k-1}} F_{a_1 \dots a_{k-1}} = \sum_{a, b} c_{a_1 \dots a_{k-1}} m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} s_{b_1} \dots s_{b_k} = 0 \quad (13.18)$$

[суммирование опять проводится по всем $\binom{n}{k-1}$ комбинациям чисел a и по всем $\binom{n}{k}$ комбинациям чисел b], то отсюда следует, что для всех чисел $x_{b_1 \dots b_k}$, определенных для $b_1 < b_2 < \dots < b_k$,

$$\sum_{a, b} c_{a_1 \dots a_{k-1}} m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} x_{b_1 \dots b_k} = 0. \quad (13.19)$$

Это можно показать, умножая скалярное произведение (13.18) и $s_{d_1} s_{d_2} s_{d_3} \dots s_{d_k}$ на $x_{d_1 \dots d_k}$ и складывая получающиеся уравнения при всех возможных комбинациях чисел d_i .

Выберем теперь числа x_{b_1, b_2, \dots, b_k} так, чтобы

$$\sum_b m_{a_1 \dots a_{k-1}; b_1 \dots b_k} x_{b_1 \dots b_k} = \begin{cases} 1 & \text{при } a_1 = 1, a_2 = 2, \dots, a_{k-1} = k-1; \\ 0 & \text{в остальных случаях.} \end{cases} \quad (13.20)$$

Тогда соотношение (13.19) эквивалентно равенству

$$c_{12 \dots k-1} = 0. \quad (13.21)$$

То же самое соотношение (13.21) должно выполняться также для всех остальных $c_{a_1 \dots a_{k-1}}$, поскольку они все входят одинаковым образом; иначе говоря, аналогичным образом можно так выбрать величины $x_{b_1 \dots b_k}$, чтобы показать, что каждое c обращается в нуль (следует заменить лишь в последней части нашего рассуждения 1, 2, ..., $k-1$ на a_1, a_2, \dots, a_{k-1}). Тем самым остается лишь показать, что выбор, приводящий к (13.20), действительно может быть сделан, после чего доказательство линейной независимости функций $F_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}}$ будет завершено.

Величины $x_{b_1 \dots b_k}$ находятся в нашем полном распоряжении. Выберем равными друг другу все те $x_{b_1 \dots b_k}$, среди индексов b_1, b_2, \dots, b_k которых имеется в точности τ чисел 1, 2, ..., $k-1$ (где $0 \leq \tau \leq k-1$). Обозначим эти $x_{b_1 \dots b_k}$ через x_τ . Рассмотрим теперь те из соотношений (13.20), в которых имеется σ чисел 1, 2, ..., $k-1$ среди a_1, a_2, \dots, a_{k-1} . Поскольку $m_{a_1 a_2 \dots a_{k-1}; b_1 b_2 \dots b_k}$ отлично от нуля только в том случае, если все a_i встречаются среди b_i , только те члены будут давать вклад в сумму в (13.20), в которых имеется σ чисел 1, 2, ..., $k-1$ и $k-1-\sigma$ чисел $k, k+1, \dots, n$ среди b_i . Единственный индекс b , значение кото-

рого остается еще неопределенным, может быть либо одним из чисел $1, 2, \dots, k-1$, либо одним из чисел $k, k+1, \dots, n$. В первом случае он может принимать $k-1-\sigma$ значений, в последнем — $n-k+1-(k-1-\sigma) = n-2k+2+\sigma$ значений, поскольку он не может быть равным одному из чисел a_1, a_2, \dots, a_{k-1} . Тогда (13.20) принимает вид

$$(k-1-\sigma)x_{\sigma+1} + (n-2k+2+\sigma)x_{\sigma} = \begin{cases} 1 & \text{при } \sigma = k-1 \\ 0 & \text{при } \sigma = 0, 1, \dots, k-2. \end{cases} \quad (13.22)$$

Это дает

$$x_{k-1} = \frac{1}{n-k+1}$$

и

$$-\frac{x_{\sigma}}{x_{\sigma+1}} = \frac{k-1-\sigma}{n-2k+2+\sigma} \quad \text{при } \sigma = 0, 1, \dots, k-2.$$

Но эти уравнения могут быть удовлетворены при $n-2k+2 \geq 0$ или $k \leq \frac{1}{2}n+1$; следовательно, тем более они будут удовлетворяться при $k \leq \frac{1}{2}n$. Значит, величины x_{b_1, b_2, \dots, b_k} могут быть выбраны так, чтобы выполнялось соотношение (13.20). Следовательно, соотношение (13.21) выполняется. Аналогично должны обращаться в нуль все остальные c в (13.18); таким образом, линейная независимость функций F установлена.

ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ

1. Непрерывная группа, образованная из совокупности всех вещественных ортогональных n -мерных матриц, называется *n -мерной группой вращений*. *Группа чистых вращений* включает ортогональные матрицы только с определителем $+1$, тогда как *группа вращений и отражений* включает также матрицы с определителем -1 ; таким образом, последняя содержит все вещественные ортогональные матрицы. Групповое умножение является снова матричным умножением, а тождественным элементом является единичная матрица.

В гл. 3 мы видели, что всякая вещественная ортогональная матрица может быть приведена к диагональному виду с помощью унитарной матрицы. Тогда абсолютные величины всех диагональных элементов равны 1; некоторые диагональные элементы равны $+1$, другие равны -1 , а остальные состоят из сопряженных пар комплексных чисел $e^{i\varphi}$ и $e^{-i\varphi}$. Собственные векторы, соответствующие собственным значениям $+1$ или -1 , могут быть записаны в вещественном виде, а пары собственных векторов, соответствующие двум комплексно сопряженным собственным значениям, — в виде комплексно сопряженных векторов. Так как эти собственные векторы, как и всякие собственные векторы, ортогональны в эрмитовом смысле, они ортогональны сами себе в комплексном ортогональном смысле; иначе говоря, сумма квадратов их компонент равна нулю.

Как известно, n -мерная ортогональная матрица представляет преобразование от одной системы ортогональных осей к другой, т. е. *вращение* осей координат. Из ортогональности этой матрицы следует, что каждая пара осей новой системы координат ортогональна и что единица длины новых осей координат та же, что и была для старых. Группа чистых вращений содержит только преобразования от одной „правой“ системы координат к другой „правой“ системе; группа вращений и отражений включает также преобразования от правой системы координат к левой и, наоборот. Последние преобразования часто называются несобственными вращениями.

Чтобы применить наши общие результаты к непрерывным группам, мы должны прежде всего ввести параметры. Это может быть сделано только несимметричным образом, так как определенные направления в пространстве (оси координат) должны быть выделены, и даже сами оси координат не могут рассматриваться на равных основаниях. Прежде всего найдем число измерений пространства искомым параметром. Рассмотрим n -мерную вещественную ортогональную матрицу. Так как первая строка является n -мерным вектором единичной длины (ось x новой системы координат), она в силу условия $a_{11}^2 + a_{12}^2 + \dots + a_{1n}^2 = 1$ содержит в точности $n - 1$ параметр. Вторая строка должна быть ортогональна первой; отсюда следует однородное линейное уравнение $a_{11}a_{21} + a_{12}a_{22} + \dots + a_{1n}a_{2n} = 0$ для $a_{21}, a_{22}, \dots, a_{2n}$, а из единичной длины вытекает $a_{21}^2 + a_{22}^2 + \dots + a_{2n}^2 = 1$. Таким образом, во второй строке имеется $n - 2$ свободных параметра. Далее, k -я строка должна быть ортогональна всем $k - 1$ предшествующим строкам — отсюда следуют $k - 1$ однородных уравнений — и иметь единичную длину. Следовательно, она содержит $n - k$ свободных параметров. Всего имеется

$$(n - 1) + (n - 2) + (n - 3) + \dots + [n - (n - 1)] + 0 = \frac{1}{2} n(n - 1)$$

свободных параметров.

2. В дальнейшем мы будем ограничиваться двумерной и трехмерными группами вращений.

Общий элемент двумерной группы чистых вращений получается путем преобразования к новой системе координат на плоскости¹⁾

$$\begin{aligned} x' &= x \cos \varphi + y \sin \varphi, \\ y' &= -x \sin \varphi + y \cos \varphi, \end{aligned} \quad (14.1)$$

где φ — угол вращения, принимающий значения от $-\pi$ до $+\pi$. Общий элемент группы имеет, таким образом, вид

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (14.2)$$

Второе преобразование — переход от $x'y'$ к x'' , y'' путем вращения системы координат на угол φ' — приводит к произведению

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi' & \sin \varphi' \\ -\sin \varphi' & \cos \varphi' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos(\varphi + \varphi') & \sin(\varphi + \varphi') \\ -\sin(\varphi + \varphi') & \cos(\varphi + \varphi') \end{pmatrix}. \quad (14.3)$$

¹⁾ Вращение определяется как положительное, если ось x вращается к оси y так, чтобы соответствовать определению трехмерных вращений. В общем случае положительным вращением вокруг некоторой оси называется вращение правого винта, продвигающегося в положительном направлении этой оси.

Соотношение (14.3) показывает, что произведение является просто вращением на угол $\varphi + \varphi'$.

Двумерная группа чистых вращений является абелевой, так как она имеет только один параметр. Если мы введем обозначение $\{\varphi\}$ гл. 10 для элемента группы с параметром φ , то соотношение (14.3) может быть записано в виде

$$\{\varphi'\} \cdot \{\varphi\} = \{\varphi + \varphi'\} = \{\varphi\} \cdot \{\varphi'\}. \quad (14.4)$$

Если $\varphi + \varphi'$ не лежит между $-\pi$ и $+\pi$, должно быть добавлено или вычтено целое число углов 2π , чтобы угол $\varphi + \varphi'$ попал в область, в которой допускается изменение параметра.

Для матрицы (14.2) угол φ является комплексной фазой собственного значения $\exp(\pm i\varphi)$. Столбцы единичной матрицы u , которая диагонализует (14.2), определяется из соотношений

$$|u_{1\alpha}|^2 + |u_{2\alpha}|^2 = 1, \quad u_{1\alpha}^2 + u_{2\alpha}^2 = 0, \quad u_{1\alpha} = \pm i u_{2\alpha}$$

с точностью до множителя с абсолютной величиной 1 (который может быть выбран произвольно). Эти условия дают $u_{11} = 1/\sqrt{2}$, $u_{21} = -i/\sqrt{2}$, $u_{12} = 1/\sqrt{2}$, $u_{22} = +i/\sqrt{2}$, и мы имеем

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{i}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{+i\varphi} \end{pmatrix}. \quad (14.5)$$

Таким образом, собственные векторы одни и те же для всех матриц (14.2). Поскольку двумерная группа чистых вращений является абелевой, каждый элемент образует класс сам по себе.

3. Из всякой двумерной матрицы с определителем -1 можно получить матрицу с определителем $+1$ путем умножения второй строки на -1 . И, наоборот, общая ортогональная матрица с определителем -1 получается путем изменения знаков во второй строке (14.2):

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & -\cos \varphi \end{pmatrix}. \quad (14.2a)$$

Матрицы (14.2) и (14.2a), где $-\pi \leq \varphi \leq \pi$, образуют двумерную группу вращений и отражений. Все матрицы (14.2a) имеют собственные значения $+1$ и -1 . Они имеют различные собственные векторы $u_{.1} = [\cos(\varphi/2), \sin(\varphi/2)]$, $u_{.2} = [-\sin(\varphi/2), \cos(\varphi/2)]$, тогда как все матрицы (14.2) имеют все одинаковые собственные векторы, но различные собственные значения. Мы можем непосред-

ственно проверить, что матрица, образованная из этих двух векторов, преобразует диагональную матрицу к виду (14.2а):

$$\begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ \sin \varphi & -\cos \varphi \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & -\sin \frac{\varphi}{2} \\ \sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\varphi}{2} & \sin \frac{\varphi}{2} \\ -\sin \frac{\varphi}{2} & \cos \frac{\varphi}{2} \end{pmatrix}. \quad (14.5a)$$

Выражение для несобственного вращения (14.2а) в виде произведения (14.5а) иллюстрирует то обстоятельство, что всякое несобственное вращение (14.2а) может рассматриваться как чистое отражение в прямой линии; соотношение (14.5а) означает, что (14.2а) получается путем, во-первых, *вращения* на угол $\varphi/2$, *затем отражения* относительно оси x , и наконец, *вращения назад* на угол $-\varphi/2$. С другой стороны, то же отражение могло бы быть произведено относительно линии, составляющей угол $\varphi/2$ с осью x .

Двумерная группа вращений и отражений является смешанной непрерывной группой. Наиболее естественная параметризация этой группы использует непрерывный параметр φ и дискретный параметр d . Последний представляет собой определитель, т. е. равен ± 1 . Тогда мы имеем

$$\{\varphi, d\} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -d \sin \varphi & d \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad (14.6)$$

$$\{\varphi, d\} \cdot \{\varphi', d'\} = \{d'\varphi + \varphi', dd'\}.$$

Эта группа не является более абелевой; матрицы (14.2а) не коммутируют, а также не имеют общих собственных векторов.

Разбиение группы на классы также меняется: (14.5а) показывает, что все элементы (14.2а) *принадлежат одному классу*, так как они все могут быть преобразованы в $\{0, -1\}$. Однако элементы (14.2) уже не образуют класса каждый в отдельности; например,

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi \\ -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi \\ \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad (14.7)$$

и, следовательно, $\{\varphi, 1\}$ и $\{-\varphi, 1\}$ принадлежат одному и тому же классу. В этом классе не может быть других элементов, так как все остальные имеют другие собственные значения и не могут быть преобразованы в один из этих двух.

4. В соответствии с общим рассмотрением интеграла Гурвица в гл. 10 существует такой инвариантный интеграл по области

двумерной группы чистых вращений, что соотношение

$$\int_{-\pi}^{\pi} J(\{\varphi\}) g(\{\varphi\}) d\varphi = \int_{-\pi}^{\pi} J(R\{\varphi\}) g(\{\varphi\}) d\varphi \quad (14.8)$$

выполняется для всех элементов группы R при условии, что $g(T)$ определяется (10.9):

$$g(T) = \frac{g(E)}{\partial p(T \cdot \{\alpha\}) / \partial \alpha} \quad \text{при } \alpha = 0, \quad (14.9)$$

где $p(T)$ — параметр элемента T .

В случае двумерной группы вращений непосредственная проверка показывает, что одинаковым областям должны быть приписаны одинаковые веса. Пусть t будет параметром элемента T ; тогда, согласно (14.4), мы имеем параметр $p(T\{\alpha\}) = t + \alpha$. После дифференцирования по α это дает 1, так что

$$g(T) = g(E). \quad (14.10)$$

Таким образом, инвариантный интеграл равен

$$\int_{-\pi}^{\pi} J(\{\varphi\}) d\varphi = \int_{-\pi}^{\pi} J(R \cdot \{\varphi\}) d\varphi. \quad (14.11)$$

Все неприводимые представления двумерной группы чистых вращений одномерны. Действительно, это справедливо для всех абелевых групп; непрерывные абелевы группы являются лишь частным случаем. Рассмотрим многомерное, скажем двумерное, представление. Мы можем привести некоторую матрицу этого представления к диагональному виду. Если два диагональных элемента не были бы равными, матрица имела бы вид

$$\begin{pmatrix} a & 0 \\ 0 & b \end{pmatrix}. \quad (14.E.1)$$

так что все матрицы, коммутирующие с ней — и, следовательно, все матрицы этого представления — имели бы только нули на пересечениях строк и столбцов с различными диагональными элементами матрицы (14.E.1); тогда представление было бы приводимым. Если бы это не имело места, то все собственные значения матрицы (14.E.1) были бы равными и матрица была бы постоянной. Тогда она имела бы диагональный вид даже до преобразования. Но это верно для любой матрицы этого представления, так что они все были бы кратными единичной матрице, и представление было бы, следовательно, приводимым.

Из (14.4) следует, что если элемент $\{\varphi\}$ соответствует матрице $(f(\varphi))$ в некотором представлении, то

$$(f(\varphi)) \cdot (f(\varphi')) = (f(\varphi')) \cdot (f(\varphi)) = (f(\varphi + \varphi')),$$

и, таким образом,

$$f(\varphi) = e^{ik\varphi}.$$

Так как матрица для $\varphi = -\pi$ должна совпадать с матрицей для $\varphi = +\pi$, мы должны иметь $\exp(ik\pi) = \exp(-ik\pi)$; следовательно, $\exp(2ik\pi) = 1$. Отсюда следует, что k является вещественным целым числом. Двумерная группа чистых вращений имеет бесконечно много неприводимых представлений, и все они одномерны. Матрица m -го представления, соответствующая элементу (14.2) с углом вращения φ , равна

$$(e^{im\varphi}).$$

Для каждого положительного и отрицательного целого числа, $m = \dots -4, -3, -2, -1, 0, +1, +2, +3, \dots$, существует одно определенное неприводимое представление двумерной группы чистых вращений.

Соотношения ортогональности

$$\int_{-\pi}^{\pi} (e^{im'\varphi})^* (e^{im\varphi}) d\varphi = \begin{cases} 0 & \text{при } m \neq m' \\ \int_{-\pi}^{\pi} d\varphi = 2\pi & \text{при } m = m' \end{cases}$$

являются как раз соотношениями ортогональности рядов Фурье. Полнота набора коэффициентов представления является также полнотой системы функций, по которой производятся разложения Фурье.

5. Найдем теперь неприводимые представления двумерной группы вращений и отражений, используя метод, который покажется весьма сложным для этой цели. Однако тот же самый метод будет в дальнейшем применен к трехмерной группе, так что полезно рассмотреть его на простом примере; кроме того, мы имеем здесь другой пример соотношений между представлением и соответствующими функциями.

Рассмотрим уравнение для гармонических полиномов от двух переменных

$$\frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y)}{\partial y^2} = 0. \quad (14.12)$$

Ясно, что оно инвариантно относительно всех преобразований (14.6). Далее, решение уравнения (14.12), являющееся однородной функцией степени m относительно переменных x и y , преобразуется

оператором \mathbf{P}_R [где R — преобразование вида (14.6)] в полином того же вида, так как преобразование \mathbf{P}_R линейно относительно переменных x и y :

$$\mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f(x \cos \varphi + y \sin \varphi, -dx \sin \varphi + dy \cos \varphi) = f(x, y) \quad (14.13)$$

или, поскольку $\{\varphi, d\}^{-1}$ равно $\{-d\varphi, d\}$,

$$\mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f(x, y) = f(x \cos(-d\varphi) + y \sin(-d\varphi), -xd \sin(-d\varphi) + yd \cos(-d\varphi)) = f(x \cos \varphi - yd \sin \varphi, x \sin \varphi + yd \cos \varphi). \quad (14.14)$$

Таким образом, если $f(x, y)$ является однородной функцией m -й степени, то тем же свойством обладает и $\mathbf{P}_R f$.

Уравнение (14.12) совпадает с одномерным волновым уравнением с мнимой скоростью i . Его общее решение имеет вид

$$f(x, y) = f_-(x - iy) + f_+(x + iy). \quad (14.15)$$

Если $f(x, y)$ — однородная функция степени m относительно x и y , то f_+ и f_- должны (с точностью до постоянного множителя) определяться выражениями

$$f_-(x - iy) = (x - iy)^m, \quad f_+(x + iy) = (x + iy)^m. \quad (14.16)$$

Представление $\mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})$, принадлежащее этим функциям, двумерно. Его первый столбец ($-$) определяется с помощью (11.23) и (14.14);

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f_-(x, y) &= f_-(x \cos \varphi - yd \sin \varphi, x \sin \varphi + yd \cos \varphi) = \\ &= [(x \cos \varphi - yd \sin \varphi) - i(x \sin \varphi + yd \cos \varphi)]^m = \\ &= [x(\cos \varphi - i \sin \varphi) - iyd(\cos \varphi - i \sin \varphi)]^m = \\ &= (x - iyd)^m e^{-im\varphi}. \end{aligned}$$

Будучи записанным через коэффициенты представления, это дает

$$\mathbf{P}_{\{\varphi, d\}} f_-(x, y) = \mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})_{--} f_- + \mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})_{+-} f_+.$$

Следовательно, эти коэффициенты даются выражениями

$$\begin{aligned} \mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\})_{--} &= e^{-im\varphi}, & \mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\})_{+-} &= 0, \\ \mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, -1\})_{--} &= 0, & \mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, -1\})_{+-} &= e^{-im\varphi}. \end{aligned} \quad (14.17)$$

Другой столбец ($+$) может быть определен тем же способом через функции f_+ . Матрица $\mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\})$, соответствующая в этом представлении чистому вращению на угол φ , оказывается равной

$$\mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, 1\}) = \begin{pmatrix} e^{-im\varphi} & 0 \\ 0 & e^{im\varphi} \end{pmatrix}, \quad (14.18)$$

где мы сначала записали строку (или столбец) $(-)$, а затем строку (или столбец) $(+)$. Матрица, соответствующая элементу группы (14.2а), равна

$$\mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, -1\}) = \begin{pmatrix} 0 & e^{im\varphi} \\ e^{-im\varphi} & 0 \end{pmatrix}. \quad (14.18a)$$

Функция f_- принадлежит строке $(-)$ (или первой) матрицы $\mathfrak{Z}^{(m)}$; функция f_+ — строке $(+)$ (или второй).

Эти представления неприводимы и различны при $m = 1, 2, 3, \dots$. Только диагональная матрица коммутирует с (14.18), но никакая диагональная матрица, кроме постоянной матрицы, не коммутирует с (14.18а). Матрицы (14.6) являются, разумеется, также „представлением“ их собственной группы. Это представление эквивалентно частному представлению $m = 1$ в (14.18), (14.18а); матрица, использованная в (14.5), преобразует (14.6) к виду (14.18), (14.18а).

Следует заметить, что (14.18) и (14.18а) также осуществляют представление при $m = 0$. Однако оно не является неприводимым, так как в этом случае всякая матрица коммутирует с (14.18); следовательно, в этом специальном случае мы можем диагонализировать (14.18а) и разделить это представление на две неприводимые компоненты

$$\mathfrak{Z}^{(0)}(\{\varphi, 1\}) = (1), \quad \mathfrak{Z}^{(0)}(\{\varphi, -1\}) = (1) \quad (14.19)$$

и

$$\mathfrak{Z}^{(0')}(\{\varphi, 1\}) = (1), \quad \mathfrak{Z}^{(0')}(\{\varphi, -1\}) = (-1). \quad (14.20)$$

6. Мы нашли теперь все представления двумерной группы вращений и отражений. Они задаются формулами (14.18) и (14.18а) при $m = 1, 2, 3, \dots$ и являются двумерными; при $m = 0$ и $m = 0'$ они представлены выражениями (14.19) и (14.20) и являются одномерными.

Коэффициенты представления $\mathfrak{Z}^{(m)}(\{\varphi, d\})_{\pm\pm}$ образуют полную систему функций в пространстве φ и d . Это значит, что всякую функцию $g(\varphi, d)$ (φ изменяется от $-\pi$ до $+\pi$, а d равно либо $+1$, либо -1) можно записать в виде их линейной комбинации. Функции $\frac{1}{2}(\mathfrak{Z}^{(0)} + \mathfrak{Z}^{(0')})$, $\mathfrak{Z}^{(1)}_{--}$, $\mathfrak{Z}^{(1)}_{++}$, $\mathfrak{Z}^{(2)}_{--}$, $\mathfrak{Z}^{(2)}_{++}$, ... задаются последовательностью $1, \exp(-i\varphi), \exp(i\varphi), \exp(-2i\varphi), \exp(2i\varphi), \dots$ при $d = 1$ и исчезают при $d = -1$; с другой стороны, функции $\frac{1}{2}(\mathfrak{Z}^{(0)} - \mathfrak{Z}^{(0')})$, $\mathfrak{Z}^{(1)}_{+-}$, $\mathfrak{Z}^{(1)}_{-+}$, $\mathfrak{Z}^{(2)}_{+-}$, $\mathfrak{Z}^{(2)}_{-+}$, ... равны нулю при $d = 1$ и, следовательно, равны $1, \exp(-i\varphi), \exp(i\varphi), \exp(-2i\varphi), \exp(2i\varphi), \dots$ при $d = -1$. Функция $g(\varphi, 1)$ может быть выражена в виде линейной комбинации первого набора, а $g(\varphi, -1)$ — второго.

Из того обстоятельства, что рассмотренные матричные элементы образуют полную систему в пространстве параметров, следует, что,

кроме (14.18), (14.18a), (14.19) и (14.20), не существует других неприводимых представлений двумерной группы вращений.

7. Обратимся теперь к исследованию трехмерной группы чистых вращений. Собственные значения матрицы \mathbf{a} , вещественной ортогональной трехмерной матрицы с определителем 1, должны иметь вид 1 , $\exp(-i\varphi)$, $\exp(+i\varphi)$, так как все они имеют модуль 1, а комплексные собственные значения появляются сопряженными парами. Фаза φ комплексного собственного значения называется *углом вращения*; собственный вектор¹⁾ \mathbf{v}_1 с собственным значением 1 называется *осью вращения*. Его компоненты v_{11} , v_{21} , v_{31} проще всего определить, если начать с $\mathbf{a}\mathbf{v}_1 = 1\mathbf{v}_1$ и, умножив на $\mathbf{a}^{-1} = \mathbf{a}^T$, найти $\mathbf{v}_1 = \mathbf{a}^T \mathbf{v}_1$. Это дает $(\mathbf{a} - \mathbf{a}^T)\mathbf{v}_1 = 0$ или, если записать более подробно,

$$\begin{aligned} (a_{12} - a_{21})v_{21} + (a_{13} - a_{31})v_{31} &= 0, \\ (a_{21} - a_{12})v_{11} + (a_{23} - a_{32})v_{31} &= 0, \\ (a_{31} - a_{13})v_{11} + (a_{32} - a_{23})v_{21} &= 0, \end{aligned} \quad (14.21)$$

откуда

$$v_{11} : v_{21} : v_{31} = (a_{23} - a_{32}) : (a_{31} - a_{13}) : (a_{12} - a_{21}). \quad (14.22)$$

Угол вращения φ проще всего определить, приравняв сумму собственных значений следу матрицы,

$$1 + e^{-i\varphi} + e^{i\varphi} = 1 + 2\cos\varphi = a_{11} + a_{22} + a_{33}, \quad (14.23)$$

где φ принимает значения между 0 и π .

Собственные векторы \mathbf{v}_2 и \mathbf{v}_3 , которые соответствуют $\exp(-i\varphi)$ и $\exp(+i\varphi)$, комплексно сопряжены друг с другом, $\mathbf{v}_2^* = \mathbf{v}_3$. С другой стороны, \mathbf{v}_1 должен быть взят вещественным: $(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1) = ((\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_1)) = 1$.

Матрица \mathbf{v} , столбцами которой являются собственные векторы \mathbf{v}_1 , \mathbf{v}_2 , \mathbf{v}_3 матрицы \mathbf{a} , диагонализует эту последнюю. Поэтому $\mathbf{v}^+ \mathbf{a} \mathbf{v}$ является диагональной матрицей с собственными значениями 1, $\exp(-i\varphi)$, $\exp(+i\varphi)$ в качестве диагональных элементов. Запишем теперь $\mathbf{V} = \mathbf{v}\mathbf{v}_0$, где²⁾

$$\mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{i}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (14.24)$$

¹⁾ Хотя \mathbf{v}_1 является, конечно, вектором, он будет также играть в нашем обсуждении роль столбца элементов матрицы. Поэтому мы обозначаем его в соответствии с нашими обозначениями элементов матриц.

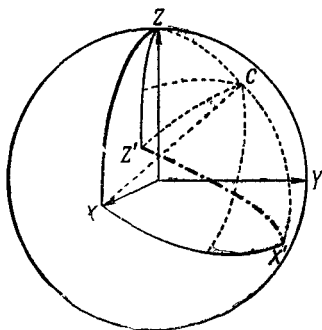
²⁾ Здесь \mathbf{v}_0 выбрано так, что \mathbf{a} представляет вращения вокруг оси X после преобразования с помощью $\mathbf{v}\mathbf{v}_0$. Ясно, что возможен другой выбор \mathbf{v}_0 , который приводит \mathbf{a} к виду, представляющему, например, вращение вокруг оси Y .

Столбцами матрицы \mathbf{V} являются векторы $\mathbf{v}_{.1}$, $(-i/\sqrt{2})(\mathbf{v}_{.2} - \mathbf{v}_{.2}^*)$ и $(1/\sqrt{2})(\mathbf{v}_{.2} + \mathbf{v}_{.2}^*)$, так что \mathbf{V} вещественна. Кроме того, матрица \mathbf{V} , будучи произведением унитарных матриц \mathbf{v} и \mathbf{v}_0 , также унитарна, так что она является вещественной ортогональной матрицей, и, следовательно, элементом группы вращений. Если мы теперь преобразуем уравнение $\mathbf{v}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{v} = \mathbf{d}$ с помощью \mathbf{v}_0 , то получим

$$\mathbf{V}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{V} = \mathbf{v}_0^\dagger \mathbf{v}^\dagger \mathbf{a} \mathbf{v} \mathbf{v}_0 = \mathbf{v}_0^\dagger \mathbf{d} \mathbf{v}_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & \sin \varphi \\ 0 & -\sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix} = \mathbf{e}_\varphi. \quad (14.25)$$

Можно принять, что в этом уравнении \mathbf{V} представляет *чистое* вращение, так как мы могли бы умножить ее на -1 , если бы ее определитель равнялся -1 , и (14.25) осталось бы без изменения. Из (14.25) видно, что *все вращения с одним и тем же углом вращения φ принадлежат одному и тому же классу*, поскольку они все могут быть преобразованы в \mathbf{e}_φ . С другой стороны, матрицы, угол вращения которых отличен от φ , не могут принадлежать одному и тому же классу, так как они имеют различные собственные значения и поэтому не могут быть преобразованы в \mathbf{e}_φ .

Геометрическую интерпретацию этого изложения дает хорошо известная теорема, согласно которой всякое ортогональное преобразование в трехмерном пространстве может быть представлено как вращение



Ф и г. 6. Геометрическая интерпретация соотношения (14.25).

вокруг соответствующим образом выбранной оси $\mathbf{v}_{.1}$. (Так как $\mathbf{a} \mathbf{v}_{.1} = \mathbf{v}_{.1}$, ось вращения не меняется при вращении.) Если преобразование переводит дугу XZ на фиг. 6 в дугу $X'Z'$, то ось вращения должна лежать на перпендикулярах, восстановленных в серединах дуг ZZ' и XX' и, следовательно, в точке их пересечения C . Действительно, вращение вокруг C преобразует Z в Z' и X в X' : из равенства двух треугольников ZCX и $Z'C'X'$ (три стороны их равны) следует, что углы ZCX и $Z'C'X'$ равны, а поэтому углы ZCZ' и XCX' также равны и равны углу вращения φ . Вращение на угол φ может быть преобразовано в другое вращение с тем же углом вращения, если ось первого вращения при-

вести в совпадение с осью второго вращения путем вращения V , выполнить затем вращения на угол φ и, наконец, вернуть ось в ее первоначальное положение с помощью V^{-1} .

Для однозначной характеристики вращений оси вращения должно быть придано определенное направление, которое задает также знак вектора \boldsymbol{v}_1 . Вращение будет происходить по часовой стрелке, если смотреть вдоль положительного направления оси.

Параметризация (фиг. 1, стр. 110) трехмерной группы чистых вращений, которая обсуждалась в гл. 10, основана на этих характеристиках. Вращение на угол φ вокруг оси \boldsymbol{v}_1 соответствует точке на расстоянии φ от начала в направлении \boldsymbol{v}_1 ¹⁾. Угол вращения всегда однозначно определяется вращением. Для вращения с $\varphi = 0$ (которое фактически вовсе не является вращением) направление оси вращения не определено; тем не менее соответствующая точка в пространстве параметров определяется однозначно: она является центром сферы.

На поверхности сферы $\varphi = \pi$ в пространстве параметров направление оси вращения не определяется однозначно; вращения на угол π вокруг противоположно направленных осей совпадают. Поэтому одно и то же вращение соответствует противоположным точкам сферической поверхности. В остальных случаях соответствие вращений точкам в пространстве параметров взаимно однозначно. Элементы определенных классов лежат на концентрических сферах.

Для этой системы параметров можно также легко сформулировать инвариантный интеграл Гурвица. Так как точки на сферической поверхности радиуса φ соответствуют вращениям на один и тот же угол, но вокруг осей, направленных по-разному, и так как все оси вращения в пространстве эквивалентны, $g(\{\varphi v_{11}, \varphi v_{21}, \varphi v_{31}\})$ может зависеть только от угла вращения φ , но не от направления вектора \boldsymbol{v}_1 . Таким образом, достаточно определить $g(\{\varphi, 0, 0\})$. С этой целью [см. формулу (10.9)] сначала вычислим параметры произведения $\{\varphi, 0, 0\} \cdot \{e_1, e_2, e_3\}$ для очень малых e_i , а затем устремим e_i к нулю. Вращение $\{e_1, e_2, e_3\}$ задается выражением

$$\{e_1, e_2, e_3\} = \begin{pmatrix} 1 & e_3 & -e_2 \\ -e_3 & 1 & e_1 \\ e_2 & -e_1 & 1 \end{pmatrix},$$

справедливым с точностью до первой степени величин e_i [см. соотношение (14. 22)]. Для $\{\varphi, 0, 0\} \{e_1, e_2, e_3\} = {}_{\varphi} \{e_1, e_2, e_3\}$ получим

$$\begin{pmatrix} 1 & e_3 & -e_2 \\ -e_3 \cos \varphi + e_2 \sin \varphi & \cos \varphi - e_1 \sin \varphi & e_1 \cos \varphi + \sin \varphi \\ e_3 \sin \varphi + e_2 \cos \varphi & -\sin \varphi - e_1 \cos \varphi & -e_1 \sin \varphi + \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

¹⁾ При обсуждении фиг. 1 в гл. 10 расстояние от начала было определено как φ/π , а не как φ . Левая часть фиг. 1 должна рассматриваться в настоящем обсуждении увеличенной в отношении $\pi:1$.

Отсюда вычислим угол вращения φ' с помощью соотношения (14.23):

$$1 + 2 \cos \varphi' = 1 + 2 \cos \varphi - 2e_1 \sin \varphi, \quad \varphi' = \varphi + e_1. \quad (14.23a)$$

Из (14.22) мы получим направление оси вращения:

$$\begin{aligned} & v'_{11} : v'_{21} : v'_{31} = \\ & = (2e_1 \cos \varphi + 2 \sin \varphi) : (e_3 \sin \varphi + e_2 (1 + \cos \varphi)) : (e_3 (1 + \cos \varphi) - e_2 \sin \varphi). \end{aligned} \quad (14.22a)$$

В сочетании с условием нормировки $v'_{11}{}^2 + v'_{21}{}^2 + v'_{31}{}^2 = 1$ это дает (с учетом лишь членов первого порядка по e)

$$v'_{11} = 1, \quad v'_{21} = \frac{e_2 (1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} + \frac{e_3}{2}, \quad v'_{31} = \frac{e_3 (1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} - \frac{e_2}{2}.$$

Таким образом, параметрами $\{\varphi, 0, 0\} \cdot \{e_1, e_2, e_3\}$ являются

$$\varphi + e_1, \quad \varphi \left[\frac{e_2 (1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} + \frac{e_3}{2} \right], \quad \varphi \left[\frac{e_3 (1 + \cos \varphi)}{2 \sin \varphi} - \frac{e_2}{2} \right].$$

При $e_1 = e_2 = e_3 = 0$ получаем в точности параметры вращения φ , т. е. $\varphi, 0, 0$. При $e_1 = e_2 = e_3 = 0$ интересующий нас якобиан равен

$$\begin{aligned} & \frac{\partial (p_1(\{\varphi, 0, 0\} \{e_1, e_2, e_3\}), \dots, p_3(\{\varphi, 0, 0\} \{e_1, e_2, e_3\}))}{\partial (e_1, e_2, e_3)} = \\ & = \begin{vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \varphi \frac{1 + \cos \varphi}{2 \sin \varphi} & -\frac{\varphi}{2} \\ 0 & \frac{\varphi}{2} & \varphi \frac{1 + \cos \varphi}{2 \sin \varphi} \end{vmatrix} = \frac{\varphi^2 (1 + \cos \varphi)^2 + \sin^2 \varphi}{4 \sin^2 \varphi} = \frac{\varphi^2}{2(1 - \cos \varphi)}. \end{aligned}$$

Таким образом, для весовой функции g [формула (10.9)] получаем

$$g(\{\varphi, 0, 0\}) = g(\{v_{11}\varphi, v_{21}\varphi, v_{31}\varphi\}) = \frac{2g_0(1 - \cos \varphi)}{\varphi^2}. \quad (14.26)$$

Вычисление инвариантного интеграла функции $J(R) = J(\varphi)$, имеющей одно и то же значение для всех элементов класса (как, например, характер представления), также довольно просто. Интегрирование в пространстве параметров может быть выполнено тогда сначала по сферической поверхности ($\varphi = \text{const}$), т. е. по всем элементам одного класса, что дает $4\pi\varphi^2$, а затем по φ , т. е. по всем различным классам. Таким образом, для интеграла Гурвица получаем

$$g_0 \int_{\varphi}^{\pi} J(\varphi) 8\pi (1 - \cos \varphi) d\varphi. \quad (14.27)$$

Для другой параметризации часто используют углы Эйлера, как это показано на фиг. 2 (стр. 110). Вращение с углами Эйлера α , β , γ является произведением трех вращений: вокруг оси Z на угол γ , вокруг оси Y на угол β и снова вокруг оси Z на угол α . В последующих главах $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ будет всегда обозначать вращение с углами Эйлера α , β и γ . В этом представлении α и γ в общем случае изменяются от 0 до 2π , а β — от 0 до π . Однако если $\beta = 0$, то α и γ не определяются однозначно; все вращения $\{\alpha, 0, \gamma\}$ являются вращениями на угол $\alpha + \gamma$ вокруг оси Z .

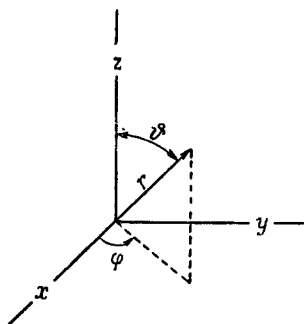
ТРЕХМЕРНАЯ ГРУППА ЧИСТЫХ ВРАЩЕНИЙ

Сферические гармоники

1. Неприводимые представления трехмерной группы вращений, так же как и представления двумерной группы, можно получить с помощью дифференциального уравнения Лапласа

$$\frac{\partial^2 f(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 f(x, y, z)}{\partial z^2} = 0, \quad (15.1)$$

если рассматривать однородные полиномы l -й степени, удовлетворяющие этому уравнению. Ортогональное преобразование R такого полинома приводит к другому полиному l -й степени, который также



Фиг. 7. Полярные координаты r , θ и φ .

является решением уравнения (15.1) и который поэтому может быть выражен в виде линейной комбинации непреобразованных полиномов. Коэффициенты образуют представление, обозначаемое через $\mathfrak{D}^{(l)}(R)$. Поскольку неприводимые представления трехмерной группы вращений мы найдем иным способом, обсудим метод, связанный с уравнением Лапласа, лишь кратко.

Для решения уравнения (15.1) обычно вводят полярные координаты r , θ и φ вместо x , y и z (см. фиг. 7); тогда полиномы l -й степени имеют вид $r^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$. Если подставить это выражение в уравнение (15.1) (записанное в полярных координатах), то r

выпадает и получается дифференциальное уравнение по переменным θ и φ (включающее l). $2l + 1$ линейно независимых решений этого уравнения ¹⁾

$$Y_{l,-l}(\theta, \varphi), Y_{l,-l+1}(\theta, \varphi), \dots, Y_{l,l-1}(\theta, \varphi), Y_{l,l}(\theta, \varphi) \quad (15.2)$$

известны как сферические гармоники ²⁾ l -й степени. Они имеют вид

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) = \Phi_m(\varphi) \Theta_{lm}(\theta), \quad (15.3)$$

где

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi},$$

$$\Theta_{lm}(\theta) = (-1)^m \left[\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} \sin^m \theta \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} P_l(\cos \theta) \quad (m \geq 0), \quad (15.3a)$$

$$\Theta_{l,-m}(\theta) = \left[\frac{2l+1}{2} \frac{(l-m)!}{(l+m)!} \right]^{1/2} \sin^m \theta \frac{d^m}{d(\cos \theta)^m} P_l(\cos \theta).$$

Функции $P_l(\cos \theta)$ являются полиномами Лежандра, определяемыми, например, формулой Родрига

$$P_l(\cos \theta) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d(\cos \theta)^l} (\cos^2 \theta - 1)^l. \quad (15.3b)$$

При $\theta = 0$ все Y_{lm} обращаются в нуль, кроме Y_{l0} . Это так и должно быть, потому что азимут φ не определен при $\theta = 0$; следовательно, в этой точке значение функции

$$Y_{lm}(\theta, \varphi) \sim e^{im\varphi} P_l^m(\cos \theta)$$

не может зависеть от φ ³⁾.

Весьма важна зависимость (15.3) от φ . Если применить оператор \mathbf{P}_R к $r^l Y_{lm}(\theta, \varphi)$, где R означает вращение на угол α вокруг оси Z , радиус и полярный угол θ не меняется, а φ переходит

¹⁾ См., например, D. Hilbert, R. Courant, Methoden der Mathematischen Physik, Berlin, 1924, S. 420, 66, 265 (см. перевод: Д. Гильберт, Р. Курант, Методы математической физики, т. I, М.—Л., 1957).

²⁾ Здесь и в дальнейшем фазы собственных функций выбраны так, чтобы они соответствовали условиям, принятым в книге: E. U. Condon, G. H. Shortley, The Theory of Atomic Spectra, London—New York, 1953 (см. перевод с 1-го издания: Е. Кондон, Г. Шортли, Теория атомных спектров, ИЛ, 1949).

³⁾ Функции $\Theta_{lm} (m \geq 0)$ без квадратной скобки в (15.3a) являются присоединенными полиномами Лежандра и часто обозначаются через $P_l^m(\cos \theta)$.

в $\varphi + \alpha$. Поэтому, если мы обозначим вращение с углами Эйлера α, β, γ через $\{\alpha, \beta, \gamma\}$, то

$$P_{\{\alpha 0 0\}} r^l Y_{lm}(\theta, \varphi) = r^l \frac{e^{im(\varphi+\alpha)}}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{lm}(\theta) = e^{im\alpha} r^l Y_{lm}(\theta, \varphi). \quad (15.4)$$

Строки и столбцы $(2l+1)$ -мерного представления, принадлежащего сферическим гармоникам степени l , нумеруются вторыми индексами соответствующих сферических гармоник от $-l$ до l . Тогда

$$P_{\{\alpha\beta\gamma\}} r^l Y_{lm}(\theta, \varphi) = \sum_{m'=-l}^l \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{m'm} r^l Y_{lm'}(\theta, \varphi). \quad (15.5)$$

Приравнивая коэффициенты, как обычно, получаем

$$\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, 0, 0\})_{m'm} = e^{im\alpha} \delta_{mm'}.$$

Таким образом, в представлении $\mathfrak{D}^{(l)}$ матрицы, соответствующие вращениям вокруг оси Z , диагональны. Для вращения на угол α мы имеем матрицу представления

$$\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, 0, 0\}) = \begin{pmatrix} e^{-il\alpha} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i(l-1)\alpha} & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \cdot & \dots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \dots & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & e^{i(l-1)\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & e^{il\alpha} \end{pmatrix}. \quad (15.6)$$

Покажем теперь, что представления $\mathfrak{D}^{(l)}$ неприводимы, доказав, что всякая матрица, коммутирующая с матрицами $\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$ при всех значениях α, β и γ , с необходимостью является постоянной матрицей. Прежде всего только диагональная матрица коммутирует со всеми матрицами (15.6). Поэтому матрица, коммутирующая с $\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$, непременно является диагональной матрицей. Более того, ниже мы увидим, что в общем случае (т. е. за исключением определенных дискретных значений β) в нулевой строке матрицы $\mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})$ нет нулей. Тогда только диагональная матрица, у которой все диагональные элементы равны (т. е. постоянная матрица), коммутирует с этими матрицами. Чтобы убедиться в этом, предположим, что диагональная матрица с элементами d_k коммутирует с $\mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})$; элементами нулевой строки произведения являются

$$d_0 \mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0k} = \mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0k} d_k, \quad (15.E.1)$$

откуда следует, что $d_0 = d_k$.

В том, что $\mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})$ в общем случае не содержит нулей в нулевой строке, можно убедиться следующим образом. Если R есть вращение на угол β вокруг оси Y , то P_R переводит точку $(r, \theta, 0)$ в точку $(r, \theta + \beta, 0)$. Поэтому функции $r^l Y_{lm}(\theta + \beta, 0)$ являются линейными комбинациями функций $r^l Y_{lm'}(\theta, 0)$, причем коэффициентами будут $\mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{m'm}$. Если мы рассмотрим точку $\theta = 0$, то в общем случае $Y_{lm}(\beta, 0)$ не равно нулю, тогда как $Y_{lm'}(0, 0)$ все равны нулю, кроме $Y_{l,0}(0, 0)$. Если бы теперь обращался в нуль коэффициент этого члена $\mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0m}$, все члены в правой части равенства были бы равны нулю, тогда как левая часть была бы отлична от нуля; поэтому $\mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{0m}$ не может обращаться в нуль.

2. Представления $\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$ являются, таким образом, неприводимыми при всех $l = 0, 1, 2, \dots$. Чтобы определить их характеры, вспомним, что следы матриц, принадлежащих одному классу, равны. Так как в этом случае класс характеризуется углом вращения φ , характер $\chi^{(l)}(\varphi)$ является функцией лишь угла вращения и может быть вычислен, если найти след любой матрицы, соответствующей элементу с вращением на угол φ . Примером такой матрицы служит матрица (15.6), если $\alpha = \varphi$. Таким образом, мы получаем

$$\chi^{(l)}(\varphi) = \sum_{m=-l}^{+l} e^{im\varphi} = 1 + 2 \cos \varphi + 2 \cos 2\varphi + \dots + 2 \cos l\varphi. \quad (15.7)$$

Соотношения ортогональности [если использовать весовую функцию, определенную выражением (14.27)] принимают вид

$$8\pi g(E) \int_0^\pi \chi^{(l')}(\varphi)^* \chi^{(l)}(\varphi) (1 - \cos \varphi) d\varphi = 8\pi^2 g(E) \delta_{l'l}.$$

Это можно показать путем простого интегрирования. Легко видеть также, что, кроме $\mathfrak{D}^{(l)}$, не существует других неприводимых представлений. Действительно, характеры любого такого представления, умноженные на $(1 - \cos \theta)$, должны быть ортогональными всем $\chi^{(l)}$ и, следовательно, $\chi^{(l+1)} - \chi^{(l)}$, т. е. функциям $1, 2 \cos \varphi, 2 \cos 2\varphi, 2 \cos 3\varphi, \dots$ в области от $\varphi = 0$ до $\varphi = \pi$; поэтому, согласно теореме Фурье, они должны обращаться в нуль.

Из сказанного следует, что последовательность $\mathfrak{D}^{(0)}, \mathfrak{D}^{(1)}, \mathfrak{D}^{(2)}, \dots$ включает все неэквивалентные неприводимые представления трехмерной группы чистых вращений. Их число бесконечно, как и должно быть, поскольку группа вращений имеет бесконечное число классов.

Тождественным представлением является $\mathfrak{D}^{(0)}$. Трехмерные ортогональные матрицы, как представление своей собственной группы, эквивалентны представлению $\mathfrak{D}^{(1)}$, как это можно видеть непосредственно либо из их размерности, либо из равенства характеров.

Всякое представление трехмерной группы вращений является комбинацией представлений $\mathfrak{D}^{(0)}$, $\mathfrak{D}^{(1)}$, $\mathfrak{D}^{(2)}$, ... и определяется с точностью до преобразования подобия числом, сколько раз каждое отдельное $\mathfrak{D}^{(0)}$, $\mathfrak{D}^{(1)}$, ... встречается в нем. Но эти числа A_0 , A_1 , A_2 , ... можно определить непосредственно, исходя из матриц, соответствующих подгруппе, являющейся двумерной группой вращений, т. е. вращений вокруг оси Z . Если представление $\exp(im\varphi)$ двумерной группы вращений встречается a_m раз, то (при $m \geq 0$) $a_m = A_m + A_{m+1} + \dots$ и $\mathfrak{D}^{(l)}$ содержится во всем представлении $A_l = a_l - a_{l+1}$ раз. Следует заметить, что к этому заключению можно прийти только в том случае, если заранее известно, что мы имеем дело с представлением; этот способ не может применяться к произвольной системе матриц.

Соотношение (15.6) определяет матрицы $\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, 0, 0\}) = \mathfrak{D}^{(l)}(\{0, 0, \gamma\})$; мы знали бы все матрицы $\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$, если бы знали также матрицы, соответствующие вращениям вокруг оси Y . Обозначим $\mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\})_{\kappa\lambda}$ через $d^{(l)}(\beta)_{\kappa\lambda}$. Вращение $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ является произведением трех вращений $\{\alpha, 0, 0\}$, $\{0, \beta, 0\}$ и $\{0, 0, \gamma\}$. Поэтому соответствующая матрица имеет вид

$$\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, 0, 0\}) \mathfrak{D}^{(l)}(\{0, \beta, 0\}) \mathfrak{D}^{(l)}(\{0, 0, \gamma\}).$$

Следовательно, общая матрица вращения может быть записана с помощью матрицы вращения вокруг оси Y в следующем виде:

$$\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{m'm} = e^{im'\alpha} d^{(l)}(\beta)_{m'm} e^{im\gamma}. \quad (15.8)$$

Гомоморфизм двумерной унитарной группы на группу вращений

3. Выведем неприводимые представления трехмерной группы чистых вращений иным методом, предложенным Г. Вейлем. Мы переходим к этому методу несмотря на то, что наше обсуждение метода, использующего уравнение Лапласа, было весьма кратким, поскольку метод Вейля позволяет вывести так называемые „двухзначные представления“ одновременно с собственными представлениями. В последующем изложении (связанном с теорией спина) эти представления будут играть такую же важную роль, как и собственные представления.

При исследовании симметрической группы можно ограничиться определением размерностей и характеров отдельных представлений; в противоположность этому, для изучения группы вращений представляют интерес не только характеры, но и элементы всех матриц представлений. Как мы увидим ниже, это происходит в силу того, что в физические величины все тождественные частицы входят одинаковым образом. Но различные направления в пространстве физически эквивалентны только в том случае, если эквивалентны все направления, притом не только для механической задачи, но и для интересующей нас физической величины. Например, направление оказывается уже выделенным, если рассматривается определенная компонента дипольного момента.

Начнем с трех простых лемм, которые, собственно говоря, относятся к элементарной теории матриц.

а) Матрица, преобразующая каждый вещественный вектор в вещественный же вектор, сама является вещественной, т. е. все ее элементы вещественны. Если такая матрица применяется к k -му единичному вектору (k -я компонента равна 1, а остальные равны 0), то результирующий вектор образуется из k -й строки матрицы. Следовательно, эта строка должна быть вещественной. Но это рассуждение применимо ко всем k , так что все строки матрицы должны быть вещественными.

б) В гл. 3 (стр. 37) мы видели, что матрица O является комплексно ортогональной, если она не меняет простого скалярного произведения двух произвольных векторов, т. е. если $((a, b)) = ((Oa, Ob))$. Эквивалентное условие может быть сформулировано с помощью одного произвольного вектора. Матрица O является комплексно ортогональной, если длина всякого отдельного произвольного вектора v остается неизменной при преобразовании с помощью O .

Рассмотрим два произвольных вектора a и b ; пусть $v = a + b$. Тогда наше новое условие комплексной ортогональности матрицы O имеет вид

$$((v, v)) = ((Ov, Ov)).$$

Используя тот факт, что $((a, b)) = ((b, a))$, находим

$$\begin{aligned} ((a + b, a + b)) &= ((a, a)) + ((b, b)) + 2((a, b)) = \\ &= ((Oa, Oa)) + ((Ob, Ob)) + 2((Oa, Ob)). \end{aligned}$$

Однако по условию имеем также, что $((a, a)) = ((Oa, Oa))$ и $((b, b)) = ((Ob, Ob))$. Следовательно,

$$((a, b)) = ((Oa, Ob)),$$

откуда мы заключаем, что матрица O комплексно ортогональна. Аналогичным образом можно показать, что матрица U унитарна, если для любого вектора выполняется соотношение $(v, v) = (Uv, Uv)$.

Матрица, оставляющая любой вещественный вектор вещественным же и не меняющая длины этого вектора, соответствует *вращению*. Геометрической основой этой теоремы служит тот простой факт, что в случае, если все длины равны в первоначальной и преобразованной фигурах, углы должны быть также равны; следовательно, преобразование является просто вращением.

в) Определим теперь общий вид двумерной унитарной матрицы

$$u = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}$$

с определителем $+1$, рассматривая элементы произведения $uu^\dagger = 1$. Из $a^*c + b^*d = 0$ следует, что $c = -b^*d/a^*$; подстановка этого в $ad - bc = 1$ дает $(aa^* + bb^*)d/a^* = 1$. Далее, поскольку $aa^* + bb^* = 1$, находим, что $d = a^*$ и $c = -b^*$. Общая двумерная унитарная матрица с определителем $+1$ имеет, таким образом, вид

$$u = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad (15.9)$$

где должно также иметь место равенство $|a|^2 + |b|^2 = 1$.

4. Рассмотрим теперь так называемые „матрицы Паули“

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (15.10)$$

Всякая двумерная матрица h с нулевым следом может рассматриваться как линейная комбинация этих матриц:

$$h = xs_x + ys_y + zs_z = (\mathbf{r}, \mathbf{S}),$$

или в явном виде

$$h = (\mathbf{r}, \mathbf{S}) = \begin{pmatrix} -z & x + iy \\ x - iy & +z \end{pmatrix}. \quad (15.10a)$$

Мы ввели обозначения $2x = h_{12} + h_{21}$, $2iy = h_{12} - h_{21}$ и $z = -h_{11} = +h_{22}$. В частности, если x , y и z вещественны, то матрица h эрмитова.

Если мы преобразуем матрицу h с помощью произвольной унитарной матрицы u с определителем 1 , то снова получим матрицу $\bar{h} = uhu^\dagger$ с нулевым следом; поэтому \bar{h} также можно записать в виде линейной комбинации матриц s_x , s_y , s_z :

$$\bar{h} = uhu^\dagger = u(\mathbf{r}, \mathbf{S})u^\dagger = x's_x + y's_y + z's_z = (\mathbf{r}', \mathbf{S}), \quad (15.11)$$

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -z & x + iy \\ x - iy & z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -z' & x' + iy' \\ x' - iy' & z' \end{pmatrix}. \quad (15.11a)$$

Последнее соотношение определяет x' , y' , z' как линейные функции величин x , y , z . Преобразование R_u , переводящее $r = (xyz)$ в $R_u r = r' = (x' y' z')$, можно найти из (15.11a). Оно имеет вид

$$\left. \begin{aligned} x' &= \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2})x + \\ &\quad + \frac{1}{2}i(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2})y + (a^*b^* + ab)z, \\ y' &= \frac{1}{2}i(a^{*2} - a^2 + b^2 - b^{*2})x + \\ &\quad + \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2})y + i(a^*b^* - ab)z, \\ z' &= -(a^*b + ab^*)x + i(a^*b - ab^*)y + (aa^* - bb^*)z. \end{aligned} \right\} \quad (15.12)$$

Частный вид матрицы R_u в этом выражении не существует¹⁾; важно лишь то, что

$$x'^2 + y'^2 + z'^2 = x^2 + y^2 + z^2 \quad (15.13)$$

в силу равенства определителей матриц \bar{h} и h . Согласно лемме „б“, отсюда следует, что преобразование R_u должно быть комплексно ортогональным. Это можно также видеть непосредственно из соотношений (15.12).

Кроме того, матрица \bar{h} эрмитова, если такова же матрица h . Иными словами, вектор $r' = (x' y' z')$ веществен, если веществен вектор $r = (xyz)$. Это означает, что, согласно лемме „а“, R_u является вещественным, как это непосредственно следует из (5.12). Следовательно, R_u представляет некоторое вращение; всякая двумерная матрица u с определителем 1 соответствует трехмерному вращению R_u ; это соответствие дается соотношениями (15.11) и (15.12).

Определитель матрицы R_u равен +1, так как при непрерывном изменении u к единичной матрице матрица R_u переходит непрерывно в трехмерную единичную матрицу. Если бы ее определитель был равен -1 в начале такого перехода, он должен был бы скачком измениться на +1. Так как это невозможно, то R_u есть чистое вращение для всех u .

Это соответствие таково, что произведение qu двух унитарных матриц q и u отвечает произведению $R_{qu} = R_q \cdot R_u$ соответствующих вращений. Согласно соотношению (15.11), в котором вместо u подставлено q , имеем

$$q(r, S)q^{\dagger} = (R_q r, S); \quad (15.12a)$$

¹⁾ Комплексные числа a и b в (15.12), которые определяют вращение, называются параметрами Кейли — Клейна; для них $|a|^2 + |b|^2 = 1$. Ради краткости группу двумерных унитарных матриц с определителем 1 часто будем называть просто унитарной группой.

после преобразования с u это дает

$$uq(r, S)q^+u^+ = u(R_q r, S)u^+ = (R_u R_q r, S) = (R_u q r, S),$$

если снова воспользоваться соотношением (15.11), заменяя в нем r на $R_q r$, а u на uq . Таким образом, между группой двумерных унитарных матриц с определителем $+1$ („унитарной группой“) и трехмерными вращениями существует гомоморфизм; это соответствие задается соотношениями (15.11) или (15.12). Заметим, однако, что до сих пор мы еще не показали, что гомоморфизм существует между двумерной унитарной группой и полной группой вращений. Это означало бы, что R_u включает все вращения, когда u покрывает всю унитарную группу. Это будет доказано несколько ниже. Следует также заметить, что гомоморфизм не является изоморфизмом, так как одному и тому же вращению соответствует более чем одна унитарная матрица. Подробнее это мы также увидим ниже.

Прежде всего примем, что u есть диагональная матрица $u_1(\alpha)$ (т. е. мы полагаем $b = 0$ и по причинам, которые будут ясны позднее, $a = e^{-\frac{1}{2}i\alpha}$). Тогда $|a|^2 = 1$ и α вещественно,

$$u_1(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{+\frac{1}{2}i\alpha} \end{pmatrix}. \quad (15.14a)$$

Из (15.12) видно, что соответствующее вращение

$$R_{u_1} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (15.14a')$$

является вращением на угол α вокруг оси Z . Предположим далее, что u вещественна,

$$u_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\beta & -\sin \frac{1}{2}\beta \\ \sin \frac{1}{2}\beta & \cos \frac{1}{2}\beta \end{pmatrix}. \quad (15.14b)$$

Согласно (15.12), соответствующее вращение

$$R_{u_2} = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \quad (15.14b')$$

является вращением на угол β вокруг оси Y . Произведение трех унитарных матриц $u_1(\alpha)u_2(\beta)u_1(\gamma)$ соответствует произведению

вращения на угол α вокруг оси Z , вращения на угол β вокруг оси Y и вращения на угол γ вокруг оси Z , т. е. вращению с углами Эйлера α, β, γ . Отсюда следует, что соответствие, определенное соотношением (15.11), не только указывает трехмерное вращение для каждой двумерной унитарной матрицы, но и по крайней мере одну унитарную матрицу для каждого чистого вращения. В частности, матрица

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{1}{2}\beta & -\sin \frac{1}{2}\beta \\ \sin \frac{1}{2}\beta & \cos \frac{1}{2}\beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & 0 \\ 0 & e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix} = \\ & = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix} \quad (15.15) \end{aligned}$$

соответствует вращению $\{\alpha, \beta, \gamma\}$. Таким образом, гомоморфизм является действительно гомоморфизмом унитарной группы на полную трехмерную группу вращений.

Остается еще открытым вопрос о кратности гомоморфизма, т. е. о том, сколько унитарных матриц u соответствуют одному и тому же вращению. Достаточно установить, сколько унитарных матриц u_0 соответствуют тождественному элементу группы вращений, т. е. преобразованию $x' = x, y' = y, z' = z$. Для всех u_0 этого частного вида тождество $u_0 h u_0^\dagger = h$ должно выполняться для всех h ; это может быть только в том случае, если u_0 является постоянной матрицей ($b = 0$ и $a = a^*$ вещественно) $u_0 = (\pm 1)$ (так как $|a|^2 + |b|^2 = 1$). Таким образом, две унитарные матрицы $(+1)$ и (-1) , и только они, соответствуют тождественному элементу группы вращений. Эти два элемента образуют инвариантную подгруппу унитарной группы, а те элементы (и только те), которые входят в один и тот же смежный класс по инвариантной подгруппе, т. е. u и $-u$, соответствуют тому же вращению. То, что u и $-u$ действительно соответствуют одному и тому же вращению, можно непосредственно видеть из (15.11) или (15.12).

С другой стороны, легко видеть, что в тригонометрические функции в (15.15) входят только половинные эйлеровы углы. Углы Эйлера определяются вращением лишь с точностью до целого числа 2π , а половинные углы Эйлера — с точностью до целого числа π . Тогда тригонометрические функции в (15.15) определяются с точностью до знака.

Таким образом, мы получили важный результат: имеется двузначный гомоморфизм группы двумерных унитарных матриц с определителем 1 на трехмерную группу чистых вращений. Существует

взаимнооднозначное соответствие между парами унитарных матриц u и $-u$ и вращениями R_u , притом так, что из $uq = t$ следует также, что $R_u R_q = R_t$; наоборот, из $R_u R_q = R_t$ следует, что $uq = \pm t$. Если унитарная матрица u известна, то соответствующее вращение R_u получается проще всего с помощью (15.12); наоборот, унитарная матрица для вращения $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ находится наиболее прямым путем из (15.15).

Представления унитарной группы

Б. Полученный только что гомоморфизм устанавливает тесную связь между представлениями рассматриваемых двух групп. Из каждого представления $D(R)$ меньшей группы, т. е. группы вращений в рассматриваемом случае, можно получить представление $U(u)$ унитарной группы, как мы уже упоминали в другой связи в гл. 9. При этом матрица $U(u) = D(R_u)$ представляет все элементы (u и $-u$) второй группы, которые при гомоморфизме соответствуют одному и тому же элементу R_u первой группы. Так, в частности, матрица тождественного преобразования $D(E)$ соответствует двум унитарным матрицам 1 и -1 . Наоборот, если все представления унитарной группы известны, то можно выбрать такие, в которых одна и та же матрица представления $U(u) = U(-u)$ соответствует обоим матрицам u и $-u$. Каждое из этих представлений позволяет образовать представление группы вращений, если матрицу $D(R_u) = U(u) = U(-u)$ сопоставить вращению R_u . Таким путем можно получить все представления группы вращений.

В частности, пусть представление $U(u)$ унитарной группы неприводимо. Элемент $u = -1$ коммутирует со всеми элементами группы; следовательно, $U(-1)$ должна коммутировать со всеми $U(u)$. Поэтому, в соответствии с общей теоремой о неприводимых представлениях, она является постоянной матрицей. Так как $(-1)^2 = 1$, квадрат этого элемента группы должен быть представлен единичной матрицей¹⁾ $U(1)$. Тогда

$$U(-1) = +U(1) \quad \text{или} \quad U(-1) = -U(1).$$

Представления, в которых $U(-1) = +U(1)$, называются *четными представлениями*. В четных представлениях $U(-u) = U(-1) \cdot U(u) = U(1) \cdot U(u) = U(u)$, т. е. одна и та же матрица всегда соответствует двум элементам u и $-u$. Поэтому четные предст-

¹⁾ Матрица $U(1)$, соответствующая тождественному элементу группы, является единичной матрицей с размерностью представления. Мы пользуемся символом $U(1)$ вместо более простого символа 1 , чтобы избежать смешивания с тождественным элементом 1 унитарной группы, который всегда является двумерным.

вления дают регулярные представления группы вращений, которые все уже известны из п. 1 настоящей главы.

Представления, в которых $\mathbf{U}(-1) = -\mathbf{U}(1)$, называются нечетными представлениями. В нечетных представлениях $\mathbf{U}(-\mathbf{u}) = = \mathbf{U}(-1)\mathbf{U}(\mathbf{u}) = -\mathbf{U}(\mathbf{u})$; элементам, отличающимся знаком, соответствуют матрицы противоположного знака. Нечетные представления унитарной группы не дают регулярных представлений группы вращений, но дают лишь „двузначные“ или „полуцелые“ представления, в которых не одна матрица, а две матрицы $\mathbf{U}(\mathbf{u})$ и $\mathbf{U}(-\mathbf{u}) = -\mathbf{U}(\mathbf{u})$ соответствуют каждому вращению $R_{\mathbf{u}} = R_{-\mathbf{u}}$. Эти две матрицы отличаются знаками их элементов.

Одно нечетное представление унитарной группы образуется самой группой: $\mathbf{U}(\mathbf{u}) = \mathbf{u}$.

В соответствующем „двузначном“ представлении группы вращений $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ вращение $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ соответствует той матрице $\mathbf{u} = \mathbf{U}(\mathbf{u})$, которая соответствует R в гомоморфизме. Таким образом, согласно (15.15),

$$\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \pm \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta \cdot e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta \cdot e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix}. \quad (15.16)$$

Первые строку или столбец обычно называют $-1/2$ -ми строкой или столбцом; вторые $+1/2$ -ми строкой или столбцом. Выражение (15.16) дает нам первое двузначное представление группы вращений.

Для двузначных представлений не всегда выполняется равенство $\mathfrak{D}(R) \cdot \mathfrak{D}(S) = \mathfrak{D}(RS)$; гарантируется лишь равенство $\mathfrak{D}(R) \cdot \mathfrak{D}(S) = = \pm \mathfrak{D}(RS)$, так как матрицы представления определяются лишь с точностью до знака. Более того, невозможно определить знаки всех матриц таким образом, чтобы был справедлив простой закон перемножения однозначных представлений. Таким образом, двузначное представление не имеет строения вещественного (однозначного) представления, в котором знаки просто оставлены неопределенными. Это легко видеть, например, из (15.16): вращению на угол π вокруг оси Z соответствует матрица $\pm i s_z$; квадрат этой матрицы, $-1 = -s_z^2$, соответствует вращению на угол 2π . Но такое вращение вообще не является собственно вращением, так как все остается без изменения; оно совпадает с тождественным элементом группы. Поэтому единичная матрица также *должна* соответствовать ему; сделать это представление однозначным путем выбора знаков в (15.16) невозможно.

6. Определим теперь неприводимые представления двумерной унитарной группы.

Рассмотрим однородный полином n -й степени относительно переменных ε и ζ . Если мы произведем унитарное преобразование переменных

$$\begin{aligned}\varepsilon' &= a\varepsilon + b\zeta, \\ \zeta' &= -b^*\varepsilon + a^*\zeta,\end{aligned}\tag{15.17}$$

то снова получим однородный полином n -й степени. (Хотя это справедливо для произвольных линейных преобразований, мы ограничимся унитарными преобразованиями.) Поэтому $n+1$ полиномов $\varepsilon^n, \varepsilon^{n-1}\zeta, \varepsilon^{n-2}\zeta^2, \dots, \varepsilon\zeta^{n-1}, \zeta^n$ принадлежит $(n+1)$ -мерному представлению унитарной группы. Чтобы сразу перейти к привычным обозначениям для группы вращений, положим $n=2j$; тогда размерность представления будет равна $2j+1$, причем j может быть либо целым, либо полуцелым¹⁾. Пусть полином имеет вид

$$f_\mu(\varepsilon, \zeta) = \frac{\varepsilon^{j+\mu}\zeta^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}},\tag{15.18}$$

где μ может принимать $2j+1$ значений $-j, -j+1, -j+2, \dots, j-2, j-1, j$; эти значения являются целыми для целых j и полуцелыми — для полуцелых j . Постоянный множитель $[(j+\mu)!(j-\mu)!]^{-1/2}$ придан произведению $\varepsilon^{j+\mu}\zeta^{j-\mu}$, поскольку, как мы покажем, он делает представление $\mathbf{U}^{(j)}$ для $2j+1$ функций (15.18) унитарным.

Построим теперь²⁾ произведение $\mathbf{P}_u f_\mu(\varepsilon, \zeta)$ в соответствии с равенством (11.19):

$$\mathbf{P}_u f_\mu(\varepsilon, \zeta) = f_\mu(a^*\varepsilon - b\zeta, b^*\varepsilon + a\zeta) = \frac{(a^*\varepsilon - b\zeta)^{j+\mu} (b^*\varepsilon + a\zeta)^{j-\mu}}{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}.\tag{15.19}$$

Чтобы выразить правую часть в виде линейной комбинации полиномов f_μ , разложим ее по формуле бинома; она примет вид

$$\begin{aligned}\sum_{x=0}^{j+\mu} \sum_{x'=0}^{j-\mu} (-1)^x \frac{\sqrt{(j+\mu)!(j-\mu)!}}{x!x'!(j+\mu-x)!(j-\mu-x')!} \times \\ \times a^{x'} a^{*j+\mu-x} b^x b^{*j-\mu-x'} \varepsilon^{2j-x-x'} \zeta^{x+x'}.\end{aligned}\tag{15.19a}$$

¹⁾ Это значит, что j отличается от целого числа на $1/2$.

²⁾ Здесь \mathbf{u} является унитарным преобразованием (15.17). В гл. 11 оператор \mathbf{P}_R был определен только для вещественных ортогональных \mathbf{R} . В данном случае, когда \mathbf{u} унитарно, из (11.18a) вместо (11.18б) следует

$$x_i = \sum_j R_{ji}^* x'_j$$

таким образом, R_{ji}^* выступает вместо R_{ji} .

Здесь можно опустить пределы суммирования и суммировать по всем целым числам, так как биномиальные коэффициенты равны нулю, когда x, x' лежат вне области суммирования. Если положить $j - x - x' = \mu'$, то μ' должно пробегать все целочисленные значения для целых j и все полужелые значения для полужелых j . Выражая все функции от ε и ζ в (15.19а) через f_{μ} , согласно (15.18), получаем

$$P_{\mu} f_{\mu}(\varepsilon, \zeta) = \sum_{\mu'} \sum_x (-1)^x \frac{V(j+\mu)! (j-\mu)! (j+\mu')! (j-\mu')!}{x! (j-\mu'-x)! (j+\mu-x)! (x+\mu'-\mu)!} \times \\ \times a^{j-\mu'-x} a^{*j+\mu-x} b^x b^{*x+\mu'-\mu} f_{\mu'}(\varepsilon, \zeta). \quad (15.20)$$

Коэффициент при $f_{\mu'}$ в правой части является элементом $U^{(j)}(u)_{\mu', \mu}$:

$$U^{(j)}(u)_{\mu', \mu} = \sum_x (-1)^x \frac{V(j+\mu)! (j-\mu)! (j+\mu')! (j-\mu')!}{(j-\mu'-x)! (j+\mu-x)! x! (x+\mu'-\mu)!} \times \\ \times a^{j-\mu'-x} a^{*j+\mu-x} b^x b^{*x+\mu'-\mu}. \quad (15.21)$$

Выражение при $\mu' = j$ (для последних строк матриц представления) несколько проще, так как факториальный множитель исключает все члены, кроме членов с $x = 0$:

$$U^{(j)}(u)_{j\mu} = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+\mu)! (j-\mu)!}} a^{*j+\mu} b^{*j-\mu}. \quad (15.21a)$$

Мы получили теперь коэффициенты для представлений $U^{(j)}$ при всех возможных значениях $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$; остается лишь показать, что представления (15.21) унитарны и неприводимы и что двумерная унитарная группа не имеет других представлений, кроме найденных здесь.

7. Докажем прежде всего унитарность представления (15.21). Доказательство опирается на то обстоятельство, что полиномы f_{μ} в (15.18) выбраны так, чтобы

$$\sum_{\mu=-j}^j f_{\mu} f_{\mu}^* = \sum_{\mu} \frac{1}{(j+\mu)! (j-\mu)!} |\varepsilon|^{2(j+\mu)} |\zeta|^{2(j-\mu)} = \frac{(|\varepsilon|^2 + |\zeta|^2)^{2j}}{(2j)!}. \quad (15.22)$$

Аналогичным образом, в силу определения (15.19) функций $P_{\mu} f_{\mu}$,

$$\sum_{\mu} |P_{\mu} f_{\mu}(\varepsilon, \zeta)|^2 = \sum_{\mu} \frac{|a^* \varepsilon - b \zeta|^{2(j+\mu)} \cdot |b^* \varepsilon + a \zeta|^{2(j-\mu)}}{(j+\mu)! (j-\mu)!} = \\ = \frac{1}{(2j)!} (|a^* \varepsilon - b \zeta|^2 + |b^* \varepsilon + a \zeta|^2)^j = \\ = \frac{1}{(2j)!} (|\varepsilon|^2 + |\zeta|^2)^{2j}. \quad (15.22a)$$

Последнее выражение получается либо прямым вычислением, либо следует из свойства унитарности матриц \mathbf{u} . Сравнение с (15.22) показывает, что сумма $\sum_{\mu} f_{\mu} f_{\mu}^*$ инвариантна относительно операций $\mathbf{P}_{\mathbf{u}}$, так что

$$\sum_{\mu} |\mathbf{P}_{\mathbf{u}} f_{\mu}|^2 = \sum_{\mu} |f_{\mu}|^2. \quad (15.23)$$

Это обеспечивает унитарность представления $\mathbf{u}^{(j)}$. Действительно, подстановка выражения для $\mathbf{P}_{\mathbf{u}} f_{\mu}$ через f_{μ} с помощью этого представления дает

$$\sum_{\mu} \sum_{\mu'} \mathbf{u}_{\mu'\mu}^{(j)} f_{\mu'} \sum_{\mu''} \mathbf{u}_{\mu\mu''}^{(j)*} f_{\mu''}^* = \sum_{\mu} f_{\mu} f_{\mu}^*. \quad (15.23a)$$

Если $(2j+1)^2$ функций $f_{\mu'} f_{\mu''}^*$ рассматривать как линейно независимые, из соотношений (15.23) и (15.23a) непосредственно следует

$$\sum_{\mu} \mathbf{u}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu'\mu} \mathbf{u}^{(j)*}(\mathbf{u})_{\mu\mu''} = \delta_{\mu'\mu''}, \quad (15.24)$$

что является условием унитарности $\mathbf{u}^{(j)}$.

Таким образом, унитарность $\mathbf{u}^{(j)}$ установлена, коль скоро показано, что между $f_{\mu'} f_{\mu''}^*$ не существует линейного соотношения, т. е. что из равенства

$$\sum_{\mu', \mu''} c_{\mu', \mu''} \varepsilon^{j+\mu'} \zeta^{j-\mu'} \varepsilon^{*j+\mu''} \zeta^{*j-\mu''} = 0 \quad (15.E.2)$$

с необходимостью следует $c_{\mu', \mu''} = 0$. Равенство (15.E.2) должно иметь место при всех значениях переменных ε и ζ , так как соотношения (15.23) и (15.23a) выполняются при всех комплексных ε и ζ . Предположим, в частности, что ε вещественно; тогда при $\lambda = 2j + \mu' + \mu''$ требование обращения в нуль коэффициента при ε^{λ} дает (после деления на $\zeta^j \zeta^{*3j-\lambda}$)

$$\sum_{\mu'} c_{\mu', \lambda-2j-\mu'} \left(\frac{\zeta^*}{\zeta} \right)^{\mu'} = 0.$$

Но это значит, что $c_{\mu', \lambda-2j-\mu'} = 0$. Линейная независимость произведений $f_{\mu'} f_{\mu''}^*$ также следует отсюда, поскольку (ζ^*/ζ) является переменной, пробегающей свободно всю комплексную единичную окружность. Она может быть записана в виде $\exp i\tau$, где τ может принимать все вещественные значения. Но, чтобы выполнялось соотношение

$$\sum_{\mu'} c_{\mu', \lambda-2j-\mu'} e^{i\mu'\tau} = 0$$

при всех вещественных значениях τ , все c должны обращаться в нуль.

8. Неприводимость системы матриц $\mathbf{U}^{(j)}$ может быть установлена точно таким же методом, каким была установлена неприводимость представлений $\mathfrak{D}^{(l)}$ группы вращений в п. 1 настоящей главы. А именно достаточно показать, что всякая матрица \mathbf{M} , коммутирующая с $\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})$ при всех \mathbf{u} (т. е. при всех значениях a и b , удовлетворяющих условию $|a|^2 + |b|^2 = 1$), должна быть с необходимостью постоянной матрицей. Рассмотрим прежде всего преобразования \mathbf{u} , имеющие вид $\mathbf{u}_1(\alpha)$ из (15.14а); иначе говоря, положим $b = 0$, $a = \exp\left(-\frac{1}{2}i\alpha\right)$. Тогда в сумме (15.21) остается лишь член с $\kappa = 0$, причем он не равен нулю только при $\mu = \mu'$; мы получаем

$$\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u}_1(\alpha))_{\mu'\mu} = \delta_{\mu'\mu} e^{i\mu\alpha}. \quad (15.25)$$

Те матрицы $\mathbf{U}^{(j)}$, которые соответствуют унитарным преобразованиям вида $\mathbf{u}_1(\alpha)$, имеют ту же форму, что и (15.6), с той лишь разницей, что, в отличие от l в (15.6), j может принимать как целые, так и полужелые значения. Но с этими матрицами коммутирует только диагональная матрица, так что \mathbf{M} должна быть диагональной. Заметим далее, что, согласно (15.21а), ни один элемент последней строки матрицы $\mathbf{U}^{(j)}$ не обращается в нуль тождественно. Приравнивая затем элементы j -й строки матриц $\mathbf{U}^{(j)}\mathbf{M}$ и $\mathbf{M}\mathbf{U}^{(j)}$, как это делалось в соотношении (15.Е.1), мы заключаем, что

$$\mathbf{U}_{jk}^{(j)} M_{kk} = M_{jj} \mathbf{U}_{jk}^{(j)}, \quad M_{kk} = M_{jj},$$

и \mathbf{M} является постоянной матрицей. Следовательно, представления $\mathbf{U}^{(j)}$ неприводимы.

9. Можно также показать, что не существует других представлений унитарной группы, кроме $\mathbf{U}^{(j)}$, если использовать тот же метод, которым мы воспользовались в п. 2 настоящей главы применительно к представлениям группы вращений. Определим прежде всего классы „унитарной группы“. Так как всякая унитарная матрица может быть диагонализирована преобразованием с некоторой унитарной матрицей, все наши матрицы после этого преобразования имеют вид $\mathbf{u}_1(\alpha)$, где α принимает значения от 0 до 2π [$\mathbf{u}_1(-\alpha)$ эквивалентна $\mathbf{u}_1(\alpha)$]. Все \mathbf{u} , которые могут быть преобразованы к одному и тому же виду $\mathbf{u}_1(\alpha)$, находятся в одном классе. (Предположение о том, что следует рассматривать только элементы группы — только унитарные матрицы с определителем 1, — не является ограничением, так как всякую унитарную матрицу можно записать в виде

произведения унитарной матрицы с определителем 1 и постоянной матрицы, а преобразование с помощью постоянной матрицы может быть просто опущено.)

Чтобы найти характер $\mathbf{u}^{(j)}$, достаточно вычислить след одного из элементов каждого класса. Возьмем саму $\mathbf{u}_1(\alpha)$ в качестве элемента класса, к которому принадлежит $\mathbf{u}_1(\alpha)$; соответствующая матрица дается выражением (15.25). Ее след равен

$$\xi_j(\alpha) = \sum_{\mu=-j}^j e^{i\mu\alpha}, \quad (15.26)$$

где суммирование проводится по всем целым значениям от нижнего предела до верхнего.

Теперь очевидно, что унитарная группа не может иметь других неприводимых представлений, кроме $\mathbf{u}^{(j)}$ при $j=0, 1/2, 1, 3/2, \dots$. Дело в том, что характер такого представления после умножения на весовую функцию должен быть ортогональным всем $\xi_j(\alpha)$ и, следовательно, функциям $\xi_0(\alpha), \xi_{1/2}(\alpha), \xi_1(\alpha) - \xi_0(\alpha), \xi_{3/2}(\alpha) - \xi_{1/2}(\alpha), \dots$. Но функция, ортогональная $1, 2 \cos \frac{1}{2} \alpha, 2 \cos \alpha, 2 \cos \left(\frac{3}{2} \alpha\right), \dots$ в области от 0 до 2π , обращается в нуль в соответствии с теоремой Фурье.

Представления трехмерной группы чистых вращений

10. Всякое представление $\mathbf{u}^{(j)}$ унитарной группы является одновременно представлением — однозначным или двузначным — группы вращений. Матрица $\mathbf{u}^{(j)}(\mathbf{u})$ соответствует вращению $\{\alpha\beta\gamma\}$, если \mathbf{u} является унитарным преобразованием, соответствующим в гомоморфизме вращению $\{\alpha\beta\gamma\}$. Коэффициенты a и b преобразования \mathbf{u} даются выражением (15.15) в виде

$$a = e^{-\frac{1}{2} i\alpha} \cos \frac{1}{2} \beta \cdot e^{-\frac{1}{2} i\gamma}, \quad b = -e^{-\frac{1}{2} i\alpha} \sin \frac{1}{2} \beta \cdot e^{\frac{1}{2} i\gamma}. \quad (15.15a)$$

Чтобы получить элементы матрицы представления, соответствующие вращению $\{\alpha\beta\gamma\}$, выражения (15.15a) следует подставить в (15.21). Для сохранения преемственности обозначений, использованных в (15.16), преобразуем представление, получающееся после этой подстановки, с помощью диагональной матрицы $M_{\chi\lambda} = \delta_{\chi\lambda} (i)^{-2\chi}$; иначе говоря, умножим μ' -ю строку на $i^{-2\mu'}$, а μ -й столбец — на $i^{2\mu}$, так что коэффициент с индексами $\mu\mu'$ умножается на $(i)^{2(\mu-\mu')} = (-1)^{\mu-\mu'}$.

Обозначим представление, получающееся при этом из $\mathbf{U}^{(j)}$, через $\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})$; его коэффициентами являются

$$\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{\mu'\mu} = \sum_x (-1)^x \frac{V(j+\mu)!(j-\mu)!(j+\mu')!(j-\mu')!}{(j-\mu'-x)!(j+\mu-x)!x!(x+\mu'-\mu)!} \times \\ \times e^{i\mu'\alpha} \cos^{2j+\mu-\mu'-2x} \frac{1}{2} \beta \cdot \sin^{2x+\mu'-\mu} \frac{1}{2} \beta \cdot e^{i\mu\gamma}. \quad (15.27)$$

Представление $\mathfrak{D}^{(j)}$ является $(2j+1)$ -мерным, где j может быть либо целым, либо полуцелым. Строки и столбцы $\mathfrak{D}^{(j)}$ пронумерованы целыми или полуцелыми числами $-j, -j+1, \dots, j-1, j$. Суммирование по x в (15.27) может производиться по всем целым числам, так как бесконечности факториалов в знаменателе ограничивают область промежутком между наибольшим из чисел 0 и $\mu-\mu'$ и наименьшим из чисел $j-\mu'$ и $j+\mu$. Формулы для $\mu'=j$ и $\mu'=-j$ особенно просты; в первом случае остается лишь член с $x=0$, а во втором — только с $x=j+\mu$:

$$\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{j\mu} = \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{i\mu\alpha} \cdot \cos^{j+\mu} \frac{1}{2} \beta \cdot \sin^{j-\mu} \frac{1}{2} \beta \cdot e^{i\mu\gamma}, \quad (15.27a)$$

$$\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{-j\mu} = (-1)^{j+\mu} \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{-i\mu\alpha} \cos^{j-\mu} \frac{1}{2} \beta \cdot \sin^{j+\mu} \frac{1}{2} \beta \cdot e^{i\mu\gamma}. \quad (15.27b)$$

Все коэффициенты представлений для вращений вокруг оси Z также принимают особенно простой вид. Вращение на угол α вокруг оси Z соответствует в гомоморфизме унитарному преобразованию $u_1(\alpha)$; коэффициенты соответствующей матрицы представления даются выражением (15.25). Матрица в $\mathfrak{D}^{(j)}$, соответствующая вращению $\{\alpha, 0, 0\}$, является поэтому диагональной матрицей с диагональными элементами $\exp(-lj\alpha)$, $\exp(-l(j-1)\alpha)$, \dots , $\exp(+l(j-1)\alpha)$, $\exp(lj\alpha)$. Тот же самый результат получается непосредственно из (15.27), если положить $\beta = \gamma = 0$. Матрица $\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha, 0, 0\})$ уже была явно представлена формулой (15.6), которая применима теперь не только при целых l , но и при полуцелых j . Это также относится к (15.8).

Характер $\chi^{(j)}(\varphi)$ матрицы $\mathfrak{D}^{(j)}$ является следом вращения на угол φ :

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \sum_{\mu=-j}^j e^{i\mu\varphi} = \\ = \begin{cases} 1 + 2 \cos \varphi + \dots + 2 \cos j\varphi & (j \text{ целое}), \\ 2 \cos \frac{1}{2} \varphi + 2 \cos \frac{3}{2} \varphi + \dots + 2 \cos j\varphi & (j \text{ полуцелое}). \end{cases} \quad (15.28)$$

Регулярные представления включают только те j , для которых $\mathbf{U}^{(j)}(-1) = \mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u}_1(2\pi))$ есть положительная единичная матрица. Из (15.25) видно, что это имеет место, когда μ целое, т. е. когда j целое. Тогда $\mathfrak{D}^{(j)}$ совпадает с $\mathfrak{D}^{(l)}$, определенным в п. 1 настоящей главы; это также проявляется в равенстве характеров.

При полуцелых j представление $\mathfrak{D}^{(j)}$ двузначно; вращение $\{\alpha\beta\gamma\}$ соответствует матрицам $\pm \mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})$. Это не означает, что знаки элементов матриц $\mathfrak{D}^{(j)}$ можно менять по отдельности; может изменяться лишь знак всей матрицы, или знаки всех элементов одновременно. Вращение R_u соответствует двум унитарным матрицам \mathbf{u} и $-\mathbf{u}$, причем каждой из них соответствует одна матрица $\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})$ и $\mathbf{U}^{(j)}(-\mathbf{u})$; при полуцелых j вторая из них равна $-\mathbf{U}^{(j)}(\mathbf{u})$. Только эти две матрицы, и никакие другие, соответствуют в $\mathfrak{D}^{(j)}$ вращению R_u . В действительности, двузначные представления вообще не являются представлениями. Однако они понадобятся для изложения теории спина Паули.

Теория представлений группы вращений была развита Шуром. Двузначные представления впервые получил Г. Вейль.

11. Дадим теперь несколько первых представлений в явном виде. $\mathfrak{D}^{(0)}(R) = (1)$, а $\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)$ дается выражением (15.16). Следующее представление $\mathfrak{D}^{(1)}(R)$ имеет вид

$$\mathfrak{D}^{(1)}(\{\alpha\beta\gamma\}) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha} \frac{1 + \cos \beta}{2} e^{-i\gamma} & -e^{-i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{-i\alpha} \frac{1 - \cos \beta}{2} e^{i\gamma} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta e^{-i\gamma} & \cos \beta & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta e^{i\gamma} \\ e^{i\alpha} \frac{1 - \cos \beta}{2} e^{-i\gamma} & e^{i\alpha} \frac{\sin \beta}{\sqrt{2}} & e^{i\alpha} \frac{1 + \cos \beta}{2} e^{i\gamma} \end{pmatrix}. \quad (15.29)$$

В этом соотношении тригонометрические функции половинных углов выражены через функции целых углов.

Представления групп вращений, по крайней мере однозначные, привычны для физиков, так как они дают формулы преобразований для векторов, тензоров и т. д. После преобразования к новой системе координат новые компоненты вектора или тензора являются линейными комбинациями компонент в старой системе координат. Если обозначить компоненты в старой системе через T_σ (σ может означать совокупность нескольких индексов), то компоненты T'_σ в новой системе координат равны

$$T'_\rho = \sum_{\sigma} D(R)_{\rho\sigma} T_\sigma, \quad (15.30)$$

где явно указана зависимость коэффициентов преобразования от ориентации R новой системы координат относительно старой. Если мы еще

раз переходим к новой системе координат, например, с помощью вращения S , то

$$T''_{\tau} = \sum_{\rho} D(S)_{\tau\rho} T'_{\rho} = \sum_{\rho\sigma} D(S)_{\tau\rho} D(R)_{\rho\sigma} T_{\sigma} \quad (15.31)$$

Теперь T'' являются компонентами тензора в системе координат, полученной путем вращения SR , так что мы имеем

$$T''_{\tau} = \sum_{\sigma} D(SR)_{\tau\sigma} T_{\sigma} \quad (15.32)$$

Поскольку (15.31) и (15.32) выполняется для произвольных значений компонент тензора T_{σ} ,

$$D(SR)_{\tau\sigma} = \sum_{\rho} D(S)_{\tau\rho} D(R)_{\rho\sigma}, \quad \mathbf{D}(SR) = \mathbf{D}(S) \mathbf{D}(R). \quad (15.33)$$

Таким образом, матрицы преобразования компонент векторов и тензоров образуют представление группы вращений.

Так, в частности, матрицами преобразования векторов являются сами матрицы \mathbf{R} , образующие представление своей группы. Это представление эквивалентно представлению $\mathfrak{D}^{(1)}$. „Матрицей преобразования“ для скаляров является $\mathfrak{D}^{(0)}$.

Однако представления, принадлежащие тензорам, которые встречаются наиболее часто, не являются неприводимыми, так как можно образовать такие линейные комбинации этих тензорных компонент, которые преобразуются лишь между собой. Эти приводимые представления преобразуются к приведенному виду с помощью матриц, образующих эти линейные комбинации из первоначальных компонент.

Рассмотрим, например, тензор второго ранга с компонентами $T_{xx}, T_{xy}, T_{xz}, T_{yx}, T_{yy}, T_{yz}, T_{zx}, T_{zy}, T_{zz}$. Этот тензор можно записать в виде суммы симметричного и антисимметричного тензоров. Шестью компонентами первого являются $T_{xx}, T_{yy}, T_{zz}, T_{xy} + T_{yx}, T_{zx} + T_{xz}, T_{yz} + T_{zy}$; тремя компонентами последнего будут $T_{xy} - T_{yx}, T_{yz} - T_{zy}, T_{zx} - T_{xz}$. Представление для антисимметричного тензора эквивалентно представлению $\mathfrak{D}^{(1)}$ и неприводимо, чего нельзя сказать о представлении для симметричного тензора. Существует одна линейная комбинация компонент $T = T_{xx} + T_{yy} + T_{zz}$, которая остается инвариантной. Остающиеся пять линейных комбинаций $T_{xx} - \frac{1}{3}T, T_{yy} - \frac{1}{3}T, T_{xy} + T_{yx}, T_{yz} + T_{zy}, T_{zx} + T_{xz}$ являются взаимно независимыми компонентами симметричного тензора с нулевым следом. Они принадлежат неприводимому представлению, эквивалентному $\mathfrak{D}^{(2)}$.

Последнее замечание показывает также, почему нецелесообразно нумеровать строки и столбцы неприводимых представлений с помощью обычных символов тензорных компонент, к которым они относятся. Этим предоставляется слишком много свободы. Так, компонента $T_{xx} - \frac{1}{3}T$ симметричного тензора с нулевым следом, приведенного выше, может быть опущена, а вместо нее может быть использована компонента $T_{zz} - \frac{1}{3}T$.

Три строки в $\mathfrak{D}^{(1)}$ не относятся к компонентам x , y и z вектора, так как в том случае, если бы это было так, матрица $\mathfrak{D}^{(1)}$ была бы вещественной.

Представление $\mathfrak{D}^{(1)}$ определяет преобразование вектора T , компонентами которого являются

$$\left. \begin{aligned} T_{-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}} (X + iY) \\ T_0 &= Z \\ T_{+1} &= \frac{-1}{\sqrt{2}} (X - iY) \end{aligned} \right\} \quad (15.34)$$

С помощью матрицы, входящей в (15.34), $\mathfrak{D}^{(1)}$ можно преобразовать в представление, применимое к компонентам x , y и z вектора, т. е. в матрицу для самого вращения \mathbf{R} . Это легко видеть, если взять $\mathfrak{D}^{(1)}(\{\alpha 0 0\})$ и $\mathfrak{D}^{(1)}(\{0 \beta 0\})$ из (15.29) и умножить их на преобразование из (15.34) справа и на сопряженное ему — слева. В первом случае получается матрица (15.14а'), а во втором — (15.14б').

ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ПРЯМОГО ПРОИЗВЕДЕНИЯ

1. Большинство физических задач обладают одновременно не одним, а несколькими видами симметрии. Например, в случае молекулы воды мы имеем дифференциальное уравнение

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{k=1}^6 \frac{\partial^2}{\partial X_k^2} - \frac{\hbar^2}{2m} \sum_{k=1}^{30} \frac{\partial^2}{\partial x_k^2} \right) \psi + V\psi = E\psi. \quad (16.E.1)$$

Здесь M — масса каждого из водородных ядер; X_1, \dots, X_6 — их декартовы координаты; m — масса электрона; x_1, \dots, x_{30} — декартовы координаты электронов. В силу своей большой массы атом кислорода может считаться покоящимся в центре масс; создаваемая им потенциальная энергия включена в V . Задача, представленная уравнением (16.E.1), имеет несколько видов симметрии: во-первых, можно переставить координаты ядер атомов водорода; во-вторых, можно переставить координаты электронов; в-третьих, вся система может быть повернута. Среди вращений следует рассматривать не только группу чистых вращений, но и полную группу вращений и отражений. При этом возникает вопрос о том, как лучше всего рассматривать совместное влияние свойств симметрии.

2. Три упомянутых выше типа операций обладают тем свойством, что операции одного типа *коммутируют* с операциями других. Ясно, что нет никакой разницы, переставить ли сначала координаты частиц, а затем совершить поворот, или наоборот. Поэтому принимается, что элементы каждой группы операторов коммутируют со всеми элементами других групп операторов, рассматриваемых совместно.

Рассмотрим прежде всего случай, когда уравнение (16.E.1) инвариантно относительно лишь двух групп. Пусть элементами этих двух групп будут E', A_2, A_3, \dots, A_n и $E'', B_2, B_3, \dots, B_m$. Тогда уравнение (16.E.1) *инвариантно* не только относительно операторов $P_{E'} = 1, P_{A_2}, \dots, P_{A_n}$ и $P_{E''} = 1, P_{B_2}, \dots, P_{B_m}$, но также *относительно всех их произведений* $P_{A_i} \cdot P_{B_j}$, этих опе-

раторов (в силу упомянутой выше коммутативности: $P_{A_x} \cdot P_{B_\lambda} = P_{B_\lambda} \cdot P_{A_x}$). Произведения $P_{A_x} P_{B_\lambda}$ образуют группу в соответствии с законом операторного умножения, так как произведение двух элементов группы снова является элементом группы:

$$P_{A_x} P_{B_\lambda} \cdot P_{A_x} P_{B_\lambda} = P_{A_x} P_{A_x} P_{B_\lambda} P_{B_\lambda} = P_{A_x A_x} P_{B_\lambda B_\lambda}. \quad (16.1)$$

Тождественным элементом группы является тождественный оператор $P_{E'} \cdot P_{E'} = 1$. Эта группа называется *прямым произведением* группы P_A и группы P_B ; она является полной группой симметрии уравнения (16.E.1).

В общем случае прямое произведение двух групп E', A_2, \dots, A_n и E'', B_2, \dots, B_m имеет в качестве элементов пары $A_x B_\lambda$, составленные из двух „сомножителей“, т. е. из двух групп, из которых оно построено. Закон группового умножения имеет вид

$$A_x B_\lambda \cdot A_x' B_\lambda' = A_x A_x' \cdot B_\lambda B_\lambda' = A_x'' B_\lambda'', \quad (16.1a)$$

где $A_x'' = A_x A_x'$ и $B_\lambda'' = B_\lambda B_\lambda'$. Пишут просто A_x вместо $A_x \cdot E''$ и B_λ вместо $E' \cdot B_\lambda$. Соотношения (16.1) и (16.1a) показывают, что группа произведений $A_x \cdot B_\lambda$ изоморфна группе произведений $P_{A_x} \cdot P_{B_\lambda}$; мы пишем $P_{A_x} P_{B_\lambda} = P_{A_x B_\lambda}$. Можно также исследовать представление группы $A_x \cdot B_\lambda$ вместо представлений группы $P_{A_x} P_{B_\lambda}$.

3. Чтобы найти представление прямого произведения двух групп, рассмотрим прямое произведение матриц $\mathbf{a}(A_x)$ и $\mathbf{b}(B_\lambda)$, которые соответствуют в некоторых представлениях отдельных сомножителей элементам A_x и B_λ соответственно, и сопоставим его элементу $A_x B_\lambda$. Матрицы $\mathbf{a}(A_x) \times \mathbf{b}(B_\lambda) = \mathbf{d}(A_x B_\lambda)$ действительно образуют представление прямого произведения, так как, согласно соотношению (2.7),

$$\mathbf{a}(A_x) \times \mathbf{b}(B_\lambda) \cdot \mathbf{a}(A_x') \times \mathbf{b}(B_\lambda') = \mathbf{a}(A_x) \cdot \mathbf{a}(A_x') \times \mathbf{b}(B_\lambda) \cdot \mathbf{b}(B_\lambda') = \\ = \mathbf{a}(A_x A_x') \times \mathbf{b}(B_\lambda B_\lambda'). \quad (16.2)$$

Иначе говоря, произведение матриц $\mathbf{a}(A_x) \times \mathbf{b}(B_\lambda)$ и $\mathbf{a}(A_x') \times \mathbf{b}(B_\lambda')$, соответствующих элементам $A_x B_\lambda$ и $A_x' B_\lambda'$, является матрицей, которая соответствует элементам $A_x B_\lambda A_x' B_\lambda' = A_x A_x' B_\lambda B_\lambda'$.

Элементами матрицы $\mathbf{d}(A_x B_\lambda) = \mathbf{a}(A_x) \times \mathbf{b}(B_\lambda)$ являются

$$d(A_x B_\lambda)_{\rho'\sigma'; \rho\sigma} = a(A_x)_{\rho'\rho} b(B_\lambda)_{\sigma'\sigma}. \quad (16.2a)$$

Если $\mathbf{a}(A_x)$ и $\mathbf{b}(B_\lambda)$ неприводимы, то тем же свойством обладают и $\mathbf{d}(A_x B_\lambda)$. Если матрица $(M_{\rho'\sigma'; \rho\sigma})$ коммутирует со всеми матрицами $\mathbf{d}(A_x B_\lambda)$, то можно написать

$$\sum_{\rho\sigma} M_{\rho'\sigma'; \rho\sigma} a(A_x)_{\rho\rho''} b(B_\lambda)_{\sigma\sigma''} = \sum_{\rho\sigma} a(A_x)_{\rho'\rho} b(B_\lambda)_{\sigma'\sigma} M_{\rho\sigma; \rho''\sigma''} \quad (16.3)$$

при всех x и λ . В частности, если положить сначала $A = E'$, а затем $B = E''$, то $\mathbf{a}(E')$ или $\mathbf{b}(E'')$ является единичной матрицей, и (16.3) принимает вид

$$\sum_{\sigma} M_{\rho'\sigma'; \rho''\sigma} b(B_{\lambda})_{\sigma\sigma'} = \sum_{\sigma} b(B_{\lambda})_{\sigma'\sigma} M_{\rho'\sigma; \rho''\sigma''} \quad (16.3a)$$

или

$$\sum_{\rho} M_{\rho'\sigma'; \rho\sigma''} a(A_x)_{\rho\rho'} = \sum_{\rho} a(A_x)_{\rho'\rho} M_{\rho\sigma'; \rho''\sigma''}. \quad (16.3b)$$

Субматрицы, входящие в

$$\begin{pmatrix} M_{\rho'1; \rho''1} & M_{\rho'1; \rho''2} & \dots \\ M_{\rho'2; \rho''1} & M_{\rho'2; \rho''2} & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix}, \quad (16.E.2)$$

коммутируют со всеми $\mathbf{b}(B_{\lambda})$ при всех ρ' и ρ'' . Аналогичным образом из (16.3b) следует, что субматрицы в

$$\begin{pmatrix} M_{1\sigma'; 1\sigma''} & M_{1\sigma'; 2\sigma''} & \dots \\ M_{2\sigma'; 1\sigma''} & M_{2\sigma'; 2\sigma''} & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \\ \vdots & \vdots & \dots \end{pmatrix} \quad (16.E.3)$$

коммутируют со всеми $\mathbf{a}(A_x)$ при всех σ' и σ'' . Следовательно, субматрицы как в (16.E.2), так и в (16.E.3), являются постоянными матрицами. Отсюда следуют соотношения

$$M_{\rho'\sigma'; \rho''\sigma''} = \delta_{\sigma'\sigma''} M_{\rho'1; \rho''1}, \quad (16.4a)$$

$$M_{\rho'\sigma'; \rho''\sigma''} = \delta_{\rho'\rho''} M_{1\sigma'; 1\sigma''}, \quad (16.4b)$$

из которых получаем, что

$$M_{\rho'\sigma'; \rho''\sigma''} = \delta_{\sigma'\sigma''} M_{\rho'1; \rho''1} = \delta_{\sigma'\sigma''} \delta_{\rho'\rho''} M_{11; 11}. \quad (16.4)$$

Таким образом, сама матрица \mathbf{M} должна быть постоянной матрицей; поэтому $\mathbf{d}(A_x B_{\lambda})$ неприводимо.

4. У нас есть теперь метод, с помощью которого можно получить неприводимые представления группы, являющейся прямым произведением двух групп, предполагая, что неприводимые представления „сомножителей“ известны. При этом остается еще открытым вопрос о том, все ли неприводимые представления прямого произведения могут быть получены таким способом.

Пусть размерности неприводимых представлений группы A обозначены через g_1, g_2, g_3, \dots , а представлений группы B — через h_1, h_2, h_3, \dots . Если скомбинировать каждое представление

первой группы с каждым представлением второй, получим неприводимые представления прямого произведения с размерностями $g_1 h_1, g_1 h_2, \dots, g_2 h_1, g_2 h_2, \dots$. Если принять, что, в силу обсуждавшейся в гл. 9 (стр. 102) теоремы, сумма квадратов размерностей всех неприводимых представлений группы равна ее порядку, то

$$g_1^2 + g_2^2 + \dots = n \quad \text{и} \quad h_1^2 + h_2^2 + \dots = m,$$

где n и m — соответственно порядки групп A и B . Следовательно, сумма квадратов размерностей представлений прямого произведения, полученных выше, равна порядку nm прямого произведения групп:

$$\begin{aligned} (g_1 h_1)^2 + (g_1 h_2)^2 + \dots + (g_2 h_1)^2 + (g_2 h_2)^2 + \dots = \\ = g_1^2 m + g_2^2 m + \dots = nm. \end{aligned}$$

Отсюда следует, что этот метод действительно дает все неприводимые представления¹⁾.

Эти соображения могут быть также представлены иным способом, применимым и к непрерывным группам. Все $g_1^2 + g_2^2 + g_3^2 + \dots$ коэффициентов первого представления, рассматриваемых как функции²⁾ A , образуют полную систему функций для функций от A . Аналогичным образом, $h_1^2 + h_2^2 + h_3^2 + \dots$ коэффициентов представлений, рассматриваемых как функции от B , образуют полную систему функций от B . Поэтому все произведения этих двух систем функций образуют полную систему функций двух переменных.

5. Собственные значения дифференциального уравнения (16.Е.1) могут быть разделены на качественно различные классы; каждому собственному значению принадлежит какое-либо представление полной группы симметрии уравнения (16.Е.1) [группы операторов, оставляющих (16.Е.1) инвариантным]. Лучше всего характеризовать неприводимое представление этой группы (прямого произведения трех упомянутых групп), пользуясь тремя символами, указывающими на три неприводимых представления, из которых построено рассматриваемое представление. Так, можно сказать, что собственное значение уравнения (16.Е.1) принадлежит симметричному представлению перестановки ядер H , антисимметричному представлению перестановки десяти электронов и семимерному представлению группы вращений. Это утверждение подразумевает, что собственное значение принадлежит представлению прямого произведения этих трех групп, получающемуся из указанных представлений „сомножителей“.

1) Два „прямых произведения“, существенно различных по своей природе, обсуждаются здесь одновременно: прямое произведение двух групп и прямое произведение двух матриц. Элементами прямого произведения групп являются $A_\alpha B_\lambda$. Представление $\mathbf{a} (A_\alpha) \times \mathbf{b} (B_\lambda)$, являющееся прямым произведением $\mathbf{a} (A_\alpha)$ и $\mathbf{b} (B_\lambda)$, соответствует элементу $A_\alpha B_\lambda$.

2) Функция от A означает соответствие числа $J(A_\alpha)$ каждому элементу группы A_α .

Собственные функции такого собственного значения, соответствующие строкам прямого произведения трех представлений, имеют три индекса, указывающих на то, каким строкам представлений трех составляющих групп они принадлежат. Две собственные функции, отличающиеся одним или более из этих трех индексов, ортогональны друг другу; это остается справедливым, даже если к ним применяется произвольный симметричный оператор. Ортогональность функций можно вывести, во-первых, из того обстоятельства, что они принадлежат различным строкам представления прямого произведения, и, во-вторых, — если различаются, скажем, их вторые индексы — из того, что они принадлежат различным строкам представления второй группы.

Если оператор $P_A = P_A P_{E^*}$ первой группы применяется к функции, принадлежащей $\rho\sigma$ -й строке представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$ прямого произведения двух групп, то получаемая при этом функция может быть разложена по функциям, принадлежащим строкам $1\sigma, 2\sigma, 3\sigma, \dots$ представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$. В самом деле, коэффициенты остаются такими же, как если бы второй группы вообще не было:

$$\begin{aligned} P_A P_{E^*} \psi_{\rho\sigma} &= \sum_{\rho'\sigma'} a(A)_{\rho'\rho} b(E'')_{\sigma'\sigma} \psi_{\rho'\sigma'} = \\ &= \sum_{\rho'\sigma'} a(A)_{\rho'\rho} \delta_{\sigma'\sigma} \psi_{\rho'\sigma'} = \sum_{\rho'} a(A)_{\rho'\rho} \psi_{\rho'\sigma}. \end{aligned} \quad (16.5)$$

Функция, принадлежащая к $\rho\sigma$ -й строке представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$, принадлежит тем самым ρ -й строке $\mathbf{a}(A)$ и σ -й строке $\mathbf{b}(B)$; такая функция обладает всеми свойствами этих двух классов функций.

6. При построении „правильных линейных комбинаций“, используемых в теории возмущений, линейные комбинации должны быть образованы внутри каждого семейства функций, причем семейством является набор функций, принадлежащих одной строке $\sigma\rho$ представления $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$ прямого произведения рассматриваемых групп симметрии. Для этого мы начинаем с составления линейных комбинаций f_1, f_2, \dots , которые принадлежат ρ -й строке $\mathbf{a}(A)$; тогда каждая функция $\psi_{\rho\sigma}$, принадлежащая $\rho\sigma$ -й строке $\mathbf{a}(A) \times \mathbf{b}(B)$, должна быть линейной комбинацией функций f_1, f_2, \dots . Предположим, что $\psi_{\rho\sigma}$ включает также функции f'_1, f'_2, \dots , не принадлежащие представлению $\mathbf{a}(A)$ или его ρ -й строке, так что

$$\psi_{\rho\sigma} = c_1 f_1 + c_2 f_2 + \dots + c'_1 f'_1 + c'_2 f'_2 + \dots \quad (16.6)$$

Тогда с необходимостью получаем $c'_1 f'_1 + c'_2 f'_2 + c'_3 f'_3 + \dots = 0$. Действительно, если перенести $c_1 f_1 + c_2 f_2 + \dots$ в левую часть, то вся левая часть принадлежит ρ -й строке $\mathbf{a}(A)$; тогда левая часть ортогональна всем членам правой, так что обе части должны быть равны нулю.

7. Воспользуемся теоремами относительно представлений прямого произведения для нахождения неприводимых представлений трехмерной группы вращений и отражений. Группа вращений и отражений есть группа вещественных ортогональных трехмерных матриц с определителями ± 1 . Она является прямым произведением группы чистых вращений и группы, изоморфной группе отражений, которая состоит из тождественного элемента E и инверсии I :

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}; \quad I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Легко видеть, что всякая вещественная ортогональная матрица может быть получена из чистого вращения путем умножения на E или I ; ее определитель либо уже равен $+1$, и в этом случае мы уже имеем дело с чистым вращением, либо, если определитель равен -1 , она получается из чистого вращения путем умножения на I . Ясно также, что E и I коммутируют со всеми матрицами группы чистых вращений (и вообще со всеми матрицами).

Группа отражений имеет два неприводимых представления: тождественное представление (известное также как положительное) и отрицательное представление, в котором матрица (1) соответствует тождественному элементу, а матрица (-1) — инверсии I . Следовательно, два представления группы вращений и отражений могут быть получены из каждого представления $\mathfrak{D}^{(l)}(R)$ группы чистых вращений, комбинируя $\mathfrak{D}^{(l)}(R)$ с положительным и отрицательным представлениями группы отражений.

Трехмерная группа вращений и отражений имеет два (однозначных) неприводимых представления каждой нечетной размерности $1, 3, 5, \dots$. Они могут быть обозначены символами $l=0_+, 0_-, 1_+, 1_-, 2_+, \dots$. Как представление l_+ , так и представление l_- имеют размерность $2l+1$; в каждом из них одни и те же матрицы соответствуют чистым вращениям, так же как и в $(2l+1)$ -мерных представлениях группы чистых вращений. В представлении l_+ та же самая матрица $\mathfrak{D}^{(l)}(R)$, которая соответствует R , отвечает теперь вращению и отражению IR ; с другой стороны, в представлении l_- матрица $-\mathfrak{D}^{(l)}(R)$ соответствует IR .

ХАРАКТЕРИСТИКИ АТОМНЫХ СПЕКТРОВ

Собственные значения и квантовые числа

1. Воспользуемся теперь результатами из теории групп для объяснения наиболее важных характеристик атомных спектров¹⁾. Настоящая глава служит лишь для ориентировки читателя и не содержит ни подробностей, ни доказательств. Автор надеется, что, опустив математические детали, можно дать обзор закономерностей спектров в том виде, как они вытекали непосредственно из опытов.

Прежде чем переходить к решению уравнения Шредингера, обсудим сначала отделение координат центра масс. В своем исходном виде (4.5а) уравнение Шредингера имеет только непрерывный спектр, соответствующий тому, что атом как целое может иметь, в дополнение к энергии возбуждения, произвольную и меняющуюся непрерывно кинетическую энергию. Если желательно — как это и бывает практически всегда — рассматривать только энергию возбуждения, то можно Принять, что атом находится в покое. Так как массой электрона можно пренебречь по сравнению с массами ядер, координаты ядра обычно отождествляются с координатами центра масс, причем принимается, что волновые функции не зависят от координат ядра. Поэтому координаты ядра не входят вообще в уравнение Шредингера; вместо этого ядро рассматривается как фиксированный центр поля, в котором движутся электроны. Это возможно, разумеется, лишь в системах, где имеется только одно ядро.

Последующее общее рассмотрение, кроме рассмотрения вопроса о расщеплении уровней во внешнем поле, не зависит от пренебрежения „движением ядра“. Чтобы избежать этого ограничения, волновую функцию следует считать зависящей от всех координат, но не зависящей от координат центра масс. Таким образом, волновая функция предполагается постоянной вдоль линий, соединяющих конфигурации частиц, отличающиеся лишь перемещением атома в пространстве как целого²⁾. Это

¹⁾ Прекрасное подробное изложение экспериментальных данных об атомных спектрах можно найти в небольшой монографии Хунда (F. Hund, Line Spectra and Periodic System, Berlin, 1927), а также в монографии Полинга и Гаудсмита (L. C. Pauling, S. Goudsmit, The Structure of Line Spectra, New York, 1930).

²⁾ В этом заключается причина того, что мы не рассматриваем группу переносов в качестве группы симметрии задачи. Все волновые функции будут *инвариантными* относительно переносов и принадлежат, таким образом, тождественному представлению группы переносов.

ограничение рассматривается в качестве дополнительного условия. Требование, чтобы скалярное произведение двух волновых функций оставалось конечным, делает в принципе невозможным использование волновых функций, которые остаются постоянными даже при бесконечных смещениях конфигураций. Однако, поскольку их можно считать постоянными при произвольно больших смещениях (в конечном конфигурационном пространстве), это не ограничивает точности выводимых результатов. Такая точка зрения, безусловно, более точна. Тем не менее обычно считается, что волновые функции не содержат координат ядра в качестве переменных.

Атом водорода обладает наиболее простым спектром, так как он имеет один электрон, который движется в постоянном потенциальном поле, если пренебречь движением ядра. Уравнение Шредингера имеет вид

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - \frac{e^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \right] \psi(x, y, z) = E\psi(x, y, z) \quad (17.1)$$

и может быть решено точно. При этом получается спектр возможных уровней энергии (значения „термов“, как их называют в спектроскопии) и собственные функции (т. е. стационарные состояния) атома водорода. Спектр имеет дискретную часть с уровнями энергии $E = -2\pi R\hbar c/1^2$, $-2\pi R\hbar c/2^2$, $-2\pi R\hbar c/3^2$, ..., где R — постоянная Ридберга,

$$E_N = -\frac{me^4}{2\hbar^2 N^2} = -\frac{2\pi R\hbar c}{N^2} = -\frac{2,18 \cdot 10^{-11}}{N^2} (\text{эрг}) = -\frac{13,60}{N^2} (\text{эВ}). \quad (17.2)$$

Эти энергии отрицательны, что соответствует тому факту, что потенциальная энергия электрона вблизи ядра является большой отрицательной величиной, так как следует затратить работу, чтобы удалить его на бесконечность, где потенциал равен нулю. Расстояние между отдельными уровнями постоянно уменьшается с увеличением главного квантового числа N ; в конце концов энергии при бесконечно больших квантовых числах обращаются в нуль. Физически это соответствует последовательному удалению электрона из области влияния ядра; когда электрон становится полностью свободным, его энергия становится равной нулю.

Непрерывный спектр соединяется с дискретным спектром (17.2) при нулевой энергии и покрывает всю область положительных энергий. В состояниях непрерывного спектра атом водорода ионизован. Положительная энергия равна кинетической энергии электрона после удаления его на бесконечность. В непрерывном спектре нет стационарных состояний в собственном смысле слова; электрон удаляется от ядра на произвольное расстояние по

прошествии достаточного промежутка времени. К тому же стационарное состояние математически соответствует нормированной волновой функции, а собственные функции непрерывного спектра не могут быть нормированы.

Появление серии, описываемой общей формулой (17.2) и сходящейся к некоторому конечному пределу, где начинается непрерывный спектр ионизованных состояний, характерно для всех атомных спектров.

Собственные значения (17.2) вырождены, т. е. каждому собственному значению принадлежит не одна, а несколько линейно независимых собственных функций. Собственное значение с индексом N („главное квантовое число“) является N^2 -кратно вырожденным.

Для удобства читателей приведем нормированные собственные функции. Их удобнее всего записывать в полярных координатах r , θ , φ (см. фиг. 7, стр. 185). Собственные функции равны ¹⁾

$$\psi_{l\mu}^N = R_{Nl}(\eta) Y_{l\mu}(\theta, \varphi),$$

$$R_{Nl}(\eta) = \left\{ \left(\frac{2}{Nr_0} \right)^3 \frac{(N-l-1)!}{2N[(N+l)!]^3} \right\}^{1/2} e^{-1/2\eta} \eta^l L_{N+l}^{2l+1}(\eta), \quad (17.3)$$

$$Y_{l\mu}(\theta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{i\mu\varphi} \cdot \left[\frac{2l+1}{2} \frac{(l-\mu)!}{(l+\mu)!} \right]^{1/2} \frac{(-\sin\theta)^\mu}{2^l l!} \times \\ \times \left(\frac{d}{d \cos\theta} \right)^{l+\mu} (\cos^2\theta - 1)^l.$$

Здесь $\eta = 2r/Nr_0$, где $r_0 = \hbar^2/me^2$ — „радиус первой боровской орбиты“. Заметим, что

$$Y_{l,-\mu}(\theta, \varphi) = (-1)^\mu Y_{l,\mu}^*$$

Мы ввели индексы l („орбитальное квантовое число“) и μ („магнитное квантовое число“), для того чтобы различить N^2 собственных функций, принадлежащих собственному значению E_N . При фиксированном N число l может принимать значения $0, 1, 2, \dots, N-1$, а μ пробегает от $-l$ до $+l$ (независимо от значения N). Таким образом, полное число собственных функций, принадлежащих E_N , равно $\sum_{l=0}^{N-1} (2l+1) = N^2$. Выражение

¹⁾ Радиальная собственная функция $R_{Nl}(\eta)$ нормирована так, что $\int |R_{Nl}|^2 r^2 dr = 1$. Сферические гармоники $Y_{l\mu}$ уже были приведены на стр. 186. Заметим, что Кондон и Шортли (см. цитированную на стр. 186 книгу. — *Ред.*) через R_{Nl} обозначают радиальную функцию, умноженную на $\eta = 2r/Nr_0$.

(15.3а) определяет $Y_{l\mu}$, нормированную сферическую гармонику ¹⁾. Производная $(2l+1)$ -го порядка от $(N+l)$ -го полинома Лагерра L_{N+l} , где

$$L_{\nu}(\eta) = (-1)^{\nu} \left[\eta^{\nu} - \frac{\nu^2}{1!} \eta^{\nu-1} + \frac{\nu^2(\nu-1)^2}{2!} \eta^{\nu-2} - \dots + (-1)^{\nu} \nu! \right],$$

обозначена через $L_{N+l}^{2l+1}(\eta)$.

Выражение (17.3) для волновой функции и ее связь с $Y_{l\mu}$ показывает, что орбитальное, или азимутальное, квантовое число l связано с $(2l+1)$ -мерным представлением группы вращений.

Спектры однократно ионизованного гелия, двукратно ионизованного лития и всех других систем, состоящих только из одного электрона и одного ядра, тесно связаны со спектром атома водорода. При этом необходимо лишь заменить потенциальную энергию в уравнении Шредингера на $-Ze^2/r$ (Z — заряд ядра), термы — на

$$E_N^{(Z)} = -\frac{mZ^2e^4}{2\hbar^2} \cdot \frac{1}{N^2}, \quad (17.2a)$$

а η в (17.3) — на

$$\eta^{(Z)} = \frac{2me^2Z}{\hbar^2N} r = \frac{2Zr}{Nr_0}. \quad (17.3a)$$

Волновая функция ψ должна быть также умножена на $Z^{3/2}$ для сохранения правильной нормировки.

2. Спектр атома с несколькими, например n , электронами не может быть рассчитан точно. Это связано со сравнительно сложным видом потенциальной энергии

$$V = \sum_i^n \frac{-e^2Z}{\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z_i^2}} + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} \frac{e^2}{\sqrt{(x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2 + (z_i - z_j)^2}}. \quad (17.4)$$

Если бы в (17.4) отсутствовал второй член, включающий взаимное отталкивание электронов, электроны двигались бы только под действием постоянного поля ядра, и уравнение Шредингера

$$(H_1 + H_2 + \dots + H_n) \psi(x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n) = E\psi, \quad (17.5)$$

¹⁾ Как уже было отмечено ранее, фазы сферических гармоник были выбраны в соответствии с определением, данным в цитированной выше книге Кондона и Шортли. Определения и обозначения, принятые в настоящей книге, согласуются с определениями и обозначениями книги М. Е. Rose, *Multipole Fields*, New York, 1955 (см. перевод: М. Роуз, *Поля мультиполей*, ИЛ, 1957. — *Ред.*). Эти определения и обозначения приведены в Приложении А.

где

$$H_k = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) - \frac{Ze^2}{\sqrt{x_k^2 + y_k^2 + z_k^2}}, \quad (17.5a)$$

могло бы быть решено точно. Собственные значения были бы суммами, а собственные функции — произведениями соответственно собственных значений и собственных функций оператора (17.5a) и могли бы быть выражены через (17.2a), (17.3), (17.3a):

$$\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) = \psi_{l_1 \mu_1}^{N_1}(x_1, y_1, z_1) \dots \psi_{l_n \mu_n}^{N_n}(x_n, y_n, z_n), \quad (17.6)$$

$$E = E_{N_1} + E_{N_2} + \dots + E_{N_n}. \quad (17.6a)$$

Чтобы показать это, подставим эти выражения в (17.5) и составим $H_k \psi(x_1, \dots, z_n)$; это дает $E_{N_k} \psi(x_1, \dots, z_n)$, так как

$$H_k \psi_{l_k \mu_k}^{N_k}(x_k, y_k, z_k) = E_{N_k} \psi_{l_k \mu_k}^{N_k}(x_k, y_k, z_k),$$

а другие сомножители функции $\psi(x_1, \dots, z_n)$ ведут себя как постоянные относительно H_k .

Естественно, что (17.5) представляет собой лишь очень плохое приближение к действительному уравнению Шредингера. Несмотря на это, мы привыкли, по крайней мере в качестве общей ориентировки, исходить из этого или аналогичного приближения и рассматривать взаимодействие электронов как „возмущение“.

В общем случае большое число собственных функций принадлежит каждому из собственных значений (17.6a), так как квантовые числа l_k, μ_k в (17.6) могут принимать различные значения при одном и том же значении энергии. Кроме того, при заданной системе главных квантовых чисел N_k можно произвольным образом переставить отдельные электроны, не меняя собственного значения энергии. Однако если взаимодействие электронов вводится как возмущение, вырождение частично снимается и уровни расщепляются. Относительно получающихся при этом уровней, большинство из которых по-прежнему вырождено, с чисто теоретической точки зрения (если не считать грубой оценки их положения) ничего не известно, кроме их свойств симметрии. Эти последние проявляются в трансформационных свойствах соответствующих собственных функций относительно перестановки электронов, чистых вращений и инверсий (отражений)¹⁾. Поэтому каждый уровень соответствует трем представлениям: одному представлению симметрической группы, одному — группы чистых вращений и одному — группы отражений. (Последние два обычно объединяются в пред-

¹⁾ Инверсией называется изменение знаков всех координат x_1, \dots, z_n .

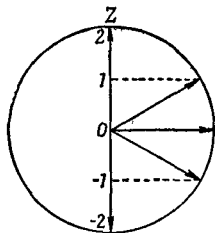
ставление группы вращений и отражений.) Соответствующими квантовыми числами (характеризующими представление) являются ¹⁾:

Мультиплетное число S ,

Квантовое число орбитального момента L ,

Четность ω .

3. Орбитальное квантовое число может принимать для различных уровней значения $L = 0, 1, 2, 3, \dots$. Соответствующие собственные значения принадлежат представлениям $\mathfrak{D}^{(0)}(R)$, $\mathfrak{D}^{(1)}(R)$, ... группы вращений ²⁾. Они известны обычно как уровни S, P, D, F, \dots соответственно. Уровню S принадлежит только одна функция, P -уровню — три, D -уровню — пять и т. д. Те $2L + 1$ собственные функции, которые принадлежат терму с орбитальным



Фиг. 8. Если полный момент количества движения равен 2, то Z -компонента этого момента может принимать значения 2, 1, 0, -1, -2 (в единицах \hbar).

квантовым числом L , различаются магнитным квантовым числом m , которое также принимает целые значения и пробегает от $-L$ до L (см. фиг. 8). Соответствующие собственные функции принадлежат m -й строке неприводимого представления $\mathfrak{D}^{(L)}$.

С физической точки зрения орбитальное квантовое число представляет полный момент количества движения ³⁾. Магнитное квантовое число, со своей стороны, соответствует проекции момента количества движения на ось Z . Задание числа m выделяет одно определенное направление в пространстве; поэтому оно требует задания представления полностью (а не только с точностью до преобразования подобия), чтобы определить функции, принадлежащие одной строке представления. Это можно осуществить, предположив, что вращения вокруг оси Z соответствуют диагональным матрицам [см. (15.6)]. С другой стороны, утверждение, что

¹⁾ Обычно большими латинскими буквами обозначаются квантовые числа атома в целом, а малыми — квантовые числа отдельных электронов. Квантовое число орбитального момента количества движения (или просто „орбитальное“ квантовое число) часто также называется азимутальным квантовым числом.

²⁾ Из выражения (19.96) на стр. 254 будет видно, что это также справедливо и для ψ_{lm}^N при $l = 0, 1, 2, \dots$

³⁾ Мы отвлекаемся здесь от существования спина.

все собственные функции D -уровней принадлежат представлению $\mathfrak{D}^{(2)}(R)$, не требует, чтобы было выделено какое-либо направление в пространстве.

Уровни, принадлежащие тождественному (положительному) представлению группы отражений, называются *четными* (или уровнями с положительной четностью); остальные — *нечетными* (или уровнями с отрицательной четностью). Понятие четности, очень важное для анализа спектров, не имеет аналогии в классической теории, типа аналогии между орбитальным квантовым числом и моментом количества движения. Поведение при отражении, или четность, уровня указывается в виде индекса у символа уровня: S_+ , S_- , P_+ , P_- , Соответствующие представления трехмерной группы вращений и отражений обозначаются через 0_+ , 0_- , 1_+ , 1_- , Наиболее часто встречаются уровни S_+ , P_- , D_+ , F_- , ... и т. д.

Понятие о мультиплетности также чуждо классической теории. Каждому уровню системы из n электронов соответствует некоторое представление симметрической группы n -й степени. Не все представления встречаются в природе; встречаются лишь представления, *связанные* с представлениями, которые обозначены в гл. 13 через $\mathfrak{D}^{(0)}$, $\mathfrak{D}^{(1)}$, ..., $\mathfrak{D}^{(1/2 n)}$ (для четного числа электронов) или $\mathfrak{D}^{(1/2 (n-1))}$ (для нечетного числа электронов). Причину этого трудно объяснить до обсуждения спина электрона и принципа Паули. Для четного числа электронов уровень с $S=0$ принадлежит представлению $\bar{\mathfrak{D}}^{(1/2 n)}$, уровень с $S=1$ — представлению $\bar{\mathfrak{D}}^{(1/2 (n-1))}$; представлением, которому принадлежит $S=\frac{1}{2}n$, является $\bar{\mathfrak{D}}^{(0)}$. Для того чтобы иметь возможность определять значение S по обозначению представления, а также для того, чтобы не смешивать с представлениями группы вращений, будем теперь писать

$$\bar{\mathfrak{D}}^{(k)} = \bar{\mathfrak{A}}^{(S)}, \quad \text{где } S = \frac{1}{2}n - k. \quad (17.7)$$

Величина S может принимать значения $0, 1, 2, \dots$, для атомов с четным числом n электронов; при нечетном числе электронов будем пока пользоваться выражением (17.7), причем возможными значениями S тогда будут $\frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, \frac{n}{2}$. В атоме водорода возможно только одно значение, $S = \frac{1}{2}$, и симметрическая группа первой степени действительно имеет только одно представление. Значение S для уровня определяет его „мультиплетность“ $2S + 1$. Для четного числа электронов мы имеем синглетные, триплетные, квинтетные и т. д. уровни, так как $2S + 1$ может принимать значения $1, 3, 5, \dots$; при нечетном же числе электронов появляются дублетные, квартетные, секстетные и т. д. уровни. Все уровни

одноэлектронной задачи дублетны. Степень мультиплетности, т. е. значение $2S + 1$, пишется слева вверху у символа уровня. Так, $^1S_+$ означает четный синглетный S -уровень; $^2P_-$ — нечетный дублетный P -уровень и т. д. Уровни, принадлежащие антисимметричному представлению $\bar{D}^{(0)} = \bar{A}^{(1/2, n)}$, имеют наивысшую кратность $n + 1$, тогда как для синглетного уровня $S = 0$ и представлением является $\bar{D}^{(1/2, n)} = \bar{A}^{(0)}$.

Энергетические уровни имеют три качественные характеристики S , L и ω , так как они принадлежат различным представлениям $A^{(S)} \times D^{(L, \omega)}$ прямого произведения симметрической группы и группы вращений и отражений. Но так как в одном и том же спектре одному представлению принадлежат несколько уровней, то нужно ввести бегущий индекс N , чтобы различать между ними. Тогда уровень $E_{N, S, L, \omega}^{NSL\omega}$ имеет четыре индекса, N , S , L и ω . Этому уровню принадлежат $(2L + 1)g_s$ собственных функций, где g_s — размерность представления $A^{(S)}$. Чтобы различить между ними, нужно указать, какой строке κ представления $A^{(S)}$ они принадлежат и какое значение m принимает магнитное квантовое число. Собственная функция $\psi_{\kappa, m}^{NSL\omega}$ будет иметь всего шесть индексов, из которых по крайней мере один может быть опущен (а именно κ , который не имеет физического смысла). Свойства уровней с различными S , L и ω хорошо известны из опыта: наиболее важно то, что оптические переходы со сколько-нибудь значительной интенсивностью происходят только между уровнями, *орбитальные квантовые числа которых либо равны, либо отличаются на 1*. Кроме того, уровни должны иметь *различное поведение при отражениях* (различную четность) и *одну и ту же мультиплетность*. Эти комбинационные правила должны следовать из квантовой механики; их вывод на основе квантовой механики является предметом следующей главы.

4. Введение спина и магнитного момента электрона (см. гл. 20) приведет к радикальному видоизменению уравнения Шредингера.

Влияние спина наиболее ясно проявляется в *тонкой структуре спектральных линий*. При энергии, для которой простая теория Шредингера приводит к единственному уровню с орбитальным квантовым числом L и мультиплетным числом S , в действительности наблюдается „мультиплет“, т. е. несколько близко лежащих уровней. В мультиплете имеются $2L + 1$ или $2S + 1$ уровней, в зависимости от того, какое из этих чисел меньше; S -уровни ($L = 0$) — всегда простые; P -уровни ($L = 1$) — простые только в синглетной системе ($S = 0$), но двойные в дублетной системе; для триплетов и всех высших мультиплетов P -уровни триплетны,

и т. д. При достаточно больших значениях орбитального квантового числа, $L \gg S$, мультиплетность равна $2S + 1$.

Чтобы различать между компонентами тонкой структуры мультиплета, им приписывают различные *полные квантовые числа* J , где

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S$$

имеется $2L + 1$ или $2S + 1$ значений J в зависимости от того, какое из чисел L и S меньше. Полное квантовое число играет роль полного момента количества движения, включая спин электрона.

Правила отбора для L , S и ω будут справедливы для всех $2L + 1$ или $2S + 1$ уровней мультиплета¹⁾. Кроме того, имеется правило отбора для J , совпадающее с правилом отбора для L ; в оптических переходах J меняется на ± 1 или 0; переходы между двумя уровнями с $J = 0$ запрещены.

5. Вернемся теперь к изложению, прерванному в конце п. 2 (стр. 216) настоящей главы, где мы установили простое уравнение Шредингера (17.5), решения которого (17.6), (17.6а) могли быть сразу написаны. В общем случае эти собственные значения оказались очень сильно вырожденными. Однако, как уже было указано, при включении взаимного отталкивания электронов, учитываемого полным потенциалом (17.4), и при использовании, например, метода возмущений Релея—Шредингера собственные значения (17.6а) расщепляются на ряд уровней, характеризующихся символами, о которых говорилось выше. Определение числа и рода уровней, возникающих из заданного уровня [см. (17.6а)], будем называть *принципом построения*²⁾.

При выводе принципа построения не следует забывать, что уравнение Шредингера дает также уровни, соответствующие состояниям, исключаемым принципом Паули, и в действительности не существующие. Однако мы будем определять лишь число тех уровней, которые действительно существуют.

Эти уровни, если отвлечься от спина, являются уровнями, соответствующими представлению $\bar{D}^{(k)} = \bar{A}^{(1/2, n-k)}$; при учете же спина оказывается, что все действительно существующие собственные значения имеют антисимметричные собственные функции (см. гл. 22). Принцип построения будет выведен методом Слетера.

¹⁾ В действительности правила для L и S справедливы только тогда, когда спиновые взаимодействия малы.

²⁾ Соответствующий английский термин building-up principle был предложен Герцбергом (G. Herzberg, Atomic Spectra and Atomic Structure, New York, 1937; см. перевод: Г. Герцберг, Атомные спектры и строение атома, М., 1947) в качестве эквивалента немецкого Aufbauprinzip. (В настоящем издании мы будем пользоваться термином „принцип построения“. — Прим. ред.)

Модель векторного сложения

6. Рассмотрим здесь простой, сильно упрощенный случай принципа построения, в котором тождественность электронов не учитывается, а в качестве группы симметрии уравнения Шредингера берется лишь группа вращений¹⁾.

Рассмотрим две системы, каждая из которых состоит в простейшем случае из одного электрона; при этом оба электрона движутся вокруг одного и того же ядра. Пусть энергия первой системы равна E , причем система находится в состоянии с орбитальным квантовым числом l . Пусть далее ψ_{-l} , ψ_{-l+1} , ..., ψ_l являются $2l+1$ собственными функциями этого собственного значения. Тогда

$$\mathbf{P}_R \psi_\mu = \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu', \mu} \psi_{\mu'}, \quad (17.8)$$

где \mathbf{P}_R — оператор вращения координат первой системы. Пусть энергия второй системы равна \bar{E} , орбитальное квантовое число \bar{l} и собственные функции $\bar{\psi}_{-\bar{l}}$, $\bar{\psi}_{-\bar{l}+1}$, ..., $\bar{\psi}_{\bar{l}}$. Тогда

$$\bar{\mathbf{P}}_R \bar{\psi}_\nu = \sum_{\nu'} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu', \nu} \bar{\psi}_{\nu'}. \quad (17.8a)$$

Два оператора $\bar{\mathbf{P}}_R$ и \mathbf{P}_R различны, так как \mathbf{P}_R вращает координаты, от которых зависят функции ψ_μ , а $\bar{\mathbf{P}}_R$ вращает переменные, от которых зависит функция $\bar{\psi}_\nu$, причем эти два набора переменных различны. Следовательно, все \mathbf{P}_R коммутируют со всеми $\bar{\mathbf{P}}_R$, причем $\mathbf{P}_R \bar{\psi}_\nu = \bar{\psi}_\nu$ и $\bar{\mathbf{P}}_R \psi_\mu = \psi_\mu$, так как \mathbf{P}_R не действует на переменные функций $\bar{\psi}_\nu$, а $\bar{\mathbf{P}}_R$ — на переменные функций ψ_μ .

Если мы будем теперь рассматривать эти две системы как одну, то, согласно (17.6) и (17.6a), собственные значения будут суммами, а собственные функции — произведениями соответствующих величин для отдельных систем. Все $(2l+1)(2\bar{l}+1)$ собственных функций

$$\begin{array}{ccccccc} \psi_{-l} \bar{\psi}_{-\bar{l}}, & \psi_{-l} \bar{\psi}_{-\bar{l}+1}, & \dots, & \psi_{-l} \bar{\psi}_{\bar{l}-1}, & \psi_{-l} \bar{\psi}_{\bar{l}}, \\ \cdot & \cdot & \dots, & \cdot & \cdot \\ \psi_l \bar{\psi}_{-\bar{l}}, & \psi_l \bar{\psi}_{-\bar{l}+1}, & \dots, & \psi_l \bar{\psi}_{\bar{l}-1}, & \psi_l \bar{\psi}_{\bar{l}} \end{array} \quad (17.9)$$

принадлежат собственному значению $E + \bar{E}$. Теперь возникает вопрос о том, какие операторы будет содержать группа составной системы, если учесть взаимодействие между системами. Ясно, что

¹⁾ См. E. F u e s, Zs. f. Phys., 51, 817 (1928).

это не все прямое произведение двух групп операторов P_R и $\bar{P}_{\bar{R}}$, элементы которого $P_R \bar{P}_{\bar{R}}$ соответствовали бы одновременным, но различным вращениям координатных систем переменных, от которых зависят функции ψ и $\bar{\psi}$. Группа, которую мы должны рассматривать, это такая группа, в которой две системы осей претерпевают одно и то же вращение; эта группа не содержит всех операторов $P_R \bar{P}_{\bar{R}}$, а лишь операторы $P_R \bar{P}_R$. Группа операторов $P_R \bar{P}_R$ изоморфна простой группе вращений. Из $RQ = T$ следует, что

$$P_R \bar{P}_R \cdot P_Q \bar{P}_Q = P_R P_Q \cdot \bar{P}_R \bar{P}_Q = P_T \bar{P}_T.$$

Если применить операторы $P_R \bar{P}_R$ к функциям (17.9), то получающиеся при этом функции могут быть записаны в виде линейных комбинаций исходных.

Согласно (17.8) и (17.8a),

$$\begin{aligned} P_R \bar{P}_R \psi_{\mu} \bar{\psi}_{\nu} &= P_R \psi_{\mu} \cdot \bar{P}_R \bar{\psi}_{\nu} = \\ &= \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu' \mu} \psi_{\mu'} \sum_{\nu'} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu' \nu} \bar{\psi}_{\nu'} = \sum_{\mu' \nu'} \Delta(R)_{\mu' \nu'; \mu \nu} \psi_{\mu'} \bar{\psi}_{\nu'}. \end{aligned} \quad (17.10)$$

Представление $\Delta(R)$, принадлежащее $(2l+1)(2\bar{l}+1)$ функциям (17.9) составной системы, является прямым произведением¹⁾ двух представлений $\mathfrak{D}^{(l)}$ и $\mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ отдельных систем:

$$\begin{aligned} \Delta(R)_{\mu' \nu'; \mu \nu} &= \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu' \mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu' \nu}, \\ \Delta(R) &= \mathfrak{D}^{(l)}(R) \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R). \end{aligned} \quad (17.11)$$

Найдем теперь неприводимые компоненты представления $\Delta(R)$. Наиболее просто это сделать, разлагая его характер по характерам неприводимых представлений. Характер представления $\Delta(R)$, где R соответствует вращению на угол φ , равен

$$\begin{aligned} \sum_{\mu \nu} \Delta(R)_{\mu \nu; \mu \nu} &= \sum_{\mu} \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu \mu} \sum_{\nu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu \nu} = \\ &= \chi^{(l)}(\varphi) \chi^{(\bar{l})}(\varphi) = \sum_{\mu=-l}^l \exp(i\mu\varphi) \sum_{\nu=-\bar{l}}^{\bar{l}} \exp(i\nu\varphi). \end{aligned} \quad (17.12)$$

¹⁾ Мы имеем здесь дело с некоторым типом прямого произведения, отличным от рассмотренных в предыдущей главе, где мы соединили две операции симметрии (вращение R и отражение I), расширяя тем самым группу. Здесь же мы комбинируем две системы, имеющие одинаковую симметрию; тогда составная система имеет ту же самую симметрию.

Чтобы разложить это выражение на неприводимые характеры, можно представить (17.12) символически в виде таблицы. Образум столбец для каждой экспоненциальной функции $\exp(i\kappa\varphi)$ (где $\kappa = -l - \bar{l}, \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots, l + \bar{l}$) и поставим в этом столбце знак плюс каждый раз, когда $\exp(i\kappa\varphi)$ встречается в (17.12). Наименьшим значением κ , которое нам встретится, будет $-\bar{l} - l$, а наибольшим $l + \bar{l}$; таким образом, всего в таблице будет $2l + 2\bar{l} + 1$ столбцов. Строки таблицы будем нумеровать значениями ν в $\kappa = \nu + \mu$; таким образом, в строке ν мы будем ставить знаки плюс, возникающие от $2l + 1$ членов $\exp[i(\nu - l)\varphi], \exp[i(\nu - l + 1)\varphi], \dots, \exp[i(\nu + l)\varphi]$. Если принять, что $l > \bar{l}$, получим табл. 1.

ТАБЛИЦА 1
Наличие функции $\exp(i\kappa\varphi)$ в характере

$\nu \backslash \kappa$	$-l - \bar{l}$.	.	.	$-l + \bar{l}$...	$l - \bar{l}$.	.	$l + \bar{l}$
$-\bar{l}$	+	+	+	+	+	+	+			
...		+	+	+	+	+	+	+		
0	→		+	+	+	+	+	+	+	
...				+	+	+	+	+	+	+
\bar{l}					+	+	+	+	+	+

Перемещая знаки плюс внутри столбцов, сделаем теперь так, чтобы каждая строка представляла неприводимый характер. [Это, разумеется, не меняет числа появлений $\exp(i\kappa\varphi)$ в суммах.] Если, например, часть таблицы, лежащую слева от пунктирной линии, повернуть на 180° вокруг строки с $\nu = 0$, отмеченной стрелкой (→), то в результате получим табл. 2.

Первый знак плюс в ν -й строке принадлежит теперь столбцу $-\nu - l$; экспонентами, соответствующими ν -й строке табл. 2, будут

$$\exp[-i(\nu + l)\varphi] + \exp[-i(\nu + l - 1)\varphi] + \dots + \exp[i(\nu + l - 1)\varphi] + \exp[i(\nu + l)\varphi] = \chi^{(l+\nu)}(\varphi). \tag{17.13}$$

Вместе они дают в точности характер неприводимого представления с $L = l + \nu$. Тогда вся таблица будет содержать неприводимые представления с

$$L = l - \bar{l}, l - \bar{l} + 1, \dots, l + \bar{l} - 1, l + \bar{l}. \tag{17.E.1}$$

ТАБЛИЦА 2

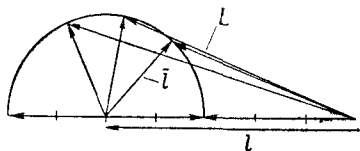
Неприводимые представления, входящие в матрицу $\Delta(R)$

x												
y	$-l-\bar{l}$.	.	.	$-l+\bar{l}$...	$l-\bar{l}$.	.	.	$l+\bar{l}$	
$-\bar{l}$							+	+	+			
...							+	+	+	+		
0	→		+	+			+	+	+	+		
...			+	+	+		+	+	+	+	+	
\bar{l}		+	+	+	+		+	+	+	+	+	+

Так, при $\bar{l} \leq l$ уровень $E + \bar{E}$ расщепляется под влиянием взаимодействия на $2\bar{l} + 1$ уровней с орбитальными квантовыми числами (17.Е.1). Неприводимыми компонентами произведения $\mathfrak{D}^{(l)}(R) \times \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)$ в этом случае будут $\mathfrak{D}^{(L)}$ с L из (17.Е.1), причем каждое из этих значений L встречается один и только один раз. Если $l \leq \bar{l}$, роли l и \bar{l} меняются местами; таким образом, в общем случае L принимает значения

$$L = |l - \bar{l}|, |l - \bar{l}| + 1, \dots, l + \bar{l} - 1, l + \bar{l}. \quad (17.14)$$

Эта „модель векторного сложения“ (см. фиг. 9) имеет весьма обширную применимость и большое значение для всей спектроскопии. Две системы, связь между которыми устанавливается с помощью этой модели, не обязательно должны состоять из отдельных



Фиг. 9. Сложение двух моментов количества движения с $l = 5$ и $\bar{l} = 2$ дает возможные значения $L = 3, 4, 5, 6$ и 7 .

электронов¹⁾, а могут сами быть сложными системами. Модель векторного сложения, как мы увидим, применима также к сочетанию спинового квантового числа с орбитальным квантовым числом (получающееся при этом число L называется „полным квантовым числом“) или к сложению полного квантового числа с ядерным спином и т. д.

¹⁾ Разумеется, в том простом виде, в котором модель приведена здесь, она не может описывать все детали в случае двух электронов, поскольку она не учитывает тождественности частиц.

7. Мы знаем теперь, что представление $\mathfrak{D}^{(l)} \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ эквивалентно представлению

$$\begin{pmatrix} \mathfrak{D}^{(|l-\bar{l}|)} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \mathfrak{D}^{(|l-\bar{l}|+1)} & & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \mathfrak{D}^{(l+\bar{l}-1)} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \mathfrak{D}^{(l+\bar{l})} \end{pmatrix} = M(R), \quad (17.15)$$

которое мы кратко обозначим через $M(R)$. Поэтому должна существовать матрица S , которая преобразует одно представление в другое:

$$\mathfrak{D}^{(l)}(R) \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R) = S^{-1} M(R) S. \quad (17.16)$$

Так как $M(R)$ и $\mathfrak{D}^{(l)} \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ унитарны, можно принять (теорема 1а гл. 9, стр. 96), что S унитарна, т. е. $S^{-1} = S^+$.

Матрица S является квадратной матрицей в широком смысле; такие матрицы обсуждались в гл. 2. Строки и столбцы матриц $\mathfrak{D}^{(l)} \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ нумеруются двумя индексами μ и ν , и так же должны быть пронумерованы столбцы матрицы S . Строки и столбцы матриц $M(R)$ также имеют два индекса, но иного рода: первый индекс L показывает, какое представление $\mathfrak{D}^{(L)}$ встречается в данной строке, а второй индекс m указывает, какая строка этого представления рассматривается. Элементами матрицы $M(R)$ являются

$$M(R)_{L'm'; Lm} = \delta_{LL'} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{m'm}. \quad (17.17)$$

Поэтому строки матрицы S должны быть размечены индексами L, m , где L пробегает от $|l-\bar{l}|$ до $l+\bar{l}$, а m от $-L$ до L . В подробной записи (17.16) принимает вид

$$\mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} = \sum_{m'm} \sum_L S_{Lm'; \mu'\nu'}^* \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{m'm} S_{Lm; \mu\nu}. \quad (17.16a)$$

Значение матрицы S заключается в том, что она определяет такие линейные комбинации произведений $\psi_{\mu}\bar{\psi}_{\nu}$,

$$\Psi_m^L = \sum_{\mu\nu} S_{Lm; \mu\nu} \psi_{\mu}\bar{\psi}_{\nu}, \quad (17.18)$$

которые преобразуются по неприводимым представлениям при применении операторов $\mathbf{P}_R \bar{\mathbf{P}}_R$, оставляющих систему (включая взаимодействие между моментами l и \bar{l}) инвариантной. Функции Ψ_m^L преобразуются следующим образом:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R \bar{\mathbf{P}}_R \Psi_m^L &= \sum S_{Lm; \mu\nu}^* \mathbf{P}_R \psi_\mu \cdot \bar{\mathbf{P}}_R \bar{\psi}_\nu = \\ &= \sum_{\mu\nu} \sum_{\mu'\nu'} S_{Lm; \mu\nu}^* \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} \psi_{\mu'} \bar{\psi}_{\nu'} = \\ &= \sum_{\mu\mu'} \sum_{\nu\nu'} \sum_{L'm'} S_{Lm; \mu\nu}^* \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu'\mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu'\nu} S_{L'm'; \mu'\nu'} \Psi_{m'}^{L'} = \\ &= \sum_{L'm'} [s \cdot \mathfrak{D}^{(l)}(R) \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R) \cdot s^{-1}]_{L'm'; Lm} \Psi_{m'}^{L'} = \\ &= \sum_{L'm'} M(R)_{L'm'; Lm} \Psi_{m'}^{L'} = \sum_{m'} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{m'm} \Psi_{m'}^{L'}. \end{aligned} \quad (17.19)$$

Они являются поэтому собственными функциями первого приближения („правильными линейными комбинациями“ из гл. 5) возмущенной составной системы.

Чтобы определить коэффициенты $S_{Lm; \mu\nu}^*$, применим прежде всего оператор $\mathbf{P}_R \bar{\mathbf{P}}_R$ к функции (17.18), где R представляет собой вращение на угол α вокруг оси Z . Левая часть умножается при этом на $\exp(+i\alpha)$ и то же самое должно иметь место для правой части:

$$\begin{aligned} \sum_{\mu\nu} S_{Lm; \mu\nu}^* e^{i\alpha} \psi_\mu \bar{\psi}_\nu &= \sum_{\mu\nu} S_{Lm; \mu\nu}^* \mathbf{P}_R \psi_\mu \bar{\mathbf{P}}_R \bar{\psi}_\nu = \\ &= \sum_{\mu\nu} S_{Lm; \mu\nu}^* e^{i\mu\alpha} e^{i\nu\alpha} \psi_\mu \bar{\psi}_\nu. \end{aligned} \quad (17.20)$$

Поэтому, в силу линейной независимости произведений $\psi_\mu \bar{\psi}_\nu$, имеем

$$S_{Lm; \mu\nu} = 0 \quad \text{при} \quad m \neq \mu + \nu. \quad (17.20a)$$

Тот же самый результат получается из (17.16a), если учесть явную зависимость коэффициентов представления от α и γ , согласно (15.8), и приравнять члены, одинаково зависящие от α и γ . Записывая¹⁾

$$S_{L, \mu+\nu; \mu\nu} = S_{L\mu\nu}, \quad (17.20b)$$

¹⁾ Элементы матрицы S , а именно $S_{L, \mu+\nu; \mu\nu} = s_{L\mu\nu}^{(\bar{l})}$, дающие те линейные комбинации произведений $\psi^{(l)} \psi^{(\bar{l})}$, которые преобразуются по $\mathfrak{D}^{(L)}$, известны как коэффициенты векторного сложения. Кондон и Шортли (см. цитированную выше книгу этих авторов) обозначают их через $s_{L\mu\nu}^{(\bar{l})} = (\bar{U}_{\mu\nu} | \bar{U} L m)$.

приводим (17.16а) к виду

$$\mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu, \mu'} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu, \nu'} = \sum_{L=|l-\bar{l}|}^{l+\bar{l}} s_{L\mu, \nu'}^* \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\mu'+\nu'; \mu+\nu} s_{L\mu, \nu}. \quad (17.166)$$

Равенство (17.16) не определяет матрицу S однозначно. Поскольку $M(R)$ коммутирует с диагональной матрицей

$$u = \begin{pmatrix} \omega_{|l-\bar{l}|} \mathbf{1} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & \omega_{|l-\bar{l}|+1} \mathbf{1} & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \omega_{l+\bar{l}-1} \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \omega_{l+\bar{l}} \mathbf{1} \end{pmatrix},$$

правая часть (17.16) не меняется, если S заменить на uS . Чтобы uS оставалась унитарной, u также должна быть унитарной; для этого абсолютные значения всех ω должны быть равны 1. Элементы матрицы uS , которая будет входить вместо S , равны

$$(uS)_{Lm; \mu\nu} = \omega_L S_{Lm; \mu\nu}.$$

Соответствующим выбором матриц ω можно всегда сделать так, чтобы элементы

$$S_{L, l-\bar{l}; l, -\bar{l}} = s_{L, l, -\bar{l}} = |s_{L, l, -\bar{l}}| \quad (17.21)$$

стали вещественными и положительными. В дальнейшем предполагается, что такой выбор уже сделан¹⁾. Умножим теперь (17.166) на $\mathfrak{D}^{(L')}(R)_{\mu'+\nu'; \mu+\nu}^*$ и проинтегрируем по всей группе. В силу соотношений ортогональности, справедливых для коэффициентов представлений, в правой части остается только один член; полагая $L' = L$ (и записывая $h = \int dR$), получаем

$$\int \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu, \mu'} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu, \nu'} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\mu'+\nu'; \mu+\nu}^* dR = h \frac{s_{L\mu, \nu'}^* s_{L\mu, \nu}}{2L+1}. \quad (17.22)$$

Чтобы определить $s_{L\mu, \nu}$, нет необходимости вычислять интеграл в (17.22) при всех возможных значениях L , μ' , ν' , μ и ν ; достаточно найти его для одной пары значений μ' , ν' и при всех L ,

¹⁾ Этот выбор приводит к тем же самым коэффициентам векторного сложения, которые даны в цитированных выше книгах Е. Кондона и Г. Шортли, а также М. Роуза (см. обсуждение в Приложении А), и которые использовались Ракá [G. R a s a h, Phys. Rev., 62, 438 (1942); Phys. Rev., 63, 367 (1943)]. Ниже мы увидим, что все получающиеся при этом коэффициенты вещественны, так что нет необходимости делать различие между S и S^* .

μ, ν (и l, \bar{l}). Чтобы по возможности упростить формулы, положим $\mu' = l$ и $\nu' = -\bar{l}$, тогда, согласно (15.27а) и (15.27б), получим

$$\begin{aligned} & \sqrt{\binom{2l}{l-\mu} \binom{2\bar{l}}{\bar{l}-\nu}} \sum_x (-1)^{x+\bar{l}+\nu} \times \\ & \times \frac{\sqrt{(L+\mu+\nu)!(L-\mu-\nu)!(L+l-\bar{l})!(L-l+\bar{l})!}}{(L-l+\bar{l}-x)!(L+\mu+\nu-x)!x!(x+l-\bar{l}-\mu-\nu)!} \times \\ & \times \int \cos^{2L+2\bar{l}+2\mu-2x} \frac{1}{2} \beta \cdot \sin^{2l-2\mu+2x} \frac{1}{2} \beta dR = h \frac{s_{L, l, -\bar{l}}^* s_{L\mu\nu}}{2L+1}. \quad (17.23) \end{aligned}$$

Как и следовало ожидать, α и γ выпали.

Теперь нам понадобятся интегралы вида

$$\int \cos^{2a} \frac{1}{2} \beta \sin^{2b} \frac{1}{2} \beta dR.$$

Они получаются также из соотношений ортогональности коэффициентов представления; эти соотношения имеют вид

$$\frac{h}{2j+1} = \int |\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{j\mu}|^2 dR = \binom{2j}{j-\mu} \int \cos^{2j+2\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j-2\mu} \frac{1}{2} \beta dR.$$

Тогда, если $j+\mu=a$, $j-\mu=b$,

$$\int \cos^{2a} \frac{1}{2} \beta \sin^{2b} \frac{1}{2} \beta dR = g \frac{b!a!}{(a+b+1)!}. \quad (17.24)$$

Если подставить значение этого интеграла в (17.23), то найдем

$$\begin{aligned} & \sum_x (-1)^{x+\bar{l}+\nu} \frac{\sqrt{(2l)!(2\bar{l})!(L+\mu+\nu)!(L-\mu-\nu)!(L+l-\bar{l})!(L-l+\bar{l})!}}{(L+l+\bar{l}+1)! \sqrt{(l-\mu)!(l+\mu)!(\bar{l}-\nu)!(\bar{l}+\nu)!}} \times \\ & \times \frac{(L+\bar{l}+\mu-x)!(l-\mu+x)!(2L+1)}{(L-l+\bar{l}-x)!(L+\mu+\nu-x)!x!(x+l-\bar{l}-\mu-\nu)!} = s_{L, l, -\bar{l}}^* s_{L\mu\nu}. \quad (17.25) \end{aligned}$$

Чтобы определить $s_{L, l, -\bar{l}}$, положим $\mu=l$, $\nu=-\bar{l}$; тогда

$$\begin{aligned} & \frac{2L+1}{(L+l+\bar{l}+1)!} \sum_x \frac{(-1)^x (L+l-\bar{l})!(L-l+\bar{l})!(L+\bar{l}+l-x)!}{(L-l+\bar{l}-x)!(L+l-\bar{l}-x)!x!} = \\ & = |s_{L, l, -\bar{l}}|^2 = (s_{L, l, -\bar{l}})^2, \quad (17.25a) \end{aligned}$$

где при получении последнего выражения было использовано соотношение (17.21). В приложении к настоящей главе будет показано, что

$$\sum_x (-1)^x \binom{L-l+\bar{l}}{x} \frac{(L+\bar{l}+l-x)!}{(L+l-\bar{l}-x)!} = (2\bar{l})! \binom{2l}{L+l-\bar{l}}. \quad (17.26)$$

Пользуясь этой суммой в (17.25а), окончательно получаем

$$s_{L, l, \bar{l}} = \sqrt{\frac{(2L+1)(2l)!(2\bar{l})!}{(L+l+\bar{l}+1)!(l+\bar{l}-L)!}}, \quad (17.27a)$$

откуда, используя (17.25), находим

$$s_{L\mu\nu}^{(l, \bar{l})} = \frac{\sqrt{(L+l-\bar{l})!(L-l+\bar{l})!(l+\bar{l}-L)!(L+\mu+\nu)!(L-\mu-\nu)!}}{\sqrt{(L+l+\bar{l}+1)!(l-\mu)!(l+\mu)!(\bar{l}-\nu)!(\bar{l}+\nu)!}} \times \\ \times \sum_x \frac{(-1)^{x+\bar{l}+\nu} \sqrt{2L+1} (L+\bar{l}+\mu-x)!(l-\mu+x)!}{(L-l+\bar{l}-x)!(L+\mu+\nu-x)! x!(x+l-\bar{l}-\mu-\nu)!}. \quad (17.27)$$

Это соотношение показывает, что условие, принятое в (17.21), действительно делает все $s_{L\mu\nu}$ вещественными: $s_{L\mu\nu}^* = s_{L\mu\nu}$.

Суммирование по x в последнем выражении, так же как и в (15.27), должно производиться по всем целым числам; бесконечные значения факториалов в знаменателе ограничивают x промежутком между наибольшим из двух чисел 0 и $\bar{l}-l+\mu+\nu$ и наименьшим из чисел $L+\mu+\nu$ и $L-l+\bar{l}$, как и в гл. 15. Величины s по-прежнему зависят от двух чисел l и \bar{l} наряду с их индексами L, μ, ν ; l и \bar{l} служат для обозначения того, какое именно произведение $\mathfrak{D}^{(l)} \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ может быть приведено с их помощью. Кроме того, s существенно не меняются¹⁾, если одновременно переставить l и \bar{l} , с одной стороны, и μ и ν , с другой. Это не видно непосредственно из выражения (17.27), так как суммирование по x не может быть выполнено в общем случае в замкнутом виде. В случае же $\mu+\nu=L$ из всей суммы не обращается в нуль лишь один член ($x=L-l+\bar{l}$) и мы получаем

$$s_{L, \mu, L-\mu}^{(l, \bar{l})} = (-1)^{l-\mu} \times \\ \times \sqrt{\frac{(2L+1)!(l+\bar{l}-L)!(l+\mu)!(L+\bar{l}-\mu)!}{(L+l+\bar{l}+1)!(L+l-\bar{l})!(L-l+\bar{l})!(l-\mu)!(\bar{l}-L+\mu)!}}. \quad (17.276)$$

Представим теперь также в явном виде соотношения для s , которые следуют из унитарности матрицы \mathbf{S} [соотношение (17.27) показывает, что \mathbf{S} вещественна]:

$$\sum_{\mu} s_{L, \mu, m-\mu}^{(l, \bar{l})} s_{L', \mu, m-\mu}^{(l', \bar{l}')} = \delta_{LL'}, \\ \sum_L s_{L, \mu, m-\mu}^{(l, \bar{l})} s_{L, \mu', m-\mu'}^{(l', \bar{l}')} = \delta_{\mu\mu'}. \quad (17.28)$$

¹⁾ Числа l и \bar{l} не входят в (17.21) совершенно одинаковым образом; следовательно, $s_{L\mu\nu}^{(l, \bar{l})} = (-1)^{l+\bar{l}-L} s_{L\mu\nu}^{(\bar{l}, l)}$.

8. Теперь мы определили все коэффициенты, которые входят в (17.166) и (17.18):

$$\Psi_m^L = \sum_{\mu} s_{L, \mu}^{(l\bar{l})} \psi_{m-\mu} \bar{\psi}_{m-\mu}. \quad (17.18a)$$

Следует заметить, что в (17.18a) мы имеем случай (разумеется, один из наиболее важных), в котором „правильные линейные комбинации“ первого приближения теории возмущений могут быть найдены лишь из общих соображений; соотношение (17.18a) справедливо в самом общем случае для всех возмущений, не выделяющих направления в пространстве. Это следует из того известного нам с самого начала факта, что все правильные линейные комбинации „принадлежат одной строке некоторого неприводимого представления“ и что только одна линейная комбинация может быть построена из функций (17.9), принадлежащих m -й строке представления $\mathfrak{D}^{(L)}$, если вообще она может быть построена (т. е. если L лежит между $|l - \bar{l}|$ и $l + \bar{l}$). С другой стороны, если другие собственные функции, кроме (17.9), принадлежат тому же собственному значению невозмущенной задачи, то возможно, что существует несколько линейных комбинаций с нужными свойствами, а „правильная“ из них может быть линейной комбинацией только этих функций.

Формула (17.166) имеет много приложений. Прежде всего, она справедлива не только для вещественных представлений (для целых l), но и для двузначных представлений гл. 15. Она включает, в частности, формулы для интенсивности линий мультиплетов и зеemanовских компонент (см. гл. 23).

Ясно, что $\mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu, \mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu, \nu}$ может быть выражено через коэффициенты представлений, так как они образуют полную систему функций. Очевидно также, что в формулу (17.166) могут входить только те коэффициенты, которые встречаются в некотором представлении в $(\mu' + \nu')$ -й строке и в $(\mu + \nu)$ -м столбце, так как только они имеют правильную зависимость от α и γ . Кроме того, (17.166) показывает также, что L может изменяться между $|l - \bar{l}|$ и $l + \bar{l}$. Если оба числа l и \bar{l} — целые или полуцелые, то все L в (17.166) — целые; если, с другой стороны, одно из них целое, а другое — полуцелое, то все L — полуцелые. Суммирование всегда ведется целыми шагами от нижней границы до верхней.

При $\bar{l} = 0$ формула (17.166) тривиальна; для $\bar{l} = 1/2$ и 1 коэффициенты $s_{L, \mu, \nu}^{(l\bar{l})}$ приведены в табл. 3 и 4¹⁾.

¹⁾ Коэффициенты $s_{L, \mu, \nu}^{(l\bar{l})}$ легко запомнить, если иметь в виду, что они обращаются в нуль при $|\mu| > l$ или $|\mu + \nu| > L$, т. е. во всех случаях, когда один из коэффициентов представления в (17.22) теряет смысл.

ТАБЛИЦА 3

Коэффициенты векторного сложения $S_{L\mu\nu}^{(l/2)}$

L	$\nu = -\frac{1}{2}$	$\nu = +\frac{1}{2}$
$l - \frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{l+\mu}}{\sqrt{2l+1}}$	$-\frac{\sqrt{l-\mu}}{\sqrt{2l+1}}$
$l + \frac{1}{2}$	$\frac{\sqrt{l-\mu+1}}{\sqrt{2l+1}}$	$\frac{\sqrt{l+\mu+1}}{\sqrt{2l+1}}$

ТАБЛИЦА 4

Коэффициенты векторного сложения $S_{L\mu\nu}^{(l)}$

L	$\nu = -1$	0	+1
$l - 1$	$\sqrt{\frac{(l+\mu)(l+\mu-1)}{2l(2l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l-\mu)(l+\mu)}{l(2l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l-\mu-1)(l-\mu)}{2l(2l+1)}}$
l	$\sqrt{\frac{(l-\mu+1)(l+\mu)}{2l(l+1)}}$	$\frac{\mu}{\sqrt{l(l+1)}}$	$-\sqrt{\frac{(l+\mu+1)(l-\mu)}{2l(l+1)}}$
$l + 1$	$\sqrt{\frac{(l-\mu+1)(l-\mu+2)}{(2l+1)(2l+2)}}$	$\sqrt{\frac{(l-\mu+1)(l+\mu+1)}{(2l+1)(l+1)}}$	$\sqrt{\frac{(l+\mu+1)(l+\mu+2)}{(2l+1)(2l+2)}}$

ПРИЛОЖЕНИЕ

Соотношение между биномиальными коэффициентами

Чтобы доказать соотношение (17.26), будем исходить из тождества

$$\sum_x \binom{a}{x} \binom{b}{c-x} = \binom{a+b}{c}. \quad (17.29)$$

Здесь в левую часть входит коэффициент при x^x в $(1+x)^a$, умноженный на коэффициент при x^{c-x} в $(1+x)^b$ и просуммированный по всем x , т. е. коэффициент при x^c в $(1+x)^a(1+x)^b = (1+x)^{a+b}$; это и есть выражение в правой части (17.29).

Пусть a — целое положительное число; b может быть положительным или отрицательным. Заметим также, что при $u < 0$

$$\begin{aligned} \binom{u}{v} &= \frac{u(u-1)\dots(u-v+2)(u-v+1)}{1 \cdot 2 \dots (v-1) \cdot v} = \\ &= (-1)^v \frac{(v-u-1)(v-u-2)\dots(1-u)(-u)}{1 \cdot 2 \dots (v-1) \cdot v} = (-1)^v \binom{v-u-1}{v}. \end{aligned} \quad (17.30)$$

Отождествляя $(L+l-\bar{l}-x)$ в (17.26) с v и используя (17.30), получаем

$$\begin{aligned} \sum_x (-1)^x \binom{L-l+\bar{l}}{x} \binom{L+\bar{l}+l-x}{L+l-\bar{l}-x} (2\bar{l})! &= \\ &= \sum_x (-1)^{L+l-\bar{l}} (2\bar{l})! \binom{L-l+\bar{l}}{x} \binom{-2\bar{l}-1}{L+l-\bar{l}-x} = \\ &= (-1)^{L+l-\bar{l}} (2\bar{l})! \binom{L-l-\bar{l}-1}{L+l-\bar{l}} = (2\bar{l})! \binom{2\bar{l}}{L+l-\bar{l}}, \end{aligned}$$

что и доказывает равенство (17.26). При выводе первого из выражений последней строки было использовано тождество (17.29), а при приведении к окончательному виду — равенство (17.30).

ПРАВИЛА ОТБОРА И РАСЩЕПЛЕНИЕ СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

1. В гл. 6 мы вычислили, пользуясь зависящим от времени уравнением Шредингера, возрастание вероятности возбуждения $|a_F(t)|^2 = |b(t)|^2$ стационарного состояния ψ_F , возникающего под действием падающего света, поляризованного по оси X и имеющего интенсивность J (плотность энергии на единичный интервал круговой частоты $d\omega = 2\pi d\nu$). Мы нашли, что, если атом находился вначале полностью в стационарном состоянии ψ_E , эта вероятность возбуждения [соотношения (6.17) и (6.6)] равна

$$|a_F(t)|^2 = B_{EF} J t = \frac{e^2}{\hbar^2} |X_{FE}|^2 J t, \quad (18.1)$$

где

$$X_{FE} = (\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_n) \psi_E) \quad (18.2a)$$

представляет собой матричный элемент „ X -компоненты дипольного момента“ для перехода $E \rightarrow F$. Если свет поляризован в направлениях осей Y или Z , то вместо X_{FE} в (18.1) появляются

$$Y_{FE} = (\psi_F, (y_1 + y_2 + \dots + y_n) \psi_E), \quad (18.2б)$$

$$Z_{FE} = (\psi_F, (z_1 + z_2 + \dots + z_n) \psi_E); \quad (18.2в)$$

если свет поляризован в направлении с направляющими косинусами $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, то соответствующим выражением является

$$\alpha_1 X_{FE} + \alpha_2 Y_{FE} + \alpha_3 Z_{FE}. \quad (18.2)$$

Согласно известному эйнштейновскому выводу¹⁾, с помощью этих матричных элементов можно вычислить вероятность $A_{FE} dt$ того, что атом, находящийся в возбужденном состоянии ψ_F , перейдет в течение малого промежутка времени dt в состояние ψ_E путем

¹⁾ A. Einstein, Verhandl. deut. physik. Ges., 318 (1916); Phys. Zs., 18, 121 (1917).

спонтанного испускания излучения. Эта величина называется „вероятностью переѳода“ и дается выражением

$$A_{FE} = \frac{4e^2\omega^3}{3\hbar c^3} (|X_{FE}|^2 + |Y_{FE}|^2 + |Z_{FE}|^2). \quad (18.1a)$$

Если спектральная линия с частотой $(F - E)/\hbar$ не встречается в спектре, несмотря на то, что существование атома в стационарном состоянии ψ_F доказывается наличием других линий, то следует заключить, что выражения (18.2a), (18.2б), (18.2в) обращаются в нуль. В подавляющем большинстве случаев эти „правила отбора“ следуют из трансформационных свойств соответствующих собственных функций. Три вида правил отбора соответствуют свойствам собственных функций относительно преобразований симметрической группы, трехмерной группы вращений и группы отражений.

Следует, однако, заметить, что из обращения в нуль выражения (18.2) не обязательно следует полное отсутствие линии $F \rightarrow E$. При выводе формулы (18.1) было сделано важное и не всегда полностью оправданное предположение о том, что размеры атома пренебрежимо малы по сравнению с длиной волны света; таким образом, расчеты были проведены так, как если бы возмущающий потенциал был *постоянным в направлении светового луча*, поскольку он меняется значительно только на расстояниях порядка длины волны. Если учесть то, что в действительности потенциал меняется синусоидально в направлении луча, то получается несколько иное выражение для вероятности переѳода (и, следовательно, для времени жизни), причем к B_{EF} в (18.1) добавляется дополнительный член B' .

Вероятность переѳода, вычисляемая с помощью (18.1) или (18.1a), связана с дипольным излучением; поправка же B' обусловлена квадрупольным и более высокими моментами. Поэтому она примерно в 10^7 [т. е. \sim (размеры атома/длина волны)²] раз меньше, чем B_{EF} , обязанная дипольному излучению, и ею можно пренебречь по сравнению с B_{EF} , если только (18.2) не обращается в нуль. Тем не менее переѳоды, для которых (18.2) равно нулю, не являются абсолютно запрещенными, а лишь значительно слабее, чем дипольные переѳоды. Решающей величиной, определяющей интенсивность квадрупольного излучения, является квадрупольный матричный элемент

$$\frac{\omega}{c} (\psi_F, (x_1y_1 + x_2y_2 + \dots + x_ny_n) \psi_E). \quad (18.3)$$

Для получения вероятности квадрупольного переѳода¹⁾ это выражение должно быть подставлено вместо X_{FE} в (18.1).

А. Между уровнями с различной мультиплетностью дипольные переѳоды не происходят. Уровни различной мультиплетности $2S + 1$ принадлежат различным представлениям симметрической группы.

¹⁾ Квадрупольные переѳоды были впервые исчерпывающим образом изучены в рамках квантовой механики А. Рубиновичем. См., например, Zs. f. Phys., 61, 338 (1930); 65, 662 (1930).

Поскольку умножение на $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$ является операцией, симметричной относительно перестановки электронов, скалярное произведение (18.2) в соответствии с выводами гл. 12 должно обращаться в нуль. Квадрупольное излучение и излучение высших мультипольностей также отсутствуют по той же причине.

Из опыта известно, что так называемый *интеркомбинационный запрет* выполняется хорошо только для элементов с *небольшими атомными номерами*. В более тяжелых элементах встречаются сравнительно интенсивные линии, отвечающие переходам между уровнями с различной мультиплетностью. Эти переходы связаны с дополнительными членами в уравнении Шредингера, обусловленными магнитным моментом электрона, и быстро становятся более вероятными с увеличением числа электронов.

Б. Умножение на $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$ не является операцией, симметричной относительно вращений, так что правила отбора для азимутального квантового числа L будут отличны от правил отбора для S . Если орбитальное квантовое число состояния ψ_E есть L , то второй множитель произведения $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$ принадлежит представлению $\mathfrak{D}^{(L)}$; первый множитель является компонентой вектора и принадлежит $\mathfrak{D}^{(1)}$.

Все $(2\bar{L} + 1)(2L + 1)$ произведений каждой пары функций, первая из которых $f_{\bar{x}}^{(\bar{L})}$ принадлежит \bar{x} -й строке $\mathfrak{D}^{(\bar{L})}$, а вторая $\psi_x^{(L)}$ принадлежит x -й строке $\mathfrak{D}^{(L)}$, преобразуются как $\mathfrak{D}^{(\bar{L})} \times \mathfrak{D}^{(L)}$ (см. аналогичное изложение в гл. 17):

$$P_R f_{\bar{x}}^{(\bar{L})} \psi_x^{(L)} = P_R f_{\bar{x}}^{(\bar{L})} \cdot P_R \psi_x^{(L)} = \sum_{\bar{\lambda}\lambda} \mathfrak{D}^{(\bar{L})}(R)_{\bar{\lambda}\bar{x}} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\lambda x} f_{\bar{\lambda}}^{(\bar{L})} \psi_{\lambda}^{(L)}.$$

С помощью матрицы S , приводящей $\mathfrak{D}^{(\bar{L})} \times \mathfrak{D}^{(L)}$, могут быть образованы линейные комбинации $F_{\mu}^{(k)}$ произведений $f_{\bar{x}}^{(\bar{L})} \psi_x^{(L)}$, принадлежащие неприводимым компонентам $\mathfrak{D}^{(k)}$ произведения $\mathfrak{D}^{(\bar{L})} \times \mathfrak{D}^{(L)}$. Наоборот, функции $f_{\bar{x}}^{(\bar{L})} \psi_x^{(L)}$ могут быть выражены через $F_{\mu}^{(k)}$ с помощью обратной матрицы S^{-1} .

В нашем случае $L = 1$ и неприводимыми компонентами произведения $\mathfrak{D}^{(1)} \times \mathfrak{D}^{(L)}$ при $L \neq 0$ будут

$$\mathfrak{D}^{(L-1)}, \mathfrak{D}^{(L)}, \mathfrak{D}^{(L+1)}. \quad (18.E.1)$$

Поэтому произведение $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$ можно записать в виде суммы трех функций, каждая из которых принадлежит к одному из представлений (18.E.1). Если азимутальное квантовое число L' состояния ψ_F не равно $L - 1$, L или $L + 1$, то

все три части скалярного произведения (18.2) обращаются в нуль. При спонтанном дипольном переходе *орбитальное квантовое число* L может меняться *только* на ± 1 или 0.

Если $L=0$, то $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$ принадлежит представлению $\mathfrak{D}^{(1)}$, так как в этом случае $\mathfrak{D}^{(1)} \times \mathfrak{D}^{(0)}$ совпадает с $\mathfrak{D}^{(1)}$. Если $L' \neq 1$, то выражение (18.2) обращается в нуль; S -уровни комбинируются только с P -уровнями ($L'=1$); *переход* $S \rightarrow S$ *также запрещен*.

Эти правила являются точными также лишь для легких элементов. Их неприменимость к большому числу электронов тоже связана с возмущениями, обусловленными магнитным моментом электрона. Линии, появляющиеся в нарушение этих правил, не так интенсивны, как линии, нарушающие интеркомбинационный запрет, так как существуют другие правила отбора, которые выполняются даже при наличии этих возмущений и которые сами по себе исключают многие из переходов, запрещенных правилами отбора для L .

Квадрупольный и высшие моменты не должны обязательно обращаться в нуль при тех же условиях. Действительно, чтобы показать запрещенность дипольных переходов, мы явно воспользовались тем, что $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)$ принадлежит представлению $\mathfrak{D}^{(1)}$. Соответствующее выражение для квадрупольного излучения $(x_1 y_1 + \dots + x_n y_n)$ принадлежит не $\mathfrak{D}^{(1)}$, а $\mathfrak{D}^{(2)}$; следовательно, при квадрупольных переходах орбитальное квантовое число может меняться на ± 2 , ± 1 или 0. Кроме того, квадрупольные переходы $S \rightarrow P$, а также $S \rightarrow S$ запрещены.

В. При дипольном излучении симметрия относительно отражений всегда меняется; четные уровни комбинируются только с нечетными, а нечетные уровни — только с четными. Так, если ψ_E остается неизменной при замене x, y, z на $-x, -y, -z$, то $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$ меняет знак; наоборот, выражение $(x_1 + x_2 + \dots + x_n)\psi_E$ остается неизменным при инверсии, если ψ_E меняет знак; таким образом, это выражение имеет четность, противоположную четности ψ_E . Чтобы скалярное произведение (18.2) не обращалось в нуль, функция ψ_F должна иметь четность, противоположную четности ψ_E .

Правило, что при разрешенных переходах четность меняется, было впервые найдено Лапортом и Ресселом на основании анализа сложных спектров. По самому своему выводу оно относится только к дипольному излучению¹⁾; с другой стороны, оно *остается справедливым и в том случае, когда учитывается магнитный момент электрона*, и применимо как к легким, так и к тяжелым элементам. Оптических переходов, противоречащих ему, почти не известно, несмотря на огромное количество данных. Наиболее изу-

¹⁾ Для квадрупольных переходов справедливы противоположные правила: при этих переходах четность не меняется.

ченный случай относится к спектру „небулия“¹⁾, где начальное состояние метастабильно. Это объясняет исключительно большое время жизни указанного состояния и, следовательно, малую вероятность перехода, особенно при условиях, существующих в разреженной атмосфере звезд.

Упомянутые три правила отбора действительно запрещают большинство переходов: мультиплетность не может измениться, L может измениться только на ± 1 или 0 (переходы $0 \rightarrow 0$ также запрещены), а четность (поведение при отражениях) должна меняться. Так, например, уровень $^3S_+$ может комбинироваться только с уровнем²⁾ $^3P_-$, уровень $^4D_-$ — только с уровнями $^4P_+$, $^4D_+$ и $^4F_+$ ³⁾ и т. д.

Еще раз подчеркнем здесь, что до сих пор магнитный момент электрона вообще не рассматривался и тонкая структура спектральных линий не учитывалась. Сформулированные выше правила справедливы для всех компонент тонкой структуры линии. Первые два правила справедливы только тогда, когда влияние магнитного момента мало (для малых расщеплений в мультиплете, т. е. в легких элементах), тогда как последнее точно выполняется по причинам, которые станут ясны позднее.

2. Следует рассмотреть еще влияние внешнего поля, которое нарушает строгую вращательную симметрию пространства. Как известно, внешние поля вызывают расщепление линий на несколько компонент. Для магнитного поля это расщепление называется эффектом Зеемана и изучено экспериментально с высокой точностью; аналогичное явление в электрическом поле, эффект Штарка, в большинстве случаев не так легко доступен наблюдению. В настоящем предварительном обзоре мы не будем тщательно обсуждать эти явления во всех подробностях; мы рассмотрим лишь упрощенную теорию эффектов Зеемана и Штарка в случае, когда не учитывается магнитный момент электрона.

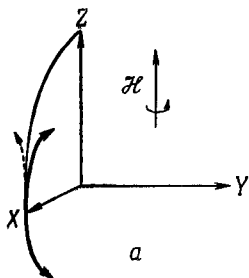
Магнитное поле, направленное вдоль оси Z , уменьшает группу симметрии конфигурационного пространства. Из всех возможных вращений только вращения около оси Z остаются операциями симметрии. Кроме того, два направления Z и $-Z$ остаются по-прежнему равноправными в силу аксиальной природы вектора магнитного поля, обеспечивающей то, что плоскость XY остается плоскостью симметрии. Однако по той же причине плоскость YZ , например, не является плоскостью симметрии, так как одно из

1) Линии, которые вначале приписывали спектру неизвестного элемента „небулия“, оказались принадлежащими спектру двукратно ионизованного кислорода. — Прим. перев.

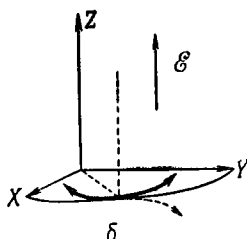
2) Для квадрупольного излучения — только с уровнями $^3D_+$, $^3P_-$, $^3D_-$, $^3F_-$; $^3G_-$.

3) Для квадрупольного излучения — только с уровнями $^4S_+$, $^4P_-$,

направлений вращения предпочтительно. В этом легче всего убедиться, если рассмотреть классическую траекторию электрона в магнитном поле и в поле ядра. При отражении пути в плоскости, проходящей через ядро и перпендикулярной полю, получается возможный с классической точки зрения путь; с другой стороны, отражение в плоскости YZ , параллельной направлению поля, не дает возможного пути (см. фиг. 10, а).



Фиг. 10, а. Магнитное поле направлено по оси Z . Отражение траектории частицы в плоскости XU снова дает возможную траекторию, что не имеет места при отражении в плоскости XZ .



Фиг. 10, б. Электрическое поле направлено по оси Z . Отражение траектории частицы в плоскости, проходящей через ось Z , дает возможную траекторию, а отражение в плоскости XU не дает возможной траектории (см. п. 4).

Из сказанного следует, что симметрия задачи относительно инверсии не нарушается магнитным полем: инверсия ($x'_k = -x_k$, $y'_k = -y_k$, $z'_k = -z_k$) является произведением вращения вокруг оси Z на угол π ($x'_k = -x_k$, $y'_k = -y_k$, $z'_k = +z_k$) и отражения в плоскости XU ($x'_k = +x_k$, $y'_k = +y_k$, $z'_k = -z_k$) и поэтому является элементом группы симметрии системы. Полная симметрия является прямым произведением группы чистых вращений вокруг оси Z , группы отражений (содержащей только инверсию и тождественное преобразование) и симметрической группы. Первые две группы и, следовательно, их прямое произведение — абелевы.

Даже в том случае, если полная вращательная симметрия задачи нарушена внешним полем, собственные значения и собственные функции имеют по-прежнему почти те же значения и свойства, какие они имели в отсутствие магнитного поля, пока последнее малó (а экспериментально достижимые поля всегда малы в этом смысле). В частности, орбитальное квантовое число L остается

вполне определенным, и для L остаются справедливыми обычные правила отбора. Кроме того, каждый уровень естественно принадлежит какому-либо из неприводимых представлений трех групп симметрии, даже если внешнее поле является сколь угодно сильным, так что каждый из них имеет мультиплетность S и точно такое же поведение при отражениях, как и уровни системы в отсутствие поля. Поэтому правила отбора А и В, которые следуют из связи собственных функций с представлениями симметрической группы и группы отражений, остаются в силе. Появляется новое квантовое число — магнитное квантовое число μ ; оно определяет представление $(\exp(+i\mu\varphi))$ двумерной группы чистых вращений, которому принадлежит уровень. Для числа μ получается новое правило отбора, принимающее различный вид для света, поляризованного в различных направлениях, так что некоторые переходы могут быть вызваны только светом, поляризованным в направлении поля (π -компоненты), а другие — только светом, поляризованным перпендикулярно направлению поля (σ -компоненты). Это не удивительно, так как различные направления в пространстве уже не эквивалентны.

Для переходов со светом, поляризованным в направлении оси Z , определяющим является выражение

$$Z_{FE} = (\psi_F, (z_1 + z_2 + \dots + z_n)\psi_E). \quad (18.2в)$$

Поскольку умножение на $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)$ является операцией, симметричной относительно вращений около оси Z , состояния ψ_F и ψ_E должны принадлежать одному и тому же представлению $(\exp(+i\mu\varphi))$ и иметь одинаковые квантовые числа, чтобы матричный элемент (18.2в) не обращался в нуль. Если свет поляризован параллельно направлению поля, то магнитное квантовое число не меняется.

Для переходов, при которых свет поляризован перпендикулярно направлению поля (σ -компоненты), определяющими величинами являются X_{FE} и Y_{FE} . Очевидно, что $(x_1 + x_2 + \dots + x_n) - i(y_1 + y_2 + \dots + y_n)$ принадлежит представлению $(\exp(-i\varphi))$, так что $[(x_1 + x_2 + \dots + x_n) - i(y_1 + y_2 + \dots + y_n)]\psi_E$ принадлежит представлению $(\exp[+i(\mu - 1)\varphi])$. Таким образом, если

$$X_{FE} - iY_{FE} = (\psi_F, [(x_1 + \dots + x_n) - i(y_1 + \dots + y_n)]\psi_E)$$

не обращается в нуль, состояние ψ_F также должно принадлежать представлению $(\exp[+i(\mu - 1)\varphi])$. Аналогичным образом, ψ_F должно принадлежать представлению $(\exp[+i(\mu + 1)\varphi])$, если

$$X_{FE} + iY_{FE} = (\psi_F, [(x_1 + \dots + x_n) + i(y_1 + \dots + y_n)]\psi_E)$$

отлично от нуля. Отсюда следует, что X_{FE} и Y_{FE} могут быть конечными только в том случае, если магнитные квантовые числа состояний ψ_F и ψ_E различаются на 1. Свет, поляризованный перпендикулярно направлению поля, вызывает переходы только с $\Delta\mu = \pm 1$.

Заметим, в частности, что скаляр должен быть умножен на величину комплексно сопряженную с $+1$ -компонентой вектора [как это записано в (15.34)], чтобы превратить его в волновую функцию с $\mu = 1$. Этот вопрос будет более подробно рассмотрен в гл. 21.

Для процессов излучения из этих правил следует, что свет, испускаемый в направлении, перпендикулярном направлению поля, поляризован параллельно направлению поля в переходах с $\Delta\mu = 0$ и перпендикулярно полю — в переходах с $\Delta\mu = \pm 1$ (поперечный эффект). Тем самым направление поляризации определяется однозначно, так как оно должно быть перпендикулярным направлению излучения.

С другой стороны, свет, испущенный в направлении магнитного поля (продольный эффект), должен быть поляризован перпендикулярно направлению поля; таким образом, он может содержать только σ -компоненты, но не π -компоненты. Однако состояние поляризации σ -компонент не определяется указанием: „перпендикулярно направлению поля“. Из опыта известно, что свет состоит частично из света с правой круговой поляризацией и частично — с левой. Обратное, отсюда следует, что некоторые переходы не могут быть возбуждены светом с левой круговой поляризацией, а другие — светом с правой круговой поляризацией¹⁾. Вычисление, вполне аналогичное вычислению, проведенному в гл. 6, показывает, что матричные элементы $(1/\sqrt{2})(X_{FE} + iY_{FE})$ или $(1/\sqrt{2})(X_{FE} - iY_{FE})$ в зависимости от того, направлено ли вращение вектора напряженности электрического поля от оси X к оси Y или наоборот, появляются в (18.1) вместо матричного элемента X_{FE} для

¹⁾ Чтобы определить состояние поляризации излучения, испущенного в некотором переходе, необходимо знать только те состояния, для которых свет не поглощается в обратном процессе. Например, переход, при котором излучается свет, поляризованный параллельно оси Z , будет возбуждаться (хотя и слабее) светом, поляризованным в направлении, составляющем некоторый угол с осью Z . Важно, что такой переход не может быть возбужден светом, поляризованным перпендикулярно Z . Аналогичным переход, при котором излучается свет с правой круговой поляризацией, не может возбуждаться светом с левой круговой поляризацией, и наоборот.

Необходимость определения поляризации излучаемого света обходным путем, через обратный процесс поглощения связана с используемой формой уравнения Шредингера, которая вовсе не описывает излучения.

переходов, возбуждаемых светом, поляризованным по кругу в плоскости XU . Таким образом, когда свет поляризован по кругу вправо, если смотреть вдоль поля (т. е. снизу, если за положительное направление оси Z принято направление вверх), он вызывает переход с увеличением μ на 1; если он поляризован по кругу влево, то вызовет переход с уменьшением μ на 1. Наоборот, если при спонтанном излучении μ уменьшается на 1, то испущенный свет (рассматриваемый в том же самом направлении) поляризован по кругу вправо; если же μ увеличивается на единицу, то свет поляризован по кругу влево.

3. Рассмотрим теперь некоторый уровень $E_{SL\omega}$ системы в отсутствие внешнего поля и исследуем, как он будет вести себя при наложении магнитного поля. Этот уровень расщепляется в магнитном поле, и вместо первоначального уровня возникает несколько новых уровней. Однако мультиплетное число S и характеристика поведения при отражениях ω не изменяются; уровни, возникающие из одного и того же уровня, существующего в отсутствие поля, сохраняют S и ω исходного уровня. Это следует из того факта, что каждая собственная функция меняется непрерывно при увеличении напряженности поля. Так как каждая собственная функция на любой стадии принадлежит некоторому представлению симметрической группы и какому-либо представлению группы отражений и так как эти представления, если они изменяются, могут изменяться только прерывно, то они не могут измениться вовсе.

Остается еще вопрос о значениях магнитного квантового числа μ , которые будут иметь уровни, возникающие из $E_{SL\omega}$. Пусть R — вращение на угол φ вокруг оси Z . Тогда, согласно (15.6), матрица представления $\mathfrak{D}^{(L)}(R)$ имеет вид

$$\begin{pmatrix} e^{-iL\varphi} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & e^{-i(L-1)\varphi} & \dots & 0 & 0 \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \dots & e^{i(L-1)\varphi} & 0 \\ 0 & 0 & \dots & 0 & e^{iL\varphi} \end{pmatrix}, \quad (18.E.2)$$

и если $\psi_{x\mu}$ является собственной функцией уровня $E_{SL\omega}$, принадлежащей x -й строке представления $\bar{A}^{(S)}$ и μ -й строке представления $\mathfrak{D}^{(L)}$,

$$P_R \psi_{x\mu} = \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\varphi, 0, 0\})_{\mu', \mu} \psi_{x\mu'} = e^{i\mu\varphi} \psi_{x\mu}, \quad (18.4)$$

т. е. $\psi_{x\mu}$ принадлежит представлению $(\exp(+i\mu\varphi))$ группы вращений вокруг оси Z . Кроме того, этот результат остается в силе

при увеличении поля; а так как μ принимает значения от $-L$ до $+L$ в представлении $\mathfrak{D}^{(L)}$, уровень с орбитальным квантовым числом L расщепится на $2L+1$ уровней $E_{SLw, \mu}$ с магнитными квантовыми числами $\mu = -L, -L+1, \dots, L-1, L$. В первом приближении собственными функциями, принадлежащими $E_{SLw, \mu}$, являются сами $\psi_{x\mu}$, так как они должны принадлежать одной строке представления $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}$ и представлению $(\exp(+i\mu\varphi))$, и никакая другая линейная комбинация функций $\psi_{x\mu}$ не обладает этим свойством. Снова „правильные линейные комбинации“ первого приближения определяются из теоретико-групповых соображений.

Простота, с которой в этом случае были определены „правильные линейные комбинации“, является следствием того, что в $\mathfrak{D}^{(L)}$ матрицы, соответствующие вращению вокруг оси Z , как представление группы вращений вокруг Z , уже находятся в приведенном виде (18.E.2). Если бы мы наложили магнитное поле, скажем, в направлении оси Y , нам бы пришлось приводить матрицы $\mathbf{d}^{(L)}(\varphi)$, соответствующие вращениям вокруг оси Y , т. е. преобразовывать их к виду (18.E.2). Тогда матрица $(T_{\mu'\mu})$, осуществляющая это приведение, даст также правильные линейные комбинации для этого случая

$$\psi'_{x\mu'} = \sum_{\mu} T_{\mu'\mu} \psi_{x\mu}.$$

Первое приближение для собственных значений $E_{SLw, \mu}$ можно получить, исходя из собственных функций первого приближения, если мы знаем изменение оператора Гамильтона нашей системы, вызванное наложением магнитного поля \mathcal{H}_z . В классической теории при рассмотрении магнитного поля к функции Гамильтона без поля добавляется член

$$\frac{e}{c}(\mathbf{A}, \mathbf{v}) = \frac{e}{mc}(A_x p_x + A_y p_y + A_z p_z)$$

(высшими степенями напряженности поля пренебрегается). Здесь \mathbf{A} — векторный потенциал, ротор которого дает напряженность поля. В квантовой механике мы подставляем $-i\hbar\partial/\partial x_i$ вместо p_{x_i} , получая таким образом в том же приближении дополнительное взаимодействие, связанное с магнитным полем,

$$\mathbf{V} = \frac{-ie\hbar}{mc} \left(A_x \frac{\partial}{\partial x} + A_y \frac{\partial}{\partial y} + A_z \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad (18.5)$$

или сумму нескольких подобных членов для всех электронов¹⁾.

¹⁾ В более точном приближении к (18.5) следует добавить дополнительный член $(A_x^2 + A_y^2 + A_z^2) \frac{e^2}{2mc^2}$; этот член ответствен, в частности, за диамагнетизм.

Для постоянного магнитного поля с напряженностью \mathcal{H}_z вдоль оси Z

$$A_x = -\frac{1}{2} \mathcal{H}_z y, \quad A_y = \frac{1}{2} \mathcal{H}_z x, \quad A_z = 0.$$

Первое приближение для добавочной магнитной энергии может быть тогда вычислено по формуле (5.22):

$$E_{SLw, \mu} - E_{SLw} = (\psi_{x\mu}, \mathbf{V}\psi_{x\mu}) = \frac{e\mathcal{H}_z}{2mc} (\psi_{x\mu}, \mathbf{L}_z\psi_{x\mu}), \quad (18.6)$$

где

$$\mathbf{L}_z = -i\hbar \left(x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} + \dots + x_n \frac{\partial}{\partial y_n} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - \dots - y_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right). \quad (18.6a)$$

Скалярное произведение в правой части (18.6) можно вычислить точно. Покажем, что для любой функции f

$$\mathbf{L}_z f = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} f) \Big|_{\varphi=0}, \quad (18.7)$$

причем это выражение равно разности между значениями f в „повернутом состоянии“ и в первоначальном состоянии, деленной на угол вращения. Поскольку

$$\{\varphi, 0, 0\} = \begin{pmatrix} \cos \varphi & \sin \varphi & 0 \\ -\sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

мы имеем

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} f(\dots x_k y_k z_k \dots) &= \\ &= f(\dots, x_k \cos \varphi - y_k \sin \varphi, x_k \sin \varphi + y_k \cos \varphi, z_k, \dots); \end{aligned}$$

дифференцирование этого выражения по φ дает при $\varphi = 0$

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} f) \Big|_{\varphi=0} = \sum_k -i\hbar \left(x_k \frac{\partial f}{\partial y_k} - y_k \frac{\partial f}{\partial x_k} \right), \quad (18.7a)$$

что эквивалентно соотношению (18.7). Используя (18.4), эту производную можно выразить через μ :

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (\mathbf{P}_{\{\varphi 00\}} \psi_{x\mu}) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (e^{i\mu\varphi} \psi_{x\mu}) = \mu\hbar (e^{i\mu\varphi} \psi_{x\mu}). \quad (18.7b)$$

В силу нормировки $(\psi_{x\mu}, \psi_{x\mu}) = 1$; поэтому (18.6) принимает вид

$$E_{SLw, \mu} - E_{SLw} = \frac{e\hbar\mathcal{H}_z \mu}{2mc} \quad (\mu = -L, -L+1, \dots, L-1, L). \quad (18.8)$$

Согласно (18.8), уровень с орбитальным квантовым числом L расщепляется в этом первом приближении (т. е. при ограничении членами, пропорциональными первой степени напряженности \mathcal{H}_z на $2L+1$ равноотстоящих уровнях). Конечно, средний из них ($\mu=0$) имеет ту же энергию, что и исходный уровень; расстояния между уровнями при заданной напряженности поля одинаковы для всякого уровня, расщепленного таким путем, так как в (18.8) входят только универсальные постоянные.

Если теперь рассмотрим зеемановские компоненты линии $F \rightarrow E$, то, поскольку уровень F расщепляется точно таким же образом, как и E , легко заметить, что все линии с одинаковыми μ совпадают. Но так как в оптических переходах μ может меняться только на ± 1 или 0, ожидается появление всего трех линий, причем две смещенные компоненты находятся на одинаковом расстоянии от центральной для всех линий. Эта картина расщепления называется обычно *нормальным эффектом Зеемана*.

Такая картина согласуется с опытом только в случае *синглетных уровней*. В соответствующих состояниях магнитные моменты (спины) электронов, которые обычно вызывают отклонение от „нормального“ расщепления, комбинируются таким образом, что их влияние исчезает. Это является также причиной отсутствия тонкой структуры у синглетных уровней. Для всех остальных термов расщепление несколько больше или несколько меньше, чем найденное выше, и меняется обычно от уровня к уровню. Поэтому линии с одинаковым изменением μ не совпадают, и получается значительно более сложная картина расщепления *аномального эффекта Зеемана*. Вычисление относительных интенсивностей отдельных зеемановских компонент будет проведено несколько ниже ¹⁾.

Следует заметить, что магнитное поле вызывает расщепление линий, максимально возможное для всякого внешнего поля. Остающееся вырождение связано целиком с симметрической группой, а тождественность электронов не может быть нарушена каким-либо внешним полем.

4. В постоянном электрическом поле, направленном вдоль оси Z , симметрия иная, чем в случае магнитного поля, так как вектор напряженности электрического поля имеет полярную природу. В этом случае уже нет центра инверсии, но плоскости, проходящие через ядро *параллельно* полю, являются плоскостями симметрии. Условия, таким образом, противоположны условиям в магнитном поле (см. фиг. 10, б, стр. 238). Группа симметрии является

¹⁾ Это будет сделано в гл. 23. Интенсивности трех рассматриваемых линий совпадают с предсказаниями классической теории эффекта Зеемана, которая правильно описывает нормальный эффект Зеемана.

двумерной группой вращений и отражений (а она не абелева!), тогда как в магнитном поле она является прямым произведением двумерной группы чистых вращений и трехмерной группы отражений. Наряду с мультиплетным числом S каждый уровень имеет электрическое квантовое число $m = 0, 0', 1, 2, \dots$, указывающее, к какому представлению $\mathfrak{Z}^{(m)}$ двумерной группы вращений и отражений принадлежит уровень.

Неприводимые представления двумерной группы вращений и отражений были определены в гл. 14. В $\mathfrak{Z}^{(0)}, \mathfrak{Z}^{(0')}, \mathfrak{Z}^{(1)}, \mathfrak{Z}^{(2)}, \dots$ матрицы

$$(1), (1), \begin{pmatrix} e^{-i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{i\varphi} \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} e^{-2i\varphi} & 0 \\ 0 & e^{2i\varphi} \end{pmatrix}, \dots$$

соответствуют вращению на угол φ , тогда как матрицы

$$(1), (-1), \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \dots$$

соответствуют отражению в оси X .

Чтобы определить значения m для уровней, на которые расщепляется уровень с орбитальным квантовым числом L , следует найти, какие из $\mathfrak{Z}^{(m)}$ входят в $\mathfrak{D}^{(L)}(R)$, где R соответствует вращению и отражению относительно Z , и сколько раз они входят. Из выражения (18.Е.2) для $\mathfrak{D}^{(L)}(R)$ мы непосредственно видим, что если R является чистым вращением около оси Z , то каждое из представлений $\mathfrak{Z}^{(1)}, \mathfrak{Z}^{(2)}, \dots, \mathfrak{Z}^{(L)}$ содержится в $\mathfrak{D}^{(L)}$ по одному разу; собственные функции, принадлежащие первой или второй строке $\mathfrak{Z}^{(m)}$, принадлежат $-m$ -й или $+m$ -й строкам представления $\mathfrak{D}^{(L)}$. С другой стороны, собственные функции, принадлежащие нулевой строке $\mathfrak{D}^{(L)}$, могут принадлежать либо $\mathfrak{Z}^{(0)}$, либо $\mathfrak{Z}^{(0')}$. Чтобы решить, какой именно случай имеет место в действительности, следует также рассматривать, например, отражение $u' = -u$. (Представления $\mathfrak{Z}^{(0)}$ и $\mathfrak{Z}^{(0')}$ для чистых вращений совпадают.)

Чтобы определить след матрицы в $\mathfrak{D}^{(L)}$, соответствующей этому преобразованию, заметим, что оно является произведением инверсии и вращения на угол π около оси Y ; поэтому его след

$$\begin{aligned} \omega(1 + 2 \cos \pi + 2 \cos 2\pi + \dots + 2 \cos L\pi) = \\ = \omega(1 - 2 + 2 - \dots + 2(-1)^L) = \omega(-1)^L, \end{aligned} \quad (18.9)$$

где ω равно $+1$ для четных уровней и -1 для нечетных. Так как компоненты $\mathfrak{Z}^{(1)}, \mathfrak{Z}^{(2)}, \dots, \mathfrak{Z}^{(L)}$ не дают никакого вклада в следы

отражений, то остается лишь уровень 0, если $\omega(-1)^L = +1$, и уровень 0', если $\omega(-1)^L = -1$.

Мы видим, что расщепление уровня в электрическом поле не является таким полным, как в магнитном поле; из уровня с орбитальным квантовым числом L возникает лишь $L+1$ уровень.

Правила отбора, которые выполняются для сильных электрических полей, сходны с правилами, справедливыми для магнитного поля. Электрическое квантовое число m не меняется при переходе с участием излучения, поляризованного вдоль оси Z , так как умножение на $z_1 + z_2 + \dots + z_n$ является операцией, симметричной относительно двумерной группы вращений около оси Z . Поэтому все переходы между уровнем 0 и уровнем 0' запрещены. С другой стороны, m меняется на ± 1 в переходах, в которых испущенный свет поляризован перпендикулярно направлению поля.

Правила отбора для орбитального квантового числа нарушаются в сильных электрических полях, поскольку полная симметрия относительно вращений уже не имеет места, так что собственные функции не принадлежат больше представлениям трехмерной группы вращений. Правило Лапорта также теряет свою силу (в то время как оно не нарушалось магнитным полем); остается лишь запрет переходов с уровня 0 на уровень 0'.

Возмущение собственных значений электрическим полем может быть также рассчитано с помощью формального метода Релея — Шредингера. Эти результаты имеют лишь ограниченную применимость, так как разложение должно расходиться вследствие вида возмущения¹⁾

$$V = e\mathcal{E}_z(z_1 + z_2 + \dots + z_n). \quad (18.10)$$

Если изобразить графически потенциал как функцию расстояния от ядра, например, в атоме водорода, то видно, что в окрестности ядра имеется глубокий минимум потенциала, но что электрон всегда имеет достаточную энергию для того, чтобы уйти на бесконечность в направлении поля.

Это наводит на мысль, что в электрическом поле, строго говоря, вовсе не существует дискретного спектра и что в этом случае нет истинных стационарных состояний. Несмотря на это, первое или второе приближения, вычисленные методом возмущений Шредингера, не являются совершенно бессмысленными. Они дают состояния, которые, если не являются действительно стационарными, ведут себя подобно стационарным состояниям в течение очень долгого времени, так как электрон в поле ядра благодаря туннельному эффекту покинет потенциальную яму и уйдет от ядра только после того, как он сделает много оборотов вокруг него.

¹⁾ См. J. R. Oppenheimer, Phys. Rev., 31, 66 (1928).

В первом приближении энергия возмущения, обусловленная электрическим полем, вовсе не расщепляет собственные значения. Коэффициенты

$$v_{x'\mu'; x\mu} = e\mathcal{E}_z (\psi_{x'\mu'}(z_1 + z_2 + \dots + z_n)\psi_{x\mu}) = 0 \quad (18.11)$$

секулярного уравнения (5.18) все равны нулю, так как $\psi_{x'\mu'}$ и $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)\psi_{x\mu}$ имеют *различную* четность. Если *нет случайного вырождения*, то все собственные функции, принадлежащие одному и тому же собственному значению E , имеют одинаковую четность; поэтому $\psi_{x'\mu'}$ и $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)\psi_{x\mu}$ будут иметь противоположную четность. Мы уже видели пример такого поведения в связи с оператором перехода на стр. 236, причем (18.11) совпадает с (18.2в) с точностью до постоянного множителя. Собственные значения матрицы $(v_{x'\mu'; x\mu}) = 0$ все равны 0. В первом приближении все уровни совпадают с невозмущенным уровнем; если разложить энергию возмущения по степеням напряженности поля, то коэффициент при первой степени будет равен нулю; таким образом, при малых напряженностях поля расщепление уровней обращается в нуль как квадрат напряженности. Только в случае атома водорода, где имеется случайное вырождение уровней с различной четностью, расщепление уровней происходит в первом порядке.

Усложнения, возникающие за счет магнитного момента, оказываются главным препятствием для экспериментальной проверки законов, выведенных выше для эффекта Штарка, так же как и в случае эффекта Зеемана. Единственным результатом, имеющим общий характер, является отсутствие расщепления уровней, пропорционального первой степени напряженности поля, так как оно следует лишь из рассмотрения поведения при отражениях.

5. Для свободных атомов постоянное магнитное или электрическое поля являются, вероятно, наиболее важными видами внешних возмущений. Для атомов в кристаллах более важными будут другие виды возмущений. Для них симметрия „внешнего поля“¹⁾, которое в этом случае создается окружающими атомами, определяется симметрией кристалла и может вызывать интересные виды расщеплений. Для большинства классов симметрии это было тщательно исследовано Бете. Из его примеров мы возьмем лишь сравнительно простой случай ромбической (гемиздрической) симметрии, симметрии ромбической пирамиды²⁾.

¹⁾ При этом подразумевается, что окружающие атомы исключены из исследуемой системы, а „внешнее“ поле воспроизводит их влияние на атом. Подобное предположение, очевидно, не вполне справедливо, так что основанное на нем рассмотрение не является полным. В частности, при таком подходе исключаются „обменные силы“.

²⁾ Ромбическая пирамида — пирамида, имеющая в основании ромб,

Ромбическая пирамида имеет три элемента симметрии: вращение на угол π вокруг оси Z и отражения в плоскостях ZX и ZY . Ее группа симметрии V_d состоит из тождественного элемента и этих трех элементов. Она изоморфна 4-группе (см. стр. 79), так как все ее элементы имеют порядок 2. Будучи абелевой, она имеет четыре одномерных неприводимых представления, матрицы которых даны в табл. 5. Первым идет тождественное представление, второе и третье сходны между собой, различаясь лишь обменом ролями осей X и Y , тогда как четвертое играет особую роль.

Если поместить атом в его положении в кристалле, то он находится в поле сил, снимающих полную пространственную симметрию, так что остается только ромбическая гемидрическая симметрия. Так как все неприводимые представления этой группы

ТАБЛИЦА 5

Представления группы ромбической пирамиды

Представление	E	Вращение на угол π вокруг осн Z	Отражение в плоскости ZX	Отражение в плоскости ZY
I	(1)	(1)	(1)	(1)
II	(1)	(-1)	(-1)	(1)
III	(1)	(-1)	(1)	(-1)
IV	(1)	(1)	(-1)	(-1)

одномерны, уровень с орбитальным квантовым числом L расщепляется на $2L + 1$ уровней.

Коснемся вопроса о числе уровней со свойствами представлений I, II, III и IV, возникающих в кристалле из одного уровня с азимутальным квантовым числом L и четностью ω . Ответ на этот вопрос может быть дан в общей теории, т. е. путем определения, сколько раз представления I, II, III и IV входят в представление $\mathfrak{D}^{(L, \omega)}$ группы вращений и отражений, если рассматривать его как представление ее ромбически-гемидрической подгруппы. Эти числа α_I , α_{II} , α_{III} и α_{IV} проще всего находятся путем определения характеров представления $\mathfrak{D}^{(L, \omega)}$ для операций из V_d . Для единичного элемента

$$2L + 1 = \alpha_I + \alpha_{II} + \alpha_{III} + \alpha_{IV}. \quad (18.12a)$$

С другой стороны, для вращений на угол π вокруг оси Z и для отражений в плоскостях ZX или ZY , согласно (18.9), имеем

$$(-1)^L = \alpha_I - \alpha_{II} - \alpha_{III} + \alpha_{IV}, \quad (18.12b)$$

$$\omega(-1)^L = \alpha_I - \alpha_{II} + \alpha_{III} - \alpha_{IV} = \alpha_I + \alpha_{II} - \alpha_{III} - \alpha_{IV}. \quad (18.12в)$$

Из (18.12в) следует, что $\alpha_{II} = \alpha_{III}$ и $\omega(-1)^L = \alpha_I - \alpha_{IV}$; из (18.12а) и (18.12б) вытекает, что $(2L+1) + (-1)^L = 2\alpha_I + 2\alpha_{IV}$. Таким образом, мы получаем значения параметров α , которые приведены в табл. 6.

ТАБЛИЦА 6

Кратность представлений группы ромбической пирамиды в различных представлениях группы вращений

Уровни	α_I	$\alpha_{II}, \alpha_{III}$	α_{IV}
S_+	1	0	0
S_-	0	0	1
P_+	0	1	1
P_-	1	1	0
D_+	2	1	1
и т. д.			

В упомянутой выше работе Бете определил расщепление почти для всех из тридцати двух типов симметрии, встречающихся в кристаллах, и получил отсюда ряд дальнейших следствий. Так, правила отбора для уровней типов I, II, III и IV получаются весьма просто, если заметить, например, что для излучения, поляризованного вдоль оси Z , умножение на $(z_1 + z_2 + \dots + z_n)$ является операцией, симметричной относительно ромбической гемидрической группы. Это означает, что разрешены переходы только между уровнями одного и того же представления.

ЧАСТИЧНОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ ИЗ ИХ ТРАНСФОРМАЦИОННЫХ СВОЙСТВ

1. Трансформационные свойства собственных функций, которые обсуждались в предыдущей главе, следуют из соотношений между значениями собственных функций для аргументов, которые могут быть преобразованы друг в друга преобразованиями группы. Если, например, группа состоит из тождественного преобразования и преобразования $x' = -x$, то для функций, принадлежащих тождественному представлению (четные функции)

$$g(-x) = g(x), \quad (19.1)$$

тогда как для функций, которые принадлежат отрицательному представлению (нечетные функции)

$$f(-x) = -f(x). \quad (19.1a)$$

В общем случае из соотношения

$$P_R \psi_x(x_1, x_2, \dots, x_n) = \sum_{\lambda} D(R)_{\lambda x} \psi_{\lambda}(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (19.2)$$

в силу (11.26a) следует, что

$$\psi_x(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) = \sum_{\lambda} D(R)_{\lambda x}^* \psi_{\lambda}(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (19.3)$$

где x'_1, \dots, x'_n получается из x_1, \dots, x_n путем преобразования R . Если вся область изменения аргументов волновой функции (т. е. все конфигурационное пространство) подразделяется на части, каждая из которых получается из одной части — *основной области* — некоторым преобразованием группы, то функции ψ_x могут быть рассчитаны всюду с помощью (19.3), коль скоро они известны в основной области. Соотношение (19.3) представляет приведение области изменения аргументов x_1, \dots, x_n , причем степень приводимости зависит от обширности группы, по отношению к которой задача на собственные значения инвариантна; она дает также трансформационные свойства функций ψ_x в явном виде. Поэтому все резуль-

таты, которые следуют из свойств инвариантности функций ψ_x , могут быть выведены из (19.3).

Рассмотрим, например, скалярное произведение четной и нечетной функций:

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(x)^* f(x) dx. \quad (19.4)$$

Разбивая область интегрирования на две части, от $-\infty$ до 0 и от 0 до $+\infty$ (эти области преобразуются одна в другую при преобразовании $x' = -x$), получаем

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(x)^* f(x) dx = \int_{-\infty}^0 g(x)^* f(x) dx + \int_0^{\infty} g(x)^* f(x) dx.$$

Если теперь ввести в первом интеграле переменную y вместо $-x$ и для $g(-y)$ и $f(-y)$ воспользоваться соотношениями (19.1) и (19.1a), то интеграл (19.4) примет вид

$$-\int_0^{\infty} g(y)^* f(y) dy + \int_0^{\infty} g(x)^* f(x) dx = 0 \quad (19.5)$$

и две его части взаимно уничтожатся.

Рассуждение о том, что f и g принадлежат различным неприводимым представлениям и что поэтому их скалярное произведение должно обращаться в нуль, проще, чем только что проведенный расчет. С другой стороны, вывод, основанный на (19.3), имеет то преимущество, что, наряду с большей наглядностью, он приводит к частичному определению собственных функций, весьма эффективному в случае тех простых задач, которые инвариантны относительно группы вращений.

2. Соотношение (19.3) выражает волновую функцию ψ_x для всех положений, возникающих из положения $P = (x_1, y_1, z_1, x_2, y_2, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n)$ при преобразованиях группы, через значения функций-партнеров ψ_λ функции ψ_x в точке P . Для группы вращений такими положениями являются все точки конфигурационного пространства, для которых относительное расположение частиц, т. е. *геометрическая форма атома*, одинаково. Точку в конфигурационном пространстве можно заменить n -лучевой звездой¹⁾, помещенной в центре трехмерного пространства. Конец каждого луча в трехмерном пространстве показывает, где находится соответствующий электрон в рассматриваемой конфигурации. Задание волновой функции во всех точках конфигурационного пространства равносильно заданию ее для всех мыслимых n -лучевиков.

¹⁾ Или, кратко, n -лучевиком. — Прим перев

Как уже указывалось при обсуждении „отделения центра масс“ на стр. 212, волновая функция будет содержать в качестве переменных также координаты ядра. Поэтому она будет определена не для тех положений, в которых n -лучевик помещен в центре трехмерного пространства; напротив, центр n -лучевика указывает положение ядра и может находиться в любой точке пространства. Однако, поскольку значения волновой функции будут одинаковыми для всех положений n -лучевика, получающихся одно из другого путем параллельного переноса, достаточно указать его для всех n -лучевиков, помещенных в центре. Волновая функция не изменится, если все координаты x (включая координаты ядра), или все координаты y , или все координаты z увеличить или уменьшить на одну и ту же величину.

Положения, получающиеся одно из другого путем вращения, соответствуют *одной и той же форме, но различным ориентациям* n -лучевика. В качестве основной области мы выберем те положения, для которых первый луч (соответствующий первому электрону) лежит на оси Z , а второй — в плоскости ZX . Эта область соответствует таким точкам конфигурационного пространства, для которых $x_1 = y_1 = z_1 = 0$. Пусть значения $2L + 1$ волновых функций $\psi_{-L}, \psi_{-L+1}, \dots, \psi_L$, принадлежащих представлению $\mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha\beta\gamma\})$, в основной области равны $G_{-L}, G_{-L+1}, \dots, G_{L-1}, G_L$ [т. е. $G_\lambda = \psi_\lambda(0, 0, z_1, x_2, 0, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n)$, причем значения G_λ зависят только от геометрической формы конфигурации частиц]. Тогда значение волновой функции в каждом положении $x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n$, получающемся из $0, 0, z_1, x_2, 0, z_2, \dots, x_n, y_n, z_n$ путем вращения $\{\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma\}$, согласно (19.3), будет равно ¹⁾

$$\begin{aligned} \psi_\mu(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= \\ &= \sum_{\lambda=-L}^{+L} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma\})_{\mu\lambda}^* G_\lambda(g) = \\ &= \sum_{\lambda=-L}^{+L} (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda(g). \quad (19.6) \end{aligned}$$

В этом выражении ²⁾ α и β являются по определению соответственно азимутальным и полярным углами первого электрона; γ — угол

¹⁾ Соотношение

$$\mathfrak{D}^{(L)}(\{\pi - \alpha, \beta, -\pi - \gamma\})_{\mu\lambda}^* = (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda}$$

следует непосредственно из (15.8),

$$\mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} = e^{i\mu\alpha} d^{(L)}(\beta)_{\mu\lambda} e^{i\lambda\gamma},$$

и того, что $d^{(L)}(\beta)_{\mu\lambda}$ вещественно.

²⁾ Вращение выбрано так, что в качестве α и β можно взять полярный и азимутальный углы первого электрона, а не соответствующие величины с обратным знаком. См. обсуждение в Приложении А (п. 2) в конце книги.

между плоскостью, проходящей через ось Z и направление на первый электрон, и плоскостью, проходящей через начало координат и первые два электрона. Значения G_λ зависят только от геометрической формы g n -лучевика.

При $L = 0$ (S -уровни) (19.6) принимает вид

$$\psi(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) = G_0(g). \quad (19.7)$$

В этом случае волновая функция зависит *только* от формы n -лучевика и вовсе не зависит от его ориентации в пространстве; S -состояния сферически симметричны ¹⁾. Это вполне естественно, так как S -состоянию принадлежит только одна собственная функция и она не может выделить направления. Для более высоких азимутальных квантовых чисел все направления равноправны по отношению к полной системе собственных функций, но нельзя выделить ни одной собственной функции, не выделяя тем самым некоторого направления, так что отдельные собственные функции уже не являются сферически симметричными.

Из (19.6) можно вывести правила отбора. Однако мы будем интересоваться главным образом тем, в какой мере из этого соотношения можно определить *собственные функции*.

3. Для твердого тела геометрическая форма g фиксирована, так что все G_λ — просто постоянные. В этом случае собственные функции зависят только от α , β и γ и полностью определяются соотношением (19.6). Простейшим твердым телом является тонкий стержень, который может свободно вращаться вокруг своей средней точки (жесткий ротатор).

Уравнение Шредингера для жесткого ротатора имеет вид

$$-\frac{\hbar^2}{2\mathfrak{I}} \left[\frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \sin \theta \frac{\partial \psi_\mu^{NL}(\theta, \varphi)}{\partial \theta} + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \psi_\mu^{NL}(\theta, \varphi)}{\partial \varphi^2} \right] = E_L^N \psi_\mu^{NL}(\theta, \varphi), \quad (19.8)$$

где \mathfrak{I} — момент инерции, а θ и φ — соответственно полярный и азимутальный углы ротатора. Основной областью в этом случае является единственная точка $\theta = 0$, „нормальное положение“ ротатора. Обозначим значения собственных функций в этой точке через G_λ^{NL} ; тогда, согласно (15.8) и (19.6), будем иметь ²⁾

$$\psi_\mu^{NL}(\theta, \varphi) = \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda^{NL}. \quad (19.8a)$$

Но ψ_μ^{NL} не должны зависеть от γ , так как ротатор имеет одно и то же положение при всех значениях этой переменной. Таким

¹⁾ A. Unsöld, Ann. d. Phys., 82, 355 (1927).

²⁾ См. примечание на стр. 252 и Приложение А.

образом, $G_\lambda^{NL} = 0$ при $\lambda \neq 0$, так что (19.8a) принимает вид ¹⁾

$$\psi_\mu^{NL}(\theta, \varphi) = (-1)^\mu e^{i\mu\varphi} d^{(L)}(\theta)_{\mu 0} G_0^{NL} = (-1)^\mu \mathfrak{D}^{(L)}(\{\varphi, \theta, 0\})_{\mu 0} G_0^{NL}. \quad (19.86)$$

Это равенство полностью выражает собственные функции через коэффициенты представления. Соотношение (19.86) показывает также, что собственные функции ψ_μ^{NL} для одних и тех же L и μ и разных N различаются, самое большее, на постоянный множитель. Так как это невозможно для собственных функций различных собственных значений, каждому L принадлежит только одно собственное значение. Поэтому в (19.8), (19.8a) и (19.86) индекс N можно опустить.

Решения уравнения (19.8) известны как сферические гармоники L -й степени; (19.86) показывает, что функции $\mathfrak{D}^{(L)}(\{\varphi, \theta, \gamma\})_{m0}$ совпадают со сферическими гармониками $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, за исключением нормировки и множителя $(-1)^m$.

Не следует слишком удивляться тому, что уравнение (19.8) можно полностью решить без вычислений. В самом деле, один из способов определения представлений (гл. 15, п. 1) был основан на решении уравнения Лапласа, которое эквивалентно уравнению (19.8). Можно сказать, что теперь мы снова подставили это решение в (19.8).

Чтобы показать, что уравнение (19.8) относится ко всем сферически симметричным задачам, упомянем случай атома водорода, который описывается уравнением

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) \psi_\mu^{Nl} - \frac{e^2}{r} \psi_\mu^{Nl} = E_{Nl} \psi_\mu^{Nl}. \quad (19.9)$$

Соотношение (19.6) показывает, что его решения имеют вид

$$\psi_\mu^{Nl} = \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda^{Nl}(r). \quad (19.9a)$$

Здесь G_λ^{Nl} — функции только r , так как n -лучевик вырождается в однолучевик, геометрическая форма которого полностью определяется длиной r луча (расстояния электрона от ядра). В этом случае α и β представляют собой азимут и полярный угол электрона, тогда как γ не имеет какого-либо смысла; по этой причине выражение (19.9a) не должно зависеть от γ . Отсюда следует, что точно так же, как в случае соотношения (19.86), G_λ^{Nl} должны обращаться в нуль при $\lambda \neq 0$:

$$\psi_\mu^{Nl}(r, \theta, \varphi) = (-1)^\mu \mathfrak{D}^{(l)}(\{\varphi, \theta, 0\})_{\mu 0} G_0^{Nl}(r) \sim Y_{l\mu}(\theta, \varphi) G_0^{Nl}(r). \quad (19.96)$$

¹⁾ См. примечание 2 на стр. 252 и Приложение А.

Согласно формулам (17.3), собственные функции атома водорода действительно имеют такой вид. Мы видим, что ψ_{μ}^{NI} действительно принадлежит μ -й строке представления $\mathfrak{D}^{(l)}$, как это и должно быть для собственной функции с магнитным квантовым числом μ и орбитальным квантовым числом l .

Простейшей задачей, на которой можно показать все возможности этого метода, является квантовомеханическое описание движения твердого тела (волчка). Рассмотрим сначала асимметричный волчок. Положение волчка можно характеризовать тремя углами Эйлера α, β, γ , указывающими вращение, переводящее волчок из его нормального положения (в котором наибольший момент инерции совпадает с осью Z , следующий после него — с осью Y , а наименьший — с осью X) в рассматриваемое. Волновая функция будет зависеть только от этих трех углов; действительно, согласно (19.6), она имеет вид

$$\begin{aligned} \psi_{\mu}^{NI}(\alpha, \beta, \gamma) &= \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_{\lambda}^{NI} = \\ &= \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} e^{i\mu\alpha} d^{(l)}(\beta)_{\mu\lambda} e^{i\lambda\gamma} G_{\lambda}^{NI}. \end{aligned} \quad (19.10)$$

Значения G_{γ}^{NI} снова являются постоянными, так как геометрическая форма твердого тела фиксирована. Так же как и собственные значения E_{NI} , они могут быть определены путем подстановки выражения (19.10) для ψ_{μ}^{NI} в уравнение Шредингера. При этом получаем $2l+1$ линейных однородных уравнений для $G_{-l}^{NI}, \dots, G_{+l}^{NI}$. Требование, чтобы определитель этой системы уравнений обращался в нуль, дает алгебраическое уравнение $(2l+1)$ -й степени для энергии E^{NI} , так что $2l+1$ собственных значений имеют орбитальное квантовое число l .

Рассмотрим теперь волчок, у которого равны два меньших момента инерции. Тогда „нормальное положение“ волчка определяется не однозначно, а с точностью до вращения вокруг оси Z . Следствием этого является то, что собственная функция остается собственной функцией, если γ заменить на $\gamma + \gamma_0$.

Более того, линейная комбинация

$$\begin{aligned} \int_0^{2\pi} \psi_{\mu}^{NI}(\alpha, \beta, \gamma + \gamma_0) e^{-i\gamma\gamma_0} d\gamma_0 &= \\ &= \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} G_{\lambda}^{NI} e^{i\mu\alpha} d^{(l)}(\beta)_{\mu\lambda} e^{i\lambda\gamma} \int e^{i\gamma_0(\lambda-\nu)} d\gamma_0 = \\ &= (\text{const}) \cdot (-1)^{\mu-\nu} G_{\nu}^{NI} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\nu} \end{aligned} \quad (19.11)$$

таких функций также является собственной функцией. Но если G_{ν}^{Nl} не равны нулю, то (19.11) показывает, что с точностью до постоянного множителя собственные функции могут быть записаны в виде ¹⁾

$$\begin{aligned} \psi_{\mu}^{\nu}(\alpha, \beta, \gamma) &= (-1)^{\mu-\nu} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\nu} \\ (\nu &= -l, -l+1, \dots, l-1, l). \end{aligned} \quad (19.11a)$$

Позднее, когда мы будем рассматривать симметрию относительно отражений, окажется, что пары собственных значений равны: $E_{\nu l} = E_{-\nu l}$, так что все $l+1$ различных собственных значений имеют одно и то же орбитальное квантовое число.

Если все три момента инерции равны, то нормальное положение совершенно не определено, и собственные функции (19.11a) остаются собственными функциями при замене $\{\alpha, \beta, \gamma\}$ на $\{\alpha, \beta, \gamma\}R$, где R — произвольное вращение. Таким образом,

$$(-1)^{\mu-\nu} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}R)_{\mu\nu} = \sum_{\kappa} (-1)^{\mu-\nu} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\kappa} \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\kappa\nu}$$

принадлежит тому же собственному значению, что и $(-1)^{\mu-\nu} \times \times \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\nu}$. Этому же собственному значению принадлежит и

$$\begin{aligned} \int \sum_{\kappa} (-1)^{\mu-\nu} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\kappa} \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\kappa\nu} \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\lambda\nu}^* dR = \\ = (\text{const}) \cdot (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda}. \end{aligned} \quad (19.12)$$

Следовательно, в этом случае все собственные значения $E_{-l, l}$, $E_{-l+1, l}$, ..., $E_{l, l}$ совпадают и каждому орбитальному квантовому числу принадлежит только одно собственное значение; это собственное значение имеет $(2l+1)^2$ -кратное вырождение.

Таким образом, если по крайней мере два момента инерции волчка равны между собой, собственные функции даются в явном виде формулой (19.11a). Соответствующие собственные значения можно найти, если подставить эти функции [т. е. $\mathfrak{D}^{(l)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\nu\mu}$] для каждого собственного значения в уравнение Шредингера, взять такие значения α , β и γ , при которых $\psi_{\mu}^{\nu}(\alpha, \beta, \gamma)$ не обращается в нуль (например, $\alpha = \beta = \gamma = 0$), и разделить на $\psi_{\mu}^{\nu}(\alpha, \beta, \gamma)$.

¹⁾ Состояние определяется квантовыми числами l , μ и бегущим квантовым числом N , которое позволяет различать между различными состояниями, имеющими одни и те же значения l и μ . В рассматриваемом случае бегущее квантовое число N равно просто ν .

Уравнение Шредингера для симметричного волчка¹⁾ может быть решено непосредственно в гипергеометрических функциях²⁾. Соотношение между коэффициентами представления и гипергеометрической функцией (при $\mu \geq \nu$) имеет вид

$$d^{(l)}(\beta)_{\mu\nu} = \sqrt{\frac{(l-\nu)!(l+\mu)!}{(l+\nu)!(l-\mu)!}} \frac{\cos^{2l+\nu-\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{\mu-\nu} \frac{1}{2} \beta}{(\mu-\nu)!} \times \\ \times F\left(\mu-l, -\nu-l, \mu-\nu+1, -\operatorname{tg}^2 \frac{1}{2} \beta\right). \quad (19.13)$$

4. Прежде чем переходить к обсуждению четности, выведем еще одно соотношение:

$$d^{(l)}(\pi-\beta)_{\mu\nu} = (-1)^{l-\mu} d^{(l)}(\beta)_{\mu,-\nu}. \quad (19.14)$$

В гл. 15 коэффициенты представления были полностью определены; возьмем $d^{(l)}(\beta)_{\mu\nu}$ из (15.27):

$$d^{(l)}(\beta)_{\mu\nu} = \sum_x (-1)^x \frac{\sqrt{(l+\mu)!(l-\mu)!(l+\nu)!(l-\nu)!}}{(l-\mu-x)!(l+\nu-x)!x!(x+\mu-\nu)!} \times \\ \times \cos^{2l-\mu+\nu-2x} \frac{1}{2} \beta \sin^{2x+\mu-\nu} \frac{1}{2} \beta. \quad (19.15)$$

Если в этом выражении вместо β подставить $\pi-\beta$, то синусы в (19.15) переходят в косинусы, а косинусы — в синусы [так как $\cos\left(\frac{\pi}{2}-x\right) = \sin x$]. Если одновременно вместо индекса x ввести индекс $x' = l-\mu-x$, по которому производится суммирование, то (19.15) принимает вид

$$d^{(l)}(\pi-\beta)_{\mu\nu} = \sum_{x'} (-1)^{l-\mu-x'} \frac{\sqrt{(l+\mu)!(l-\mu)!(l+\nu)!(l-\nu)!}}{x'!(\mu+\nu+x')!(l-\mu-x')!(l-\nu-x')!} \times \\ \times \sin^{2x'+\mu+\nu} \frac{1}{2} \beta \cos^{2l-\mu-\nu-2x'} \frac{1}{2} \beta. \quad (19.16)$$

¹⁾ Квантовомеханическая теория симметричного волчка рассматривалась в следующих работах: Н. Rademacher, F. Reiche, Zs. f. Phys., 39, 444 (1926); 41, 453 (1927); R. de L. Kronig, I. I. Rabi, Phys. Rev., 29, 262 (1927); C. Manneback, Zs. f. Phys., 28, 76 (1927); J. H. van Vleck, Phys. Rev. 33, 476 (1929). Теория асимметричного волчка рассматривалась в работах: E. E. Witmer, Proc. Nat. Acad., 13, 60 (1927). S. C. Wang, Phys. Rev., 34, 243 (1929); H. A. Kramers, G. P. Ittman, Zs. f. Phys., 53, 553 (1929); 58, 217 (1929); 60, 663 (1930); O. Klein, Zs. f. Phys., 58, 730 (1929); H. Casimir, Zs. f. Phys., 59, 623 (1930).

²⁾ См., например, P. M. Morse, H. Feshbach, Methods of Theoretical Physics, Pt. 1, New York, 1953, p. 388, 542 (см. перевод: Ф. Морс и Г. Фешбах, Методы теоретической физики, ИЛ, 1958).

Так как x' — целое число, $(-1)^{x'} = (-1)^{-x'}$, так что правая часть (19.16) равна $(-1)^{l-\mu} d(\beta)_{\mu, -\nu}$, и тем самым соотношение (19.14) установлено.

В одночастичной задаче поведение волновой функции при отражениях определяется ее угловой зависимостью. Для однолучевика инверсия P_I состоит лишь в замене φ на $\varphi \pm \pi$ и θ на $\pi - \theta$; длина луча r остается без изменения. При этой подстановке (19.9б) преобразуется к виду

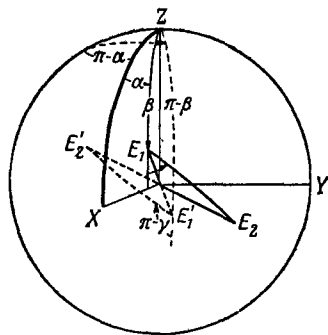
$$\begin{aligned} P_I \psi_{\mu}^{NI}(r, \theta, \varphi) &= (-1)^{\mu} e^{+i\mu(\varphi \pm \pi)} d^{(l)}(\pi - \theta)_{\mu 0} G^{NI}(r) = \\ &= e^{+i\mu\varphi} (-1)^{l-\mu} d^{(l)}(\theta)_{\mu 0} G^{NI}(r) = (-1)^l \psi_{\mu}^{NI}(r, \theta, \varphi). \end{aligned} \quad (19.17)$$

Уровни с четными l четны; уровни с нечетными l нечетны¹⁾.

Для двух независимых частиц, как, например, в атоме гелия, согласно (19.6), имеем

$$\psi_{\mu}^L = \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_{\lambda}(r_1, r_2, \varepsilon), \quad (19.18)$$

поскольку эта конфигурация определяется геометрией двухлучевика, который можно характеризовать длинами r_1, r_2 двух лучей



Фиг. 11. Поведение двухлучевика при отражении.

и углом между ними ε . При отражении меняется только положение двухлучевика, но не его геометрическая форма. Если произвести инверсию, то α, β и γ переходят в $\alpha \pm \pi, \pi - \beta$ и $\pi - \gamma$ (см. фиг. 11)²⁾.

¹⁾ Таким образом, оптический переход с $\Delta l = 0$ для одноэлектронной системы запрещен, поскольку при этом переходе изменяется четность.

²⁾ На фиг. 11 ради простоты принято $r_1 = r_2 = 1$. Точки E_1 и E_2 являются положениями двух электронов до инверсии, а E_1' и E_2' — их положениями после инверсии.

Поэтому

$$\begin{aligned} P_l \psi_\mu^L &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma\})_{\mu\lambda} G_\lambda = \\ &= \sum_\lambda (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu, -\lambda} (-1)^{L+\lambda} G_\lambda, \end{aligned} \quad (19.18a)$$

так как, в силу (19.14),

$$\begin{aligned} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma\})_{\mu\lambda} &= e^{i\mu(\alpha \pm \pi)} (-1)^{L-\mu} d^{(L)}(\beta)_{\mu, -\lambda} e^{i\lambda(\pi - \gamma)} = \\ &= (-1)^{L+\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu, -\lambda}. \end{aligned} \quad (19.14a)$$

Таким образом, для четных уровней из $P_l \psi_\mu = \psi_\mu$ следует

$$G_{-\lambda}(r_1, r_2, \varepsilon) = (-1)^{L+\lambda} G_\lambda(r_1, r_2, \varepsilon), \quad (19.19)$$

тогда как для нечетных уровней¹⁾, для которых $P_l \psi_\mu = -\psi_\mu$,

$$G_{-\lambda}(r_1, r_2, \varepsilon) = -(-1)^{L+\lambda} G_\lambda(r_1, r_2, \varepsilon). \quad (19.19a)$$

Функция G_0 отлична от нуля только при $\omega = (-1)^L(S_+, P_-, D_+$ и т. д.). Следовательно, атом He не имеет уровня S_- : волновые функции S -уровней имеют одинаковые значения при всех положениях двухлучевика, так что S -уровни необходимым образом имеют положительную четность.

Подставляя (19.6) в уравнение Шредингера и приравнявая коэффициенты при одинаковых функциях от α, β и γ , получаем в общем случае $2L+1$ уравнений для $2L+1$ функций $G_{-L}, G_{-L+1}, \dots, G_{L-1}, G_L$ от переменных, описывающих форму n -лучевика. Пользуясь соотношениями (19.19) и (19.19a), для атома He можно значительно сократить число независимых функций, оставляя лишь одну неизвестную функцию для уровней S_+ и P_+ , две — для уровней P_- и D_- , три — для уровней D_+ и F_+ и т. д.²⁾

Для нескольких электронов невозможно заменить инверсию n -лучевика чистым вращением. Инверсия преобразует n -лучевик в его „оптический изомер“ (или зеркальное изображение). Он имеет форму, отличную от формы исходного n -лучевика только

¹⁾ В случае асимметричного волчка по-прежнему справедливы равенства $G_{-\lambda} = G_\lambda$ для $l+1$ собственных значений с орбитальным квантовым числом l и $G_{-\lambda} = -G_\lambda$ для остальных l собственных значений. Таким образом, секулярное уравнение $(2l+1)$ -й степени разделяется на два уравнения степеней $(l+1)$ и l . Поскольку, в силу (19.14a), волновые функции ψ_μ^{-l} и ψ_μ^l для симметричного волчка [выражение (19.11a)] при инверсии преобразуются одна в другую, отсюда следует, что они принадлежат одному и тому же собственному значению.

²⁾ См. G. Breit, Phys. Rev., 35, 369 (1930).

при $n \geq 3$. При $n = 2$ это явление не имеет места; геометрическая форма двухлучевика всегда совпадает с формой его изомера или зеркального изображения.

Если обозначить через \bar{g} координаты, описывающие форму n -лучевика, изомерного g , то, согласно (19.6), фиг. 11 и (19.14a), имеем

$$\begin{aligned} P_{I\psi_{\mu}}^L &= \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha \pm \pi, \pi - \beta, \pi - \gamma\})_{\mu\lambda} G_{\lambda}(\bar{g}) = \\ &= \sum_{\lambda} (-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu, -\lambda} (-1)^{L+\lambda} G_{\lambda}(\bar{g}). \end{aligned}$$

С другой стороны,

$$P_{I\psi_{\mu}}^L = w\psi_{\mu} = \sum_{\lambda} w(-1)^{\mu-\lambda} \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})_{\mu\lambda} G_{\lambda}(g),$$

где для четных уровней $w = +1$, а для нечетных $w = -1$. Тогда

$$(-1)^{L+\lambda} G_{\lambda}(\bar{g}) = wG_{-\lambda}(g). \quad (19.20)$$

Соотношение (19.20) не может быть использовано для вычисления собственных функций в явном виде; однако оно показывает, какую информацию о виде собственных функций, сверх даваемой соотношением (19.6), можно получить из симметрии собственных функций относительно группы отражений. Однако рассмотрение этой группы позволяет надеяться получить не слишком много дополнительной информации. Инверсии позволяют сравнивать волновые функции только для двух точек конфигурационного пространства, тогда как группа вращений дает возможность установить связь между значениями этой функции для непрерывного трехпараметрического семейства точек. В соответствии с этим с помощью группы вращений можно было бы исключить три переменные, причем нужно допустить лишь увеличение числа неизвестных функций (G_{-L}, \dots, G_L). Это число, равное $2L + 1$, по-видимому, может быть снова несколько уменьшено с помощью группы отражений, но упрощение получается сравнительно несущественным.

Естественно попытаться воспользоваться симметрией относительно перестановок электронов для дальнейшего уменьшения числа неизвестных функций. До некоторой степени это возможно. Однако рассуждения в этом случае не так просты, как в предшествующем рассмотрении, в котором первый и второй электроны играют роль, отличную от остальных (α и β являются соответственно азимутом и полярным углом первого электрона). Это приводит к тому, что формулы, следующие из рассмотрения перестановок электронов, весьма сложны и не будут приведены здесь.

СПИН ЭЛЕКТРОНА

Физические основы теории Паули

1. В предыдущей главе обсуждались наиболее важные свойства атомных спектров, которые могут рассматриваться без введения спина электрона. Однако многие из менее очевидных характеристик, среди которых наиболее важной, по-видимому, является тонкая структура, не могли быть объяснены, так как они тесно связаны с иным свойством электрона — его магнитным моментом.

Гипотеза о том, что электрон имеет магнитный момент и момент количества движения („спин“), была выдвинута Гаудсмитом и Уленбеком. Еще до создания квантовой механики они заметили, что невозможно дать полное описание спектров, не приписывая электрону магнитный момент и механический момент: концепция электрона как точечного заряда оказалась недостаточной. Как известно, в классической электродинамике магнит эквивалентен точечному заряду, вращающемуся вокруг оси магнитного момента. Тогда вектор магнитного момента μ связан с моментом количества движения L соотношением

$$\mu = \frac{eL}{2mc} = \eta L, \quad (20.E.1)$$

где e — заряд вращающейся частицы и m — ее масса. Однако, как показали Гаудсмит и Уленбек, соотношение (20.E.1) не применимо к магнитному моменту, обязанному спину, если взять обычные заряд и массу электрона. Вместо этого следует предположить, что момент количества движения равен

$$|S| = \frac{1}{2} \hbar, \quad (20.1)$$

тогда как магнитный момент равен целому магнетону Бора

$$|\mu| = \frac{e\hbar}{2mc} = \frac{e}{mc} |S| = 2\eta |S|. \quad (20.1a)$$

Квантовая механика электрона со спином показывает, что эти утверждения нельзя понимать буквально. Даже теория Паули требует, что не может быть осуществлен эксперимент, позволяющий

определить направление (в частности, направляющие косинусы) механического или магнитного моментов. Возможно лишь различить между одним направлением и противоположным ему. Следовательно, вопрос о вероятности различных пространственных направлений спина не имеет смысла, т. е. не может быть решен с помощью эксперимента; измерена может быть лишь проекция спина на какое-либо одно направление. Такие измерения, примером которых служит опыт Штерна — Герлаха, могут дать только два ответа: либо спин ориентирован по рассматриваемому направлению, либо он имеет противоположное направление. Возможными экспериментальными результатами для проекции момента количества движения на рассматриваемое направление являются $+\frac{\hbar}{2}$ или $-\frac{\hbar}{2}$. Если при измерении проекции спина на ось Z получен первый результат, то повторное измерение проекции спина на ось Z , выполненное немедленно, с достоверностью даст направление $+Z$ и не даст $-Z$. С другой стороны, измерение проекции на ось Y дает с равной вероятностью два возможных результата: $+Y$ и $-Y$. Поэтому важно приписать независимые вероятности всем направлениям спина; даже в том случае, когда спин с достоверностью направлен по оси Z (т. е. если проекция момента количества движения на ось Z с достоверностью равна $+\frac{\hbar}{2}$), вероятность направления $+Y$ равна $\frac{1}{2}$,

а для всех направлений, кроме $-Z$, вероятность отлична от нуля.

Спин приобретает еще более символический характер в релятивистской теории электрона Дирака, как это было подчеркнуто, в частности, Н. Бором. Согласно этой теории (которую мы не будем здесь обсуждать), существование магнитного момента является целиком релятивистским эффектом, который выступает автоматически, когда пространство и время рассматриваются как равноправные.

2. В теории Паули магнитный момент описывается дополнительной координатой s в волновой функции, которая при этом принимает вид $\Phi(x, y, z, s)$. В то время как x, y, z изменяются от $-\infty$ до $+\infty$, координата s может принимать только два значения: -1 и $+1$. Поэтому волновая функция электрона состоит в действительности из двух функций от x, y, z : $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$. То обстоятельство, что переменная s (в противоположность координатам x, y, z) может принимать лишь два значения, отражает тот факт, что компонента спина, например в направлении Z , может иметь лишь два значения $(+\frac{\hbar}{2}$ и $-\frac{\hbar}{2})$, тогда как координаты, определяющие положение, могут принимать все значения от $-\infty$ до $+\infty$

Скалярное произведение двух функций от x , y , z и s определяется как непосредственное обобщение скалярного произведения, которое мы видели выше. Скалярное произведение двух функций $\varphi(x, y, z)$ и $g(x, y, z)$ было определено как предел суммы

$$\sum_{x, y, z} \varphi(x, y, z)^* g(x, y, z),$$

где суммирование должно распространяться на всю область от $-\infty$ до $+\infty$. Аналогичным образом, скалярное произведение $\Phi(x, y, z, s)$ и $G(x, y, z, s)$ равно

$$\sum_{s=\pm 1} \sum_{x, y, z} \Phi(x, y, z, s)^* G(x, y, z, s), \quad (20.2)$$

где суммирование снова производится по всей области изменения переменных. Переходя к пределу, получаем

$$\begin{aligned} (\Phi, G) &= \sum_{s=\pm 1} \int \int \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x, y, z, s)^* G(x, y, z, s) dx dy dz = \\ &= \int \int \int_{-\infty}^{\infty} [\Phi(x, y, z, -1)^* G(x, y, z, -1) + \\ &\quad + \Phi(x, y, z, 1)^* G(x, y, z, 1)] dx dy dz. \quad (20.3) \end{aligned}$$

3. Величины, зависящие только от пространственных координат, остаются важным специальным классом физических величин. Эти величины — как координата X или скорость — имеют также смысл в теории, вовсе не рассматривающей спина. Опыты, в которых измеряются эти величины, мы будем называть „бесспиновыми“. Сами эти величины соответствуют в теории Паули операторам, действующим только на декартовы координаты x , y , z , так что спиновая координата может рассматриваться как параметр.

Уточним понятие оператора, действующего только на некоторые из координат. Всякий оператор X , который может быть применен к функции $f(\xi)$ одной переменной ξ (как, например, дифференцирование по ξ), может быть применен также к функции двух переменных, так как любая функция $F(\xi, \sigma)$ двух переменных может рассматриваться как семейство функций лишь одной переменной ξ ; для каждого конкретного значения σ функция $F(\xi, \sigma)$ является функцией только ξ ¹⁾. Если оператор X применяется ко всем этим функциям от ξ , то для каждого значения σ получается другое семейство функций от ξ . Это семейство образует тогда

¹⁾ Под ξ мы подразумеваем здесь тройку координат x , y , z , а под σ — спиновую координату s .

функцию $\mathbf{X}F(\xi, \sigma)$. Утверждение о том, что \mathbf{X} действует только на ξ , означает таким образом, что значение функции $\mathbf{X}F$ в точке ξ, σ зависит только от значений функции $F(\xi', \sigma')$ при $\sigma' = \sigma$.

Пусть $\Psi_k(x, y, z, s)$ — собственная функция оператора \mathbf{H} , действующего только на x, y и z . Если λ_k является соответствующим собственным значением, то функция от x, y, z, s

$$\mathbf{H}\Psi_k(x, y, z, s) - \lambda_k\Psi_k(x, y, z, s) = 0 \quad (20.4)$$

должна обращаться в нуль; иначе говоря, должны обращаться в нуль обе функции этого семейства ($s = +1$ и $s = -1$):

$$\mathbf{H}\Psi_k(x, y, z, -1) - \lambda_k\Psi_k(x, y, z, -1) = 0,$$

$$\mathbf{H}\Psi_k(x, y, z, +1) - \lambda_k\Psi_k(x, y, z, +1) = 0.$$

Если при данном λ_k уравнение

$$\mathbf{H}\psi_k(x, y, z) = \lambda_k\psi_k(x, y, z)$$

имеет только одно решение, то как $\Psi_k(x, y, z, +1)$, так и $\Psi_k(x, y, z, -1)$ должны быть кратными $\psi_k(x, y, z)$ ¹⁾:

$$\Psi_k(x, y, z, -1) = u_{-1}\psi_k(x, y, z), \quad \Psi_k(x, y, z, 1) = u_1\psi_k(x, y, z), \quad (20.5)$$

$$\Psi_k(x, y, z, s) = u_s\psi_k(x, y, z).$$

Независимо от того, как выбраны u_{-1} и u_1 , $u_s\psi_k(x, y, z)$ остается собственной функцией оператора \mathbf{H} , принадлежащей собственному значению λ_k . Это показывает, что введение спиновой координаты s превратило собственное значение λ_k в двукратно вырожденное собственное значение, которому принадлежат две линейно независимые и взаимно ортогональные собственные функции

$$\Psi_{k-} = \delta_{s,-1}\psi_k(x, y, z), \quad (20.5a)$$

$$\Psi_{k+} = \delta_{s,+1}\psi_k(x, y, z). \quad (20.5b)$$

Скалярное произведение Ψ_{k-} и Ψ_{k+} действительно обращается в нуль, так как один из множителей в каждом члене подынтегральной функции (20.3) равен нулю.

Собственные функции

$$\delta_{s,-1}\psi_1, \delta_{s,+1}\psi_1, \delta_{s,-1}\psi_2, \delta_{s,+1}\psi_2, \delta_{s,-1}\psi_3, \dots$$

¹⁾ Сначала могло бы показаться несколько странным, что s выступает в качестве переменной в левой части этого равенства и в качестве индекса — в правой; но это лишний раз подчеркивает то обстоятельство, что всякая функция x, y, z и s может рассматриваться как соответствие между функцией от x, y и z и каждым значением s .

соответствуют возможным результатам двух измерений, выполняемых одновременно: а) измерения величины, отвечающей оператору \mathbf{H} и б) измерения Z -компоненты спина. Для Ψ_{k-} значение первой величины с достоверностью равно λ_k , а спин с достоверностью имеет направление $-Z$, тогда как для Ψ_{k+} первая величина по-прежнему с достоверностью равна λ_k , но спин имеет направление $+Z$, т. е. вероятность обнаружить его в направлении $-Z$ равна нулю. В общем случае, если волновая функция равна

$$\Phi = a_1\Psi_{1-} + a_2\Psi_{2-} + a_3\Psi_{3-} + \dots + b_1\Psi_{1+} + b_2\Psi_{2+} + b_3\Psi_{3+} + \dots, \quad (20.6)$$

вероятность того, что \mathbf{H} имеет значение λ_k и что спин одновременно имеет направление $-Z$, равна $|a_k|^2$, а вероятность значения λ_k для \mathbf{H} и направления спина $+Z$ равна $|b_k|^2$.

Инвариантность описания относительно пространственных вращений

4. При описании электрона волновой функцией, зависящей от s , оси Z отдается предпочтение перед всеми направлениями, даже перед двумя другими осями координат. Поэтому совершенно необходимо исследовать здесь вопрос о том, как изотропность пространства сохраняется при этом описании, т. е. какую волновую функцию $\mathbf{O}_R\Phi$ припишет состоянию Φ второй наблюдатель, если он описывает физическую систему и все величины *точно таким же образом, как и первый*, за исключением того, что он пользуется *системой координат, повернутой* относительно системы координат первого наблюдателя. Пусть относительное расположение двух систем координат таково, что координаты точки x, y, z во второй системе равны

$$\begin{aligned} R_{xx}x + R_{xy}y + R_{xz}z &= x', \\ R_{yx}x + R_{yy}y + R_{yz}z &= y', \\ R_{zx}x + R_{zy}y + R_{zz}z &= z'. \end{aligned}$$

(\mathbf{R} является вещественной ортогональной трехмерной матрицей с определителем 1.) Функция $\mathbf{O}_R\Phi$ может быть определена как волновая функция, приписываемая состоянию Φ вторым наблюдателем, или как волновая функция первоначального состояния Φ , повернутого с помощью преобразования R , и обнаруживаемая первым наблюдателем.

Если бы волновая функция зависела только от пространственных координат частиц, оператор \mathbf{O}_R был бы просто точечным преобразованием \mathbf{P}_R (см. гл. 11):

$$\mathbf{P}_R\varphi(x', y', z') = \varphi(x, y, z). \quad (20.7)$$

Равенство (20.7) утверждает просто, что волновая функция $P_{R\psi}$ для второго наблюдателя в точке x', y', z' принимает то же самое значение, что и волновая функция для первого наблюдателя в точке x, y, z . Это должно быть верно, так как точку x, y, z второй наблюдатель называет x', y', z' .

При включении спиновых координат, наряду с пространственными, преобразование O_R не может оставаться просто точечным преобразованием, так как s нельзя подвергнуть точечному преобразованию. По этой причине O_R будет более общим оператором, чем P_R . Предположим, что существует система операторов O_R (каждому вращению R принадлежит некоторый оператор O_R), и попытаемся найти его, исходя из основных предположений теории Паули и требования равноправности наблюдателей, связанных с различными системами координат. Мы найдем, что *существует только одна система операторов, удовлетворяющих этим условиям*. Ее определение позволит сделать важные заключения о свойствах электрона со спином.

5. Описание второго наблюдателя, который приписывает состоянию Φ волновую функцию $O_R\Phi$, должно быть вполне эквивалентным первоначальному описанию. В частности, оно должно давать те же самые *вероятности переходов* между двумя произвольными состояниями Ψ и Φ , какие даются первым:

$$|(\Psi, \Phi)|^2 = |(O_R\Psi, O_R\Phi)|^2. \quad (20.8)$$

Здесь важно заметить, что, хотя *состояние* Φ , которое представляется как состояние $O_R\Phi$ для наблюдателя, связанного с повернутой системой координат, задано полностью указанием его волновой функции, волновая функция второго наблюдателя для этого состояния не определена однозначно. Она может быть умножена на произвольную постоянную c , имеющую абсолютное значение 1, так как волновые функции $O_R\Phi$ и $cO_R\Phi$ описывают одно и то же физическое состояние. Это означает, что оператор O_R не является однозначным — для всякой функции Φ в O_R имеется свободный множитель. Будет показано (см. приложение в конце настоящей главы), что этим произволом в O_R можно воспользоваться так, чтобы для всех Ψ и Φ имели место соотношения

$$\left. \begin{aligned} &(\Psi, \Phi) = (O_R\Psi, O_R\Phi) \\ \text{и} \quad &O_R(a\Psi + b\Phi) = aO_R\Psi + bO_R\Phi \end{aligned} \right\} \quad (20.8a)$$

(a и b — постоянные); иначе говоря, *так, чтобы O_R стал линейным оператором*. Тогда два способа описания — один для наблюдателя в первоначальной системе и другой для наблюдателя в повернутой системе координат — *отличаются только каноническим преобразованием*, что обеспечивает их полную физическую эквива-

лентность. Второй наблюдатель воспринимает состояние с волновой функцией Φ как $O_R\Phi$; величине, которая соответствует оператору H для первого наблюдателя, соответствует оператор $O_RHO_R^{-1}$ с точки зрения второго наблюдателя.

Наоборот, требование (20.8а), чтобы O_R был линейным унитарным оператором, определяет постоянную c_Φ однозначно для всех волновых функций, кроме одной. Если $cO_R\Phi$ подставить вместо волновой функции $O_R\Phi$, то для сохранения в силе соотношений (20.8а) все волновые функции должны быть одновременно умножены на c . Чтобы убедиться в этом, подставим $cO_R\Phi$ вместо $O_R\Phi$ в (20.8а), оставив неизменной, скажем, $O_R\Psi$; тогда, если (20.8а) должно выполняться для этой новой системы, то

$$(\Psi, \Phi) = (O_R\Psi, cO_R\Phi) = c(O_R\Psi, O_R\Phi),$$

откуда вместе с (20.8а) следует, что $c = 1$. В дальнейшем мы всегда будем выбирать функцию $O_R\Phi$ так, чтобы (20.8а) выполнялось; тогда для всех волновых функций $O_R\Phi$ (где R — заданное вращение) остается свободной лишь одна константа. Эта константа может, однако, зависеть от R .

6. Рассмотрим теперь два состояния $\Psi_- = \psi(x, y, z)\delta_{s, -1}$ и $\Psi_+ = \psi(x, y, z)\delta_{s, +1}$. Для „бесспиновых“ опытов оба эти состояния ведут себя так, как если бы их волновые функции были равны $\psi(x, y, z)$. Поэтому пока рассматриваются „бесспиновые“ опыты, для наблюдателя в повернутой системе координат они представляются как состояние с волновой функцией $P_R\psi(x, y, z)$. Поэтому, согласно (20.5), волновые функции $O_R\Psi_-$ и $O_R\Psi_+$ должны иметь вид

$$\begin{aligned} O_R\delta_{s, -1}\psi(x, y, z) &= u_{s, -1}P_R\psi(x, y, z), \\ O_R\delta_{s, +1}\psi(x, y, z) &= u_{s, +1}P_R\psi(x, y, z), \end{aligned} \quad (20.9)$$

где $u_{s, -1}$ и $u_{s, +1}$ не зависят от x, y, z и на данном этапе могут быть различными для разных ψ . Однако, если φ является состоянием, отличным от ψ , для которого справедливо соотношение

$$O_R\delta_{s, -1}\varphi(x, y, z) = \bar{u}_{s, -1}P_R\varphi(x, y, z),$$

то из линейности оператора O_R следует, что

$$\begin{aligned} O_R\delta_{s, -1}(\varphi + \psi) &= \bar{u}_{s, -1}P_R(\varphi + \psi) = \bar{u}_{s, -1}P_R\varphi + \bar{u}_{s, -1}P_R\psi = \\ &= O_R\delta_{s, -1}\varphi + O_R\delta_{s, -1}\psi = \bar{u}_{s, -1}P_R\varphi + u_{s, -1}P_R\psi. \end{aligned}$$

В силу линейной независимости $P_R\varphi$ и $P_R\psi$ отсюда следует, что

$$\bar{u}_{s, -1} = \bar{u}_{s, -1} = u_{s, -1}.$$

Аналогичным образом,

$$\bar{u}_{s,1} = u_{s,1}.$$

Таким образом, величины u_{st} одинаковы для всех волновых функций, а матрица $u = u(R)$ может зависеть только от вращения R . Если $\Phi(x, y, z, s)$ является произвольной волновой функцией

$$\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s,-1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s,1} \Phi(x, y, z, 1), \quad (20.10)$$

то из линейности оператора O_R и соотношений (20.9) снова следует, что

$$\begin{aligned} O_R \Phi(x, y, z, s) &= O_R \delta_{s,-1} \Phi(x, y, z, -1) + O_R \delta_{s,1} \Phi(x, y, z, 1) = \\ &= u_{s,-1} P_R \Phi(x, y, z, -1) + u_{s,1} P_R \Phi(x, y, z, 1), \end{aligned} \quad (20.11)$$

$$O_R \Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm 1} u_{st} P_R \Phi(x, y, z, t).$$

Таким образом, оператор O_R может быть разбит на два множителя:

$$O_R = Q_R P_R. \quad (20.12)$$

Оператор P_R является обычным оператором преобразования, определенным равенством (20.7), и действует только на пространственные координаты волновой функции; оператор Q_R определяется равенством

$$Q_R \Phi(x, y, z, s) = \sum_{t=\pm 1} u(R)_{st} \Phi(x, y, z, t) \quad (20.12a)$$

и действует только на спиновую координату s . Поскольку область изменения s состоит только из двух точек $+1$ и -1 , (20.12a) показывает, что оператор Q_R эквивалентен двухрядной матрице:

$$u(R) = \begin{pmatrix} u(R)_{-1,-1} & u(R)_{-1,1} \\ u(R)_{1,-1} & u(R)_{1,1} \end{pmatrix}. \quad (20.13)$$

Операторы P и Q коммутируют; поэтому для двух произвольных вращений R и S имеем

$$P_S Q_R = Q_R P_S \quad (20.14)$$

и, в частности,

$$P_R Q_R = Q_R P_R.$$

Возможность разбить оператор O_R на два множителя P_R и Q_R опирается главным образом на предположение о том, что существуют „бесспиновые“ опыты, которые могут быть описаны волновой функцией, зависящей только от x , y и z . Это предположение

отбрасывается в релятивистской теории Дирака, и в последней теории \mathbf{O}_R не может быть разбит на два множителя, удовлетворяющих (20.14), если R представляет переход к движущейся системе координат.

Связь с теорией представлений

7. Из унитарности операторов \mathbf{O}_R и \mathbf{P}_R (и, следовательно, также \mathbf{P}_R^{-1}) следует, что оператор $\mathbf{Q}_R = \mathbf{O}_R \mathbf{P}_R^{-1}$ должен быть унитарным. Поэтому для любых функций Φ и Ψ

$$(\mathbf{Q}_R \Phi, \mathbf{Q}_R \Psi) = (\Phi, \Psi). \quad (20.15)$$

Отсюда следует, что матрица $\mathbf{u}(R)$ должна быть унитарной. Если положить $\Phi = \delta_{s\sigma} \psi$ и $\Psi = \delta_{s'\sigma'} \psi$, то, согласно (20.3) (если ψ нормирована), $(\Phi, \Psi) = \delta_{\sigma\sigma'}$. Поэтому в соответствии с (20.15) и (20.12a) имеем

$$\begin{aligned} \delta_{\sigma\sigma'} &= (\mathbf{Q}_R \delta_{s\sigma} \psi, \mathbf{Q}_R \delta_{s'\sigma'} \psi) = (\mathbf{u}_{s\sigma} \psi, \mathbf{u}_{s'\sigma'} \psi) = \\ &= \sum_{s=\pm 1} \int \int \int_{-\infty}^{+\infty} \mathbf{u}_{s\sigma}^* \psi^* \mathbf{u}_{s'\sigma'} \psi \, dx \, dy \, dz = \sum_{s=\pm 1} \mathbf{u}_{s\sigma}^* \mathbf{u}_{s'\sigma'}. \end{aligned}$$

Но это равенство и является в точности условием унитарности матрицы \mathbf{u} .

Кроме того, поскольку \mathbf{O}_R определяется физическими требованиями и соотношениями (20.8a) лишь с точностью до постоянного множителя с абсолютной величиной 1, зависящего от R , можно заменить \mathbf{O}_R на $c_R \mathbf{O}_R$, не меняя физического содержания теории и не видоизменяя соотношений (20.8a) (где $|c_R| = 1$). Множитель c_R может быть включен в оператор \mathbf{Q}_R , т. е. в $\mathbf{u}(R)$; тем самым можно обеспечить, чтобы определитель матрицы $\mathbf{u}(R)$ был равен $+1$.

Наконец, чтобы полностью определить матрицу $\mathbf{u}(R)$, учтем, что $\mathbf{O}_R \Phi$ есть волновая функция состояния Φ , повернутого на R , а $\mathbf{O}_S \mathbf{O}_R \Phi$ — волновая функция этого состояния, повернутого сначала на R , а затем на S , или в целом — на SR . Таким образом, оператор $\mathbf{O}_S \mathbf{O}_R$ физически полностью эквивалентен оператору \mathbf{O}_{SR} . Так как он тоже удовлетворяет соотношениям (20.8a) — произведение двух линейных унитарных операторов снова линейно и унитарно, — то он может отличаться от \mathbf{O}_{SR} лишь постоянным множителем:

$$\mathbf{O}_{SR} = c_{S,R} \mathbf{O}_S \mathbf{O}_R. \quad (20.16)$$

Далее, в силу $\mathbf{P}_{SR} = \mathbf{P}_S \mathbf{P}_R$ и соотношения (20.14), из (20.12) следует, что

$$\mathbf{Q}_{SR} \mathbf{P}_{SR} = c_{S,R} \mathbf{Q}_S \mathbf{P}_S \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R, \quad \mathbf{Q}_{SR} = c_{S,R} \mathbf{Q}_S \mathbf{Q}_R$$

или, с учетом (20.12а),

$$\sum_{t=\pm 1} \mathbf{u}(SR)_{st} \Phi(x, y, z, t) = c_{S,R} \sum_{r=\pm 1} \sum_{t=\pm 1} \mathbf{u}(S)_{sr} \mathbf{u}(R)_{rt} \Phi(x, y, z, t),$$

$$\mathbf{u}(SR) = c_{S,R} \mathbf{1} \cdot \mathbf{u}(S) \mathbf{u}(R). \quad (20.17)$$

Так как определители всех матриц \mathbf{u} мы нормировали к 1, из (20.17) следует также, что $|c_{S,R} \cdot \mathbf{1}| = 1$ и $c_{S,R} = \pm 1$. Таким образом, с точностью до знака, матрицы $\mathbf{u}(R)$ образуют представление трехмерной группы вращений:

$$\mathbf{u}(SR) = \pm \mathbf{u}(S) \mathbf{u}(R). \quad (20.17a)$$

Это наводит на мысль, что либо $\mathbf{u}(R)$ совпадает с матрицами, которые обсуждались в гл. 15,

$$\mathbf{u}(\{\alpha\beta\gamma\}) = \mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha\beta\gamma\}) = \begin{pmatrix} e^{-1/2 i \alpha} \cos \frac{1}{2} \beta e^{-1/2 i \gamma} & -e^{-1/2 i \alpha} \sin \frac{1}{2} \beta e^{1/2 i \gamma} \\ e^{1/2 i \alpha} \sin \frac{1}{2} \beta e^{-1/2 i \gamma} & e^{1/2 i \alpha} \cos \frac{1}{2} \beta e^{1/2 i \gamma} \end{pmatrix}, \quad (20.18)$$

либо по крайней мере получаются из них с помощью преобразования подобия. Это действительно так, и в следующей главе мы покажем, что всякая система двумерных матриц, удовлетворяющих (20.17а), либо состоит из единичных матриц, либо может быть получена из $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ с помощью преобразования подобия. Первая из этих возможностей исключается, так как это означало бы, например, что состояние, в котором спин с достоверностью был направлен по оси Z , обладало бы этим свойством после произвольного вращения.

Матрица \mathbf{u} может быть диагональной матрицей только для вращений с $\beta = 0$ (которые оставляют неизменной ось Z); для таких вращений она должна быть диагональной. Действительно, если спин в первой системе координат имеет направление $-Z$, так что $\Phi(x, y, z, 1) = 0$, то это должно сохраниться и во второй системе координат. Но если это так, из (20.11) следует, что $\mathbf{u}_{1,-1} = 0$; аналогичным образом $\mathbf{u}_{-1,1} = 0$; значит $\mathbf{u}(\{\alpha 0 0\})$ есть диагональная матрица. Поскольку \mathbf{u} эквивалентна $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha 0 0\})$, она может быть равна либо

$$\mathbf{u}(\{\alpha 0 0\}) = \begin{pmatrix} e^{-1/2 i \alpha} & 0 \\ 0 & e^{1/2 i \alpha} \end{pmatrix}, \quad \text{либо} \quad \begin{pmatrix} e^{1/2 i \alpha} & 0 \\ 0 & e^{-1/2 i \alpha} \end{pmatrix}. \quad (20.E.2)$$

Но из второго выражения следует, что в состоянии $\psi_{\delta_{s,-1}}$ момент количества движения должен иметь направление $+Z$, а в состоянии $\psi_{\delta_{s,+1}}$ — направление $-Z$. Мы исключаем этот выбор, так как в этом случае волновая функция $\Phi(x, y, z, -s)$ была бы приписана состоянию, которое мы описываем функцией $\Phi(x, y, z, s)$.

Таким образом, $u(\{\alpha 00\}) = \mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha 00\})$ и унитарная матрица S , преобразующая $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ в u , должна коммутировать с $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha 00\})$; следовательно, она должна быть диагональной матрицей. Пусть ее два диагональных элемента равны a и a' ($|a| = |a'| = 1$). Тогда можно изменить обозначения и приписать волновую функцию $S\Phi(x, y, z, s)$ состоянию, волновая функция которого ранее равнялась $\Phi(x, y, z, s)$, где

$$S\Phi(x, y, z, -1) = a\Phi(x, y, z, -1),$$

$$S\Phi(x, y, z, 1) = a'\Phi(x, y, z, 1).$$

Это допустимо, так как до сих пор мы не придавали никакого значения комплексной фазе отношения $\Phi(x, y, z, -1)/\Phi(x, y, z, 1)$. В описании, возникающем таким путем из первоначального и вполне эквивалентном ему, мы в каждом случае имеем

$$u(\{\alpha, \beta, \gamma\}) = \mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha, \beta, \gamma\}), \quad (20.18a)$$

и мы находим, что всякое описание спина, основанное на положениях, обсуждавшихся в п. п. 1, 2 и 3, физически вполне эквивалентно описанию, в котором волновая функция состояния Φ , повернутого на R , равна¹⁾ $O_R\Phi$. Здесь $O_R = P_R Q_R$ является оператором, определенным соотношением

$$\begin{aligned} O_R\Phi(x, y, z, s) &= \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{1/2s, 1/2t} P_R\Phi(x, y, z, t) = \\ &= \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{1/2s, 1/2t} \Phi(x'', y'', z'', t), \end{aligned} \quad (20.19)$$

где x'', y'', z'' получаются из x, y, z путем вращения R^{-1} . Матрицы $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ имеют индексы $1/2s, 1/2t$, так как строки и столбцы $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ обозначены индексами $-1/2$ и $+1/2$ вместо индексов -1 и $+1$ в случае матрицы u .

Пусть, например,

$$\Phi(x, y, z, s) = (x + iy) \exp(-r/2r_0) \quad \text{при } s = \pm 1 \quad (20.E.3)$$

Функция $(x + iy) \exp(-r/2r_0)$ является, если отвлечься от нормировки, собственной функцией атома водорода с $N = 2, l = 1$ и $\mu = +1$ [см. (17.3)]

¹⁾ Здесь R всегда является чистым вращением.

Рассмотрим состояние (20.Е.3) в системе координат, ось Y которой совпадает со старой осью Y , а ось Z является старой осью X . Тогда вращение R имеет вид $\{0, \pi/2, 0\}$ и

$$x' = -z, \quad y' = y, \quad z' = x,$$

а обратным преобразованием является

$$x'' = z, \quad y'' = y, \quad z'' = -x.$$

Матрица $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{0, \pi/2, 0\})$ равна

$$\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}.$$

Волновая функция состояния (20.Е.3) в новой системе координат, согласно (20.19), имеет вид

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_R \Phi(x, y, z, s) &= \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}}(z + iy) e^{-r/2r_0} - \frac{1}{\sqrt{2}}(z + iy) e^{-r/2r_0} & \text{при } s = -1, \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(z + iy) e^{-r/2r_0} + \frac{1}{\sqrt{2}}(z + iy) e^{-r/2r_0} & \text{при } s = +1, \end{cases} \\ &= \delta_{s1} \sqrt{2}(z + iy) e^{-r/2r_0}. \end{aligned}$$

В новой системе координат спин с достоверностью направлен по оси $+Z$; следовательно, в старой системе спин был с достоверностью направлен по оси $+X$.

8. Получим теперь определенные физические следствия из формул преобразования (20.19). С помощью (20.19) можно ответить на следующий важный вопрос: каковы вероятности того, что измерение проекции спина на ось Z' приведет к результатам $+\hbar/2$ и $-\hbar/2$, если известно, что Z -компонента имеет значение $+\hbar/2$? Иными словами, каково соотношение между вероятностями проекций спина на два направления Z' и Z , составляющие угол β ? Если спин ориентирован в направлении Z , то волновая функция имеет вид $\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s1} \varphi(x, y, z)$. Если рассматривать это состояние с точки зрения системы координат, повернутой на $\{0, \beta, 0\}$, то в силу соотношения

$$\mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, s) = \delta_{s1} \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \varphi(x, y, z)$$

[так как $\Phi(x, y, z, -1) = 0$], используя $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{0, \beta, 0\})_{st}$ из (15.16), имеем

$$\mathcal{O}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, -1) = \cos \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, -1) -$$

$$- \sin \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, 1) = - \sin \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \varphi(x, y, z), \quad (20.20)$$

$$\mathcal{O}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, 1) = \sin \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, -1) +$$

$$+ \cos \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \Phi(x, y, z, 1) = \cos \frac{1}{2} \beta \mathbf{P}_{\{0\beta 0\}} \varphi(x, y, z).$$

Теперь второй наблюдатель может вычислить вероятность данного значения проекции спина на ось Z' , составляющей угол β с первоначальным направлением оси Z , непосредственно пользуясь волновой функцией $O_{\{\alpha\beta\}}\Phi$. Согласно (20.20), вероятность найти спин в направлении $+Z'$ дается выражением $\left|\cos\frac{1}{2}\beta\right|^2$, а вероятность найти спин в направлении $-Z'$ — выражением $\left|\sin\frac{1}{2}\beta\right|^2$. Если вероятность определенного направления спина равна 1, то для направления, составляющего с ним угол β , вероятность равна $\left|\cos\frac{1}{2}\beta\right|^2$. При $\beta=0$ эта вероятность равна 1, как это и должно быть при совпадении двух направлений; при $\beta=\pi/2$, когда направления взаимно перпендикулярны, она равна $1/2$; при $\beta=\pi$, когда два направления противоположны, эта вероятность равна 0.

Рассмотрим теперь вопрос о том, при каких условиях существует направление, в котором спин с достоверностью *не лежит*. Пусть этим направлением будет, скажем, направление Z' , так что волновая функция $O_{\{\alpha\beta\}}\Phi$ в системе координат, в которой ось Z совпадает с направлением Z' , имеет вид

$$O_{\{\alpha\beta\}}\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s, -1}\varphi(x, y, z).$$

Сама волновая функция Φ (ради краткости будем писать $R = \{\alpha, \beta, \gamma\}$) имеет вид

$$\begin{aligned}\Phi(x, y, z, s) &= O_{R^{-1}}O_R\Phi = O_{R^{-1}}\delta_{s, -1}\varphi(x, y, z) = \\ &= \mathfrak{D}^{(1/2)}(R^{-1})_{1/2s, -1/2}\mathbf{P}_{R^{-1}}\varphi(x, y, z).\end{aligned}$$

Следовательно, такое направление будет существовать только в том случае, если $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$ различаются лишь постоянным множителем, не зависящим от x, y, z :

$$\frac{\Phi(x, y, z, -1)}{\Phi(x, y, z, 1)} = \frac{\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{-1/2, -1/2}}{\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{1/2, -1/2}} = e^{-i\alpha} \operatorname{ctg}\frac{1}{2}\beta. \quad (20.E.4)$$

Абсолютная величина и комплексная фаза этого множителя остаются, как показывает (20.E.4), совершенно произвольными. То, что $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$ отличаются лишь множителем, показывает, что при одновременном измерении Z -компоненты спина и произвольной, не зависящей от спина величины вероятность для последней, в соответствии с п. 3, *статистически независима* от направления спина. В этом случае всегда существует направление — его азимут α и полярный угол β даются соотношением (20.A.4) — вдоль которого спин с достоверностью *не лежит*; в противном случае такого направления не существует.

9. Следует еще обратить внимание на то обстоятельство, что далеко идущие конкретные утверждения о поведении электрона со спином могут быть получены на основе одних лишь требований инвариантности и общих принципов квантовой механики, а также некоторых весьма качественных постулатов. Только что полученные два результата, особенно результат, касающийся соотношений между вероятностями различных направлений спина, доступны (по крайней мере в принципе) экспериментальной проверке.

Определение оператора O_R было дано в предположении, что различные системы координат физически эквивалентны. Внешние поля, нарушающие изотропность пространства, могут также приводить к видоизменению операторов O_R . Разумеется, пока внешнее поле слабо, операторы, осуществляющие переход к повернутым осям, будут по-прежнему приближенно даваться выражением (20.19). Однако в дальнейшем (20.19) будет считаться справедливым и при сильных полях.

Наконец, обратим внимание на одно весьма существенное обстоятельство в выводе (20.19), которое могло быть заслонено математическим формализмом. Это обстоятельство состоит в том, что эквивалентность двух систем координат также влечет за собой эквивалентность операторов O_R , осуществляющих преобразование к сходным образом повернутым системам координат.

Операторы O_R линейны и унитарны, но они не представляют точечного преобразования, как P_R . По этой причине к ним не применимо соотношение (11.22). Это значит, что

$$O_R \Phi \Psi \neq O_R \Phi \cdot O_R \Psi.$$

Кроме того, следует заметить, что вращение R соответствует не одному, а двум операторам, O_R и $-O_R$, так как матрица $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha, \beta, \gamma\})$, входящая в (20.19), определяется вращением лишь с точностью до знака. К тому же равенство $O_{SR} = O_S O_R$ не имеет места; выполняется лишь соотношение

$$O_{SR} = \pm O_S O_R. \quad (20.16a)$$

Нет никакой возможности произвольно опустить один из этих операторов $+O_R$ или $-O_R$ таким путем, чтобы (20.16a) оставалось справедливым для оставшихся операторов с одним лишь верхним знаком.

10. Проекция спина на ось Z является такой же „физической величиной“, как и пространственные координаты или момент количества движения. Тогда, согласно физической интерпретации квантовой механики, она должна соответствовать линейному эрмитовому оператору; этот оператор будем обозначать через $S_z = (\hbar/2) s_z$. Собственными значениями оператора s_z , соответствующими возможным значениям $-\hbar/2$ и $+\hbar/2$ Z -компоненты спина, являются -1 и $+1$. Собственными функциями, принадлежащими первому собственному значению, являются все функции

$\Psi_-(x, y, z, s) = \delta_{s, -1} \psi(x, y, z)$; они отличны от нуля только при $s = -1$. Второму собственному значению принадлежат все функции $\Psi_+(x, y, z, s) = \delta_{s, +1} \psi'(x, y, z)$, отличные от нуля только при $s = +1$. Таким образом

$$\begin{aligned} s_z \delta_{s, -1} \psi(x, y, z) &= -\delta_{s, -1} \psi(x, y, z), \\ s_z \delta_{s, +1} \psi'(x, y, z) &= +\delta_{s, +1} \psi'(x, y, z); \end{aligned}$$

для произвольных функций

$$\Phi(x, y, z, s) = \delta_{s, -1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s, +1} \Phi(x, y, z, 1)$$

мы имеем

$$\begin{aligned} s_z \Phi(x, y, z, s) &= s_z (\delta_{s, -1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s, +1} \Phi(x, y, z, 1)) = \\ &= -\delta_{s, -1} \Phi(x, y, z, -1) + \delta_{s, +1} \Phi(x, y, z, 1), \\ s_z \bar{\Phi}(x, y, z, s) &= \sum_{t=\pm 1} t \delta_{st} \bar{\Phi}(x, y, z, t) = s \bar{\Phi}(x, y, z, s), \end{aligned} \quad (20.21)$$

в силу линейности операторов s_z .

Так как оператор s_z действует только на спиновые координаты, то, подобно \mathbf{O}_R , его матричный вид будет

$$s_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (20.21a)$$

Определим теперь оператор \mathfrak{h} , соответствующий Z' -компоненте спина. Для наблюдателя в системе координат, осью Z которой является Z' , этот оператор равен просто s_z , поскольку для этого наблюдателя, по определению, все операторы имеют тот же вид, что и для первого наблюдателя, за исключением того, что они относятся к его собственной системе координат. С другой стороны, этот оператор должен получаться из \mathfrak{h} путем преобразования с помощью оператора \mathbf{O}_R , так что

$$s_z = \mathbf{O}_R \mathfrak{h} \mathbf{O}_R^{-1}, \quad \mathfrak{h} = \mathbf{O}_R^{-1} s_z \mathbf{O}_R$$

Тогда в силу (20.12) (а также в силу коммутативности \mathbf{P}_R с s_z) следует, что

$$\mathfrak{h} = \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{P}_R^{-1} s_z \mathbf{P}_R \mathbf{O}_R = \mathbf{O}_R^{-1} s_z \mathbf{O}_R \quad (20.22)$$

Если для всех операторов, входящих в (20.22), воспользоваться матричной формой (они действуют только на s), получим

$$\mathfrak{h} = \mathbf{u}(R)^\dagger s_z \mathbf{u}(R).$$

Теперь из соотношения (15.11) следует, что наш оператор \mathfrak{h} совпадает с матрицей, использованной в этом соотношении, если положить $\bar{\mathbf{h}} = s_z$ (т. е. $x' = y' = 0, z' = 1$). Вектор $\mathbf{r} = (x, y, z)$ в равенстве (15.11) представляет собой вектор, компоненты которого получаются из \mathbf{r}' (с компонентами $x' = y' = 0, z' = 1$) путем преобразования R^{-1} и, следовательно, является единичным вектором в направлении Z' . Поэтому равенство (15.10а), определяющее \mathfrak{h} , принимает вид

$$\mathfrak{h} = a_1 s_x + a_2 s_y + a_3 s_z, \quad (20.22a)$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$ — направляющие косинусы оси Z' . Из (20.22a) видно, что оператор Z' -компоненты спина построен из операторов компонент X, Y, Z , определенных в (15.10),

$$s_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

точно таким же способом, как и оператор Z' -компоненты координаты (оператор умножения на $\alpha_1 x + \alpha_2 y + \alpha_3 z$) образован из операторов координат XYZ . Операторы этого типа называются „векторными операторами“.

Соотношение (15.11) показывает, что оператор $(Rr, s) = (r', s)$ для Rr -компоненты спина получается из оператора (r, s) для r -компоненты спина путем преобразования с $u(R)^{-1}$ (т. е. с O_R^{-1}).

В теории спина изложение чаще всего начинают прямо с (20.22a), положив это равенство в основу всей теории.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Линейность и унитарность операторов вращения

Пусть $\bar{\Phi}$ — волновая функция, приписанная вторым наблюдателем тому состоянию, которое первый наблюдатель описывает волновой функцией Φ . Воспользуемся аналогичными обозначениями для всех других состояний. Тогда, согласно (20.8), для всех функций Ψ и Φ имеем

$$|(\Psi, \Phi)| = |(\bar{\Psi}, \bar{\Phi})|. \quad (20.8')$$

В действительности (20.8') справедливо только в том случае, если Ψ и Φ соответствуют физическим состояниям и, следовательно, нормированы. В противном случае мы вообще не можем рассматривать „второе описание“ состояния Φ , так как только нормированные $\bar{\Phi}$ представляют состояния. Однако полезно определить функции $\bar{\Phi}'$ и для ненормированных Φ' . А именно, положим $\bar{\Phi}' = a\bar{\Phi}$, если $\Phi' = a\Phi$, причем Φ нормирована. Тогда (20.8') справедливо для всех функций.

Кроме того, (20.8') не меняется, если умножить Ψ и Φ на постоянные с абсолютной величиной 1. Покажем, что эти постоянные c_Ψ, c_Φ можно выбрать так, чтобы выполнялось не только соотношение

$$|(O_R\Psi, O_R\Phi)| = |(\Psi, \Phi)|, \quad (20.8)$$

но и соотношения

$$\begin{aligned} (O_R\Psi, O_R\Phi) &= (\Psi, \Phi), \\ O_R(a\Psi + b\Phi) &= aO_R\Psi + bO_R\Phi, \end{aligned} \quad (20.8a)$$

для всех $c_\Psi \bar{\Psi} = O_R\Psi$ и $c_\Phi \bar{\Phi} = O_R\Phi$, где a и b — произвольные постоянные. Трудность в переходе от (20.8) к (20.8a) заключается

в том, что для (20.8) требуется только равенство абсолютных величин скалярных произведений $(\mathbf{O}_R\Psi, \mathbf{O}_R\Phi)$ и (Ψ, Φ) , тогда как для (20.8а) нужно, чтобы фазы также были равны, причем для всех функций одновременно.

Если функции Ψ_1, Ψ_2, \dots образуют полную ортогональную систему, то тем же свойством обладают и $\bar{\Psi}_1, \bar{\Psi}_2, \dots$. Из соотношения $(\Psi_i, \Psi_k) = \delta_{ik}$ и (20.8') следует, что $(\bar{\Psi}_i, \bar{\Psi}_k) = \delta_{ik}$ и, если не существует функции, ортогональной всем Ψ_i , то не может существовать функции, ортогональной всем $\bar{\Psi}_i$.

Рассмотрим теперь функции \bar{F}_x , которые соответствуют функциям $F_x = \Psi_1 + \Psi_x$ при $x = 1, 2, 3, 4, \dots$. Если \bar{F}_x разложить по полной ортогональной системе $\bar{\Psi}_1, \bar{\Psi}_2, \dots$, то все коэффициенты разложения $(\bar{\Psi}_x, \bar{F}_x)$ будут равны нулю, кроме коэффициентов при $\bar{\Psi}_1$ и $\bar{\Psi}_x$, которые по абсолютной величине равны 1, так как (Ψ_λ, F_x) не обращается в нуль только при $\lambda = 1$ и $\lambda = x$; для этих же значений λ скалярное произведение равно единице. Таким образом, имеем

$$\bar{F}_x = y_x(\bar{\Psi}_1 + x_x\bar{\Psi}_x), \quad |y_x| = |x_x| = 1 \quad (\text{при } x = 2, 3, \dots). \quad (20.23)$$

Выберем теперь значение одной из постоянных $c_{\Psi_1} = 1$ и запишем $c_{\Psi_x} = x_x$ и $c_{F_x} = 1/y_x$. Тогда

$$\mathbf{O}_R\Psi_1 = \bar{\Psi}_1, \quad \mathbf{O}_R\Psi_x = c_{\Psi_x}\bar{\Psi}_x = x_x\bar{\Psi}_x, \quad (20.24)$$

$$\mathbf{O}_R(\Psi_1 + \Psi_x) = \mathbf{O}_R F_x = c_{F_x}\bar{F}_x = \frac{\bar{F}_x}{y_x} = \mathbf{O}_R\Psi_1 + \mathbf{O}_R\Psi_x.$$

Пусть теперь Φ является произвольной функцией, разложенной по функциям Ψ_x :

$$\Phi = a_1\Psi_1 + a_2\Psi_2 + a_3\Psi_3 + \dots \quad (20.25)$$

Разложим $\bar{\Phi}$ по полной ортогональной системе функций $\mathbf{O}_R\Psi_1, \mathbf{O}_R\Psi_2, \dots$

$$\bar{\Phi} = \bar{a}_1\mathbf{O}_R\Psi_1 + \bar{a}_2\mathbf{O}_R\Psi_2 + \bar{a}_3\mathbf{O}_R\Psi_3 + \dots$$

Таким образом,

$$|\bar{a}_x| = |(\mathbf{O}_R\Psi_x, \bar{\Phi})| = |(x_x\bar{\Psi}_x, \bar{\Phi})| = |(\Psi_x, \Phi)| = |a_x| \quad (20.26),$$

и, в частности, $|\bar{a}_1| = |a_1|$. Поэтому мы выберем $c_\Phi = a_1/\bar{a}_1$, так что

$$\mathbf{O}_R\Phi = c_\Phi\bar{\Phi} = a_1\mathbf{O}_R\Psi_1 + a'_2\mathbf{O}_R\Psi_2 + a'_3\mathbf{O}_R\Psi_3 + \dots \quad (20.27)$$

К тому же $|a'_x| = |a_x|$. В действительности окажется, что $a'_x = a_x$. Чтобы показать это, применим (20.8) к паре функций $F_x = \Psi_1 + \Psi_x$ и Φ . Прежде всего мы находим

$$|(F_x, \Phi)| = |(\Psi_1 + \Psi_x, \Phi)| = |a_1 + a_x|.$$

Аналогичным образом, поскольку \bar{F}_x и $\bar{\Phi}$ отличаются от $\mathbf{O}_R F_x$ и $\mathbf{O}_R \Phi$ только постоянным множителем с модулем 1,

$$\begin{aligned} |(\bar{F}_x, \bar{\Phi})| &= |(\mathbf{O}_R F_x, \mathbf{O}_R \Phi)| = \\ &= |(\mathbf{O}_R \Psi_1 + \mathbf{O}_R \Psi_x, a_1 \mathbf{O}_R \Psi_1 + a'_2 \mathbf{O}_R \Psi_2 + \dots)| = |a_1 + a'_x|. \end{aligned}$$

Следовательно, $|a_1 + a_x|^2 = |a_1 + a'_x|^2$ или

$$|a_1|^2 + a_1^* a'_x + a_1 a'_x{}^* + |a'_x|^2 = |a_1|^2 + a_1^* a_x + a_1 a_x^* + |a_x|^2.$$

Величины $a'_x{}^*$ можно исключить из этого соотношения, пользуясь равенством $a'_x a'_x{}^* = a_x a_x^*$, в результате чего для a'_x получаем квадратное уравнение

$$a_1^* a'^2_x - (a_1^* a_x + a_1 a_x^*) a'_x + a_1 |a_x|^2 = 0. \quad (20.28)$$

Из (20.28) следует, что либо

$$a'_x = a_x, \quad \text{либо} \quad a'_x = \frac{a_x^* a_1}{a_1^*}. \quad (20.29)$$

В первом случае для каждой функции $\Phi = \sum_x a_x \Psi_x$ и $\Psi = \sum_x b_x \Psi_x$

$$\mathbf{O}_R \Phi = \sum_x a_x \mathbf{O}_R \Psi_x, \quad \mathbf{O}_R \Psi = \sum_x b_x \mathbf{O}_R \Psi_x; \quad (20.30)$$

а также

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R (a\Phi + b\Psi) &= \mathbf{O}_R \sum_x (aa_x + bb_x) \Psi_x = \\ &= \sum_x (aa_x + bb_x) \mathbf{O}_R \Psi_x = a \mathbf{O}_R \Phi + b \mathbf{O}_R \Psi, \end{aligned}$$

так что оператор \mathbf{O}_R действительно является *линейным*. Далее

$$(\mathbf{O}_R \Psi, \mathbf{O}_R \Phi) = \left(\sum_x b_x \mathbf{O}_R \Psi_x, \sum_\lambda a_\lambda \mathbf{O}_R \Psi_\lambda \right) = \sum_{x\lambda} b_x^* a_\lambda \delta_{x\lambda} = \sum_x b_x^* a_x$$

и, кроме того,

$$(\Psi, \Phi) = \left(\sum_x b_x \Psi_x, \sum_\lambda a_\lambda \Psi_\lambda \right) = \sum_{x\lambda} b_x^* a_\lambda \delta_{x\lambda} = \sum_x b_x^* a_x.$$

Оператор \mathbf{O}_R является также *унитарным*, тем самым соотношение (20.8а) доказано.

Необходимо еще показать, что второе возможное значение a'_x в (20.29) не может осуществляться. С этой целью подставим

$$\mathbf{O}_R \Phi = \mathbf{O}_R \sum_x a_x \Psi_x = \sum_x a_x^* \mathbf{O}_R \Psi_x \quad (20.31)$$

вместо

$$\mathbf{O}_R \Phi = \mathbf{O}_R \sum_x a_x \Psi_x = \frac{a_1}{a_1^*} \sum_x a_x^* \mathbf{O}_R \Psi_x,$$

т. е. умножим $\mathbf{O}_R \Phi$ на a_1^*/a_1 . Это не может, разумеется, изменить содержания описания.

Рассмотрим теперь две собственные функции оператора Гамильтона, т. е. два стационарных состояния $\chi = \sum_x u_x \Psi_x$ и $\chi' = \sum_x u'_x \Psi_x$ с различными энергиями E и E' . Тогда

$$\chi e^{-i \frac{E}{\hbar} t} + \chi' e^{-i \frac{E'}{\hbar} t} = \sum_x \left(u_x e^{-i \frac{E}{\hbar} t} + u'_x e^{-i \frac{E'}{\hbar} t} \right) \Psi_x \quad (20.32)$$

будет решением зависящего от времени уравнения Шредингера. При втором описании, в силу (20.31), функция

$$\mathbf{O}_R \chi = \sum_x u_x^* \mathbf{O}_R \Psi_x$$

должна соответствовать состоянию χ , а функция

$$\mathbf{O}_R \chi' = \sum_x u_x'^* \mathbf{O}_R \Psi_x$$

состоянию χ' . В то же время энергии при втором описании по-прежнему равны E и E' . Поэтому функция

$$e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \mathbf{O}_R \chi + e^{-i \frac{E'}{\hbar} t} \mathbf{O}_R \chi' = \sum_x \left(u_x^* e^{-i \frac{E}{\hbar} t} + u_x'^* e^{-i \frac{E'}{\hbar} t} \right) \mathbf{O}_R \Psi_x \quad (20.33)$$

также должна быть решением уравнения Шредингера, представляющим состояние, совпадающее с состоянием (20.32) при $t=0$, и, следовательно, представляющим то же самое состояние в течение всех последующих моментов времени. Но это невозможно, так как, согласно (20.31),

$$\sum_x \left(u_x e^{-i \frac{E}{\hbar} t} + u_x' e^{-i \frac{E'}{\hbar} t} \right)^* \mathbf{O}_R \Psi_x$$

соответствует состоянию (20.32), которое совпадает с (20.33) при $t \neq 0$, только в случае, если $E = E'$. Поэтому вторая возможность в (20.29) приводит к противоречию, так что выбор величины c , использованный в (20.24) и (20.27), приводит к первой

возможности в (20.29). Отсюда следует *линейность и унитарность* операторов O_R .

Таким путем мы приходим к важному результату, что два физически эквивалентных описания — после соответствующего изменения свободных констант, волновых функций — могут быть преобразованы одно в другое путем *канонического преобразования*. Следует, однако, заметить, что для исключения второй возможности, соответствующей „антиунитарной“ функции (20.31), необходимо рассматривать также временную зависимость волновых функций. Точнее, было постулировано, что если состояние Φ по прошествии промежутка времени t превращается в состояние Φ' , то состояние $\bar{\Phi}$ в течение того же промежутка времени превращается в состояние $\bar{\Phi}'$. Это предположение является оправданным и действительно необходимым для настоящего обсуждения, но оно окажется непригодным при рассмотрении операции „отражения времени“ в гл. 26.

КВАНТОВОЕ ЧИСЛО ПОЛНОГО МОМЕНТА КОЛИЧЕСТВА ДВИЖЕНИЯ

1. В формуле преобразования предыдущей главы [см. (20.19)], которая записывается в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R \Phi(x, y, z, s) &= \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2}s, \frac{1}{2}t} \mathbf{P}_R \Phi(x, y, z, t) = \\ &= \sum_{t=\pm 1} \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2}s, \frac{1}{2}t} \Phi(x'', y'', z'', t), \end{aligned} \quad (21.1)$$

R означает чистое вращение. Если мы хотим записать волновую функцию в системе координат, полученной из первоначальной путем несобственного вращения, сначала можно произвести инверсию

$$x' = -x, \quad y' = -y, \quad z' = -z, \quad (21.2)$$

а затем — вращение. Таким образом, остается лишь вопрос о том, как волновая функция $\mathbf{O}_I \Phi$ состояния Φ представляется наблюдателю, связанному с системой координат, оси которой направлены *противоположно* осям первоначальной системы.

Рассмотрим прежде всего состояние $u_s \psi(x, y, z)$. В „бесспиновых“ опытах оно ведет себя для первого наблюдателя так, как если бы его волновая функция была ψ , и поэтому для наблюдателя в отраженной системе координат — так, как если бы его волновая функция была $\mathbf{P}_I \psi$, где

$$\mathbf{P}_I \psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z). \quad (21.2)$$

Следовательно, $\mathbf{O}_I u_s \psi(x, y, z) = u'_s \cdot \mathbf{P}_I \psi(x, y, z)$. Магнитный момент в состоянии $u_s \psi(x, y, z)$ имеет заданное направление. При инверсии координат это направление переходит в противоположное, так как магнитный момент является *аксиальным* вектором. Но противоположное направление обозначено в новой системе координат точно так же, как и первоначальное направление в старой системе. Для второго наблюдателя направление спина такое же, как и для первого, и множитель u'_s функции $\mathbf{P}_I \psi$ в $\mathbf{O}_I u_s \psi(x, y, z)$ равен u_s .

Мы знаем, что магнитный диполь может быть всегда заменен круговым током. Если этот круговой ток лежит, скажем, в плоскости $X'Y'$ и направлен от X' к Y' , то он также лежит в плоскости $X'Y'$ и направлен от X' к Y' .

Следовательно, для всех u_s и всех $\psi(x, y, z)$ имеем

$$\mathbf{O}_I u_s \psi(x, y, z) = u_s \mathbf{P}_I \psi(x, y, z) = \mathbf{P}_I u_s \psi(x, y, z), \quad (21.3)$$

с точностью постоянного множителя, который может еще зависеть от u и ψ . Но можно показать, точно так же, как это было сделано после соотношений (20.8а), что эта постоянная должна иметь одну и ту же величину для всех u и всех ψ , если мы требуем линейности операторов \mathbf{O}_I . Поскольку \mathbf{O}_I уже содержит совершенно произвольный множитель, эта постоянная может быть полностью опущена. Далее, так как всякую функцию $\Phi(x, y, z, s)$ можно записать в виде линейной комбинации функций вида $u_s \psi(x, y, z)$, то из (21.3) и свойства линейности операторов \mathbf{O}_I и \mathbf{P}_I следует, что $\mathbf{O}_I \equiv \mathbf{P}_I$:

$$\mathbf{O}_I \Phi(x, y, z, s) = \mathbf{P}_I \Phi(x, y, z, s) = \Phi(-x, -y, -z, s). \quad (21.4)$$

Оператор \mathbf{O}_I , осуществляющий инверсию (21.2) системы координат, вовсе не действует на спиновые координаты; он задается соотношением (21.4). Мы имеем $\mathbf{O}_I^2 = 1$ или $\mathbf{O}_I \mathbf{O}_I \Phi = \Phi$; таким образом, тождественный оператор и оператор \mathbf{O}_I образуют группу, изоморфную группе отражений.

В соотношениях (21.1) и (21.4) мы имеем формулы преобразования волновых функций при произвольном изменении осей. Кроме того, эти соотношения справедливы не только для электронов, но и для протонов. Однако магнитный момент протона гораздо меньше, чем магнитный момент электрона (масса протона примерно в 1840 раз больше), и поэтому не так легко доступен наблюдению, как магнитный момент, связанный со спином электрона. В дальнейшем изложении мы не будем учитывать спин ядра.

Соотношения (21.1) и (21.4) остаются также справедливыми без существенных изменений в релятивистской теории электрона Дирака¹⁾. Согласно последней, волновая функция состоит не из двух функций координат $\Phi(x, y, z, -1)$ и $\Phi(x, y, z, 1)$, а из четырех. Наряду с s , можно ввести пятую координату s' , которая также может принимать два значения. Тогда для чистых вращений соотношение (21.1) остается без изменений: s' вообще не участвует в этом преобразовании; с другой стороны, при инверсиях два значения s' меняются местами.

2. Соотношения (21.1) и (21.4) относятся к системе, содержащей только один электрон. В случае нескольких электронов

¹⁾ J. A. G a u p t, Proc. Roy. Soc., A124, 163 (1929).

волновая функция $\Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n)$ содержит спиновые координаты всех частиц, как и их декартовы координаты. Скалярное произведение двух функций Φ и G равно

$$(\Phi, G) = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_n=\pm 1} \int \int \dots \int_{-\infty}^{\infty} \Phi(x_1, \dots, s_n)^* \times \\ \times G(x_1, \dots, s_n) dx_1 \dots dz_n. \quad (21.5)$$

В простой теории без спина оператор P_R действовал на все тройки координат, притом на все одинаковым образом. Аналогичным образом, оператор O_R , который в теории Паули осуществляет преобразование к другой системе осей, действует теперь на все координаты x_k, y_k, z_k и s_k точно так же, как он действует на x, y, z и s в (21.1) и (21.4). Таким образом, имеем

$$O_R \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \sum_{t_1, \dots, t_n} \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2}s_1, \frac{1}{2}t_1} \dots \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2}s_n, \frac{1}{2}t_n} \times \\ \times P_R \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \dots, x_n, y_n, z_n, t_n) \quad (21.6)$$

и

$$O_I \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = P_I \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \Phi(-x_1, -y_1, -z_1, s_1, \dots, -x_n, -y_n, -z_n, s_n). \quad (21.7)$$

Оператор O_R является произведением операторов P_R и Q_R , первый из которых действует только на декартовы координаты:

$$P_R \Phi(x'_1, y'_1, z'_1, s_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n, s_n) = \\ = \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n). \quad (21.6a)$$

Здесь x'_k, y'_k, z'_k получаются из x_k, y_k, z_k путем вращения R . Второй оператор действует только на спиновые координаты:

$$Q_R \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \sum_{t_1=\pm 1} \dots \sum_{t_n=\pm 1} \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2}s_1, \frac{1}{2}t_1} \dots \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2}s_n, \frac{1}{2}t_n} \times \\ \times \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \dots, x_n, y_n, z_n, t_n). \quad (21.6b)$$

Поскольку система спиновых координат может принимать 2^n различных наборов значений, оператор Q_R эквивалентен 2^n -мерной матрице; ее строки и столбцы нумеруются n индексами, причем

каждый индекс может иметь значения ± 1 , соответствующие двум возможным значениям спиновых координат. Матричной формой Q_R является

$$Q_R = \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R) \times \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R) \times \dots \times \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R), \quad (21.6в)$$

$$(Q_R)_{s_1 s_2 \dots s_n; t_1 t_2 \dots t_n} = \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2} s_1, \frac{1}{2} t_1} \dots \mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)_{\frac{1}{2} s_n, \frac{1}{2} t_n}.$$

Все операторы P коммутируют с операторами Q_R :

$$P_S Q_R = Q_R P_S \quad (21.8)$$

и, в частности,

$$O_R = P_R Q_R = Q_R P_R.$$

Кроме того, оператор $O_I = P_I$ коммутирует со всеми P_R и, следовательно, в силу (21.8), со всеми O_R , где R — любое чистое вращение.

Операторы Q_R определяются вращением лишь с точностью до знака, так как $\mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)$ имеет свободный знак. Для четного числа электронов эту неоднозначность можно устранить условием, чтобы все $\mathfrak{D}^{(\frac{1}{2})}(R)$ в (21.6) и (21.6в) брались с одним и тем же знаком. Для нечетного числа электронов оператор Q_R невозможно сделать однозначным.

3. Если мы переходим сначала к координатной системе, повернутой на R , а затем — к системе координат, повернутой относительно этой последней на S , то волновая функция Φ преобразуется сначала в $O_R \Phi$, а затем — в $O_S O_R \Phi$. Но переход к той же самой системе координат осуществляется одним вращением SR . В этом случае получается волновая функция $O_{SR} \Phi$, которая может отличаться от $O_S O_R \Phi$ лишь постоянным множителем. Далее, поскольку $O_S O_R$ и O_{SR} линейны и унитарны, этот множитель одинаков для всех волновых функций и может зависеть только от вращений S и R :

$$O_{SR} = c_{S,R} O_S O_R. \quad (21.9)$$

Поскольку преобразование к иной системе координат всегда можно выполнить с помощью линейного унитарного оператора, соотношение (21.9) не использует никаких специальных предположений теории Паули и является необходимым следствием инвариантности системы уравнений относительно пространственных вращений. В конце этой главы мы проведем дальнейшее исследование этого равенства и получим ряд следствий, которые должны выполняться в любой квантовой теории.

Соотношение (21.9) можно, разумеется, проверить вычислением. Прежде всего в силу (21.8)

$$O_S O_R = P_S Q_S P_R Q_R = P_S P_R Q_S Q_R = P_{SR} Q_S Q_R.$$

Для четного числа электронов матрицы (21.6в), представляющие собой матричный вид операторов Q , образуют однозначное представление группы вращений, так что $Q_S Q_R = Q_{SR}$ и мы имеем

$$O_S O_R = P_{SR} Q_S Q_R = P_{SR} Q_{SR} = O_{SR}. \quad (21.10a)$$

В этом случае в (21.9) $c_{S,R} = 1$ и операторы O_R образуют группу, изоморфную группе чистых вращений. Следовательно, в этом случае можно определить функции, которые по отношению к операторам O_R принадлежат одной строке некоторого неприводимого представления или просто некоторому неприводимому представлению группы вращений.

Для нечетного числа электронов матрицы (21.6в) образуют двузначное представление группы чистых вращений; поскольку $Q_S Q_R = \pm Q_{SR}$,

$$O_S O_R = P_{SR} Q_S Q_R = \pm P_{SR} Q_{SR} = \pm O_{SR}. \quad (21.10b)$$

Постоянная $c_{S,R} = \pm 1$ в (21.9), и операторы O_R уже не изоморфны группе вращений. В силу двузначности операторов Q_R каждому вращению соответствуют два оператора $+O_R$ и $-O_R$.

Так как в гомоморфизме унитарной группы¹⁾ на группу вращений каждому вращению соответствуют две унитарные матрицы $u = \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)$ и $u = -\mathfrak{D}^{(1/2)}(R)$, можно попытаться установить однозначное соответствие между O и u . Это можно осуществить, если каждому u сопоставить $O_u = Q_u \cdot P_{R_u}$ и принять, что $u \times u \times \dots \times u$ является матричной формой оператора Q_u в соответствии с (21.6в), тогда как R_u является вращением, соответствующим u в гомоморфизме. Тогда каждый оператор Q_u однозначно соответствует одной матрице u . Так как вращения R_u также однозначно соответствуют матрицам u , то тем же свойством обладают и операторы P_R . Кроме того, из соотношения

$$(u \times u \times \dots \times u) \cdot (v \times v \times \dots \times v) = uv \times uv \times \dots \times uv,$$

и из $R_u R_v = R_{uv}$ следует, что $P_{R_u} P_{R_v} = P_{R_{uv}}$ и поэтому

$$O_u O_v = O_{uv}.$$

¹⁾ Точнее, группы двумерных унитарных матриц с определителем 1.

Таким образом, для нечетного числа электронов функции f_{-j} , f_{-j+1} , ..., f_{j-1} , f_j , для которых справедливо соотношение

$$\mathbf{O}_u f_{\mu}^{(j)} = \sum_{\mu'=-j}^j \mathbf{u}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu',\mu} f_{\mu'}^{(j)}, \quad (21.11)$$

принадлежат различным строкам представления $\mathbf{u}^{(j)}$ унитарной группы. Следовательно, они удовлетворяют соотношениям, выведенным в гл. 12 для функций, принадлежащих неприводимым представлениям *любой* группы.

В дальнейшем изложении вместо (21.11) всегда будем пользоваться соотношением

$$\mathbf{O}_R f_{\mu}^{(j)} = \pm \sum_{\mu'=-j}^j \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu',\mu} f_{\mu'}^{(j)}; \quad (21.11a)$$

может показаться, что (21.11) вытекает из (21.11a) лишь с точностью до знака:

$$\mathbf{O}_u f_{\mu}^{(j)} = \pm \sum_{\mu'} \mathbf{u}^{(j)}(\mathbf{u})_{\mu',\mu} f_{\mu'}^{(j)}. \quad (21.11b)$$

Действительно, всегда выводится именно (21.11). Кроме того, из (21.11a) следует (21.11), а не (21.11b). Чтобы убедиться в том, что нижний знак в (21.11b) исключается, предположим, что он верен. Тогда мы могли бы непрерывно преобразовать \mathbf{u} в единичную матрицу. При этом обе части (21.11b) изменяются непрерывно, так что всюду нужно было бы сохранять нижний знак. Но для $\mathbf{u} = \mathbf{1}$ соотношение (21.11b) с нижним знаком имеет вид

$$\mathbf{O}_1 f_{\mu}^{(j)} = - \sum_{\mu'} \delta_{\mu',\mu} f_{\mu'}^{(j)} = - f_{\mu}^{(j)},$$

что заведомо неверно, так как \mathbf{O}_1 — тождественный оператор, который должен оставлять неизменной любую функцию. Поэтому в (21.11b) верным является лишь верхний знак. Следовательно, (21.11a) действительно совпадает с (21.11); мы предпочитаем пользоваться формулой (21.11a), так как в ней подчеркивается значение операции \mathbf{O} как пространственного вращения.

Пусть далее в соотношении (21.11) $\mathbf{u} = -\mathbf{1}$. Тогда \mathbf{O}_{-1} отличается знаком от тождественного оператора, так как $\mathbf{P} = \mathbf{P}_E$ является положительным, а $-1 \times -1 \times \dots \times -1$ в (21.6в) — отрицательным тождественными операторами (мы имеем дело с нечетным числом электронов). Тогда из (21.11) вытекает, что $\mathbf{u}^{(j)}(-\mathbf{1}) = -\mathbf{1}$, откуда, согласно гл. 15, следует, что j должно быть полуцелым. Для нечетного числа электронов волновая функция может принадлежать только нечетному представлению унитарной группы или группы операторов \mathbf{O}_u и, следовательно,

двузначному представлению группы вращений. Естественно, что для четного числа электронов появляются только регулярные представления группы вращений (или четные представления унитарной группы).

Усложнение с двузначными представлениями возникают вследствие того, что коэффициенты $c_{S,R}$ в (21.9) могут быть равны как -1 , так и $+1$; операторы O , выражающие инвариантность описания при пространственных вращениях, не образуют группы, изоморфной группе вращений, но образуют группу, изоморфную унитарной группе.

4. В теории, учитывающей спин, оператор Гамильтона H уравнения Шредингера $H\Psi = E\Psi$ для энергии E не является больше просто оператором, действующим только на декартовы координаты, как это имело место в предыдущих исследованиях. Силы, возникающие вследствие наличия магнитного момента у электрона, приводят к необходимости введения дополнительных членов, значение которых мы обсудим ниже. Хотя точный вид этих членов вызывает еще некоторые сомнения, ясно, что нельзя отдавать предпочтения какому-либо направлению в пространстве, пока нет внешнего магнитного или электрического поля; если Ψ_μ является стационарным состоянием, то повернутое состояние $O_R\Psi_\mu$ или $O_u\Psi_\mu$ также стационарно, причем оба они имеют одинаковую энергию. Отсюда следует, что $O_R\Psi_\mu$ и $O_u\Psi_\mu$ могут быть представлены в виде линейной комбинации других собственных функций того же собственного значения:

$$O_R\Psi_\mu = \sum_y D(R)_{y\mu} \Psi_y, \quad \text{или} \quad O_u\Psi_\mu = \sum_y D(u)_{y\mu} \Psi_y. \quad (21.12)$$

Из $O_S O_R = O_{SR}$ или, для нечетного числа электронов, из $O_S O_R = \pm O_{SR}$ (или $O_u O_v = O_{uv}$) можно заключить, как обычно, что

$$D(S)D(R) = D(SR), \quad (21.13a)$$

или, для нечетного числа электронов,

$$D(S)D(R) = \pm D(SR) \quad \text{или} \quad D(u)D(v) = D(uv). \quad (21.13b)$$

Матрицы $D(R)$ образуют однозначное представление группы вращений для четного числа электронов и двузначное представление группы вращений (или однозначное представление унитарной группы) для нечетного числа электронов.

Так же как и в гл. 12, можно заключить, что эти представления могут рассматриваться как неприводимые¹⁾. Для четного

¹⁾ Рассматривая собственное значение как несколько случайно совпавших собственных значений,

числа электронов $D(R)$ могут иметь вид $\mathfrak{D}^{(0)}, \mathfrak{D}^{(1)}, \mathfrak{D}^{(2)}, \dots$; для нечетного числа электронов они являются одним из представлений $\mathfrak{D}^{(1/2)}, \mathfrak{D}^{(3/2)}, \mathfrak{D}^{(5/2)}, \dots$ (причем $D(u)$ равны $u^{(1/2)}, u^{(3/2)}, u^{(5/2)}, \dots$):

$$O_R \Psi_{\mu}^{(j)} = \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu' \mu} \Psi_{\mu'}^{(j)}. \quad (21.12a)$$

Верхний индекс этих представлений называется квантовым числом полного момента количества движения и обозначается буквами J или J ; это число является целым для четного числа электронов и полуцелым — для нечетного числа („чередование мультиплетности“). Номер строки μ , которой принадлежат собственные функции, и здесь также называется магнитным квантовым числом; μ также является целым для четного числа электронов и полуцелым — для нечетного числа.

5. Пусть S — оператор, симметричный относительно O_R , т. е. скаляр, на который не оказывает влияния изменение направления осей. Тогда мы знаем, что матричный элемент

$$S_{NJ\mu; N'J'\mu'} = (\Psi_{\mu}^{NJ}, S \Psi_{\mu'}^{N'J'}) = \delta_{JJ'} \delta_{\mu\mu'} S_{NJ; N'J'} \quad (21.14)$$

с двумя собственными функциями, принадлежащими различным представлениям $\mathfrak{D}^{(j)}$ и $\mathfrak{D}^{(j')}$ или различным строкам одного и того же представления, должен *обращаться* в нуль. С другой стороны, если в (21.14) $j = j'$ и $\mu = \mu'$, то выражение (21.14) имеет один и тот же вид при всех μ , т. е. не зависит от магнитного квантового числа.

Теперь естественно найти аналогичные формулы для векторных и тензорных операторов. Скалярный оператор был определен требованием его независимости от выбора системы осей; примером такой величины является энергия, тогда как X -компонента дипольного момента не является такой величиной. Скалярная величина соответствует одному и тому же оператору для всех наблюдателей. С другой стороны, поскольку первый наблюдатель приписывает оператор $O_R^{-1} S O_R$ физической величине, которой второй наблюдатель приписывает оператор S , должно иметь место соотношение

$$O_R^{-1} S O_R = S, \quad S O_R = O_R S. \quad (21.15)$$

Таким образом, симметричный оператор коммутирует со всеми преобразованиями.

В противоположность этому, если V_x, V_y, V_z являются X' -, Y' -, Z' -компонентами *векторного* оператора, то X -, Y -, Z -ком-

понентами этого оператора будут ¹⁾

$$\begin{aligned} \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}_x \mathbf{O}_R &= R_{xx} \mathbf{V}_x + R_{xy} \mathbf{V}_y + R_{xz} \mathbf{V}_z, \\ \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}_y \mathbf{O}_R &= R_{yx} \mathbf{V}_x + R_{yy} \mathbf{V}_y + R_{yz} \mathbf{V}_z, \\ \mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}_z \mathbf{O}_R &= R_{zx} \mathbf{V}_x + R_{zy} \mathbf{V}_y + R_{zz} \mathbf{V}_z. \end{aligned} \quad (21.16)$$

Таким образом, \mathbf{V}_x , \mathbf{V}_y , \mathbf{V}_z не преобразуются по представлению $\mathfrak{D}^{(0)}$, как \mathbf{S} ; при преобразовании к новой системе координат они не остаются неизменными, а преобразуются с помощью матрицы вращения \mathbf{R} . Далее, $\mathfrak{D}^{(1)}$ как представление группы вращений эквивалентно представлению матрицами \mathbf{R} ; для дальнейших вычислений вместо X -, Y -, Z -компонент удобно пользоваться компонентами:

$$\begin{aligned} \mathbf{V}^{(-1)} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_x + \frac{i}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_y, \\ \mathbf{V}^{(0)} &= \mathbf{V}_z, \\ \mathbf{V}^{(1)} &= \frac{-1}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_x + \frac{i}{\sqrt{2}} \mathbf{V}_y. \end{aligned} \quad (21.17)$$

Для этих компонент в силу (15.34) вместо (21.16) имеем

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{V}^{(p)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma=-1}^1 \mathfrak{D}^{(1)}(R)_{p\sigma} \mathbf{V}^{(\sigma)}. \quad (21.16a)$$

В более общем случае можно рассмотреть неприводимый тензорный оператор ранга ω , определенный условием, что его $2\omega + 1$ компонент $\mathbf{T}^{(p)}$ при вращении преобразуются следующим образом:

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{T}^{(p)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{p\sigma} \mathbf{T}^{(\sigma)}. \quad (21.166)$$

Если в (21.16) R заменить на R^{-1} , то в силу $\mathbf{O}_R^{-1} = \mathbf{O}_R^{-1}$ и $\mathfrak{D}^{(\omega)}(R^{-1})_{p\sigma} = \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma p}^*$ получим

$$\mathbf{O}_R \mathbf{T}^{(p)} \mathbf{O}_R^{-1} = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma p}^* \mathbf{T}^{(\sigma)}. \quad (21.16b)$$

¹⁾ Несмотря на сходство систем (11.18a) и (21.16), они выражают совершенно различные соотношения. Первая из них дает компоненты x' вектора во второй системе координат, выраженные через компоненты x в первой системе. Три соотношения (21.16) выражают векторы, направленные по осям X' , Y' , Z' , через векторы, имеющие направления X , Y , Z . Коэффициенты этих двух систем совпадают, так как они образуют вещественную ортогональную матрицу. В более общем случае одна из них была бы транспонированной обратной к другой.

Из этих равенств мы найдем соотношения, аналогичные (21.14), для векторных и тензорных операторов. Чтобы применить (21.16в), подействуем унитарным оператором O_R на оба сомножителя скалярного произведения:

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = (\Psi_{\mu}^{Nj}, T^{(\rho)}\Psi_{\mu'}^{N'j'}); \quad (21.18)$$

тогда получим

$$\begin{aligned} T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} &= (O_R \Psi_{\mu}^{Nj}, O_R T^{(\rho)} O_R^{-1} O_R \Psi_{\mu'}^{N'j'}) = \\ &= \sum_{\nu} \sum_{\sigma} \sum_{\nu'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma\rho} \mathfrak{D}^{(j')}(R)_{\nu'\mu'} T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}. \end{aligned} \quad (21.18a)$$

Если аналогичную формулу для скалярных операторов проинтегрировать по всем вращениям, то соотношения ортогональности непосредственно привели бы к (21.14). Чтобы вычислить интеграл от произведения трех коэффициентов вращения, который нужен для (21.18a), запишем сначала произведение первых двух из них с помощью (17.16б):

$$\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma\rho}^* = \sum_{L=|j-\omega|}^{j+\omega} S_{L\nu\sigma}^{(j\omega)} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\nu+\sigma, \mu+\rho}^* S_{L\rho}^{(j\omega)}.$$

Подставляя это выражение в (21.18a) и используя при интегрировании по всем вращениям соотношения ортогональности (10.12), получаем

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = \sum_{L=|j-\omega|}^{j+\omega} S_{L\mu\rho}^{(j\omega)} \sum_{\nu\sigma\nu'} S_{L\nu\sigma}^{(j\omega)} \frac{\delta_{Lj'} \delta_{\nu+\sigma, \nu'} \delta_{\mu+\rho, \mu'}}{2j'+1} \cdot T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}$$

где обе части равенства разделены на $\int dR$. Это выражение обращается в нуль, если j' не лежит в пределах $|j-\omega|$ и $j+\omega$; при $|j-\omega| \leq j' \leq j+\omega$ это выражение равно

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = S_{j'\mu\rho}^{(j\omega)} \delta_{\mu+\rho, \mu'} T_{Nj; N'j'}. \quad (21.19)$$

где $T_{Nj; N'j'}$ уже не зависит от μ , μ' и ρ ¹⁾.

Эта формула является весьма общей²⁾. Она позволяет получить численное значение отношения $T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} / T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\sigma)}$ „матричных элементов“, т. е. скалярных произведений (21.18), у которых первые множители Ψ_{μ}^{Nj} суть различные собственные функции одного

¹⁾ Величины $T_{Nj; N'j'}$ называются иногда приведенными матричными элементами или „матричными элементами с двойной чертой“ и записываются в виде $(Nj \parallel T \parallel N'j')$.

²⁾ В такой общей форме формулу впервые получил Эккарт [C. Eckart, Rev. Mod. Phys., 2, 305 (1930)].

и того же собственного значения, операторы — различные компоненты одного и того же неприводимого тензора, а вторые множители $\Psi_{\mu}^{N'j'}$ — собственные функции также одного и того же собственного значения (которое может отличаться от собственного значения для функций Ψ_{μ}^{NJ}).

Вернемся к случаю *векторных* операторов, полагая в (21.19) $\omega = 1$. Пользуясь таблицей коэффициентов векторного сложения на стр. 231, мы получаем формулы, аналогичные (21.14), для векторных операторов:

$$V_{NJ\mu; N'j-1\mu-1}^{(-1)} = \sqrt{j+\mu} \sqrt{j+\mu-1} V'_{NJ; N'j-1},$$

$$V_{NJ\mu; N'j-1\mu}^{(0)} = -\sqrt{j+\mu} \sqrt{j-\mu} \sqrt{2} V'_{NJ; N'j-1}, \quad (21.19a)$$

$$V_{NJ\mu; N'j-1\mu+1}^{(1)} = \sqrt{j-\mu-1} \sqrt{j-\mu} V'_{NJ; N'j-1},$$

$$V_{NJ\mu; N'j\mu-1}^{(-1)} = \sqrt{j-\mu+1} \sqrt{j+\mu} V'_{NJ; N'j},$$

$$V_{NJ\mu; N'j\mu}^{(0)} = \mu \sqrt{2} V'_{NJ; N'j}, \quad (21.19б)$$

$$V_{NJ\mu; N'j\mu+1}^{(1)} = -\sqrt{j+\mu+1} \sqrt{j-\mu} V'_{NJ; N'j}.$$

$$V_{NJ\mu; N'j+1\mu-1}^{(-1)} = \sqrt{j-\mu+1} \sqrt{j-\mu+2} V'_{NJ; N'j+1},$$

$$V_{NJ\mu; N'j+1\mu}^{(0)} = \sqrt{j-\mu+1} \sqrt{j+\mu+1} \sqrt{2} V'_{NJ; N'j+1}, \quad (21.19в)$$

$$V_{NJ\mu; N'j+1\mu+1}^{(1)} = \sqrt{j+\mu+1} \sqrt{j+\mu+2} V'_{NJ; N'j+1}.$$

Все не перечисленные здесь матричные элементы векторных операторов обращаются в нуль; элементы с $j=j'=0$ также равны нулю. Разумеется, из общих соображений нельзя определить $V'_{NJ; N'j}$. В то время как матричные элементы скалярного оператора равны нулю, если квантовые числа полного момента количества движения или магнитные квантовые числа различаются [j и j' , и (или) μ и μ'], эти квантовые числа могут отличаться на 1 в случае векторных операторов.

При выводе формул (21.19) не делалось никаких предположений о конкретном виде операторов O_R ; поэтому формулы (21.19) должны оставаться справедливыми и в теории, не учитывающей спина, если заменить O_R на P_R и квантовое число полного момента количества движения J на орбитальное квантовое число l . Действительно, мы уже не раз приходили к выводу об обращении в нуль матричных элементов векторных операторов. Например, умножение на

$$x_1 + x_2 + \dots + x_n, \quad y_1 + y_2 + \dots + y_n, \quad z_1 + z_2 + \dots + z_n$$

представляет три компоненты векторного оператора, и мы нашли, что вероятность радиационного перехода из состояния ψ_F в состояние ψ_E , которая определяется матричными элементами

$$(\psi_F, (x_1 + x_2 + \dots + x_n) \psi_E) \text{ и т. д.}$$

обращается в нуль, если разность орбитальных квантовых чисел состояний ψ_F и ψ_E не равна 0 или ± 1 . Далее мы видели, что магнитное квантовое число не меняется, если свет поляризован по оси Z ($\rho = 0$), и меняется на ± 1 , если свет поляризован в направлении оси X или оси Y .

Дополнительный член в уравнении Шредингера, обязанный наличию магнитного поля \mathcal{H}_z в направлении оси Z ,

$$V_z = V^{(0)} = \frac{-ie\hbar\mathcal{H}_z}{2mc} \left[x_1 \frac{\partial}{\partial y_1} + x_2 \frac{\partial}{\partial y_2} + \dots \right. \\ \left. \dots + x_n \frac{\partial}{\partial y_n} - y_1 \frac{\partial}{\partial x_1} - y_2 \frac{\partial}{\partial x_2} - \dots - y_n \frac{\partial}{\partial x_n} \right],$$

является Z -компонентой векторного оператора. В этом случае мы уже фактически вычислили матричные элементы $V_{Nl\mu; N'l'\mu'}$. Средняя из формул (21.196) показывает, что они должны быть пропорциональны магнитному квантовому числу μ . Мы нашли также, что множитель пропорциональности не зависит от N и l и равен $e\hbar\mathcal{H}_z/2mc$.

Формула (21.19) является в определенном смысле аналогом формулы (19.6), в которой в явном виде выражена зависимость собственных функций от ориентации n -лучевика конфигурации. Последние сочетают в одном равенстве, по крайней мере в случае бесспиновой теории, всю информацию о *волновой функции*, которую дает вращательная симметрия системы. Как в элементарной теории, так и в теории с учетом спина формула (21.19) включает всю информацию о *матричных элементах*, которую можно получить из вращательной симметрии, причем без использования какого-либо приближения.

6. Интересно отметить ¹⁾, что существование квантового числа полного момента количества движения, а также равенства (21.19) следуют уже из весьма общего соотношения (21.9), за исключением того, что (21.9) не позволяет решить, является ли число j целым или полуцелым. Нельзя ожидать решения этого вопроса на основе (21.9), так как число электронов не входит в это соотношение.

Если использовать соотношение (21.9) для выяснения поведения (21.13) матриц D при умножении, то вместо (21.13) получается только тот результат, что матрицы $D(R)$, определенные в (21.12),

$$D(SR) = c_{S,R} D(S) D(R), \quad (21.20a)$$

образуют с точностью до множителя представление группы вращений. Однако тождественный элемент по-прежнему представлен единичной матрицей. Сейчас мы покажем, что, умножая каждую матрицу $D(R)$, удовлетворяющую соотношению (21.20a), на соответствующим образом выбранное число c_R , можно получить систему

¹⁾ Оставшаяся часть настоящей главы не существенна для понимания последующих глав.

матриц $\bar{\mathbf{D}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$, которые образуют представление унитарной группы, т. е. для которых

$$\bar{\mathbf{D}}(S)\bar{\mathbf{D}}(R) = \pm \bar{\mathbf{D}}(SR). \quad (21.20)$$

Поэтому, согласно гл. 15, эта система матриц с помощью преобразования подобия может быть расщеплена на представления $\mathfrak{D}^{(0)}$, $\mathfrak{D}^{(1/2)}$, $\mathfrak{D}^{(1)}$. Это означает, что такой набор матриц, к которому сразу приводит соотношение (21.9), дает в сущности однозначные и двузначные представления, рассмотренные в гл. 15.

В частности, набор двумерных матриц, удовлетворяющих соотношению (20.17), содержит либо только постоянные матрицы (если он содержит $\mathfrak{D}^{(0)}$ дважды), либо эквивалентен представлению $\mathfrak{D}^{(1/2)}$, как мы заключили в предыдущей главе.

Сначала образуем представление $\bar{\mathbf{D}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$ из $\mathbf{D}(R)$ и выберем c_R равными $(-1/\lambda)$ -й степени определителя матриц $\mathbf{D}(R)$. Здесь λ — размерность матриц $\mathbf{D}(R)$. Это приводит к тому, что $|\bar{\mathbf{D}}(R)| = 1$:

$$|\bar{\mathbf{D}}(R)| = |c_R \mathbf{1} \cdot \mathbf{D}(R)| = |c_R \cdot \mathbf{1}| \cdot |\mathbf{D}(R)| = c_R^\lambda |\mathbf{D}(R)| = 1. \quad (21.21)$$

Значения постоянных c_R и элементы матриц $\bar{\mathbf{D}}(R)$ не определены еще однозначно, а лишь с точностью до λ -значного корня степени λ из единицы, ω . Таким образом, каждому элементу группы R соответствуют λ матриц, а именно все матрицы, кратные $\mathbf{D}(R)$ и имеющие определитель 1.

Если $\bar{\mathbf{D}}(S)$ умножить на $\bar{\mathbf{D}}(R)$, то получается $\bar{\mathbf{D}}(SR)$. В силу (21.20а), это произведение кратно любой матрице $\bar{\mathbf{D}}(SR)$; его определитель является произведением определителей матриц $\bar{\mathbf{D}}(S)$ и $\bar{\mathbf{D}}(R)$, равным 1.

Из представления $\mathbf{D}(R)$, определенного с точностью до множителя, мы получили многозначное, точнее, λ -значное представление; произведение всякой матрицы $\bar{\mathbf{D}}(S)$ на всякую $\bar{\mathbf{D}}(R)$ дает некоторую матрицу $\bar{\mathbf{D}}(SR)$.

Можно попытаться уменьшить эту многозначность представления, выбирая и сохраняя одну из λ матриц $\bar{\mathbf{D}}(R)$ и опуская остальные. Естественно, что это можно сделать не произвольным образом, а лишь таким путем, чтобы любая из оставленных матриц $\bar{\mathbf{D}}(S)$, будучи умноженной на любую другую из оставленных матриц $\bar{\mathbf{D}}(R)$, давала бы снова одну из оставленных матриц $\bar{\mathbf{D}}(SR)$.

Следуя методу Вейля¹⁾, мы положим в основу этого отбора свойства непрерывности представлений.

Если S и S' — два соседних элемента группы ($S \sim S'$), то для первоначальной формы $D(R)$ мы должны бы иметь

$$D(S) \sim D(S') \quad \text{и} \quad |D(S)| \sim |D(S')|.$$

Из последнего соотношения следует, что λ значений чисел c_S являются попарно соседними со значениями $c_{S'}$. В то же время λ матриц $\bar{D}(S)$ являются попарно соседними с λ матрицами $\bar{D}(S')$, притом так, что какая-либо матрица $\bar{D}(S)$ является соседом одной и только одной матрицы $\bar{D}(S')$, тогда как остальные $\lambda - 1$ матриц существенно отличны, поскольку они получаются из первых путем умножения на число, существенно отличающееся от единицы (корень степени λ из 1).

Если соединить тождественный элемент $E = S(0)$ с элементом $S = S(1)$ непрерывной линией $S(t)$ в пространстве параметров, то можно потребовать, чтобы матрицы $D(S(t))$ пробегали непрерывную последовательность. Тогда, отправляясь от $\bar{D}(S(0)) = \bar{D}(E) = \mathbf{1}$ и следуя вдоль заданного пути $S(t)$, можно получить только одну из λ матриц $\bar{D}(S)$. Мы обозначим ее через $\bar{D}(S)_{S(t)}$. Если путь $S(t)$ деформируется непрерывным образом, а конечные точки его остаются фиксированными, то $\bar{D}(S)_{S(t)}$ никак не меняется, ибо эта матрица может измениться только непрерывно при непрерывной деформации пути, тогда как переход к другой матрице $\bar{D}(S)$ обязательно повлек бы за собой скачок.

Произведение $\bar{D}(S)_{S(t)} \cdot \bar{D}(R)_{R(t)}$ является одной из матриц $\bar{D}(SR)$, которая также получается непрерывным образом из $\bar{D}(E) = \mathbf{1}$. Соответствующий путь проходит сначала от E вдоль $S(t)$ к S ; при этом $D(E) = \mathbf{1}$ переходит непрерывно в $\bar{D}(S)_{S(t)}$; затем путь идет к SR по точкам $S \cdot R(t)$, причем $\bar{D}(S)_{S(t)} = \bar{D}(S)_{S(t)} \cdot \mathbf{1}$ переходит непрерывно в $\bar{D}(S)_{S(t)} \bar{D}(R)_{R(t)}$, проходя через матрицы $\bar{D}(S)_{S(t)} \cdot \bar{D}(R(t))$:

$$\bar{D}(S)_{S(t)} \cdot \bar{D}(R)_{R(t)} = \bar{D}(SR)_{S(t), S \cdot R(t)}. \quad (21.22)$$

Если все пути от E к S могут быть деформированы непрерывным образом один в другой, то пространство параметров односвязно

¹⁾ H. Weyl, Math. Zs., 23, 271; 24, 328, 377, 789 (1925); V. Schreier, Abhandl. Math. Seminar Hamburg, 4, 14 (1926); 5, 233 (1927).

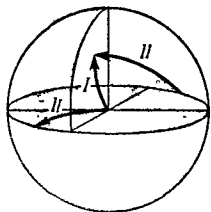
и существует *одна-единственная* матрица $\bar{D}(S) = \bar{D}(S)_{S(t)}$, которую можно получить непрерывным образом из $\bar{D}(E) = 1 = \bar{D}(E)$. Следовательно, матрицы $\bar{D}(S)$ образуют *однозначное представление группы*.

Если пространство параметров многосвязно, то существуют два или более пути $S_1(t)$, $S_2(t)$, ..., которые не могут быть деформированы один в другой непрерывно; соответствующие матрицы $\bar{D}(S)_{S_1(t)}$, ..., $\bar{D}(S)_{S_2(t)}$, ... могут отличаться друг от друга. Представление может быть тогда столь же многозначно, сколько имеется путей от E к S , которые не могут быть деформированы один в другой.

7. Соотношение (21.22) наводит на мысль, что вместо исходной группы следует рассматривать „покрывающую группу“, которая имеет столько элементов $S_{S_1(t)}$, $S_{S_2(t)}$, ... для каждого элемента S первоначальной группы, сколько существует путей $S_1(t)$, $S_2(t)$, ... от E к S , которые не могут быть деформированы один в другой¹⁾. Правило умножения для этой покрывающей группы имеет вид

$$S_{S_1(t)} R_{R_k(t)} = S R_{S_2(t), S \cdot R_k(t)}. \quad (21.22a)$$

Согласно (21.22), матрицы $\bar{D}(S)_{S_i(t)}$ образуют регулярное однозначное представление покрывающей группы. Отсюда следует, что *представление непрерывной группы, определенное с точностью до множителя, можно преобразовать в регулярное представление покрывающей группы путем умножения на соответствующим образом подобранные числа*. Если известны все представления покрывающей группы, то известны также и все представления (с точностью до множителя) исходной группы.

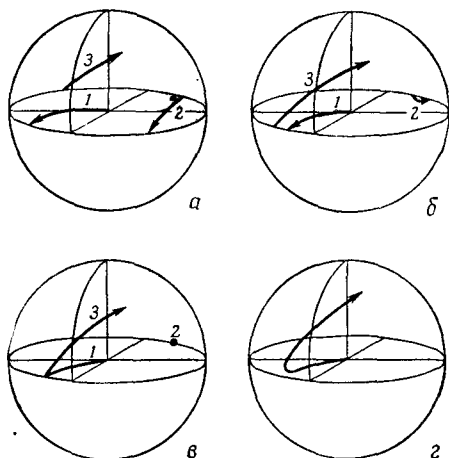


Фиг. 12. Любой элемент группы вращений может быть достигнут от тождественного элемента: либо (I) по непрерывному пути без скачков, либо (II) по непрерывному пути, включающему скачок из некоторой точки в противоположную ей. Эти два типа путей не могут быть деформированы один в другой.

Пространство параметров (см. фиг. 1 на стр. 110) трехмерной группы чистых вращений двусвязно. Произвольной точки можно достичь от E либо непосредственно (I) (фиг. 12), либо путем скачка к противоположной точке (II), причем эти два пути нельзя

¹⁾ Рассматриваемая здесь группа называется также группой Пуанкаре.

деформировать один в другой. (Скачок к противоположной точке не рассматривается в качестве разрыва линии пространства параметров, так как противоположные точки соответствуют одному и тому же вращению.) С другой стороны, путь с двумя скачками к противоположным точкам уже можно преобразовать в путь без скачков, если преобразование выбрать так, чтобы рассматриваемые два скачка вместе компенсировали один другой (фиг. 13).



Фиг. 13. Путь, включающий два скачка в противоположные точки, можно непрерывно деформировать в путь, не имеющий таких скачков, если совместить два скачка, как это показано на схеме.

Таким образом, покрывающая группа имеет вдвое больше элементов, чем группа вращений; следовательно, она изоморфна группе матриц $\mathfrak{D}^{1/2}(R)$. Будучи двузначным представлением группы вращений, это представление является регулярным для покрывающей группы, притом точным, так как каждому вращению сопоставляются две матрицы $\pm \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)$, отличные одна от другой и от всех других $\mathfrak{D}^{(1/2)}(S)$.

Матрицы $\mathfrak{D}^{1/2}(R)$ образуют унитарную группу; она является, следовательно, покрывающей группой трехмерной группы вращений. Ее представления можно разбить на $\mathbf{u}^{(0)}, \mathbf{u}^{(1/2)}, \dots$, и соответственно матрицы $\bar{\mathbf{D}}(R) = c_R \mathbf{D}(R)$ можно разложить на $\pm \mathfrak{D}^{(0)}, \pm \mathfrak{D}^{(1/2)}, \pm \mathfrak{D}^{(1)}, \dots$. Если считать, что матрицы $\mathbf{D}(R)$ находятся в приведенном виде (для этого нужно лишь преобразование к новой

системе линейно независимых функций), то для этих функций получаем

$$\mathbf{O}_R \Psi_{\mu}^{(j)} = \frac{1}{c_R} \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu', \mu} \Psi_{\mu'}^{(j)}, \quad (21.126)$$

причем j можно рассматривать как квантовое число полного момента количества движения собственных функций $\Psi_{-j}^{(j)}, \Psi_{-j+1}^{(j)}, \dots, \Psi_{j-1}^{(j)}, \Psi_j^{(j)}$.

Хотя соотношение (21.126) не вполне эквивалентно равенству (21.12а), оно позволяет вывести большинство правил для полного квантового числа j .

ТОНКАЯ СТРУКТУРА СПЕКТРАЛЬНЫХ ЛИНИЙ

1. В гл. 18 мы вывели правила отбора для орбитального квантового числа, четности и мультиплетного числа в том виде, как они возникают в теории, не учитывающей спин. Если учесть силы, возникающие вследствие наличия спинового магнитного момента электрона, то эти правила уже не будут точными, так как они опираются на предположение о том, что $P_R\Psi$ является собственной функцией оператора энергии, принадлежащей тому же собственному значению, что и Ψ . (Состояние $P_R\Psi$ предполагалось тождественным с точностью до вращения состоянию Ψ .)

Теперь мы знаем, что при учете спина не оператор P_R , а O_R осуществляет вращение состояния; P_R поворачивает только пространственные координаты системы. В соответствии с этим $P_R\Psi$ была бы собственной функцией оператора H только в том случае, если бы оператор H не зависел от спина. В действительности, в H появляются также члены, связанные со спином, так что функция $P_R\Psi$ не является собственной функцией оператора H для собственного значения, отвечающего функции Ψ , и поэтому не может быть записана в виде линейной комбинации собственных функций, принадлежащих этому собственному значению. Следовательно, при учете спина собственные функции не принадлежат какому-либо представлению группы вращений, связанному с операторами P_R , и понятие орбитального квантового числа уже не имеет строгого смысла. Только тогда, когда члены, связанные со спином, малы, и можно получить в хорошем приближении решения действительного уравнения Шредингера даже при пренебрежении ими, что зачастую законно, понятие орбитального квантового числа (и мультиплетного числа) имеет смысл, и только тогда верны правила отбора, выведенные в гл. 18. Ниже мы изложим все это точнее.

Вычисления, выполненные в гл. 18 с помощью операторов P , могут быть проведены также при использовании O вместо P . Поскольку инвариантность гамильтониана относительно операций относится ко *всем* его членам, то получаемые при этом результаты будут точными. Операторы O_R , соответствующие вращениям,

коммутируют с оператором инверсии O_I , и оба они коммутируют с операторами O_P , переставляющими все *четыре* координаты двух или более электронов:

$$O_P \Psi(x_{\alpha_1}, y_{\alpha_1}, z_{\alpha_1}, s_{\alpha_1}, \dots, x_{\alpha_n}, y_{\alpha_n}, z_{\alpha_n}, s_{\alpha_n}) = \\ = \Psi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) \quad (22.1)$$

[здесь P есть перестановка $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \alpha_1 & \alpha_2 & \dots & \alpha_n \end{pmatrix}$]. Полная группа симметрии является прямым произведением группы O_R , описывающей вращения, на группы отражений и перестановок. Представления этого прямого произведения и, следовательно, собственные значения полного уравнения Шредингера, можно характеризовать тремя квантовыми числами или тремя символами. Они указывают представления трех групп, прямое произведение которых дает то представление полной группы симметрии, которому принадлежат собственные функции рассматриваемого собственного значения. Представление $\mathfrak{D}^{(J)}$ группы операторов вращения обсуждалось в предыдущей главе; оно дает квантовое число J полного момента количества движения¹⁾. Представление группы отражений $O_E = 1$, $O_I = P_I$ дает четность. Перейдем теперь к более подробному изучению операторов перестановок O_P . Это изучение приводит к принципу Паули и завершает обсуждение точных свойств симметрии. Оставшаяся часть главы будет посвящена связи этих величин с приближенными понятиями гл. 18, в частности с орбитальным квантовым числом L и мультиплетным числом S .

Полезно разложить перестановки (22.1) всех четырех координат на два множителя, соответствующие двум множителям P_R и Q_R , составляющим O_P . Поэтому мы напомним

$$O_P = P_P Q_P = Q_P P_P, \quad (22.2)$$

где Q_P действует только на спиновые координаты,

$$Q_P \Psi(x_1, y_1, z_1, s_{\alpha_1}, \dots, x_n, y_n, z_n, s_{\alpha_n}) = \\ = \Psi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n), \quad (22.2a)$$

а P_P — только на декартовы координаты

$$P_P \Phi(x_{\alpha_1}, y_{\alpha_1}, z_{\alpha_1}, \sigma_1, \dots, x_{\alpha_n}, y_{\alpha_n}, z_{\alpha_n}, \sigma_n) = \\ = \Phi(x_1, y_1, z_1, \sigma_1, \dots, x_n, y_n, z_n, \sigma_n). \quad (22.2b)$$

¹⁾ В оставшейся части книги мы будем пользоваться символом J для обозначения этого квантового числа.

Поэтому, если в (22.26) заменить Φ на $\mathbf{O}_P\Psi$, то получим

$$\begin{aligned} P_P\mathbf{O}_P\Psi(\dots, x_{\alpha_k}, y_{\alpha_k}, z_{\alpha_k}, \sigma_k, \dots) = \\ = \mathbf{O}_P\Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, \sigma_k, \dots), \end{aligned}$$

а последующая подстановка $\sigma_k = s_{\alpha_k}$ в этом соотношении приводит, в силу (22.2а) и (22.1), непосредственно к соотношению (22.2).

2. Существенное упрощение дальнейшего изложения получается вследствие того, что собственные функции всех *физических* состояний принадлежат антисимметричному представлению по отношению к операторам \mathbf{O}_P :

$$\mathbf{O}_P\Phi = \varepsilon_P\Phi, \quad (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi = 0, \quad (22.3)$$

где ε_P равно либо $+1$, либо -1 в зависимости от того, является ли P четной или нечетной перестановкой. Функции, удовлетворяющие (22.3), называются *антисимметричными функциями*; требование, чтобы все волновые функции были антисимметричными, составляет содержание *принципа Паули*¹⁾.

Принцип Паули не является следствием введенных ранее принципов квантовой механики; можно сказать, что в противоположность зависящему от времени уравнению Шредингера, играющему роль уравнения движения, этот принцип является начальным условием, выполненным для любой системы. Если уравнение (22.3) удовлетворяется в некоторый момент времени, оно, как мы сейчас покажем, удовлетворяется всегда. Из уравнения

$$i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \mathbf{H}\Phi,$$

поскольку \mathbf{H} является оператором, симметричным относительно операторов \mathbf{O}_P и, таким образом, коммутирующим с ними, следует, что

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi = (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)i\hbar \frac{\partial \Phi}{\partial t} = \mathbf{H}(\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi. \quad (22.3a)$$

Но отсюда следует, что $(\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi$ всегда обращается в нуль, если это выражение равнялось нулю в некоторый момент времени. Из (22.3а) заключаем, что скалярное произведение

$$((\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi, (\mathbf{O}_P - \varepsilon_P)\Phi) \quad (22.E.1)$$

постоянно во времени; поэтому оно остается всегда равным нулю, если оно когда-либо было равно нулю. Однако из обращения

¹⁾ W. Heisenberg, Zs. f. Phys., 38, 411 (1926); P. A. M. Dirac, Proc. Roy. Soc., A112, 661 (1926).

в нуль выражения (22.Е.1) следует равенство нулю выражения $(O_P - \varepsilon_P)\Phi$. Мы видим, что принцип Паули по крайней мере совместим с квантовомеханическим уравнением движения.

Важный вывод из того, что все волновые функции принадлежат антисимметричному представлению, относится к разделению системы на несколько частей. Рассмотрим, например, систему из двух атомов гелия, которые взаимодействовали в течение некоторого времени, а затем отделились один от другого. Неприводимое представление симметрической группы четвертого порядка, которому принадлежала волновая функция до разделения атомов, обозначим через $D(P)$. Тогда можно поставить вопрос: каким представлениям симметрической группы второго порядка могут принадлежать состояния атомов гелия после их разделения? Если $D(P)$ является антисимметричным представлением, состояния каждого из атомов гелия после их разделения наверняка также антисимметричны. Тот факт, что одна из частей системы принадлежит определенному представлению, однозначно определяется тем, что полная система принадлежит антисимметричному представлению. То же самое имеет место и в случае, если $D(P)$ является симметричным (тождественным) представлением, но этого уже нельзя сказать о каком-либо ином представлении.

Причина антисимметричного характера всех волновых функций не может быть указана, исходя из общих соображений, а должна рассматриваться как экспериментальный факт¹⁾.

3. В дальнейшем мы будем считать, что оператор Гамильтона разделен на две части:

$$H = H_0 + H_1. \quad (22.4)$$

Первая часть является обычным оператором Шредингера, содержащим энергию взаимодействия зарядов и кинетическую энергию:

$$H_0 = -\hbar^2 \sum_k \frac{1}{2m_k} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) + V(x_1, \dots, z_n). \quad (22.4a)$$

Этот оператор не содержит спина. Вторая часть гамильтониана H_1 включает магнитные моменты электронов; в нашем исследовании мы будем считать ее малой по сравнению с H_0 и рассматривать как „возмущение“. Это возмущение и является причиной появления тонкой структуры. Она проявляется в расщеплении собственных значений простого уравнения Шредингера с оператором (22.4a) (т. е. „уровней основной структуры“) на несколько компонент тонкой структуры.

Первым шагом в применении теории возмущений (см. гл. 5) будет определение „правильных линейных комбинаций“. Это необходимо, так как собственные значения невозмущенной задачи,

¹⁾ В дальнейшем Паули показал, что релятивистские теории поля могут быть легко сформулированы для частиц с полуцелым спином только тогда, когда они подчиняются принципу Паули. — *Прим., добавленное в издании 1959 г.*

т. е. оператора H_0 , вырождены. Это будет главной задачей настоящей главы. Можно принять, что правильные линейные комбинации принадлежат некоторому неприводимому представлению симметрической группы по отношению к операторам O_P ; в силу принципа Паули, мы используем только антисимметричные представления. Если изотропия пространства не нарушается, можно далее предположить, что они принадлежат одной строке некоторого неприводимого представления $\mathfrak{D}^{(J)}$ группы вращений по отношению к операторам O_R . В данном случае из собственных функций собственного значения оператора H_0 , принадлежащих определенной строке представления $\mathfrak{D}^{(J)}$, можно образовать только одну антисимметричную линейную комбинацию, так что правильную линейную комбинацию для метода возмущений можно определить на основе одного лишь этого требования.

Пусть E — собственное значение невозмущенного оператора H_0 и $\psi(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$ — принадлежащая ему собственная функция, функция только декартовых координат. Собственную функцию оператора H_0 для собственного значения E , зависящую от всех координат $x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n$, мы получим, *умножая ψ на произвольную функцию $f(s_1, \dots, s_n)$ спиновых координат*. Поскольку H_0 является бесспиновым оператором (не зависит от спина), $f(s_1, \dots, s_n)$ можно рассматривать как постоянный множитель:

$$H_0\psi f = fH_0\psi = fE\psi = E\psi f. \quad (22.5)$$

Всего существует 2^n линейно независимых функций от s_1, s_2, \dots, s_n , $f_{\sigma_1\sigma_2\dots\sigma_n} = \delta_{s_1\sigma_1}\delta_{s_2\sigma_2}\dots\delta_{s_n\sigma_n}$ ($\sigma_1 = \pm 1, \sigma_2 = \pm 1, \dots, \sigma_n = \pm 1$),

$$(22.6)$$

в виде линейных комбинаций которых могут быть представлены все функции от s_1, s_2, \dots, s_n , как мы уже видели в гл. 13, где были определены неприводимые представления симметрической группы. Следовательно, если

$$f_1, f_2, \dots, f_{2^n} \quad (22.6a)$$

является полной ортогональной системой функций переменных s [они могут быть функциями (22.6)], с помощью ψ можно образовать следующие 2^n собственных функций оператора H_0 :

$$\psi f_1, \psi f_2, \dots, \psi f_{2^n}. \quad (22.7)$$

Если несколько функций от $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$ являются собственными функциями оператора H_0 , принадлежащими собственному значению E , то, согласно (22.7), с помощью каждой из них можно образовать 2^n линейно независимых собственных

функций, содержащих в качестве переменных спиновые координаты. Введение спиновых координат увеличивает кратность собственных значений бесспиновых операторов в 2^n раз. Это соответствует тому обстоятельству, что уравнение $H_0\psi = E\psi$ определяет только зависимость ψ от декартовых координат; для каждого из n спинов может быть еще сделан выбор между двумя противоположными направлениями.

4. Прежде всего рассмотрим систему, не имеющую иной симметрии, кроме эквивалентности электронов, т. е. такую, в которой пространственная симметрия нарушена внешним полем. Можно предположить, что функции ψ_1, ψ_2, \dots от $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$ являются собственными функциями заданного собственного значения оператора H_0 , принадлежащими некоторому неприводимому представлению симметрической группы n -й степени:

$$P_P \psi_x = \sum_{x'} D(P)_{x'x} \psi_{x'}. \quad (22.8)$$

Эти соотношения выполняются также при замене ψ_x на $\psi_x f_\lambda$, поскольку функция спиновых координат может рассматриваться как постоянный множитель по отношению к операторам P_P .

Собственная функция $\psi_x f_\lambda$ оператора H_0 также должна принадлежать представлению группы операторов O_P , так как при учете спина электроны по-прежнему эквивалентны. Состояние $O_P \psi_x f_\lambda$, в котором электроны просто поменялись местами по сравнению с $\psi_x f_\lambda$, также должно быть собственной функцией H_0 с тем же собственным значением, что и $\psi_x f_\lambda$, и поэтому может быть выражено в виде линейной комбинации функций $\psi_{x'} f_{\lambda'}$. Мы можем подставить выражение (22.8) для $P_P \psi_x$ в

$$O_P \psi_x f_\lambda = P_P O_P \psi_x f_\lambda = P_P \psi_x \cdot O_P f_\lambda \quad (22.9)$$

и выразить функции $O_P f_\lambda$ через $f_{\lambda'}$, так как всякая функция от s может быть выражена через $f_{\lambda'}$. Однако, чтобы получить по возможности наиболее простую систему коэффициентов, следует начать с ортогональной системы (22.6а), функции которой принадлежат неприводимым представлениям симметрической группы по отношению к операторам O_P .

5. В гл. 13 мы определили такую ортогональную систему для s . Там мы воспользовались ортогональной системой

$$s_1^{\gamma_1}, s_2^{\gamma_2}, \dots, s_n^{\gamma_n} \quad (\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n = 0 \text{ или } 1), \quad (22.6б)$$

а не (22.6). Мы расположили эти функции таким образом, что все функции k -й строки были функциями k -й степени ($\gamma_1 + \gamma_2 + \dots + \gamma_n = k$); всего было $\binom{n}{k}$ таких функций. Далее,

было показано, что при $k \leq n/2$ можно образовать линейные комбинации функций k -й степени, каждая из которых принадлежит одной строке одного из представлений

$$D^{(0)}, D^{(1)}, D^{(2)}, \dots, D^{(k)}. \quad (22.E.2)$$

Поскольку размерность $D^{(i)}$ равна

$$l_i = \binom{n}{i} - \binom{n}{i-1}, \quad (22.10)$$

число этих функций действительно равно $l_0 + l_1 + l_2 + \dots + l_k = \binom{n}{k}$. При $k \geq n/2$ вместо представлений (22.E.2) появляются представления

$$D^{(0)}, D^{(1)}, D^{(2)}, \dots, D^{(n-k)} \quad (22.E.3)$$

(см. примеры в виде таблиц на стр. 161).

Если обозначить функции k -й степени, принадлежащие λ -й строке представления $D^{(i)}$, через $g_{\lambda k}^{(i)}$, то

$$Q_{\rho} g_{\lambda k}^{(i)} = \sum_{\lambda'=1}^{l_i} D^{(i)}(P)_{\lambda' \lambda} g_{\lambda' k}^{(i)} \quad (i = 0, 1, 2, \dots, k \text{ или } n - k). \quad (22.11)$$

Мы использовали функции (22.6б), а не функции (22.6) потому, что для них множители $s_{\rho}^{\gamma_{\rho}}$ при $\gamma_{\rho} = 0$ можно просто опустить, а это упрощает формулы. Однако теперь снова вернемся к функциям (22.6), заменяя $s_{\rho}^0 = 1$ на $\delta_{s_{\rho}, -1}$ и $s_{\rho}^1 = s_{\rho}$ на $\delta_{s_{\rho}, 1}$, т. е. заменяя всюду s_{ρ}^{γ} на $\delta_{s_{\rho}, 2\gamma-1}$. Таким образом, функция

$$UF(s_1, s_2, \dots, s_n) = \sum_{\gamma_{\rho}=0, 1} c_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n} \delta_{s_1, 2\gamma_1-1} \delta_{s_2, 2\gamma_2-1} \dots \delta_{s_n, 2\gamma_n-1} \quad (22.12a)$$

заменит всюду функцию

$$F(s_1, s_2, \dots, s_n) = \sum_{\gamma_{\rho}=0, 1} c_{\gamma_1 \gamma_2 \dots \gamma_n} s_1^{\gamma_1} s_2^{\gamma_2} \dots s_n^{\gamma_n}. \quad (22.12)$$

Это не изменяет трансформационных свойств, поскольку ясно, что замена (22.12) на (22.12a) коммутует с перестановкой переменных. Поэтому, если мы запишем

$$Ug_{\lambda k}^{(i)} = f_{\lambda, k - \frac{1}{2}n}^{(\frac{1}{2}n-i)}, \quad Ug_{\lambda, \frac{1}{2}n+m}^{(\frac{1}{2}n-s)} = f_{\lambda m}^{(s)} \quad (22.13)$$

и ¹⁾

$$D^{(l)}(P) = A\left(\frac{1}{2}n-l\right)(P)^*, \quad D\left(\frac{1}{2}n-S\right)(P) = A^{(S)}(P)^*, \quad (22.13a)$$

то, согласно (22.11), будем иметь

$$Q_P f_{\lambda m}^{(S)} = \sum_{\lambda'} A^{(S)}(P)_{\lambda' \lambda}^* f_{\lambda' m}^{(S)}. \quad (22.11a)$$

Для четных n как S , так и m являются целыми; при нечетных n — полуцелыми.

Функция $g_{\lambda, \frac{1}{2}n+m}^{(\frac{1}{2}n-S)}$ имеет степень $\frac{1}{2}n + m$, т. е., если она записана в виде (22.12), в нее входят только члены, содержащие $\frac{1}{2}n + m$ множителей s_p^1 (и $\frac{1}{2}n - m$ множителей s_p^0). Поэтому в $U g_{\lambda, \frac{1}{2}n+m}^{(\frac{1}{2}n-S)} = f_{\lambda m}^{(S)}$ входят только те члены, которые содержат $\frac{1}{2}n + m$ множителей $\delta_{s_p, 1}$ (и $\frac{1}{2}n - m$ множителей $\delta_{s_p, -1}$); функции $f_{\lambda m}^{(S)}$ могут быть отличными от нуля только для тех наборов значений переменных s_p , в которых точно $\frac{1}{2}n + m$ из s равны $+1$ (и $\frac{1}{2}n - m$ равны -1), так что сумма всех s_p равна

$$\frac{1}{2}n + m - \left(\frac{1}{2}n - m\right) = 2m;$$

$$f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, s_2, \dots, s_n) = 0 \quad \text{при} \quad s_1 + s_2 + \dots + s_n \neq 2m. \quad (22.14)$$

Если функции

$$f_{\lambda m}^{(S)}, \quad (22.E.4)$$

где

$$\lambda = 1, 2, \dots, \left(\frac{1}{2}n - S\right) - \left(\frac{1}{2}n - S - 1\right),$$

$$m = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S,$$

$$S = \frac{1}{2}n, \frac{1}{2}n - 1, \frac{1}{2}n - 2, \dots, \frac{1}{2} \quad \text{или} \quad 0,$$

¹⁾ Фактически звездочки в (22.13a) не имеют какого-либо значения, так как $D^{(l)}(P)$ вещественны. Они введены только для упрощения последующих вычислений, так как делают излишним использование вещественности представлений $D^{(l)}$.

взяты в качестве полной ортогональной системы функций от s , то, используя (22.8) и (22.11а), для (22.9) получаем

$$\mathbf{O}_P \psi_x f_{\lambda m}^{(S)} = \sum_{x'} \sum_{\lambda'} D(P)_{x'x} A^{(S)}(P)_{\lambda'\lambda}^* \psi_{x'} f_{\lambda' m}^{(S)}. \quad (22.9a)$$

Таким образом, функции $\psi_x f_{\lambda m}^{(S)}$ преобразуются между собой по прямому произведению

$$\mathbf{D}(P) \times \mathbf{A}^{(S)}(P)^*.$$

6. Можно предположить, что собственные функции первого приближения, т. е. правильные линейные комбинации

$$\sum_{\substack{xS' \\ \lambda m}} a_{xS'\lambda m} \psi_x f_{\lambda m}^{(S')}, \quad (22.15)$$

в теории возмущений, вводящей спиновые силы, принадлежат неприводимым представлениям группы операторов \mathbf{O}_P . Так как принцип Паули требует, чтобы использовались собственные функции, представления которых антисимметричны, достаточно определить антисимметричные линейные комбинации (22.15); первое приближение для собственных функций, удовлетворяющих принципу Паули, должно представлять собой их линейную комбинацию.

Поэтому предположим, что линейные комбинации (22.15) антисимметричны. Тогда из (22.9а) и линейной независимости функций $\psi_x f_{\lambda' m}^{(S')}$ следует, что

$$\sum_{x\lambda} a_{xS'\lambda m} D(P)_{x'x} A^{(S')}(P)_{\lambda'\lambda}^* = \epsilon_P a_{x'S'\lambda' m}. \quad (22.16)$$

Если представление, *присоединенное* представлению $\mathbf{A}^{(S')}(P)$, обозначить через

$$\bar{\mathbf{A}}^{(S')}(P) = \epsilon_P \mathbf{A}^{(S')}(P) \quad (22.17)$$

и умножить (22.16) на ϵ_P , то в силу того, что $\epsilon_P^2 = 1$, получаем

$$\sum_{x\lambda} a_{xS'\lambda m} D(P)_{x'x} \bar{\mathbf{A}}^{(S')}(P)_{\lambda'\lambda}^* = a_{x'S'\lambda' m}. \quad (22.18)$$

Суммируя по всем перестановкам P , из соотношений ортогональности можно заключить, что левая часть обращается в нуль, если $\mathbf{D}(P)$ и $\bar{\mathbf{A}}^{(S')}(P)$ не эквивалентны. Если $\mathbf{D}(P)$ не эквивалентно какому-либо из представлений $\bar{\mathbf{A}}^{(S')}(P)$, то все $a_{x'S'\lambda' m}$ обращаются в нуль, и из функций $\psi_x f_{\lambda m}^{(S')}$ нельзя образовать никаких антисимметричных линейных комбинаций. Антисимметричная собственная функция может быть построена из функций от s и собственных

функций оператора H_0 , принадлежащих некоторому неприводимому представлению операторов P_R , только в том случае, если это представление эквивалентно одному из представлений $\bar{A}^{(\frac{1}{2}n)}$, $\bar{A}^{(\frac{1}{2}n-1)}$, $\bar{A}^{(\frac{1}{2}n-2)}$, ... Следовательно, собственные функции и собственные значения оператора H_0 , принадлежащие другим представлениям, исключаются принципом Паули.

Поэтому предположим, что $D(P)$ эквивалентно одному из представлений $\bar{A}^{(S')}(P)$, скажем $\bar{A}^{(S)}(P)$; фактически мы предполагаем, что оно совпадает с ним, поскольку преобразование подобия представления $D(P)$ сводится к определенному выбору линейно независимых собственных функций ψ_x . Назовем S мультиплетным числом собственных функций ψ_x , принадлежащих представлению $\bar{A}^{(S)}$. Если в (22.18) подставить

$$D(P) = \bar{A}^{(S)}(P) \quad (22.19)$$

и затем просуммировать по всем перестановкам, то получим [временно обозначая размерность представления $\bar{A}^{(S)}(P)$ через g_S]

$$\sum_{x\lambda} a_{xS'\lambda m} \frac{n!}{g_S} \delta_{SS'} \delta_{x'\lambda'} \delta_{x\lambda} = n! a_{x'S'\lambda'm}, \quad (22.20)$$

$$a_{x'S'\lambda'm} = \delta_{SS'} \delta_{x'\lambda'} \sum_x \frac{a_{xSxm}}{g_S} = \delta_{SS'} \delta_{x'\lambda'} b_m,$$

где b_m не зависит от S' , x' и λ' . Таким образом, антисимметричные линейные комбинации (22.15) функций $\psi_x f_{\lambda m}^{(S)}$ имеют вид

$$\sum_{\substack{xS' \\ \lambda m}} \delta_{SS'} \delta_{x\lambda} b_m \psi_x f_{\lambda m}^{(S')} = \sum_m b_m \sum_x \psi_x f_{xm}^{(S)}. \quad (22.20a)$$

Имеется $2S+1$ линейно независимых антисимметричных функций

$$\Xi_m^S = \sum_x \psi_x f_{xm}^{(S)}, \quad (22.20б)$$

соответствующих $2S+1$ значениям индекса m .

Если мы хотим образовать антисимметричные функции из собственных функций $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots$, принадлежащих некоторому собственному значению оператора H_0 , мы должны умножить функции ψ_x , принадлежащие x -й строке представления $\bar{A}^{(S)}$, на функцию $f_{xm}^{(S)}$ от s , принадлежащую x -й строке *присоединенного* представления $\bar{A}^{(S)*}$, и просуммировать эти произведения по всем x (для всех партнеров). Другие $g_S \cdot (2^n - 2S - 1)$ линейных комбинаций функций $\psi_x f_{\lambda m}^{(S)}$, которые ортогональны этим функциям, принадлежат

представлениям группы O_P , отличным от антисимметричного представления.

7. Если к H_0 добавляются спиновые члены H_1 как возмущение, то H перестает быть бесспиновым оператором, и его собственное значение E расщепляется на несколько собственных значений, которые в общем случае принадлежат неприводимым представлениям группы операторов симметрии O_P . Поскольку волновые функции всех физически реализуемых состояний антисимметричны, возможными уровнями энергии являются лишь уровни, принадлежащие антисимметричным представлениям. Если собственные функции оператора H_0 с собственным значением E , являющиеся функциями от $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$, принадлежат представлению $\bar{A}^{(S)}(P)$, то около значения энергии E будут расположены $2S+1$ близких уровней. В первом приближении каждому из этих уровней принадлежит одна линейная комбинация функций Ξ_m , задаваемых соотношением (22.20б). Настоящую правильную линейную комбинацию [т. е. значения коэффициентов b_m в (22.20а)] нельзя определить без решения $(2S+1)$ -мерного секулярного уравнения для матрицы

$$(H_1)_{m'm} = (\Xi_{m'}, H_1 \Xi_m), \quad (22.20в)$$

так как в рассматриваемом случае наличия внешних полей отсутствует симметрия, которая могла бы дать дополнительную информацию.

8. Рассмотрим теперь систему, в которой, помимо эквивалентности электронов, имеется полная вращательная симметрия. Функции от $x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n$, являющиеся собственными функциями оператора H_0 , кроме мультиплетного числа S , имеют определенное значение орбитального квантового числа L и могут быть выбраны так, чтобы они удовлетворяли соотношениям

$$P_P \psi_{x\mu} = \sum_{x'} \bar{A}^{(S)}(P)_{x'x} \psi_{x'\mu}, \quad P_R \psi_{x\mu} = \sum_{\mu'} \mathcal{D}^{(L)}(R)_{\mu'\mu} \psi_{x\mu'} \quad (22.21)$$

(здесь P является перестановкой, а R — вращением). Из функций $\psi_{x\mu}$ пространственных координат можно образовать функции $\psi_{x\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$ всех координат, которые также являются собственными функциями оператора H_0 . Функции $\psi_{x\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$, как и $\psi_{x\mu}$, удовлетворяют соотношениям (22.21); поскольку P не действует на спиновые координаты, спиновые функции $f_{\lambda m}^{(S)}$ могут рассматриваться в (22.21) как постоянные.

Функции $\psi_{x\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$ должны также принадлежать некоторому представлению группы вращений относительно операторов O_R , так как одно лишь введение спиновых координат не нарушает равно-

правности пространственных направлений. Действительно [см аналогичное соотношение (22.9)],

$$\mathbf{O}_R \psi_{x\mu} f_{\lambda m}^{(S)} = \mathbf{P}_R \psi_{x\mu} \cdot \mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}, \quad (22.22)$$

и в этом соотношении функции $\mathbf{P}_R \psi_{x\mu}$ можно выразить через $\psi_{x\mu}$, пользуясь соотношениями (22.21); в то же время $\mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}$ можно выразить через $f_{\lambda m}^{(S)}$ — как и всякую функцию от s . Определим теперь эти коэффициенты.

Если выразить $\mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}$ через $f_{\lambda' m'}^{(S')}$, то нужно использовать только те $f_{\lambda' m'}^{(S')}$, которые также принадлежат λ -й строке представления $\mathbf{A}^{(S)}$, так как \mathbf{Q}_R является оператором, симметричным относительно перестановки переменных s и (в противоположность \mathbf{Q}_P) не меняет трансформационных свойств функций $f_{\lambda m}^{(S)}$. Поэтому будем иметь

$$\mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)} = \sum_{m'=-S}^S \mathfrak{D}^{(S)}(R)_{m' m} f_{\lambda m'}^{(S)} \quad (m = -S, -S+1, \dots, S-1, S). \quad (22.23)$$

Кроме того, поскольку $\mathbf{Q}_R \mathbf{Q}_{R'} = \pm \mathbf{Q}_{RR'}$, матрицы $\mathfrak{D}^{(S)}(R)$ образуют $(2S+1)$ -мерное (однозначное или двузначное) представление группы вращений. Как сейчас будет показано, это представление является неприводимым представлением $\mathfrak{D}^{(S)}(R)$.

Пусть R — вращение на угол α вокруг оси Z . Тогда

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n) &= \sum_{t_\rho = \pm 1} \dots \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{1 \frac{1}{2} s_\rho, \frac{1}{2} t_\rho} \dots f_{\lambda m}^{(S)}(t_1, \dots, t_n) = \\ &= \sum_{t_\rho = \pm 1} \delta_{s_1 t_1} e^{i \frac{1}{2} s_1 \alpha} \dots \delta_{s_n t_n} e^{i \frac{1}{2} s_n \alpha} f_{\lambda m}^{(S)}(t_1, \dots, t_n) = \\ &= e^{i \frac{1}{2} (s_1 + \dots + s_n) \alpha} f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n), \end{aligned} \quad (22.24)$$

$$\mathbf{Q}_R f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n) = e^{i m \alpha} f_{\lambda m}^{(S)}(s_1, \dots, s_n),$$

где мы полагаем $m = \frac{1}{2} (s_1 + s_2 + \dots + s_n)$, поскольку, согласно (22.14), функция $f_{\lambda m}^{(S)}$ наверняка обращается в нуль для других наборов значений s . Для $R = \{\alpha, 0, 0\}$ представление в (22.23) является диагональной матрицей с диагональными элементами $\exp\{-iS\alpha\}$, $\exp\{-i(S-1)\alpha\}$, ..., $\exp\{+i(S-1)\alpha\}$, $\exp\{+iS\alpha\}$, что показывает его эквивалентность неприводимому представлению $\mathfrak{D}^{(S)}(R)$. Кроме того, (22.24) показывает, что $f_{\lambda m}^{(S)}$ принадлежат m -й

строке представления $\mathfrak{D}^{(S)}(R)$, так что $\mathfrak{D}^{(S)}(R)$ действительно должно входить в (22.23). *Функции переменных* s_1, s_2, \dots, s_n , *которые принадлежат представлению* $A^{(S)*} = D\left(\frac{1}{2}n - S\right)$ *по отношению к перестановке частиц, принадлежат представлению* $\mathfrak{D}^{(S)}$ *группы вращений по отношению к вращениям* Q_R . Фактически они принадлежат представлению $A^{(S)*} \times \mathfrak{D}^{(S)}$ прямого произведения этих двух групп. Это можно показать, если подействовать оператором Q_P на (22.23) и использовать (22.11a):

$$\begin{aligned} Q_P Q_R f_{\lambda m}^{(S)} &= \sum_{m'} \mathfrak{D}^{(S)}(R)_{m' m} Q_P f_{\lambda m'}^{(S)} = \\ &= \sum_{m'} \sum_{\lambda'} \mathfrak{D}^{(S)}(R)_{m' m} A^{(S)}(P)_{\lambda' \lambda}^* f_{\lambda' m'}^{(S)}, \end{aligned} \quad (22.24a)$$

т. е. $f_{\lambda m}^{(S)}$ принадлежит (λ, m) -й строке представления $A^{(S)}(P)^* \times \mathfrak{D}^{(S)}(R)$.

Описанные результаты можно хорошо проиллюстрировать с помощью разложений представлений, приведенных на стр. 161. Можно считать, что каждое $D^{(i)}$ заменено на функции, принадлежащие этому $D^{(i)}$. Тогда i -й *столбец* будет содержать те функции, которые принадлежат $D^{(i)} = A\left(\frac{1}{2}n - i\right)$ по отношению к перестановкам переменных, причем $D^{(i)}$ k -й строки заменяются на $g_{1k}^{(i)}, g_{2k}^{(i)}, \dots$. Если $f_{\lambda, k - \frac{1}{2}n}^{(\frac{1}{2}n - i)} = U g_{\lambda k}^{(i)}$ из (22.13) подставить теперь вместо $g_{\lambda k}^{(i)}$, то $k = \left(\frac{1}{2}n + m\right)$ -я строка будет содержать функции, принадлежащие $\exp(+im\varphi)$ по отношению к вращениям вокруг оси Z . Из того факта, что каждое из $D^{(i)} = A\left(\frac{1}{2}n - i\right)$ встречается не более чем один раз в каждой строке, видно, что существует не более одной функции от s , которая принадлежит заданной строке представления $A\left(\frac{1}{2}n - i\right)$ и $\exp(+im\varphi)$ по отношению к вращениям вокруг оси Z . Поскольку $A\left(\frac{1}{2}n - i\right)$ встречается в строках $i, i + 1, \dots, n - i - 1, n - i$, выражение $m = k - \frac{1}{2}n$ будет принимать в i -м столбце значения $-\frac{1}{2}n + i, -\frac{1}{2}n + i + 1, \dots, \frac{1}{2}n - i - 1, \frac{1}{2}n - i$. Функции, появляющиеся в различных строках i -го столбца, принадлежат различным строкам представления $\mathfrak{D}\left(\frac{1}{2}n - i\right)$ по отношению к трехмерным вращениям и являются партнерами.

Если бы мы использовали функции g из гл. 13 непосредственно вместо функций $f = U g$, то следовало бы только заменить „вращения вокруг оси Z “ на „вращения вокруг оси X “; ничего больше не изменилось бы.

Антисимметричная функция $x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n$, которая преобразуется согласно представлению $\bar{A}^{(S)}$ при перестановках P_P одних только декартовых координат и имеет мультиплетное число S , должна преобразовываться [см. (22.21) и (22.11a)] согласно представлению $A^{(S)*}$ при перестановках Q_P спиновых координат [см. (22.24a)] и согласно представлению $\mathfrak{D}^{(S)}$ при вращениях спиновых координат. Поэтому мультиплетное число не определяет только симметрию по отношению к перестановкам переменных (декартовых или спиновых координат). В силу специальной структуры функций от s , оно определяет также и симметрию по отношению к вращениям спиновых координат точно так же, как орбитальное квантовое число определяет симметрию по отношению к вращениям декартовых координат. Одна существенная разница между орбитальным квантовым числом и мультиплетным числом возникает вследствие того, что наиболее важные величины типа H_0 являются не зависящими от спина величинами, инвариантными относительно всех Q , если даже изотропность пространства нарушена внешним полем.

Тот факт, что функции $f_{\lambda m}^{(S)}$, которые принадлежат некоторому неприводимому представлению $A^{(S)}$ симметрической группы, принадлежат также неприводимому представлению $\mathfrak{D}^{(S)}$ группы вращений, и наоборот, представляет собой свойство функций переменных, принимающих только два значения. Если бы s могли принимать несколько значений, то функция, которая принадлежит определенному представлению симметрической группы, могла бы тем не менее принадлежать различным представлениям группы вращений; и наоборот, функция, принадлежащая заданному представлению группы вращений, могла бы также принадлежать различным представлениям симметрической группы. Трансформационные свойства относительно вращений и перестановок связаны описанным выше образом только с переменными, принимающими два значения.

9. Если теперь образовать антисимметричные комбинации функций $\psi_{x\mu} f_{\lambda m}^{(S)}$, согласно (22.20б), то получим $(2S+1)(2L+1)$ таких комбинаций, так как выражение (22.20б) может быть построено для любого μ :

$$\Xi_{m\mu}^{SL} = \sum_x \psi_{x\mu}^{SL} f_{x m}^{(S)} \quad (\mu = -L, \dots, L, m = -S, \dots, S). \quad (22.25)$$

Если подвергнуть вращению состояния $\Xi_{m\mu}^{SL}$,

$$\begin{aligned} O_R \Xi_{m\mu}^{SL} &= \sum_x P_R \psi_{x\mu}^{SL} \cdot Q_R f_{x m}^{(S)} = \\ &= \sum_x \sum_{\mu' m'} \mathfrak{D}^L(R)_{\mu' \mu} \psi_{x\mu'}^{SL} \mathfrak{D}^{(S)}(R)_{m' m} f_{x m'}^{(S)} = \\ &= \sum_{\mu' m'} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\mu' \mu} \mathfrak{D}^{(S)}(R)_{m' m} \Xi_{m' \mu'}^{SL}, \end{aligned}$$

то они преобразуются по прямому произведению $\mathfrak{D}^{(L)} \times \mathfrak{D}^{(S)}$,

Поэтому квантовое число полного момента J получающихся при этом антисимметричных собственных значений определяется путем разложения произведения $\mathfrak{D}^{(L)} \times \mathfrak{D}^{(S)}$. Это разложение уже было выполнено в гл. 17. Неприводимые компоненты имеют верхние индексы

$$J = |L - S|, |L - S| + 1, \dots, L + S - 1, L + S, \quad (22.26)$$

а соответствующие линейные комбинации функций $\mathfrak{E}_{m\mu}^{SL}$ имеют, согласно (17.18а), вид

$$\Psi_m^J = \sum_{\mu} s_{J\mu, m-\mu}^{(LS)} \mathfrak{E}_{m-\mu, \mu}^{SL}. \quad (22.27)$$

Коэффициенты $s_{J\mu, m-\mu}^{(LS)}$ были определены в гл. 17 формулами (17.27) и (17.27б).

При введении спина уровень с орбитальным квантовым числом L и мультиплетным числом S расщепляется на $2L + 1$ или $2S + 1$ (на меньшее из этих чисел) „компонент тонкой структуры“ с квантовыми числами полного момента (22.26). Соответствующие собственные функции первого приближения даются равенством (22.27).

Хотя при наличии полной пространственной симметрии число собственных функций, которые принадлежат одному собственному значению, значительно больше, чем при отсутствии полной симметрии, правильные линейные комбинации для теории возмущений могут быть гораздо проще определены при наличии полной симметрии, чем в отсутствие ее. При наличии полной пространственной симметрии коэффициентами правильных линейных комбинаций являются просто коэффициенты модели векторного сложения, приведенные в явном виде в гл. 17. Таким образом, полная пространственная симметрия более чем окупает те усложнения, к которым она приводит.

Значения (22.26) квантового числа J показывают, что для уровней, возникающих при введении спина из уровня с орбитальным квантовым числом L и мультиплетным числом S , квантовые числа J полного момента даются *моделью векторного сложения*. Согласно этой модели, для получения результирующего вектора J нужно скомбинировать векторы L и S так, как показано на фиг. 9¹⁾. Вектор L истолковывается как орбитальный момент количества движения, а S — как момент количества движения, связанный со спином электрона; J является полным моментом количества движения.

¹⁾ Для этой цели на фиг. 9 (стр. 224) следует заменить l на L , \bar{l} на S и L на J .

10. Определим, наконец, четность функций (22.27). Если четность функции $\psi_{x\mu}$ есть ω (она одинакова для всех $\psi_{x\mu}$), то

$$\mathbf{P}_I \psi_{x\mu} = \omega \psi_{x\mu}.$$

Это выполняется также для функций (22.27), поскольку эти функции, рассматриваемые как функции декартовых координат, являются линейными комбинациями функций $\psi_{x\mu}$ и $\mathbf{O}_I = \mathbf{P}_I$. Таким образом, при введении спиновых координат четность не меняется и совпадает для всех компонент тонкой структуры уровня с четностью соответствующего уровня основной структуры до введения спина.

11. Оценим „мультиплетное расщепление“, т. е. разность энергий между компонентами тонкой структуры. С классической точки зрения расщепление связано с энергией взаимодействия спиновых магнитных моментов с током, возникающим вследствие кругового движения электронов вокруг ядра, а также друг с другом. Напряженность поля, создаваемого круговым током, будет $\sim ev/r^2c$, где e и v — соответственно заряд и скорость электрона, а r — его расстояние от начала координат. В качестве r можно взять радиус первой боровской орбиты \hbar^2/me^2 , который, согласно квантовой механике, равен среднему удалению внутренних электронов от ядра, а v можно оценить из соотношения $mvr \sim \hbar$. Тогда для напряженности магнитного поля получим

$$\sim \frac{m^2 e^7}{\hbar^5 c},$$

а для энергии магнитного диполя $e\hbar/2mc$ в этом поле — значение $me^8/2\hbar^4 c^2$. (Точный расчет на основе релятивистской квантовой теории Дирака приводит к значению $me^8/32\hbar^4 c^2$ для разности энергий двух уровней с $N=2$, $l=1$, $j=1/2$ и $j=3/2$ в атоме водорода.) Таким образом, расщепление тонкой структуры будет порядка

$$\sim \left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^2 = \alpha^2 = \left(\frac{1}{137}\right)^2$$

от основной структуры или от расстояния между уровнями атома водорода с различными главными квантовыми числами ($\sim me^4/\hbar^2$). Постоянная α есть *постоянная тонкой структуры Зоммерфельда*.

Грубую оценку порядка величины различных физических эффектов можно получить, разлагая энергию по степеням постоянной тонкой структуры. Практически каждая степень связана с учетом в вычислениях новых физических явлений. Нулевую степень содержит лишь энергия покоя электрона mc^2 . Первая степень имеет нулевой коэффициент. Вторая степень приводит к энергии, даваемой обычной теорией Шредингера; она пропорциональна

$mc^2\alpha^2 = me^4/\hbar^2$ и представляет собой единственный член, в который не входит скорость света. Коэффициент при третьей степени α спать равен нулю. Мы только что видели, что члены четвертой степени дают энергию магнитного момента электрона, обладающего спином, в первом приближении теории возмущений. Пятая степень α приводит к ширине линий, связанной с дипольным излучением¹⁾. Член шестой степени дает второе приближение для спиновых эффектов, а член седьмой степени — уширение линий, связанное с квадрупольным излучением. Член восьмой степени дает третье приближение для спинового взаимодействия, а член девятой степени — уширение уровней за счет переходов, происходящих между уровнями с разной мультиплетностью (интеркомбинационный запрет) и т. д.

Разумеется, член разложения, содержащий высшую степень постоянной тонкой структуры, может быть больше, чем член с меньшей степенью, если его коэффициент достаточно велик. Однако, как правило, член с более высокой степенью α является наименьшим. Тем не менее коэффициенты некоторых членов (например, в формуле для расщепления тонкой структуры) обычно растут с увеличением порядкового номера атома, тогда как для других членов (например, радиационная ширина уровня) это не имеет места или не имеет места в общем случае. Так, второе приближение для расщепления тонкой структуры, за исключением нескольких первых элементов, существенно больше, чем радиационное уширение. Линии, которые исключаются интеркомбинационными запретами, почти всегда сильнее, чем квадрупольные линии, так что разложение по степеням α является иногда лишь способом группировки эффектов. Если член, раньше появляющийся в разложении по степеням α , больше, чем член, появляющийся позднее, то говорят, что связь является *нормальной*.

12. Если бы собственные функции оператора H давались точно выражениями (22.27), они принадлежали бы неприводимым представлениям $A^{(S)}(P)$ и $D^{(L)}(R)$ групп операторов P_P и P_R соответственно, и правила отбора для мультиплетного числа и орбитального квантового числа выполнялись бы точно. В действительности

¹⁾ Сумма ширин двух уровней дает естественную ширину линии, возникающей при переходах между ними. Ширина линии равна произведению \hbar на сумму вероятностей переходов для всех возможных переходов с данного уровня. Если в (18.1а) подставить $mc^2\alpha^2 \sim \hbar\omega$ вместо $\hbar\omega$, а радиус первой бортовой орбиты подставить вместо матричного элемента от x , то вероятность перехода будет

$$\sim \frac{4}{3} \frac{e^2 m^3 c^6 a^6}{\hbar c^3 \hbar^3} \cdot \frac{\hbar^4}{m^2 e^4} = \frac{1}{h} \frac{4mc^3 \hbar a^6}{3e^2} \sim \frac{mc^2}{\hbar} \alpha^5.$$

Она пропорциональна пятой степени постоянной тонкой структуры.

(22.27) является лишь первым приближением для собственных функций. Если второе приближение

$$\Phi_m^{NJ} = \Psi_m^{NJ} + \sum_{N' \neq N} \sum_{J'm'} \left(\frac{(\Psi_{m'}^{N'J'}, H_1 \Psi_m^{NJ})}{E_N - E_{N'}} \right) \Psi_{m'}^{N'J'} \quad (22.28)$$

по существу совпадает с первым, то можно предположить, что первое приближение является почти точным решением¹⁾. В этом случае переходы, исключаемые правилами отбора для S и L , не могут происходить с заметной интенсивностью.

В выражении (22.28) достаточно просуммировать по N' ; так как оператор H_1 симметричен относительно O_R , $(\Psi_{m'}^{N'J'}, H_1 \Psi_m^{NJ})$ наверняка исчезает при $J' \neq J$ или $m' \neq m$. Кроме того, $(\Psi_{m'}^{N'J'}, H_1 \Psi_m^{NJ})$ оказывается того же порядка величины, что и произведение $(\Psi_m^{NJ}, H_1 \Psi_m^{NJ})$, дающее первое приближение энергии возмущения, связанной со спином (т. е. мультиплетное расщепление). С другой стороны, $E_N - E_{N'}$ является расстоянием от ближайшего уровня основной структуры, соответствующего собственному значению с квантовым числом J полного момента количества движения. Если первая величина значительно меньше, чем вторая, то приближение (22.27) является хорошим; в противном случае оно недостаточно. Пригодность приближения, таким образом, существенно зависит от наличия случайной близости уровней с тем же квантовым числом J , но с разными S и L . (Если S и L функции $\Psi_m^{N'J}$ равны S и L функции Ψ_m^{NJ} , то соответствующий член в (22.28) не меняет трансформационных свойств функций $\Psi_m^{N'J}$ по отношению к P .)

¹⁾ $E_{N'}$ пробегает все собственные значения обычного уравнения Шредингера; индексы S и L (соответственно мультиплетное и орбитальное квантовые числа) включены в N' .

ПРАВИЛА ОТБОРА И ПРАВИЛА ИНТЕНСИВНОСТЕЙ ПРИ УЧЕТЕ СПИНА

Правила отбора, правила интенсивностей и правила интервалов в теории, включающей спин, можно разделить на два класса. Правила первого класса (правила 1—4, см. ниже) следуют из соображений симметрии без каких бы то ни было предположений относительно величины спиновых сил. Эти правила как по содержанию, так и по обоснованию весьма сходны с правилами простой (бесспиновой) теории (см. гл. 18), которые связаны с инвариантностью оператора энергии относительно вращений и отражений. Для вывода правил второго класса (правила 5—7, см. ниже) одной лишь изотропности пространства недостаточно; чтобы вывести их, следует также предположить, что спиновые силы малы по сравнению с электростатическими силами простой теории, так что собственные функции и собственные значения простой теории существенно не меняются при введении спина в оператор Гамильтона.

1. Правило отбора для квантового числа полного момента совпадает с правилом отбора для орбитального квантового числа в простой теории. При переходе, связанном с дипольным излучением, J меняется на ± 1 или 0 с дополнительным ограничением, что переходы между уровнями с $J=0$ запрещены. Для дипольного излучения характерны матричные элементы векторных операторов (умножение на $x_1 + x_2 + \dots + x_n$ и т. д.), а эти матричные элементы исчезают, если вышеупомянутые условия не выполнены.

Далее, правило отбора для четности (правило Лапорта) остается в силе, так как оператор O_I совпадает с оператором P_I простой теории Шредингера. Все матричные элементы

$$(\Psi_F, V_x \Psi_E), (\Psi_F, V_y \Psi_E), (\Psi_F, V_z \Psi_E) \quad (23.1)$$

любого *полярного* векторного оператора обращаются в нуль, если четности Ψ_F и Ψ_E состояний Ψ_F и Ψ_E одинаковы. При инверсии осей полярный вектор сохраняет свое направление, так что его компоненты меняют знак, т. е.

$$O_I V_x O_I^{-1} = -V_x.$$

Так как $O_I \Psi_F = \omega_F \Psi_F$ и $O_I \Psi_E = \omega_E \Psi_E$, из унитарности операторов O_I следует, что

$$(\Psi_F, V_x \Psi_E) = (O_I \Psi_F, O_I V_x O_I^{-1} \cdot O_I \Psi_E) = -\omega_F \omega_E (\Psi_F, V_x \Psi_E).$$

Таким образом, матричные элементы (23.1) должны обращаться в нуль, если Ψ_F и Ψ_E имеют одинаковую четность. (Аналогичным образом можно показать, что матричный элемент аксиального векторного оператора равен нулю, если Ψ_F и Ψ_E имеют различную четность.)

Поскольку четность уровня основной структуры сохраняется во всех компонентах тонкой структуры, правило Лапорта применимо в равной степени ко всем компонентам уровня основной структуры.

Если спектр состоит только из дублетных уровней с четностью $\omega = (-1)^L$, как, например, в спектре всякого водородоподобного атома, из правил отбора для j и ω следуют также правила отбора для L . Согласно правилу Лапорта, L может меняться только на нечетное число; разрешено изменение L на 1, но не на 3 и более, так как в этом случае $j (= L \pm 1/2)$ изменялось бы на 2 или более, что ведет к запрету.

Правило, что трансформационные свойства не меняются при перестановке электронов, уже содержится в утверждении о том, что волновые функции, которые все антисимметричны, остаются антисимметричными при произвольном возмущении (не только под влиянием излучения).

2. В магнитном поле, параллельном оси Z , уровни с квантовым числом j расщепляются на $2j + 1$ зеемановских компонент. „Правильными линейными комбинациями“ для вычисления магнитной энергии как возмущения являются сами функции Ψ_μ^j , как и в простой теории. Если оператор O_R применяется к функциям Ψ_μ^j , причем R есть вращение на угол α вокруг оси Z , волновая функция Ψ_μ^j просто умножается на $e^{i\mu\alpha}$. Магнитное поле полностью устраняет вырождение; в магнитном поле каждому собственному значению принадлежит только одна собственная функция.

Пусть вспомогательный оператор H_2 , в который входит магнитное поле, разложен в ряд по степеням компонент напряженности поля $\mathcal{H}_x, \mathcal{H}_y, \mathcal{H}_z$:

$$H_2 = (\mathcal{H}_x V_x + \mathcal{H}_y V_y + \mathcal{H}_z V_z) + (\mathcal{H}_x^2 V_{xx} + \dots) + \dots \quad (23.2)$$

Тогда коэффициенты V_x, V_y, V_z при первой степени должны образовывать аксиальный векторный оператор, так как само поле \mathcal{H} является аксиальным вектором, а оператор H_2 в целом должен быть скаляром. Первое приближение для энергии возмущения, обусловленной взаимодействием с магнитным полем, которое направлено по оси Z ,

$$\mathcal{H}_z (\Psi_\mu^j, V_z \Psi_\mu^j),$$

согласно формуле для матричных элементов векторных операторов, пропорционально μ [см. среднюю формулу (21.19б)]. Поэтому расщепление в магнитном поле пропорционально первой степени напряженности поля при слабых полях, причем первоначальный уровень расщепляется на $2j+1$ равноотстоящих компонент. Однако, в противоположность расщеплению в простой теории это расщепление не одинаково для всех уровней и не может быть вычислено в общем виде. Оно может быть рассчитано численно только для „нормальной связи“, т. е. если выражение (22.27) является хорошим приближением для собственных функций.

Иначе обстоит дело с соотношениями интенсивностей зеемановских компонент. Сила линии, соответствующей переходу с μ -компоненты более высоко лежащего уровня на μ' -компоненту более низкого уровня, с точностью до универсального постоянного множителя равна квадрату абсолютной величины одного из матричных элементов

$$\left(\Psi_{\mu}^{Nj}, \sum_k z_k \Psi_{\mu'}^{N'j'} \right), \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{\mu}^{Nj}, \sum_k (x_k + iy_k) \Psi_{\mu'}^{N'j'} \right), \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\Psi_{\mu}^{Nj}, -\sum_k (x_k - iy_k) \Psi_{\mu'}^{N'j'} \right),$$

в зависимости от того, является ли свет поляризованным соответственно по оси Z , по кругу вправо или влево относительно оси Z . Эти три величины представляют собой матричные элементы трех различных компонент $(0, -1, +1)$ векторного оператора. Их отношения при различных μ , μ' и поляризациях можно получить непосредственно из выражений (21.19). Эти формулы показывают также, что магнитное квантовое число μ может изменяться только на 0 (π -компоненты) или ± 1 (σ -компоненты). Относительные интенсивности в переходах, например с $j \rightarrow j-1$, равны

$$A_{\mu \rightarrow \mu-1} = (j + \mu)(j + \mu - 1), \\ A_{\mu \rightarrow \mu} = 2(j + \mu)(j - \mu), \\ A_{\mu \rightarrow \mu+1} = (j - \mu - 1)(j - \mu). \quad (23.3)$$

Сумма этих трех выражений, представляющая собой вероятность перехода с более высокого уровня с магнитным квантовым числом μ на все зеемановские уровни более низкого уровня, одинакова для всех зеемановских компонент верхнего уровня, т. е. не зависит от μ . То же самое справедливо для суммы вероятностей переходов для всех линий, имеющих общий нижний зеемановский уровень.

Это правило сумм для вероятностей переходов имеет простое физическое обоснование. Сумма трех выражений в (23.3) является полной вероятностью перехода из состояния Ψ_{μ}^{Nj} во все

состояния, энергии которых соответствуют нижнему уровню. Но так как состояния Ψ_{μ}^{Nj} с различными μ преобразуются в линейные комбинации тех же состояний при вращениях осей и поэтому отличаются лишь вращением и так как полная вероятность перехода не должна зависеть от вращений, она не может зависеть от μ .

Математически правило сумм можно вывести наиболее просто с помощью соотношения (21.18а), если составить выражение

$$\begin{aligned} |T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)}|^2 = \sum_{\nu\sigma\nu'} \sum_{\lambda\tau\lambda'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\nu\mu}^* \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\lambda\mu} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\sigma\rho}^* \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\tau\rho} \times \\ \times \mathfrak{D}^{(j')} (R)_{\nu'\mu'}, \mathfrak{D}^{(j')} (R)_{\lambda'\mu'}^*, T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}, T_{Nj\lambda; N'j'\lambda'}^{(\tau)}. \end{aligned}$$

Если просуммировать это выражение по μ и ρ , то в силу унитарности $\mathfrak{D}^{(j)}$ и $\mathfrak{D}^{(\omega)}$ первые четыре множителя в правой части заменяются на $\delta_{\nu\lambda} \cdot \delta_{\sigma\tau}$.

Тогда интегрирование по всем вращениям дает, если учесть соотношения ортогональности,

$$\sum_{\mu\rho} |T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)}|^2 = \frac{1}{2j'+1} \sum_{\nu\sigma\nu'} |T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}|^2. \quad (23.E.1)$$

Это непосредственно показывает, что сумма (23.E.1) не зависит от μ' .

3. Электрическое поле, параллельное оси Z , расщепляет уровень с полным квантовым числом j на $j+1$ компонент в случае четного числа электронов, как и в простой теории, которая обсуждалась в гл. 18. Они принадлежат представлениям

$$\mathfrak{Z}^{(j)}, \mathfrak{Z}^{(j-1)}, \dots, \mathfrak{Z}^{(2)}, \mathfrak{Z}^{(1)}, \mathfrak{Z}^{(0)} \text{ или } \mathfrak{Z}^{(0')}$$

двумерной группы вращений и отражений. Последний уровень принадлежит представлениям $\mathfrak{Z}^{(0)}$ или $\mathfrak{Z}^{(0')}$, если $\omega(-1)^j$ равно соответственно $+1$ или -1 . Правила отбора из гл. 18 можно также вывести здесь тем же способом, за тем лишь исключением, что L следует заменить на j .

Эффект Штарка в случае нечетного числа электронов будет рассмотрен более подробно. Фактически сам результат можно получить весьма просто. Однако здесь есть один принципиальный вопрос, который следует обсудить.

Трудность возникает вследствие того, что каждому вращению R соответствуют две матрицы $\pm \mathfrak{D}^{(j)}(R)$. То же самое имеет место для несобственных вращений:

$$\mathfrak{D}^{(j, \omega)}(RI) = \pm \omega \mathfrak{D}^{(j)}(R).$$

Тол. к инверсии соответствует одна матрица $+\omega 1$. Однако электрическое поле снимает симметрию относительно инверсий, и, хотя остаются многие несобственные вращения, соответствующие матрицы

остаются теми же в силу их двузначности, независимо от того, $w = +1$ или $w = -1$. Это показывает, что некоторый существенный элемент оказался потерянным вследствие двузначности. Для некоторых определенных свойств симметрии это действительно так. В случае же группы симметрии в электрическом поле ниже следующий более подробный анализ не приводит к каким-либо новым результатам, кроме очевидных.

Чтобы получить однозначные представления, вспомним, что для нечетного числа электронов вращательная симметрия выражается с помощью операторов O_u , которые образуют группу, изоморфную двумерной унитарной группе. Чтобы выразить инвариантность относительно несобственных вращений, воспользуемся операторами $O_I O_u$. Набор операторов $O_u = 1 O_u$, $O_I O_u$ представляет собой прямое произведение группы отражений ($O_E = 1$, O_I) и группы операторов O_u . Если обозначить общий элемент группы прямого произведения группы отражений и унитарной группы¹⁾ через \mathfrak{z} , то полная симметрия относительно вращений и отражений может быть выражена с помощью операторов $O_{\mathfrak{z}}$, которые образуют группу, изоморфную группе \mathfrak{z} . Элементы \mathfrak{z} и $O_{\mathfrak{z}}$ соответствуют либо чистым вращениям, и в этом случае \mathfrak{z} имеет вид E_u , либо несобственным вращениям, и в этом случае \mathfrak{z} имеет вид I_u . Однако каждому вращению, собственному или несобственному, соответствуют два \mathfrak{z} или $O_{\mathfrak{z}}$.

Если накладывается внешнее поле, то операциями симметрии²⁾ остаются только те \mathfrak{z} , которые соответствуют вращениям, собственным или несобственным, принадлежащим группе симметрии системы во внешнем поле. Соответствующие им матрицы $D(\mathfrak{z})$,

$$O_{\mathfrak{z}} \Psi_{\mu} = \sum_{\mu'} D(\mathfrak{z})_{\mu, \mu'} \Psi_{\mu'}, \quad (23.4)$$

образуют (однозначное) представление группы соответствующих \mathfrak{z} , а различные уровни системы в поле принадлежат различным представлениям этой группы. Группа симметрии системы не изоморфна этой группе, а (двукратно) гомоморфна, так как два \mathfrak{z} соответствуют каждому из ее элементов.

В случае однородного электрического поля, параллельного оси Z , к группе симметрии принадлежат вращения вокруг Z и отражения

¹⁾ Таким образом, величины \mathfrak{z} являются элементами абстрактной группы, но не матриц, а пар J_u , где J есть либо E , либо I , а u есть элемент унитарной группы. Закон умножения (см. гл. 16) имеет вид $J_u \cdot J_v = J_{uv}$.

²⁾ Это значит, что только они по-прежнему преобразуют собственные функции заданного собственного значения в собственные функции того же собственного значения.

в плоскостях, проходящих через Z . Вращениям вокруг оси Z на угол α соответствуют матрицы

$$\mathfrak{z}_\alpha = E \begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\alpha} & 0 \\ 0 & e^{i\frac{1}{2}\alpha} \end{pmatrix}, \quad \mathfrak{z}'_\alpha = E \begin{pmatrix} -e^{-i\frac{1}{2}\alpha} & 0 \\ 0 & -e^{i\frac{1}{2}\alpha} \end{pmatrix} \quad (-\pi < \alpha \leq \pi) \quad (23.5)$$

[см. (15.16)]. Отражение в плоскости ZX является произведением инверсии и вращения вокруг оси Y на угол π . Поэтому соответствующие \mathfrak{z} имеют вид

$$\mathfrak{z}_y = I \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathfrak{z}'_y = I \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (23.5a)$$

Произведения (23.5) и (23.5a) соответствуют отражениям в других плоскостях. В представлении прямого произведения группы отражений и унитарной группы, принадлежащем уровню с четностью ω и полным квантовым числом j , матрицы, соответствующие элементам группы (23.5), имеют вид

$$D(\mathfrak{z}_\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-ij\alpha} & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & e^{ij\alpha} \end{pmatrix}, \quad D(\mathfrak{z}'_\alpha) = - \begin{pmatrix} e^{-ij\alpha} & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & e^{ij\alpha} \end{pmatrix}. \quad (23.6)$$

Аналогичным образом матрицы, соответствующие элементам группы (23.5a), равны

$$D(\mathfrak{z}_y) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 & -\omega \\ 0 & 0 & \dots & \omega & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 0 & -\omega & \dots & 0 & 0 \\ \omega & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix} = -D(\mathfrak{z}'_y) \quad (23.6)$$

[при этом в (15.21a) следует подставить $a=0$, $b=-1$ для \mathfrak{z}_y и $a=0$, $b=+1$ для \mathfrak{z}'_y]. Матрицы (23.6) и (23.6a) и их произведения образуют представление той подгруппы прямого произведения группы отражений и унитарной группы, элементы которой соответствуют элементам симметрии системы, остающимся и при наличии электрического поля. Это представление может быть приведено путем перемены порядка строк и столбцов так, чтобы они

находились в порядке $-j, j, -j+1, j-1, \dots, -1/2, 1/2$ вместо $-j, -j+1, \dots, j-1, j$. Тогда оно распадается на последовательность двухрядных неприводимых представлений

$$\mathbf{z}^{(m)}(\mathfrak{z}_x) = \begin{pmatrix} e^{-im\alpha} & 0 \\ 0 & e^{im\alpha} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}^{(m)}(\mathfrak{z}'_x) = \begin{pmatrix} -e^{-im\alpha} & 0 \\ 0 & -e^{im\alpha} \end{pmatrix} \quad (23.7)$$

и

$$\mathbf{z}^{(m)}(\mathfrak{z}_y) = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} 0 & -\omega \\ \omega & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{z}^{(m)}(\mathfrak{z}'_y) = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} 0 & \omega \\ -\omega & 0 \end{pmatrix}, \quad (23.7a)$$

где m принимает значения

$$m = j, j-1, j-2, \dots, \frac{3}{2}, \frac{1}{2}, \quad (23.8)$$

так что уровень с квантовым числом полного момента j расщепляется на $j+1/2$ штатковских компонент с электрическими квантовыми числами (23.8).

В этом случае оказывается, что представления $\mathbf{z}^{(m)}$ для $\omega = +1$ и $\omega = -1$ эквивалентны, так как они могут быть преобразованы одно в другое с помощью матрицы

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

Таким образом, уровни с одинаковыми электрическими квантовыми числами, возникающие из четных и нечетных уровней, имеют одинаковые трансформационные свойства, и правила отбора будут для них одинаковыми. Этого следовало ожидать, так как правило Лапорта неприменимо в электрическом поле также и к четному числу электронов, а единственным различием между уровнями, возникающими от четных или нечетных уровней, является появление уровней 0 и $0'$ соответственно. Для нечетного числа электронов даже эта черта, связанная с четностью, исчезает, поскольку уровни 0 и $0'$ не могут возникать.

4. Если оператор возмущения для электрического поля разложить в ряд типа (23.2), то из полярной природы вектора электрического поля следует, что коэффициенты V_x, V_y, V_z должны быть компонентами полярного вектора. Поэтому матричные элементы

$$(\Psi_\mu^{Nj}, V_z \Psi_\mu^{Nj}),$$

которые могли бы описывать эффект, пропорциональный первой степени напряженности поля, обращаются в нуль, так как Ψ_μ^{Nj} и Ψ_μ^{Nj} имеют одинаковую четность

Расщепление, возникающее во втором приближении, пропорционально \mathfrak{E}^2 ; можно показать, что в этом приближении смещение и расщепление пропорциональны μ^2 .

5. Большинство из выведенных до сих пор правил в той мере, в какой они относятся к изотропному случаю, являются частными случаями соотношений (21.19):

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = S_{\mu+\rho, \mu}^{(j'w)} \delta_{\mu+\rho, \mu'} T_{Nj; N'j'}. \quad (23.9)$$

Последнее равенство позволяет определить отношение матричных элементов

$$\frac{T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)}}{T_{Nj\nu; N'j'\nu'}^{(\sigma)}} = \frac{(\Psi_{\mu}^{NJ}, T^{(\rho)} \Psi_{\mu'}^{N'j'})}{(\Psi_{\nu}^{NJ}, T^{(\sigma)} \Psi_{\nu'}^{N'j'})}, \quad (23.9a)$$

если соответствующие собственные функции Ψ_{μ}^{NJ} и Ψ_{ν}^{NJ} , а также $\Psi_{\mu'}^{N'j'}$ и $\Psi_{\nu'}^{N'j'}$ принадлежат одним и тем же собственным значениям E_j^N и $E_{j'}^{N'}$ (т. е. если они являются партнерами) и если операторы $T^{(\rho)}$ и $T^{(\sigma)}$ являются компонентами одного и того же *неприводимого тензорного оператора*

$$O_R^{-1} T^{(\rho)} O_R = \sum_{\sigma} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\rho\sigma} T^{(\sigma)}. \quad (23.9б)$$

Скаляры, соответствующие представлению $\mathfrak{D}^{(0)}$, и векторы, соответствующие $\mathfrak{D}^{(1)}$, и т. д. являются неприводимыми тензорами. Величины $T_{Nj; N'j'}$ в (23.9) являются числами, которые нельзя определить общими методами, так как они зависят от набора операторов T и от частного вида используемого гамильтониана.

До сих пор нам встретилась лишь одна формула, которую нельзя было записать в виде (23.9). Это было соотношение (18.8) для нормального эффекта Зеемана. При выводе его было учтено, что рассматриваемый векторный оператор L_z определяется соотношением (17.8), т. е. имеет вид

$$L_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} P_{\{\varphi 00\}} \quad (23.10)$$

при $\varphi = 0$. В других случаях вывод правил, выходящих за рамки соотношения (23.9), возможен только с помощью дополнительных предположений или приближений.

Наиболее важным предположением этого рода является допущение о „нормальной“ связи между спиновым и орбитальным моментами, или связи Рессела — Саундерса. Подобная связь предполагалась в предыдущей главе; она характеризуется расщеплением тонкой структуры, которое мало по сравнению с расстояниями между соседними уровнями основной структуры. В этом случае может быть определено не только квантовое число полного момента,

но и сохранен смысл понятий мультиплетного числа и орбитального квантового числа. Это полезно выразить в явном виде, заменив символ N на тройной символ NSL для уровней с одним и тем же квантовым числом J , где S — мультиплетное число, L — орбитальное квантовое число, а N служит только для различения между уровнями с одними и теми же S , L и J ¹⁾. Изложение в оставшейся части этой главы будет опираться на предположение о „нормальной связи“.

Согласно (22.27), собственные функции имеют вид

$$\Psi_m^{NSLJ} = \sum_{\mu} S_{J\mu, m-\mu}^{(LS)} \Xi_{m-\mu, \mu}^{NSL} \quad (23.11)$$

Функции $\Xi_{-S\mu}^{NSL}$, $\Xi_{-S+1; \mu}^{NSL}$, ..., $\Xi_{S, \mu}^{NSL}$ являются функциями-партнерами относительно Q_R и принадлежат различным строкам представления $\mathfrak{D}^{(S)}$; то же самое имеет место для $\Xi_{\nu, -L}^{NSL}$, $\Xi_{\nu, -L+1}^{NSL}$, ..., $\Xi_{\nu, L}^{NSL}$ по отношению к операторам P_R и представлению $\mathfrak{D}^{(L)}$. Если (23.11) справедливо, то отношение матричных элементов

$$(\Psi_m^{NSLJ}, T^{(\sigma\rho)} \Psi_{m'S'L'J'}^{N'S'L'J'}) = T_{NSLJm; N'S'L'J'm'}^{(\sigma\rho)} \quad (23.12)$$

с различными J , J' , m , m' , σ , ρ , но с одинаковыми NSL и $N'S'L'$ можно вычислить, если только $T^{(\sigma\rho)}$ являются компонентами тензора ранга q по отношению к Q_R , ранга p по отношению к P_R , и неприводимого по отношению к ним обоим:

$$Q_R^{-1} T^{(\sigma\rho)} Q_R = \sum_{\sigma'} \mathfrak{D}^{(q)}(R)_{\sigma\sigma'} T^{(\sigma'\rho)}, \quad (23.13a)$$

$$P_R^{-1} T^{(\sigma\rho)} P_R = \sum_{\rho'} \mathfrak{D}^{(p)}(R)_{\rho\rho'} T^{(\sigma\rho')}. \quad (23.13b)$$

По отношению к действительным операторам симметрии O_R тензор T не является в общем случае неприводимым; он принадлежит прямому произведению двух неприводимых представлений

$$\begin{aligned} O_R^{-1} T^{(\sigma\rho)} O_R &= Q_R^{-1} P_R^{-1} \cdot T^{(\sigma\rho)} P_R Q_R = \\ &= \sum_{\rho'} Q_R^{-1} \mathfrak{D}^{(p)}(R)_{\rho\rho'} T^{(\sigma\rho')} Q_R = \sum_{\sigma'} \mathfrak{D}^{(q)}(R)_{\sigma\sigma'} \mathfrak{D}^{(p)}(R)_{\rho\rho'} T^{(\sigma', \rho')}. \end{aligned}$$

Относительно операций Q_R функции $\Xi_{\nu\mu}^{NSL}$ при $\nu = -S, \dots, S$ принадлежат $\mathfrak{D}^{(S)}$ и являются партнерами. Из (23.13a) следует, что соотношение, аналогичное (23.9), имеет вид

$$(\Xi_{\nu\mu}^{NSL}, T^{(\sigma\rho)} \Xi_{\nu'\mu'}^{N'S'L'}) = \delta_{\nu+\sigma, \nu'} S_{S\nu\sigma}^{(Sq)} \cdot t_{NSL\mu; N'S'L'\mu'}^{(\rho)}. \quad (23.14a)$$

¹⁾ Как и всюду при нормальной связи, символом J мы снова обозначаем квантовое число полного момента.

Подобным образом, имеем

$$(\mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL}, \mathbb{T}^{(\sigma\rho)} \mathbb{E}_{\nu'\mu'}^{N'S'L'}) = \delta_{\mu+\rho, \mu'} S_{L'\mu\rho}^{(LP)} \bar{t}_{NSL\nu}^{(\sigma)}; N'S'L'\nu', \quad (23.146)$$

в силу (23.136) и поскольку $\mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL}$ при $\mu = -L, \dots, L$ преобразуются согласно представлению $\mathfrak{D}^{(L)}$ при операциях \mathbf{P}_R .

Комбинируя (23.14а) и (23.146), имеем

$$(\mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL}, \mathbb{T}^{(\sigma\rho)} \mathbb{E}_{\nu'\mu'}^{N'S'L'}) = \delta_{\nu+\sigma, \nu'} \delta_{\mu+\rho, \mu'} S_{S'\nu\sigma}^{(Sq)} S_{L'\mu\rho}^{(LP)} t_{NSL}; N'S'L' \quad (23.14)$$

или, с учетом (23.11),

$$\begin{aligned} (\Psi_m^{NSLJ}, \mathbb{T}^{(\sigma\rho)} \Psi_{m'}^{N'S'L'J'}) = & \\ = \sum_{\mu\mu'} S_{J, \mu}^{(LS)} S_{m-\mu, \mu'}^{(L'S')} \delta_{m-\mu+\sigma, m'-\mu'} \delta_{\mu+\rho, \mu'} S_{S', m-\mu, \sigma}^{(Sq)} \times & \\ \times S_{L'\mu\rho}^{(LP)} t_{NSL}; N'S'L' = \sum_{\mu} S_{J, \mu}^{(LS)} S_{m-\mu, \mu+\rho}^{(L'S')} \times & \\ \times \delta_{m+\sigma+\rho, m'} S_{S', m-\mu, \sigma}^{(Sq)} S_{L'\mu\rho}^{(LP)} t_{NSL}; N'S'L'. & \quad (23.15) \end{aligned}$$

Эти формулы определяют отношения всех матричных элементов (23.12) с одинаковыми NSL и $N'S'L'$.

В выражении (23.15), как и в (23.9), все $s_{\mu\nu}^{(LS)}$, первый нижний индекс которых больше, чем сумма двух верхних индексов, или меньше, чем абсолютная величина их разности ($J > L + S$ или $J < |L - S|$), должны быть положены равными нулю. То же самое будет при $|\mu| > L$, при $|\nu| > S$ или $|\mu + \nu| > J$.

6. Может показаться, будто класс операторов, определенный соотношениями (23.13а) и (23.13б), является весьма искусственным. Однако почти все важнейшие операторы являются компонентами тензоров или суммами компонент тензоров этого рода. В частности, все бесспиновые операторы симметричны (т. е. скаляры) по отношению к \mathbf{O}_R , так что (23.13а) справедливо для них при $q = 0$. Поэтому под действием \mathbf{P}_R они преобразуются точно так же, как и под действием \mathbf{O}_R , и являются скалярами, векторами и т. д. по отношению к последнему, если они являются ими в действительности.

Проверим соотношение (23.15) в нескольких простых случаях. Для бесспиновых операторов и всех операторов с $q = 0$ мы видим, что скалярное произведение (23.15) обращается в нуль, если $S' \neq S$. Это соответствует выведенному ранее правилу, что матричные элементы между состояниями, принадлежащими различным мультиплетностям, обращаются в нуль (правило А, стр. 234). Если к тому же $p = 0$ (т. е. если этот оператор является скаляром по отношению к \mathbf{P}_R , а следовательно, и по отношению к \mathbf{O}_R), то должно быть $L' = L$. Поскольку $\rho = \sigma = 0$ (скаляр имеет только 0-компоненту),

сумма (23.15) может быть вычислена, если воспользоваться соотношениями ортогональности для коэффициентов векторного сложения [см. (17.28)]

$$\sum_{\mu} s_{J, \mu, m-\mu}^{(LS)} s_{J', \mu, m-\mu}^{(LS)} = \delta_{JJ'} \quad (23.16)$$

и тем обстоятельством, что $s_{L\mu 0}^{(L0)} = s_{S, m-\mu, 0}^{(S0)} = 1$. Для оператора, являющегося скаляром в обоих смыслах ($p=0, q=0$), получаем, что матричные элементы

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{T} \Psi_{m'}^{N'S'L'J'}) = \delta_{SS'} \delta_{LL'} \delta_{JJ'} \delta_{mm'} t_{NSL; N'S'L'} \quad (23.17)$$

а) обращаются в нуль при $J' \neq J$ или $m' \neq m$ и не зависят от m при $J' = J$ и $m' = m$, что является правилом для операторов, симметричных относительно \mathbf{O}_R , и б) одинаковы для всех компонент тонкой структуры некоторого уровня основной структуры независимо от J . Для этого недостаточно, чтобы оператор \mathbf{T} был скаляром относительно $\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R$; он должен быть скаляром относительно \mathbf{P}_R и \mathbf{Q}_R в отдельности, причем связь должна быть „нормальной“.

Одним из операторов, скалярным в обоих смыслах, является, например, гамильтониан \mathbf{H}_0 простой теории Шредингера. В этом случае

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{H}_0 \Psi_{m'}^{N'S'L'J'}) = E^{NSL} \delta_{NN'} \delta_{SS'} \delta_{LL'} \delta_{JJ'} \delta_{mm'},$$

где E^{NSL} является собственным значением простого уравнения Шредингера; E^{NSL} одинаково для всех компонент тонкой структуры, так как эта теория не дает никакого расщепления тонкой структуры.

Формулы Хёня — Кронига для интенсивностей

Если $\mathbf{T}^{pq} = \mathbf{V}^{(p)}$ является скаляром относительно \mathbf{Q}_R и вектором относительно \mathbf{P}_R [как, например, оператор умножения на

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k (x_k + iy_k), \quad \sum_k z_k, \quad -\frac{1}{\sqrt{2}} \sum_k (x_k - iy_k),$$

определяющий вероятности дипольных переходов], то $p=1, q=0$ и, согласно (23.15), мы можем написать

$$\begin{aligned} \mathbf{V}_{NSLJm; N'S'L'J'm'}^{(p)} &= \delta_{SS'} \delta_{m+\rho, m'} \times \\ &\times \sum_{\mu} s_{J, \mu, m-\mu}^{(LS)} s_{J', \mu+\rho, m-\mu}^{(L'S')} s_{L', \mu, \rho}^{(L1)} \mathbf{v}_{NSL, N'S'L'} \end{aligned} \quad (23.15a)$$

Матричные элементы (23.15a) будут обращаться в нуль, кроме случаев, когда $S' = S$ и $L' = L$ или $L' = L \pm 1$ (и $J' = J$ или

$J' = J \pm 1$). Так как мы уже знаем отношение матричных элементов при различных m , m' и ρ [соотношение (23.9)],

$$V_{NSLJm; N'S'L'J'm'}^{(\rho)} = s_{J'm\rho}^{(J1)} \delta_{m+\rho, m'} V_{NSLJ; N'S'L'J'}, \quad (23.18)$$

можно подставить их конкретные значения и вычислить для этих значений их отношения для различных J и J' . Формулы для s примут наиболее простой вид, если подставить $m = J$, $m' = J'$ и $\rho = m' - m = J' - J$. Тогда, например, выражение (17.276) и табл. 4 на стр. 231 при $L' = L - 1$ $J' = J + 1$ приводят к следующему соотношению:

$$\begin{aligned} & s_{J, \mu, J-\mu}^{(LS)} \cdot s_{L-1, \mu, 1}^{(L1)} = \\ & = \frac{(-1)^{L-\mu} \sqrt{(L+S-J)!(2J+1)!}}{\sqrt{(J+L+S+1)!(J+S-L)!(J-S+L)!}} \times \\ & \times \sqrt{\frac{(L+\mu)!(S+J-\mu)! \sqrt{(L-\mu-1)(L-\mu)}}{(L-\mu)!(S-J+\mu)! \sqrt{2L(2L+1)}}} = \\ & = \frac{(-1)^{L-1-(\mu+1)} \sqrt{(L-1+S-J-1)!(2J+3)!}}{\sqrt{(J+1+L-1+S+1)!(J+1+S-L+1)!(J+1-S+L-1)!}} \times \\ & \times \sqrt{\frac{(L+\mu)!(S+J-\mu)!}{(L-\mu-2)!(S-J+\mu)!}} \times \\ & \times \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}} = \\ & = s_{J+1, \mu+1, J-\mu}^{(L-1, S)} \times \\ & \times \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}}. \end{aligned}$$

Пользуясь соотношением (23.16) и вышеприведенным равенством, получаем

$$\begin{aligned} & V_{NSLJJ, N'SL-1J+1J+1}^{(1)} = \sum_{\mu} s_{J, \mu, J-\mu}^{(LS)} s_{L-1, \mu, 1}^{(L1)} s_{J+1, \mu+1, J-\mu}^{(L-1, S)} v_{N'SL; NSL-1} = \\ & = \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1} \end{aligned}$$

для суммы матричных элементов (23.15а). Поэтому подстановка $s_{J+1, J, 1}^{(J1)} = 1$ в (23.18) для $V_{NSLJ; N'S'L'J'}$ дает

$$\begin{aligned} & V_{NSLJ; N'SL-1J+1} = \\ & = \sqrt{\frac{(L+S-J-1)(L+S-J)(J+S-L+1)(J+S-L+2)}{(2J+2)(2J+3)2L(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1} \end{aligned} \quad (23.19a)$$

Аналогичные формулы

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SL-1J} = \\
 & = \sqrt{\frac{(L+S-J)(J+S-L+1)(J-S+L)(J+L+S+1)}{2J(2J+2)(L)(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1'}
 \end{aligned} \quad (23.19б)$$

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SL-1J-1} = \\
 & = \sqrt{\frac{(J-S+L-1)(J-S+L)(J+S+L)(J+L+S+1)}{2J(2J-1)(2L)(2L+1)}} v_{NSL; N'SL-1}
 \end{aligned} \quad (23.19в)$$

могут быть выведены таким же путем. Эти равенства вместе с (23.18) дают выражения для всех матричных элементов операторов дипольных переходов между волновыми функциями двух мультиплетов через одну и ту же величину $v_{NSL; N'SL-1}$. Орбитальные квантовые числа этих двух мультиплетов равны L и $L' = L - 1$. Аналогичное вычисление при $L' = L$ дает:

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SLJ+1} = \\
 & = \sqrt{\frac{(L+S-J)(J-S+L+1)(J+S-L+1)(J+L+S+2)}{(2J+2)(2J+3)(2L)(L+1)}} v_{NSL; N'SL}
 \end{aligned} \quad (23.19г)$$

$$\begin{aligned}
 & V_{NSLJ; N'SLJ-1} = \\
 & = -\sqrt{\frac{(L+S-J+1)(J-S+L)(J+S-L)(J+L+S+1)}{2J(2J-1)(2L)(L+1)}} v_{NSL; N'SL}
 \end{aligned} \quad (23.19д)$$

В этом случае $s_{L, \mu, J'-J}^{(L1)}$ были частично скомбинированы с первым и частично со вторым множителем в (23.15а). Лишь вывод соответствующей формулы для $L' = L$ и $J' = J$ требует специального рассмотрения; коэффициенты $s_{L\mu 0}^{(L1)}$ должны быть разбиты на сумму двух слагаемых

$$s_{L\mu 0}^{(L1)} = \frac{\mu}{\sqrt{L(L+1)}} = \frac{L}{\sqrt{L(L+1)}} - \frac{\sqrt{L-\mu} \sqrt{L-\mu}}{\sqrt{L(L+1)}}.$$

Суммирование в (23.15а) с первым членом может быть выполнено непосредственно, если воспользоваться соотношениями ортогональности (23.16); тогда сумма по μ дает

$$v_{NSL; N'SL} \frac{L}{\sqrt{L(L+1)}}.$$

Суммирование со вторым членом может быть выполнено, если учесть, что

$$\begin{aligned} s_{J, \mu, J-\mu}^{(LS)} \sqrt{L-\mu} &= \frac{(-1)^{L-\mu} \sqrt{(L+S-J)! (2J+1)!}}{\sqrt{(J+S+L+1)! (J+S-L)! (J-S+L)!}} \times \\ &\times \sqrt{\frac{(L+\mu)! (J+S-\mu)!}{(L-\mu-1)! (S-J+\mu)!}} = \\ &= -s_{J+\frac{1}{2}, \mu+\frac{1}{2}, J-\mu}^{(L-\frac{1}{2}, S)} \sqrt{\frac{(L+S-J)(J+S-L+1)}{2J+2}}, \end{aligned}$$

и соотношения ортогональности (23.16). При этом для (23.15а) получаем

$$\begin{aligned} \sum_{\mu} (s_{J, \mu, J-\mu}^{(LS)})^2 s_{L\mu 0}^{(L1)} &= \frac{L}{\sqrt{L(L+1)}} - \frac{(L+S-J)(J+S-L+1)}{(2J+2)\sqrt{L(L+1)}} = \\ &= \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2(J+1)\sqrt{L(L+1)}}, \end{aligned}$$

откуда окончательно имеем

$$V_{NSLJ; N'SLJ} = \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}\sqrt{L(L+1)}} v_{NSL; N'SL}. \quad (23.19e)$$

Отношения матричных элементов для $L' = L + 1$ могли бы быть получены прямыми вычислениями того же рода; с другой стороны, заметим, что из эрмитовости оператора $V^{(0)}$ следует, что

$$V_{N'SL-1 J' m'; NSLJ m}^{(0)*} = V_{NSLJ m; N'SL-1 J' m'}^{(0)}$$

Следовательно, рассматриваемые отношения могут быть вычислены с помощью формул (23.19а) — (23.19в).

Формулы (23.19а) — (23.19е) представляют собой формулы для интенсивностей Хёнля — Кронига, дающие отношения интенсивностей компонент тонкой структуры линии. Чтобы получить полную интенсивность компоненты тонкой структуры $NSLJ \rightarrow N'S'L'J'$, следует просуммировать интенсивности $|V_{NSLJ m; N'S'L'J' m'}^{(\rho)}|^2$ отдельных зеемановских компонент по всем значениям m, m' и ρ :

$$\begin{aligned} \sum_{m' m} \sum_{\rho} |V_{NSLJ m; N'S'L'J' m'}^{(\rho)}|^2 &= \sum_{m m'} |V_{NSLJ; N'S'L'J'} s_{J' m, m'-m}^{(J1)}|^2 = \\ &= |V_{NSLJ; N'S'L'J'}|^2 \sum_m 1 = (2J+1) |V_{NSLJ; N'S'L'J'}|^2. \end{aligned}$$

Поэтому полная интенсивность линии $J \rightarrow J'$ определяется прежде всего матричным элементом $V_{NSLJ; N'S'L'J'}$.

Формула Ланде

7. Второе приложение формулы (23.19е) связано с эффектом Зеемана. Взаимодействие магнитного поля с атомом описывается двумя дополнительными членами гамильтониана. Первым членом является $V = \eta \mathcal{H} L_z$, где $\eta = e/2m_0c$ и m_0 — масса электрона. Этот член описывает взаимодействие магнитного поля с токами, создаваемыми движением электронов; он имеет тот же самый вид, что и в простой теории Шредингера [см. (18.6) и (18.7)]. Действие оператора L_z заключается просто в умножении волновой функции на Z -компоненту момента количества движения:

$$L_z \psi_{x\mu}^{NSL} = \mu \hbar \psi_{x\mu}^{NSL}. \quad (23.20)$$

Поэтому, согласно (22.25),

$$L_z \mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL} = \sum_x L_z \psi_{x\mu}^{NSL} f_{xy}^{(S)} = \hbar \sum_x \mu \psi_{x\mu}^{NSL} f_{xy}^{(S)} = \mu \hbar \mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL},$$

так что в этом случае $\nu_{NSL}; N'S'L'$ принимает вид

$$(\mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL}, L_z \mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL}) = \mu \hbar = \nu_{NSL}; NSL \frac{\mu}{\sqrt{L(L+1)}},$$

как следует из сравнения с (23.14). Согласно (23.19е), это дает

$$V_{NSLJ; NSLJ} = \hbar \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2\sqrt{J(J+1)}}. \quad (23.20a)$$

Тогда соотношение (23.18) показывает, что матричные элементы оператора L_z равны

$$(\Psi_m^{NSLJ}, L_z \Psi_m^{NSLJ}) = m \hbar \frac{J(J+1) + L(L+1) - S(S+1)}{2J(J+1)}. \quad (23.21)$$

Второй член \bar{V} оператора магнитной энергии в гамильтониане описывает взаимодействие магнитного поля со спиновым магнитным моментом электрона; он равен скалярному произведению магнитного момента на напряженность поля, т. е. ($\eta = e/2m_0c$)

$$2\eta(\mathbf{s}_x \mathcal{H}_x + \mathbf{s}_y \mathcal{H}_y + \mathbf{s}_z \mathcal{H}_z), \quad (23.22)$$

или в случае нескольких электронов — сумме членов вида (23.22). Если магнитное поле направлено по оси Z , то $\bar{V} = 2\eta \mathcal{H} S_z$, где S_z есть Z -компонента полного спина. Соответствующим оператором является умножение на

$$\frac{1}{2} \hbar (s_1 + s_2 + \dots + s_n) = S_z, \quad (23.22a)$$

так как \mathbf{S}_z представляет собой, согласно (20.21), умножение на s . Будет показано, что

$$\mathbf{S}_z \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{Q}_{\{\alpha, 0, 0\}} \Psi \Big|_{\alpha=0}. \quad (23.23a)$$

Это соотношение аналогично (18.7):

$$\mathbf{L}_z \Psi = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{P}_{\{\alpha, 0, 0\}} \Psi \Big|_{\alpha=0}. \quad (23.23b)$$

Множитель $1/2$ появляется в (23.22a) вследствие того, что спин представляет собой момент количества движения, равный $\hbar/2$. Так как $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\alpha, 0, 0)_{\frac{1}{2}s, \frac{1}{2}t} = \delta_{st} e^{\frac{1}{2}i s \alpha}$, то соотношение, определяющее \mathbf{Q}_R [см. (21.66)], принимает вид

$$\begin{aligned} \mathbf{Q}_{\{\alpha, 0, 0\}} \Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots) &= \\ &= \sum_{t_1 \dots t_n = \pm 1} \dots \mathfrak{D}^{(1/2)}(\{\alpha, 0, 0\})_{\frac{1}{2}s_k, \frac{1}{2}t_k} \dots \Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, t_k, \dots) = \\ &= \sum_{t_1, \dots, t_n} \dots \delta_{s_k t_k} e^{\frac{1}{2}i s_k \alpha} \dots \Psi(\dots, x_k, y_k, z_k, t_k, \dots) = \\ &= e^{\frac{1}{2}i (s_1 + \dots + s_n) \alpha} \Psi, \end{aligned}$$

откуда непосредственно следует равенство (23.23a).

Поэтому имеем также

$$(\mathbf{E}_{\nu\mu}^{NSL}, \mathbf{S}_z \mathbf{E}_{\nu\mu}^{NSL}) = \nu\hbar. \quad (23.226)$$

Теперь \mathbf{S}_z является скаляром по отношению к \mathbf{P}_R и вектором по отношению к \mathbf{Q}_R , тогда как \mathbf{L}_z является вектором относительно \mathbf{P}_R и скаляром относительно \mathbf{Q}_R . При вычислении выражения $(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{S}_z \Psi_m^{NSLJ})$ с помощью величин (23.226) L и S следует поэтому поменять местами, после чего вместо (23.21) получим

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{S}_z \Psi_m^{NSLJ}) = m\hbar \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (23.24)$$

Матричные элементы полного оператора взаимодействия с магнитным полем $\mathbf{V} + \bar{\mathbf{V}} = \eta \mathcal{H} \mathbf{L}_z + 2\eta \mathcal{H} \mathbf{S}_z$ можно вычислить, если сложить (23.21) и удвоенную величину матричного элемента (23.24). Смещение зеемановских компонент с магнитным квантовым числом m оказывается равным

$$\Delta E_m = \frac{e\hbar \mathcal{H}}{2m_0 c} m \frac{3J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (23.25)$$

Это обычная формула Ланде. Она показывает, что вследствие аномального (вдвое большего, чем классическое значение) магнитного момента, связанного со спином электрона, различные уровни в магнитном поле расщепляются по-разному. Действительное расщепление получается, если расщепление $\eta \mathcal{H} m$ нормального эффекта Зеемана умножить на

$$g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}. \quad (23.25a)$$

Вывод формул (23.19) и аналогичных формул можно упростить, если заметить, что вычисляемые отношения матричных элементов не должны [согласно (23.15)] зависеть от конкретной механической задачи и от частного вида оператора $\mathbf{T}^{(pq)}$ и могут зависеть только от их трансформационных свойств. Действительно, вычисляемые отношения являются просто суммами произведений коэффициентов $s_{\mu\nu}^{(LS)}$. Однако все s являются просто числами, задаваемыми выражением (17.27), так что эти отношения одинаковы для всех операторов с одинаковыми трансформационными свойствами. Таким образом, они могут быть вычислены для любого тензора с нужными трансформационными свойствами (23.13a) и (23.13б), причем результаты распространяются на все тензоры с одинаковыми p и q .

Правило интервалов

8. В качестве примера выведем правило интервалов Ланде, т. е. отношение сдвигов уровней

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{H}_1 \Psi_m^{NSLJ}) = \Delta E_J^{NSL}$$

для различных компонент тонкой структуры одного и того же уровня основной структуры. Оператор \mathbf{H}_1 представляет собой добавку к простому оператору энергии Шредингера, описывающую магнитные моменты электронов.

Оператор \mathbf{H}_1 состоит из двух частей. Первая часть дает взаимодействие магнитных моментов электронов с токами, вызванными их движением; вторая же дает взаимодействие магнитных моментов между собой.

Первая (почти всегда бóльшая) часть состоит из суммы n выражений $\mathbf{V} = \mathbf{V}_1 + \mathbf{V}_2 + \dots + \mathbf{V}_n$, где \mathbf{V}_k описывает взаимодействие магнитного момента k -го электрона с токами. Кроме декартовых координат, \mathbf{V}_k действует на спиновые координаты только

k -го электрона ¹⁾, так что

$$\mathbf{B}_k = s_{kx} \mathbf{V}_{kx} + s_{ky} \mathbf{V}_{ky} + s_{kz} \mathbf{V}_{kz}, \quad (23.26)$$

где \mathbf{V}_{kx} , \mathbf{V}_{ky} , \mathbf{V}_{kz} — бесспиновые операторы. Так как \mathbf{B}_k должен быть скаляром по отношению к \mathbf{O}_R и так как s_{kx} , s_{ky} , s_{kz} являются компонентами векторного оператора, операторы \mathbf{V}_{kx} , \mathbf{V}_{ky} , \mathbf{V}_{kz} также должны быть компонентами векторного оператора.

Вместо отношений всех матричных элементов оператора \mathbf{B}

$$(\Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{B} \Psi_m^{NSLJ}) : (\Psi_m^{NSLJ'}, \mathbf{B} \Psi_m^{NSLJ'}),$$

которые мы хотим вычислить, можно просто вычислить это отношение для одного \mathbf{B}_k — эти отношения одинаковы для всех k . Кроме того, $s_{kx} \mathbf{V}_{kx}$, $s_{ky} \mathbf{V}_{ky}$, $s_{kz} \mathbf{V}_{kz}$ являются xx -, yy - и zz -компонентами тензора, который удовлетворяет соотношениям (23.13а) и (23.13б) и является вектором в обоих смыслах ($p = q = 1$). Поэтому отношение любых двух из выражений

$$\begin{aligned} & (\Psi_m^{NSLJ}, s_{kx} \mathbf{V}_{kx} \Psi_m^{NSLJ}), \quad (\Psi_m^{NSLJ}, s_{ky} \mathbf{V}_{ky} \Psi_m^{NSLJ}), \\ & (\Psi_m^{NSLJ}, s_{kz} \mathbf{V}_{kz} \Psi_m^{NSLJ}) \end{aligned} \quad (23.27)$$

одинаково для всех аналогичных тензоров, причем это верно также и для отношений этих выражений к аналогичным выражениям, в которых J заменено на J' .

То же самое справедливо для суммы трех приведенных выражений (23.27), так что достаточно вычислить отношения матричных элементов

$$(\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{T}^{(xx)} + \mathbf{T}^{(yy)} + \mathbf{T}^{(zz)}) \Psi_m^{NSLJ}) \quad (23.28)$$

при различных J , где \mathbf{T} — произвольный оператор, векторный в обоих смыслах. Естественно, эти операторы будут выбраны так, чтобы вычисление выражения (23.28) было наиболее простым. Пусть

$$\mathbf{T}^{(xx)} = L_x S_x, \quad \mathbf{T}^{(yy)} = L_x S_y, \quad \mathbf{T}^{(zz)} = L_x S_z, \dots \quad (23.29)$$

Тогда прежде всего

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} = \mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{P}_{\{\alpha 00\}} + \mathbf{P}_{\{\alpha 00\}} \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{Q}_{\{\alpha 00\}}. \quad (23.30)$$

¹⁾ Всякий оператор, действующий только на k -ю спиновую координату, можно записать в виде $\mathbf{S}_0 + s_{kx} \mathbf{V}_{kx} + s_{ky} \mathbf{V}_{ky} + s_{kz} \mathbf{V}_{kz}$, где \mathbf{S}_0 , \mathbf{V}_{kx} , \mathbf{V}_{ky} и \mathbf{V}_{kz} являются бесспиновыми операторами. В выражение для \mathbf{B}_k член \mathbf{S}_0 не входит. Однако, даже если бы он входил, он должен быть скаляром по отношению как к \mathbf{P}_R , так и к \mathbf{Q}_R . Он соответствовал бы в (23.13а) и (23.13б) случаю $p = q = 0$ и вызывал бы, согласно (23.17), одинаковое смещение всех компонент тонкой структуры без изменения расщепления.

При $\alpha = 0$, согласно (23.23а) и (23.23б), это дает

$$\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} \Big|_{\alpha=0}. \quad (23.30a)$$

Поскольку $\mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} \Psi = \exp(im\alpha) \Psi$, отсюда следует, что

$$(\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z) \Psi_m = m\hbar \Psi_m \quad (23.31)$$

и

$$(\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2 \Psi_m = m^2 \hbar^2 \Psi_m. \quad (23.31a)$$

Таким образом, получаем

$$\sum_{m=-J}^J (\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2 \Psi_m^{NSLJ}) = \sum_{m=-J}^J m^2 \hbar^2 = \frac{\hbar^2 J(J+1)(2J+1)}{3}. \quad (23.32)$$

В этом выражении z можно заменить на x или y , так как после суммирования по m нельзя различить оси координат. Чтобы показать это, предположим, что \mathbf{O}_R представляет вращение, переводящее ось Z в ось X . Тогда (23.32) принимает вид

$$\begin{aligned} \sum_m (\mathbf{O}_{R^{-1}} \Psi_m^{NSLJ}, \mathbf{O}_{R^{-1}} (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2 \mathbf{O}_R \cdot \mathbf{O}_{R^{-1}} \Psi_m^{NSLJ}) &= \\ = \sum_m \sum_{m' m''} \mathfrak{D}^{(J)}(R^{-1})_{m' m''}^* \mathfrak{D}^{(J)}(R^{-1})_{m'' m} (\Psi_{m'}^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 \Psi_{m''}^{NSLJ}) &= \\ = \sum_{m' m''} \delta_{m' m''} (\Psi_{m'}^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 \Psi_{m''}^{NSLJ}) &= \\ = \sum_m (\Psi_m^{NSLJ}, (\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 \Psi_m^{NSLJ}). \end{aligned}$$

Следовательно,

$$\begin{aligned} \sum_m (\Psi_m^{NSLJ}, [(\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 + (\mathbf{L}_y + \mathbf{S}_y)^2 + (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2] \Psi_m^{NSLJ}) &= \\ = \hbar^2 J(J+1)(2J+1). \end{aligned} \quad (23.33)$$

Но, поскольку $(\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 + (\mathbf{L}_y + \mathbf{S}_y)^2 + (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2$ есть скаляр, т. е. оператор, симметричный относительно \mathbf{O}_R , все $2J+1$ членов в левой части (23.33) одинаковы и равны

$$\begin{aligned} (\Psi_m^{NSLJ}, [(\mathbf{L}_x + \mathbf{S}_x)^2 + (\mathbf{L}_y + \mathbf{S}_y)^2 + (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z)^2] \Psi_m^{NSLJ}) &= \\ = \hbar^2 J(J+1). \end{aligned} \quad (23.33a)$$

Для орбитального момента количества движения из

$$\mathbf{L}_z \mathfrak{E}_{\nu\mu}^{NSL} = \mu \hbar \mathfrak{E}_{\nu\mu}^{NSL} \quad (23.34)$$

аналогичным образом следует, что

$$(\mathfrak{E}_{\nu\mu}^{NSL}, (\mathbf{L}_x^2 + \mathbf{L}_y^2 + \mathbf{L}_z^2) \mathfrak{E}_{\nu\mu}^{NSL}) = \hbar^2 L(L+1). \quad (23.35)$$

Тогда из (23.11) и соотношений ортогональности (17.28) следует, что

$$(\Psi_m^{NSLJ}, (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) \Psi_m^{NSLJ}) = \hbar^2 L(L+1), \quad (23.35a)$$

так как $L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ является скаляром в обоих смыслах. Аналогично для спина из соотношений

$$S_z \mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} \Omega_{\{\alpha 00\}} \mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL} = \nu \hbar \mathbb{E}_{\nu\mu}^{NSL} \quad (\alpha = 0) \quad (23.36)$$

следует, что

$$(\Psi_m^{NSLJ}, (S_x^2 + S_y^2 + S_z^2) \Psi_m^{NSLJ}) = \hbar^2 S(S+1). \quad (23.36a)$$

Вычитая (23.35a) и (23.36a) из (23.33a), получаем

$$\begin{aligned} (\Psi_m^{NSLJ}, (L_x S_x + L_y S_y + L_z S_z) \Psi_m^{NSLJ}) &= \\ &= \frac{1}{2} \hbar^2 [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \end{aligned} \quad (23.37)$$

Согласно предыдущему, сдвиги компонент тонкой структуры одного и того же уровня основной структуры пропорциональны матричным элементам (23.37):

$$\Delta E_J^{NSL} = \epsilon_{NSL} [J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]. \quad (23.37a)$$

Поэтому разность между смещениями уровней двух последовательных компонент тонкой структуры

$$\Delta E_{J+1}^{NSL} - \Delta E_J^{NSL} = 2\epsilon_{NSL} (J+1) \quad (23.37b)$$

пропорциональна большему из двух квантовых чисел полного момента. Это и есть *правило интервалов Ланде*.

Правило интервалов Ланде справедливо только в случае нормальной связи, т. е. в случае, когда расщепление тонкой структуры мало по сравнению с расстояниями между уровнями основной структуры. Кроме того, оно подразумевает предположение о том, что взаимодействиями между спиновыми магнитными моментами можно пренебречь. Как показал Гейзенберг¹⁾, это предположение не оправдывается для всех легких элементов, особенно для He. Поэтому правило интервалов лучше всего выполняется для элементов со средними атомными номерами.

Взаимодействие спиновых магнитных моментов между собой состоит из двух частей. Первая часть представляет собой скаляр

¹⁾ См. W. Heisenberg, Zs. f. Phys., 39, 499 (1926).

в обоих смыслах и поэтому никак не влияет на тонкую структуру. Вторая часть принадлежит $\mathfrak{D}^{(2)}$ в обоих отношениях. В целом получается смещение уровней¹⁾, пропорциональное $[J(J+1) - L(L+1) - S(S+1)]^2$, наряду с членом вида (23.37а) и членом, не зависящим от J . Отношение константы пропорциональности этого члена к ϵ_{NSL} не может быть определено из общих соображений, так что если учтено спин-спиновое взаимодействие, формула интервалов содержит *две неопределенные* постоянные.

¹⁾ Доказательство предоставляется читателю. См. также G. A g a k i, Progr. Theor. Phys. (Kyoto), 3, 152 (1948).

КОЭФФИЦИЕНТЫ РАКА

Выводы формул Хёня — Кронига для интенсивностей и правила интервалов Ланде, изложенные в предыдущей главе, представляют частные случаи вычисления матричных элементов неприводимого тензорного оператора, с заданными трансформационными свойствами не только относительно вращений всех координат, но также относительно вращений спиновых и обычных координат в отдельности. Операторы $T^{(\sigma\rho)}$ этого рода были определены¹⁾ в соотношениях (23.13а) и (23.13б). Операторы, неприводимые относительно одновременных вращений как спинов, так и пространственных координат, могут быть получены из них с помощью линейных комбинаций:

$$T_{\omega}^{(\tau)} = \sum_p s_{\omega p \tau - p}^{(qp)} T_{qp}^{(p, \tau-p)}. \quad (24.1)$$

Используя соотношения (23.13а), (23.13б) и (17.16б), а также соотношения ортогональности (17.28) для s , легко показать, что

$$O_R^{-1} T_{\omega}^{(\tau)} O_R = D^{(\omega)}(R)_{\tau\tau'} T_{\omega}^{(\tau')}. \quad (24.1a)$$

Фактически оператор этого рода уже рассматривался при выводе правила интервалов Ланде. Оператор спин-орбитального взаимодействия есть скаляр ($\omega = 0$), составленный из операторов, являющихся векторами как по отношению к вращению спинов ($q = 1$), так и по отношению к вращением координат ($p = 1$).

Аналогично, волновые функции Ψ_m^{NSLJ} и $\Psi_{m'}^{N'S'L'J'}$, которые входят в матричный элемент, имеют определенные трансформационные свойства (определяемые квантовым числом J) по отношению к вращением всех координат. Эти волновые функции имеют

¹⁾ Читатель помнит, что $T^{(\sigma\rho)}$ есть $\sigma\rho$ -компонента тензора ранга q по отношению к спиновым вращением O_R и ранга p по отношению к вращением координат P_R . Оператор $T_{\omega}^{(\tau)}$ в (24.1) является компонентой τ тензора ранга ω по отношению к совместным вращением координат и спинов $O_R = O_R P_R$.

также определенные трансформационные свойства по отношению к вращениям спиновых и обычных координат в отдельности. Двумя соответствующими квантовыми числами являются S и L . В результате матричные элементы вида

$$(\Psi_{m'}^{N'S'L'J'}, T_{\omega}^{(\tau)} \Psi_m^{NSLJ}) \quad (24.E.1)$$

для всех допустимых значений $J, J', \omega, m, m', \tau$ могут быть выражены через одну постоянную. Этими допустимыми значениями являются просто те значения, для которых существуют Ψ и T_{ω} . Значения J ограничиваются векторным сложением: $|S - L| \leq J \leq S + L$; ограничением для m будет $-J \leq m \leq J$ и т. д. Трудность, с которой мы встретились при вычислениях, заключалась в том, что выражение, полученное при использовании характеристик волновых функций и операторов по отношению к вращениям всех координат J, J', ω , не находится в естественной связи с выражением, получаемым при использовании трансформационных свойств по отношению к вращениям спиновых и обычных координат в отдельности. Выражение (23.18) является выражением первого рода, а выражение (23.15а) — выражением последнего рода. В вычислении, следующем за (23.18), выражение (23.15а) преобразуется к виду (23.18). Возможность такого преобразования показывает, что между коэффициентами векторного сложения s имеются важные соотношения, которые до сих пор еще не рассматривались. Дальнейшее изложение в этой главе будет посвящено более подробно изучению свойств представлений $\mathfrak{D}^{(J)}$ (в частности, условий их вещественности), симметрии коэффициентов векторного сложения [уже упоминавшихся в связи с формулами (17.27)] и, наконец, общей форме соотношений, которые позволили нам, в частности, преобразовать выражение (23.15а) к виду (23.18).

Важность явных и общих формул для сравнения матричных элементов вида (24.E.1) с различными $J, J', \omega, m, m', \tau$ была ясно показана в книге Кондона и Шортли¹⁾. Явный вид общих формул для такого сравнения впервые указал Ракá²⁾. За последнее время по этому вопросу был опубликован ряд монографий³⁾, которые рассматривают его значительно подробнее, чем это сделано в настоящей главе.

1) См. цитированную на стр. 186 книгу В. Кондона и Г. Шортли.

2) См. цитированные на стр. 227 работы Ракá. См. также У. Фано, G. Racah, Irreducible Tensorial Sets, New York, 1959.

3) См. цитированную на стр. 215 монографию М. Роуза, а также A. R. Edmonds, Angular Momentum in Quantum Mechanics, Princeton University Press, 1957. В последней монографии наши $s_{J\mu\nu}^{(LS)}$ обозначены через $(L\mu S\nu | LSJ\mu + \nu)$.

Комплексно-сопряженные представления

Условия вещественности неприводимых представлений играют существенную роль в дальнейшем анализе. Эти результаты были получены впервые двумя основателями теории представлений — Фробениусом и Шуром¹⁾, и мы воспользуемся ими также в гл. 26.

В предыдущих главах были описаны различные способы получения новых представлений из заданного представления или из пары представлений. К ним будет добавлен новый, хотя и вполне очевидный путь: переход к комплексному сопряжению. Если $D(R)$ образуют представление группы, то и $(D(R))^*$ образует представление, т. е. представление образуют матрицы, элементы которых являются комплексно-сопряженными элементам $D(R)$. Ясно, что из соотношения $D(R)D(S) = D(RS)$ следует $D(R)^*D(S)^* = D(RS)^*$. Далее, если представление $D(R)$ неприводимо, то это же относится и к комплексно-сопряженному представлению $D(R)^*$. Если преобразование с матрицей S преобразует все $D(R)$ к приведенному виду, показанному на стр. 105, то S^* будет приводить $D(R)^*$ к аналогичному виду.

Комплексное сопряжение приводит к важному различию между неприводимыми представлениями: представление $D(R)^*$ может быть либо эквивалентным, либо неэквивалентным представлению $D(R)$. Так как характер представления $D(R)^*$ является комплексно-сопряженным характеру $\chi(R)$ представления $D(R)$ и так как два представления эквивалентны, если совпадают их характеры (см. стр. 106), то представление $D(R)$ будет эквивалентным комплексно-сопряженному представлению $D(R)^*$, если его характер веществен, т. е. если все числа $\chi(R)$ вещественны. В противном случае $D(R)$ и $D(R)^*$ будут неэквивалентными.

Формулы (15.26) и (15.28) показывают, что все неприводимые представления трехмерной группы вращений, а также двумерной унитарной группы, имеют вещественные характеры. То же самое относится ко всем группам, в которых каждый элемент находится в том же классе, что и обратный ему. В этом легче всего убедиться, если рассматривать представления в унитарном виде. Тогда из соотношения

$$D(R^{-1}) = D(R)^\dagger \quad (24.2)$$

следует, что характеры матриц для R и R^{-1} являются комплексно-сопряженными. Если R и R^{-1} принадлежат одному и тому же классу, характеры R и R^{-1} также равны. Следовательно, они вещественны. Такое положение имеет место в случае трехмерной группы вращений, двумерной унитарной группы, а также в случае группы *всех* двумерных вещественных ортогональных матриц. Оно не относится к группе двумерных чистых вращений, и эта последняя имеет представления как с вещественными, так и с комплексными характерами (см. гл. 14).

¹⁾ G. Frobenius, I. Schur, Berl. Ber., 1906, S. 186.

Если $D(R)$ унитарно и имеет вещественный характер, то существует такая унитарная матрица C , которая преобразует $D(R)^*$ в $D(R)$. Тогда

$$CD(R) = D(R)^*C. \quad (24.3)$$

Если представление $D(R)$ неприводимо, то C в (24.3) определяется однозначно, с точностью до постоянного множителя. Кроме того, матрица C либо симметрична, либо антисимметрична. Чтобы доказать эту теорему, возьмем соотношение, комплексно-сопряженное соотношению (24.3), и умножим его на C слева. Тогда

$$CC^*D(R)^* = CD(R)C^* = D(R)^*CC^*. \quad (24.3a)$$

Последнее выражение получается, если снова использовать (24.3). Если представление $D(R)^*$ неприводимо, то матрица CC^* , которая коммутирует с ним, должна быть кратной единичной матрице: $CC^* = c1$. Кроме того, поскольку C унитарна, $C^T C^* = 1$; отсюда вытекает, что $C = cC^T$. Транспонирование этого соотношения дает $C^T = cC$, так что $C = c^2C$, $c = \pm 1$. Это дает

$$C = \pm C^T. \quad (24.36)$$

Далее, легко убедиться в том, что если C симметрична для представления $D(R)$, то она будет симметрична и для эквивалентного представления $S^{-1}D(R)S$. Аналогичное утверждение относится и к тому случаю, когда C антисимметрична, так что возможность, следующая из (24.36), дает классификацию неприводимых представлений с вещественными характерами на представления, для которых $C = C^T$, и представления, для которых $C = -C^T$.

Резюмируем полученные выше результаты. Если $D(R)$ есть унитарное неприводимое представление, то таким же будет представление $D(R)^*$. Представления $D(R)$ и $D(R)^*$ неэквивалентны, если $\chi(R)$ комплексны для любых R . Неприводимое представление этого рода будет называться комплексным. Если $\chi(R)$ вещественны, то $D(R)$ и $D(R)^*$ эквивалентны. Унитарная матрица C , которая преобразует одно из них в другое, либо симметрична, либо антисимметрична. В первом случае представление будет называться потенциально-вещественным, а во втором случае — псевдовещественным.

Основание для такой терминологии заключается в том, что $D(R)$ фактически можно придать вещественный вид, если матрица C в соотношении (24.3) симметрична. Это следует из следующей леммы¹⁾. Если матрица C одновременно симметрична

¹⁾ Эта лемма играет важную роль в теории матрицы рассеяния.

и унитарна, то можно считать ее собственные векторы вещественными. Из

$$Cv = \omega v \quad (24.4)$$

при умножении слева на $C^{-1} = C^{\dagger} = C^*$ следует, что $v = \omega C^* v$. Поскольку модуль собственного значения унитарной матрицы равен 1, комплексное сопряжение последнего соотношения дает

$$Cv^* = \omega v^*. \quad (24.4a)$$

Если v и v^* различны, то они могут быть заменены их вещественной и мнимой частями. Если v и v^* различаются лишь постоянным множителем, они могут быть заменены их вещественной или мнимой частями. Отсюда вытекает, что симметричная унитарная матрица C может быть записана в виде

$$C = r^{-1} \omega r, \quad (24.4b)$$

где r — вещественная ортогональная матрица, $r^{\dagger} r = 1$, а ω — диагональная матрица. Запишем ω в виде квадрата другой диагональной матрицы ω_1 ; модуль диагональных элементов матрицы ω_1 равен 1, причем $\omega_1^{-1} = \omega_1^*$. Следовательно, (24.3) принимает вид

$$r^{-1} \omega_1^2 r D(R) = D(R)^* r^{-1} \omega_1^2 r$$

или, если умножить это равенство на $\omega_1^{-1} r = \omega_1^* r$ слева и на $r^{-1} \omega_1^{-1} = r^{-1} \omega_1^*$ справа,

$$\omega_1 r D(R) r^{-1} \omega_1^* = \omega_1^* r D(R)^* r^{-1} \omega_1. \quad (24.4b)$$

Левая и правая части последнего равенства являются комплексно-сопряженными друг другу; следовательно, обе части равенства вещественны. Отсюда следует, что $D(R)$ становится вещественным, если его подвергнуть преобразованию $r^{-1} \omega_1^* = (\omega_1 r)^{-1}$. Обратное, если $D(R)$ может быть преобразовано к вещественному представлению, матрица C должна быть симметричной. Ясно, что C симметрична (а именно, является постоянной матрицей), если $D(R)$ уже вещественно. Поэтому она симметрична для всякой другой формы этого представления. Далее, отсюда следует, что если C в (24.3) антисимметрична, то $D(R)$ не может быть сделано вещественным с помощью преобразования подобия.

Определим, наконец, матрицу $C^{(j)}$, которая преобразует неприводимое представление $\mathfrak{D}^{(j)}$ трехмерной группы вращений в комплексно-сопряженное представление $\mathfrak{D}^{(j)*}$. Матрицы $C^{(j)}$ играют также важную роль в квантовой теории поля. Так как соотношение (24.3) должно выполняться для всякого вращения, применим его прежде всего к вращению на угол α вокруг оси Z . В этом

случае $\mathfrak{D}^{(j)}$ является диагональной матрицей и nm -элементы левой и правой частей (24.3) равны

$$C_{nm}^{(j)} e^{im\alpha} = e^{-in\alpha} C_{nm}^{(j)}. \quad (24.5)$$

Так как это равенство должно выполняться для любого α , матричный элемент $C_{nm}^{(j)}$ обращается в нуль во всех случаях, кроме случая $n + m = 0$,

$$C_{nm}^{(j)} = c_m^{(j)} \delta_{n, -m}. \quad (24.5a)$$

Применим затем (24.3) к произвольному элементу группы, но выпишем только $(-j, \mu)$ -элемент (24.3). Соответствующие $\mathfrak{D}^{(j)}$ особенно просты. Имеем

$$c_j^{(j)} \mathfrak{D}^{(j)} (\{\alpha\beta\gamma\})_{j\mu} = \mathfrak{D}^{(j)} (\{\alpha\beta\gamma\})_{-j-\mu}^* c_\mu^{(j)}, \quad (24.56)$$

или, в силу (15.27a) и (15.27b),

$$\begin{aligned} c_j^{(j)} \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2} \beta e^{i\mu\gamma} = \\ = (-1)^{j-\mu} \sqrt{\binom{2j}{j+\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2} \beta e^{i\mu\gamma} c_\mu^{(j)}, \end{aligned}$$

откуда

$$c_\mu^{(j)} = c_j^{(j)} (-1)^{j-\mu}, \quad (24.5b)$$

так как $j - \mu$ всегда является целым числом¹⁾. Поскольку \mathbf{C} определяется из соотношения (24.3) только с точностью до множителя, выберем $c_j^{(j)} = 1$; тогда из (24.5a) получим

$$C_{nm}^{(j)} = (-1)^{j-m} \delta_{n, -m} = (-1)^{j+n} \delta_{n, -m}. \quad (24.6)$$

Все элементы матрицы $\mathbf{C}^{(j)}$ равны нулю, кроме тех, которые лежат на косоj диагонали. Эти элементы равны поочередно $+1$ и -1 , начиная с $+1$ в верхнем правом углу и кончая в нижнем левом углу числом $+1$, если j — целое число, и -1 , если j — полуцелое:

$$\mathbf{C}^{(j)} = \begin{pmatrix} 0 & \dots & 0 & 0 & 1 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 0 \\ 0 & \dots & 1 & 0 & 0 \\ \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \dots & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}. \quad (24.6a)$$

Поэтому \mathbf{C} симметрична для целых j и антисимметрична для полуцелых j ; первые из этих представлений потенциально-веще-

¹⁾ В настоящей книге все показатели основания (-1) являются целыми числами.

ственные, а последние — псевдовещественны. Мы замечаем также, что прямое произведение двух потенциально-вещественных представлений или двух псевдовещественных представлений содержит только потенциально-вещественные неприводимые компоненты. Неприводимые части прямого произведения потенциально-вещественного представления и псевдовещественного представления все псевдовещественны¹⁾. То обстоятельство, что представления $\mathfrak{D}^{(j)}$ с целыми j могут быть приведены к вещественному виду, можно было бы усмотреть из того факта, что мы могли бы использовать в (15.5) вещественные линейные комбинации $Y_m^l + Y_{-m}^l$ и $i(Y_m^l - Y_{-m}^l)$ сферических функций. Соответствующие \mathfrak{D}^l имели бы вещественный вид. Если в соотношение (24.3) подставить явное выражение матрицы \mathbf{C} , оно принимает вид

$$\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{m', m}^* = (-1)^{m-m'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{-m', -m}; \quad (24.7)$$

это может быть показано также непосредственно. Естественно, что вид $\mathbf{C}^{(j)}$ зависит от того, в какой форме взяты $\mathfrak{D}^{(j)}$, но симметричность или антисимметричность их не могут измениться.

Симметричная форма коэффициентов векторного сложения

Кoeffициенты векторного сложения были первоначально определены в (17.16) как элементы матрицы \mathbf{S} , которая преобразует прямое произведение двух представлений к приведенному виду (17.15). Они вошли в (17.18) — и это является их наиболее важной функцией в качестве коэффициентов, позволяющих образовать функции, принадлежащие m -й строке неприводимого представления $\mathfrak{D}^{(L)}$ из произведений функций ψ_μ и $\bar{\psi}_\nu$, принадлежащих соответственно μ -й строке $\mathfrak{D}^{(l)}$ и ν -й строке $\mathfrak{D}^{(\bar{l})}$. Они выполняют ту же функцию в (22.27), где волновая функция с квантовыми числами J, m была получена в виде

$$\Psi_m^J = \sum_{\mu} S_{J\mu m - \mu}^{(LS)} \mathbb{E}_{m-\mu, \mu}^{SL} \quad (24.8)$$

т. е. выражена через волновые функции \mathbb{E} , которые преобразуются операторами \mathbf{Q}_R и \mathbf{P}_R по представлениям $\mathfrak{D}^{(S)}$ и $\mathfrak{D}^{(L)}$ и принадлежат $(m - \mu)$ -й и μ -й строкам этих представлений соответственно.

¹⁾ См. дальнейшее обсуждение этих соотношений и других характеристик неприводимых представлений в работе: E. P. Wigner, Am. Journ. Math., 63, 57 (1941); см. также S. W. MacLeky, Am. Journ. Math., 73, 576 (1951).

Ни в одном из этих случаев три представления $\mathfrak{D}^{(L)}$, $\mathfrak{D}^{(l)}$, $\mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ или $\mathfrak{D}^{(l)}$, $\mathfrak{D}^{(s)}$, $\mathfrak{D}^{(L)}$ не входят симметрично. Формула (17.22)

$$\int \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu', \mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu', \nu} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\mu', +\nu'; \mu + \nu}^* dR = \frac{h s_{L\mu', \nu'}^{(l\bar{l})} s_{L\mu\nu}^{(l\bar{l})}}{2L+1} \quad (24.8a)$$

ближе всего подходит к удовлетворению этого требования, и она будет нашей отправной точкой; здесь $h = \int dR$ — объем группы. Несколько более симметричной формой соотношения (24.8a) является

$$\int \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu', \mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu', \nu} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{m', m}^* dR = \frac{h S_{Lm'; \mu', \nu'} S_{Lm; \mu\nu}}{2L+1}, \quad (24.8б)$$

где S — первоначальная матрица, которая преобразует $\mathfrak{D}^l \times \mathfrak{D}^{\bar{l}}$ к приведенному виду. Согласно (17.20a) и (17.20б),

$$S_{Lm; \mu\nu} = \delta_{m, \mu + \nu} s_{L\mu\nu}^{(\bar{l})}. \quad (24.8в)$$

Интеграл (24.8б) обращается в нуль во всех случаях, кроме случая $m' = \mu' + \nu'$ и $m = \mu + \nu$; при тех же условиях отличны от нуля и коэффициенты S . Поскольку $C^+ \mathfrak{D}^* C = C^T \mathfrak{D}^* C = \mathfrak{D}$, левая часть (24.8б) будет симметричной по l, \bar{l}, L , если умножить ее на $C_{m'\lambda'} C_{m\lambda}$ и просуммировать по m' и m . В правую часть можно подставить значение C из (24.6):

$$\begin{aligned} \int \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu', \mu} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu', \nu} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\lambda', \lambda} dR &= \\ &= \frac{h (-1)^{L-\lambda'} S_{L, -\lambda'; \mu', \nu'} (-1)^{L-\lambda} S_{L, -\lambda; \mu\nu}}{2L+1}. \end{aligned} \quad (24.8г)$$

Поэтому, если положить

$$\frac{(-1)^{L-\lambda} S_{L, -\lambda; \mu\nu}}{\sqrt{2L+1}} \sim \begin{pmatrix} l & \bar{l} & L \\ \mu & \nu & \lambda \end{pmatrix},$$

то l, \bar{l} и L будут входить симметрично. По причинам, которые станут ясными в дальнейшем, положим

$$\begin{pmatrix} l & \bar{l} & L \\ \mu & \nu & \lambda \end{pmatrix} = (-1)^{l-\bar{l}-L} \frac{(-1)^{L-\lambda} S_{L, -\lambda; \mu\nu}}{\sqrt{2L+1}}. \quad (24.9)$$

При внесении этого выражения в (24.8б) множитель $(-1)^{l-\bar{l}-L}$ исчезает, так как он появляется в обоих матричных коэффициентах S и так как $l - \bar{l} - L$ обязательно является целым числом; число L является целым или полуцелым в зависимости от того, целым или полуцелым является число $l + \bar{l}$, т. е. $l + \bar{l} - 2\bar{l} = l - \bar{l}$.

Выражение (24.9) называется $3j$ -символом; его выражение через s в более симметричных обозначениях имеет вид

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1-j_2-m_3}}{\sqrt{2j_3+1}} S_{j_3 m_3 m_1}^{(j_1 j_2)} \delta_{m_1+m_2+m_3, 0}. \quad (24.9a)$$

Поскольку коэффициенты s определены только при том условии, что j_1, j_2 и j_3 образуют векторный треугольник, т. е. если их сумма является целым числом и если $|j_1 - j_2| \leq j_3 \leq j_1 + j_2$ (или, что равносильно, если ни одно из j не больше, чем сумма двух других), $3j$ -символы также определены лишь при этом условии. Дальнейшие вычисления упрощаются, если положить, что $3j$ -символы обращаются в нуль, если величины j не образуют векторного треугольника. Аналогичным образом исключается необходимость указывать пределы суммирования, если приписать значение нуль тем $3j$ -символам, для которых абсолютное значение какого-либо m больше соответствующего j . Поэтому в дальнейшем мы примем эти условия.

$3j$ -символ, определенный равенством (24.9a), не вполне симметричен. Полная симметрия не может быть достигнута, поскольку в случае, когда, например, два из j равны, коэффициенты s не являются симметричными функциями индексов строк m . Однако $3j$ -символы удовлетворяют следующим соотношениям:

$$\begin{aligned} (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & j_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} j_3 & j_2 & j_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}, \quad (24.10) \end{aligned}$$

т. е. при перестановке двух j с одновременной перестановкой соответствующих m („перестановка столбцов“) значение символа не меняется, если $j_1 + j_2 + j_3$ четно; оно меняет знак, если $j_1 + j_2 + j_3$ нечетно. Отсюда можно заключить, что значение символа не меняется, если j подвергаются вместе с соответствующими m циклической перестановке:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_2 & j_3 & j_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_3 & j_1 & j_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}. \quad (24.10a)$$

Наконец, если у всех индексов строк изменить знак, получим

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{j_1+j_2+j_3} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.10б)$$

Таким образом, в общем случае (т. е. когда все три j различны и, по крайней мере, одно из соответствующих им m не равно

нулю) из значения одного символа можно получить значения еще одиннадцати. Если некоторые из j равны между собой или если все m равны нулю, значение символа должно обращаться в нуль в силу указанных выше соотношений.

Равенства (24.10), (24.10a) и (24.10б) можно доказать следующим образом. Введение $3j$ -символов в (24.8г) дает

$$\int \mathfrak{D}^{(j_1)}(R)_{n_1 m_1} \mathfrak{D}^{(j_2)}(R)_{n_2 m_2} \mathfrak{D}^{(j_3)}(R)_{n_3 m_3} dR = h \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.11)$$

Левая часть последнего соотношения не меняется, если переставить любую пару индексов j с одновременной перестановкой соответствующих индексов n и m , сопутствующих им. Это должно быть верно также и для правой части, притом для любых значений n . Если положить все n равными соответствующим m , правая часть становится квадратом $3j$ -символа, причем он не меняется при перестановке любых двух j , сопровождаемой перестановкой соответствующих индексов нижних строк m . С точностью до знака это выполняется и для самих $3j$ -символов. Чтобы найти соотношение между знаками, можно положить $n_1 = -j_1$, $n_2 = j_1 - j_3$, $n_3 = j_3$. Это такой набор значений, для которого $3j$ -символ может быть определен особенно просто, так как вся сумма (17.27) для соответствующего s содержит лишь один член с $\kappa = 0$, отличный от нуля. Фактически нам нужен только знак символа

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -j_1 & j_1 - j_3 & j_3 \end{pmatrix}, \quad (24.E.2)$$

а он содержит $(-1)^{j_1 - j_2 - j_3}$ из (24.9a) и $(-1)^{j_2 + j_1 - j_3}$ из (17.27). Следовательно, знак выражения (24.E.2) определяется выражением $(-1)^{2j_1 - 2j_3}$. Аналогично знаки символов

$$\begin{pmatrix} j_2 & j_1 & j_3 \\ j_1 - j_3 & -j_1 & j_3 \end{pmatrix} \quad \text{и} \quad \begin{pmatrix} j_1 & j_3 & l_2 \\ -j_1 & j_3 & j_1 - j_3 \end{pmatrix} \quad (24.E.3)$$

определяются выражениями $(-1)^{j_2 - j_1 - j_3}$ и $(-1)^{-j_3 - j_1 + j_2}$. Следовательно, перестановка первых двух столбцов символа (24.E.2) приводит к умножению этого символа на $(-1)^{j_2 - j_1 - j_3} / (-1)^{2j_1 - 2j_3} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3}$. Поскольку произведения двух символов в (24.11) должно оставаться без изменения при такой перестановке, второй символ тоже должен меняться на тот же множитель при перестановке первых двух столбцов. Подобным образом перестановка последних двух столбцов дает множитель

$$(-1)^{-j_2 - j_1 + j_3} / (-1)^{2j_1 - 2j_3} = (-1)^{-3j_1 + j_2 + j_3} = (-1)^{j_1 + j_2 + j_3},$$

так как $(-1)^{4j_1} = 1$. Это показывает, что перестановка последних двух столбцов меняет $3j$ -символ на множитель $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3}$. Это доказывает равенство первого, второго и последнего из выражений (24.10). Отсюда вытекают равенство третьего выражения (24.10) и равенства (24.10a). Назначение множителя $(-1)^{j_1 - j_2 - m_3}$ заключается как раз в том, чтобы обеспечить выполнение соотношений (24.10) и (24.10a).

Чтобы доказать (24.10б), заметим, что правая часть (24.11) вещественна. Следовательно, правая часть может быть заменена комплексносопряженным выражением, а \mathfrak{D}^* можно снова выразить через \mathfrak{D} с помощью (24.7). Это дает множитель $(-1)^{n_1 + n_2 + n_3 - m_1 - m_2 - m_3}$, который может

быть, однако, опущен, так как обе части равенства не равны нулю только при $n_1 + n_2 + n_3 = 0$ и $m_1 + m_2 + m_3 = 0$. Следовательно,

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -n_1 & -n_2 & -n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ n_1 & n_2 & n_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.12)$$

Если снова положить $n_1 = -j_1$, $n_2 = j_1 - j_3$, $n_3 = j_3$, то знак первого символа в правой части (24.12) становится равным $(-1)^{2j_1 - 2j_2}$. Символ в левой части также приобретает вид (24.E.2), если переставить первый столбец с последним. Следовательно, его знак определяется выражением $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3} (-1)^{2j_3 - 2j_1} = (-1)^{-j_1 + j_2 - j_3}$. Поэтому отношение первых множителей имеет знак $(-1)^{j_1 + j_2 + j_3}$. Это доказывает изменение знака, указанное в (24.10б); замена чисел n соответствующими m показывает, что абсолютные значения обеих частей (24.10б) также равны. Более абстрактный вывод этих соотношений дан в статье, указанной в примечании на стр. 343.

Ковариантные и контравариантные коэффициенты векторного сложения

Связь между орбитальным и спиновым моментами, приводящая к полному моменту количества движения и данная в соотношении (24.8), может быть выражена с помощью $3j$ -символов:

$$\Psi_m^J = (-1)^{L + \mu + (m - \mu - S)} \sqrt{2J + 1} \sum_{\mu} \begin{pmatrix} L & S & J \\ \mu & m - \mu & -m \end{pmatrix} \mathbb{E}_{m - \mu}^{SL}. \quad (24.13)$$

Показатель степени первого множителя записан в таком виде потому, что $L + \mu$ и $m - \mu - S$ являются целыми числами. Нет необходимости указывать пределы суммирования по μ , если пользоваться условием, что все $3j$ -символы, у которых абсолютное значение индекса строки превосходит соответствующий индекс представления, равны нулю. Первый и последний столбцы $3j$ -символа можно переставить с помощью (24.10). Это не вызывает никакого изменения, если одновременно изменить знаки всех индексов строк. Кроме того, можно заменить $m - \mu$ на ν и производить суммирование также и по ν . $3j$ -Символы будут обращаться в нуль во всех случаях, кроме $\mu + \nu - m = 0$. Таким путем (24.13) можно привести к виду

$$\Psi_m^J = \sum_{\nu\mu} (-1)^{L + \mu + (\nu - S)} \sqrt{2J + 1} \begin{pmatrix} J & S & L \\ m & -\nu & -\mu \end{pmatrix} \mathbb{E}_{\nu\mu}^{SL}. \quad (24.13a)$$

Если, наконец, заменить Ψ_m^J на $(-1)^{2L} \Psi_m^J$, а показатели — их величиной с обратным знаком (что допустимо, поскольку они целые), то найдем

$$\Psi_m^J = \sum_{\nu\mu} (-1)^{L - \mu} (-1)^{S - \nu} \sqrt{2J + 1} \begin{pmatrix} J & S & L \\ m & -\nu & -\mu \end{pmatrix} \mathbb{E}_{\nu\mu}^{SL}. \quad (24.136)$$

Дальнейшее усовершенствование обозначений может быть достигнуто введением понятий ковариантных и контравариантных компонент волновой функции и $3j$ -символов¹⁾. Ковариантным метрическим тензором, естественным образом приспособленным для этой цели, является $C_{mn}^{(j)}$; он определен в (24.3) и имеет явный вид (24.6). Такой тензор позволяет опускать индексы вектора, выражая ковариантные компоненты f_m^J вектора через его контравариантные компоненты f_J^m :

$$f_m^J = \sum_{m'} C_{mm'}^{(j)} f_J^{m'}. \quad (24.14)$$

Следует заметить, что тензор $C_{mm'}^J = (-1)^{J+m} \delta_{m'}$, $-m$ симметричен только при целых J , так что два индекса m, m' переставлять нельзя. Переход от ковариантных компонент к контравариантным производится аналогичным образом:

$$f_J^n = \sum_{n'} C_J^{nn'} f_{n'}^J, \quad (24.14a)$$

где²⁾

$$C_J^{nn'} = (-1)^{J-n} \delta_{n, -n'} = (-1)^{J+n'} \delta_{n, -n'}. \quad (24.14b)$$

Мы будем пользоваться только ковариантными компонентами волновых функций, но как ковариантными, так и контравариантными компонентами $3j$ -символов. Например, компонента $3j$ -символа, контравариантная по последнему индексу, есть

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m \\ m_1 & m_2 & j \end{pmatrix} = \sum_{m'} C_J^{mm'} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m' \end{pmatrix} = (-1)^{j-m} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix}. \quad (24.15)$$

Выражение (24.136) с помощью таких обозначений может быть, очевидно, записано в виде

$$\Psi_m^J = \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J & \nu & \mu \\ m & S & L \end{pmatrix} \Xi_{\nu\mu}^{SL} \quad (24.15a)$$

или, короче,

$$\Psi_m^J = \sqrt{2J+1} (J_m S^\nu L^\mu) \Xi_{\nu\mu}^{SL}. \quad (24.15b)$$

В (24.15a) и (24.15b) в отношении индексов строк (т. е. индексов ν, μ и т. д., указывающих строку представления) использован принятый в общей теории относительности прием обозначе-

¹⁾ Они первоначально были предложены К. Херригом.

²⁾ Можно предложить следующее мнемоническое правило для запоминания знака в (24.146): первый индекс (n) контравариантного (contravariant) метрического тензора входит в показатель с отрицательным (negative) знаком.

ния суммирования: по повторяющимся индексам строк производится суммирование. Один из индексов в каждой суммируемой паре всегда ковариантный (нижний), а второй — контравариантный (верхний). Свободные индексы строк, т. е. индексы строк, по которым не производится суммирование, ковариантны в обеих частях этого равенства или контравариантны в обеих частях. Поскольку ковариантные индексы поднимаются в обеих частях с помощью одного и того же метрического тензора, свободные ковариантные индексы можно заменить в обеих частях любого равенства на свободные контравариантные индексы, и наоборот. В результате свободные индексы можно фактически опустить в обеих частях. Соотношение вида (24.15а) или (24.15б), имеющее „релятивистски инвариантный вид“, остается справедливым и в том случае, если представления не приведены к виду, указанному в гл. 15, а лишь эквивалентны этим представлениям. Следует заметить, что величины s в гл. 17 являются по существу смешанными $3j$ -символами

$$s_{L\mu\nu}^{(i\bar{i})} = \sqrt{2L+1} (-1)^{l-\bar{l}+L} \begin{pmatrix} l & \bar{l} & \mu + \nu \\ \mu & \nu & L \end{pmatrix} = \\ = \sqrt{2L+1} (-1)^{l-\bar{l}-L} \begin{pmatrix} L & \mu & \nu \\ \mu + \nu & l & \bar{l} \end{pmatrix}. \quad (24.16)$$

Несмотря на большое сходство принятых обозначений с обозначениями, используемыми в общей теории относительности, между ними имеется существенная разница. Индексы векторов и тензоров теории относительности пробегает всегда одни и те же значения (0, 1, 2, 3); они относятся к осям в одном и том же пространстве. Индексы m , n , μ и т. д. все связаны с некоторым представлением; они относятся к различным партнерам, принадлежащим некоторому неприводимому представлению. Каждый индекс может принимать столько значений, сколько строк и столбцов имеет представление, с которым он связан. Суммирование („свертка“) всегда производится по индексам, относящимся к одному и тому же представлению; свободные индексы в обеих частях соотношения — как, например, m в (24.15б) — относятся к одному и тому же представлению (в данном случае к $\mathfrak{D}^{(j)}$). Естественным следствием этого является то, что не существует единого метрического тензора; каждое представление имеет свой метрический тензор. Разница между индексами, связанными с различными представлениями, находит свое отражение также в симметричности или антисимметричности тензоров; эти соотношения, записанные в (24.10) и (24.10а), не зависят от вида представления только в том случае, если переставляемые индексы относятся к одному и тому же представлению. Однако в этом же случае они действительно *не зависят*

от вида представления, и соотношение

$$\begin{pmatrix} J & j & j \\ m & \nu & \mu \end{pmatrix} = (-1)^{J+2j} \begin{pmatrix} J & j & j \\ m & \mu & \nu \end{pmatrix} \quad (24.17)$$

справедливо независимо от того, в каком виде взято используемое представление. Это обстоятельство и приводит к тому условию относительно знаков $3j$ -символов, которое было принято.

Соотношение (24.17) имеет интересное прямое следствие: если связываются две частицы, волновые функции которых являются партнерами одного и того же представления („эквивалентные орбиты“), образуя состояние с полным моментом количества движения J ,

$$\Psi_m^J(1, 2) = (J_m, j^\nu, j^\mu) \psi_\nu^j(1) \psi_\mu^j(2) \quad (24.17a)$$

(здесь цифрами 1 и 2 обозначены переменные двух рассматриваемых частиц), то получающееся при этом состояние будет симметричным относительно перестановки двух частиц, если $J+2j$ четно, и антисимметричным, если $J+2j$ нечетно. Так, два $2p$ -электрона дают симметричные S - и D -состояния и антисимметричное P -состояние. Это соответствует случаю j (в данном случае называемого l) равного 1 и J (в данном случае называемого L) равного 0 или 2 в симметричном случае и равного 1 в антисимметричном случае. Аналогично в результате связи двух спинов электронов получаем симметричное состояние $S=1$ и антисимметричное состояние $S=0$.

Запишем, наконец, полностью контравариантную форму $3j$ -символа:

$$\begin{aligned} (J^m, S^\nu, L^\mu) &= C_J^{mm'} C_S^{\nu\nu'} C_L^{\mu\mu'} (J_{m'}, S_{\nu'}, L_{\mu'}) = \\ &= (-1)^{J-m+S-\nu+L-\mu} (J_{-m}, S_{-\nu}, L_{-\mu}). \end{aligned} \quad (24.18)$$

Множитель $(-1)^{-m-\nu-\mu}$ может быть опущен, так как $3j$ -символы не обращаются в нуль только при $m+\nu+\mu=0$. Поэтому (24.106) дает

$$(J^m, S^\nu, L^\mu) = (J_m, S_\nu, L_\mu); \quad (24.18a)$$

полностью ковариантные и полностью контравариантные $3j$ -символы равны. Эта теорема зависит от вида представлений, принятого в гл. 15. Однако она позволяет нам записать (24.11) в ковариантном виде. С этой целью прежде всего заметим, что хотя индексы коэффициентов представления записаны как нижние индексы, в действительности первый индекс является контравариантным индексом. Это очевидно уже из основной формулы

$$O_R \psi_m^j = \sum_{m'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{m'm} \psi_{m'}^j.$$

Суммирование по m' показывает, что этот индекс следовало бы писать как верхний. Поэтому представляется естественным вместо (24.11) писать

$$\int \mathfrak{D}^{(j_1)}(R)_{n_1 m_1} \mathfrak{D}^{(j_2)}(R)_{n_2 m_2} \mathfrak{D}^{(j_3)}(R)_{n_3 m_3} dR = h \begin{pmatrix} n_1 & n_2 & n_3 \\ j_1 & j_2 & j_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.186)$$

Вычислим ковариантно-контравариантные компоненты представления $\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{nm}$:

$$C_{nm}^j C_j^{mm'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{n'm'} = (C \mathfrak{D}^{(j)} C^T)^m_n, \quad (24.18B)$$

так как контравариантный метрический тензор является обратным по отношению к ковариантному метрическому тензору. Так как $C^T = (-1)^{2j} C$ и так как C^{-1} преобразует \mathfrak{D} в \mathfrak{D}^* , находим, что ковариантно-контравариантная m -компонента представления $\mathfrak{D}^{(j)}(R)$ отличается множителем $(-1)^{2j}$ от комплексно-сопряженной контравариантно-ковариантной компоненты $\mathfrak{D}^{(j)}(R)$ [т. е. обычной $\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{nm}$]. Для первоначального вида интеграла от трех коэффициентов представлений это дает

$$\int \mathfrak{D}^{(j_1)}(R)_{n_1 m_1} \mathfrak{D}^{(j_2)}(R)_{n_2 m_2} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{nm}^* dR = (-1)^{2j} h \begin{pmatrix} n_1 & n_2 & j \\ j_1 & j_2 & n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & m \\ m_1 & m_2 & j \end{pmatrix}. \quad (24.18Г)$$

Разумеется, (24.18Г) могло бы быть получено и непосредственно.

Теорема о равенстве полностью ковариантных и полностью контравариантных компонент $3j$ -символа позволяет записать соотношения ортогональности (17.28) в инвариантном виде:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & m' \\ j_1 & j_2 & j' \end{pmatrix} = \frac{\delta_{jj'} \delta_{mm'}}{2j+1}. \quad (24.19)$$

При $m = m'$ это соотношение эквивалентно первому из соотношений (17.28); при $m \neq m'$ каждый член суммы обращается в нуль, так как $m_1 + m_2$ не может быть равным как $-m$, так и $-m'$. Другое соотношение ортогональности приобретает вид, не зависящий от вида представления:

$$\sum_j \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j \\ m_1 & m_2 & m \end{pmatrix} \begin{pmatrix} m'_1 & m'_2 & m \\ j_1 & j_2 & j \end{pmatrix} = \frac{\delta_{m_1 m'_1} \delta_{m_2 m'_2}}{2j+1}. \quad (24.19a)$$

Здесь подразумевается суммирование по m в силу сокращенного обозначения суммирования. Ковариантные обозначения используются

не только и, может быть, не столько потому, что они приводят к соотношениям, которые не меняются, когда представления подвергаются преобразованиям подобия. Их главная задача состоит в том, чтобы облегчить запоминание этих соотношений. Из них следуют также весьма сжатые обозначения, которые будут введены в следующем разделе.

Коэффициенты Рака

Предыдущие расчеты указывают более симметричный вид коэффициентов векторного сложения, но не дают еще соотношений, которые позволили бы без труда и с наименьшими вычислениями получить формулы последней главы. Как уже упоминалось в первом разделе настоящей главы, между коэффициентами векторного сложения должно существовать некоторое общее соотношение, которое при полном его использовании может сделать совершенно прозрачными выводы формул Хэнля — Кронига, правила интервалов Ланде и других аналогичных выражений. Имеется много способов вывести искомые формулы; некоторые формулы уже следуют из расчетов последней главы.

Рассмотрение трех частиц, движущихся в сферически симметричном поле, приводит к вышеупомянутым соотношениям наиболее естественным путем¹⁾. Первая частица имеет значение энергии, которому принадлежат волновые функции ψ_x при $x = -j_1, -j_1 + 1, \dots, j_1 - 1, j_1$; функции ψ_x являются партнерами и принадлежат представлению $\mathfrak{D}^{(j_1)}$. Волновыми функциями, соответствующими энергии второй частицы, являются φ_λ ; эти функции принадлежат представлению $\mathfrak{D}^{(j_2)}$. Соответствующими величинами для третьей частицы являются χ_μ и $\mathfrak{D}^{(j_3)}$. Волновая функция всей системы является линейной комбинацией функций

$$\psi_x(1)\varphi_\lambda(2)\chi_\mu(3), \quad (24.E.4)$$

где цифрами 1, 2, 3 обозначены координаты трех частиц. Поскольку функции $\psi_x(1)$ всегда будут зависеть от координат первой частицы, в дальнейшем ее аргумент будет опускаться. Подобным образом вместо $\varphi_\lambda(2)$ и $\chi_\mu(3)$ будем писать φ_λ и χ_μ . Рассматриваемая ситуация является крайне схематичной и не описывает какой-либо реальной физической системы. Однако связанные с ней соображения полезны для получения искомого соотношений.

¹⁾ См. цитированные выше работы Рака (стр. 227) и монографию Эдмондса (стр. 338), гл. 6; см. также L. C. Biedenharn, J. M. Blatt, M. E. Rose, Rev. Mod. Phys., 24, 249 (1952).

Образуем линейные комбинации волновых функций (24.Е.4), которые преобразуются по неприводимому представлению J при вращении координат всех трех частиц. Такие волновые функции можно получить тремя различными путями. Во-первых, можно связать моменты количества движения первых двух частиц в результирующий момент j , согласно (24.15а),

$$X_m^j(1, 2) = \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\lambda}, \quad (24.20)$$

и затем связать третью частицу с полученным моментом j , так чтобы образовать полный момент количества движения J ,

$$\begin{aligned} X_M^J(1, 2, 3) &= \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \chi_{\mu} X_m^j(1, 2) = \\ &= \sqrt{2J+1} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\lambda} \chi_{\mu}. \end{aligned} \quad (24.21)$$

Индекс j указывает полный момент частиц 1 и 2, посредством которых было получено состояние X_M^J . Волновая функция (24.21) была бы естественным предметом рассмотрения, если бы взаимодействие между частицами 1 и 2 было сильнее, чем взаимодействие каждой из этих частиц с частицей 3.

С другой стороны, состояния с моментом J могут быть получены, если связать сначала частицы 2 и 3, а результирующее состояние — с частицей 1 или если связать частицы 1 и 3, а затем получить окончательную волновую функцию, связывая полученное таким образом состояние с частицей 2. Эти схемы соответствуют более сильному взаимодействию между частицами 2, 3 и частицами 1, 3 соответственно, однако мы не будем рассматривать эту мотивировку более подробно. Полученные таким путем волновые функции имеют вид

$$\Psi_M^J(1, 2, 3) = \sqrt{2J+1} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \kappa & m \\ M & j_1 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \lambda & \mu \\ m & j_2 & j_3 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\lambda} \chi_{\mu}, \quad (24.21a)$$

$$\Phi_M^J(1, 2, 3) = \sqrt{2J+1} \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix} \psi_{\kappa\lambda} \chi_{\mu}. \quad (24.21б)$$

Индекс j в (24.21а) означает совместный момент частиц 2 и 3. Подобным образом j в (24.21б) дает совместный момент частиц 1 и 3.

Три состояния Ψ_M^{JJ} , Φ_M^{JJ} и X_M^{JJ} не совпадают, хотя полный момент количества движения и его Z -компонента равны $J\hbar$ и $M\hbar$ для каждого из них. Однако поскольку каждое состояние (24.Е.4) может быть выражено в виде линейной комбинации всех $\Phi_{M'}^{J'J'}$, то это справедливо также и для Ψ_M^{JJ} или X_M^{JJ} . Кроме того, если выразить, например,

$$X_M^{JJ} = \sum_{J'} \sum_{M'} c(jJM; j'J'M') \Phi_{M'}^{J'J'} \quad (24.22)$$

через функции Φ , то коэффициенты при $\Phi_{M'}^{J'J'}$ с $J' \neq J$ или $M' \neq M$ будут обращаться в нуль, так как эти функции Φ принадлежат либо представлению, отличному от представления $\mathfrak{D}^{(J)}$ функций X_M^{JJ} , либо иной строке этого представления. Следовательно, суммирование по J' , M' в (24.22) может быть опущено, а эти индексы можно заменить на J и M . Далее, коэффициенты $c(jJM; j'JM)$ не зависят от M , так как и X_M^{JJ} и Φ_M^{JJ} являются партнерами, принадлежащими одному и тому же представлению $\mathfrak{D}^{(J)}$. Скалярные произведения (X_M^{JJ}, Φ_M^{JJ}) не зависят от M . Поэтому и коэффициенты c не зависят от M .

Следовательно, если всюду опустить множитель $\sqrt{2J+1}$, (24.22) дает соотношение вида

$$\begin{aligned} & \sqrt{2j+1} \begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} \psi_{\kappa} \varphi_{\lambda} \chi_{\mu} = \\ & = \sum_{j'} c^j(j; j') \sqrt{2j'+1} \begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' & \kappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix} \psi_{\kappa} \varphi_{\lambda} \chi_{\mu}. \end{aligned} \quad (24.22a)$$

В обеих частях последнего соотношения подразумевается суммирование по m , κ , λ , μ . Однако, в силу линейной независимости функций $\psi_{\kappa} \varphi_{\lambda} \chi_{\mu}$, коэффициенты при каждом произведении $\psi_{\kappa} \varphi_{\lambda} \chi_{\mu}$ в обеих частях равны

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} J & \mu & m \\ M & j_3 & j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j & \kappa & \lambda \\ m & j_1 & j_2 \end{pmatrix} = \\ & = \sum_{j'} (-1)^{2j_1} (2j'+1) \left\{ \begin{matrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{matrix} \right\} \begin{pmatrix} J & \lambda & m \\ M & j_2 & j' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j' & \kappa & \mu \\ m & j_1 & j_3 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (24.23)$$

где

$$\left\{ \begin{matrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{matrix} \right\} = \frac{(-1)^{2j_1} c^J(j; j')}{\sqrt{2j+1} \sqrt{2j'+1}}. \quad (24.23a)$$

Эти величины называются $6j$ -символами, или коэффициентами Рака́¹⁾ или коэффициентами повторной связи (recoupling coefficients). Последнее название указывает на связь с настоящим выводом, который заключается в переходе от волновой функции X к волновой функции Φ . В первом случае сильно связаны частицы 1 и 2, а во втором — частицы 1 и 3. Из вывода следует, что $6j$ -символы не зависят от κ , λ , μ [эти индексы вошли только при переходе от (24.22а) к (24.23)], а также не зависят от M (как уже было указано). Ниже мы покажем это еще раз. Следовательно, (24.23) является тождеством по κ , λ , μ , и $6j$ -символ является универсальной функцией шести j , входящих в него; он полностью (численно) определяется этими шестью числами. Заметим, что в обеих частях равенства (24.23) подразумевается суммирование по m . Фактически же, поскольку в (24.23) последний $3j$ -символ не обращается в нуль только при $m = \kappa + \mu$, для каждого j' лишь один член отличен от нуля, и правая часть содержит по существу только суммирование по j' . Кроме того, в силу наличия $3j$ -символов в правой части, даже член с $m = \kappa + \mu$ исчезает, если не выполнено равенство $M = \lambda + m = \kappa + \lambda + \mu$. Левая часть содержит только один член — член с $m = \kappa + \lambda$ — и обращается в нуль, кроме случая $M = \mu + m = \kappa + \lambda + \mu$. Таким образом, (24.23) является нетривиальным соотношением только при $M = \kappa + \lambda + \mu$. Это не удивительно, так как X_M^{JJ} и Φ_M^{JJ} содержат только произведения $\psi_{\kappa\varphi\lambda\mu}$ с $\kappa + \lambda + \mu = M$, так что сравнение коэффициентов при остальных $\psi_{\kappa\varphi\lambda\mu}$ не может дать никакой дополнительной информации.

Равенство (24.23) содержит искомое соотношение. Придадим ему теперь различные формы, а также запишем его в более симметричном виде. С этой целью заменим сначала в обеих частях контравариантные индексы κ , λ , μ ковариантными индексами и произведем циклическую перестановку в обеих частях во втором $3j$ -символе. Заменим также различные виды j другими символами и получим

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} j_1 & l_2 & \lambda \\ \mu_1 & \lambda_2 & l \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & j_2 & l \\ \lambda_1 & \mu_2 & \lambda \end{pmatrix} = \\ & = \sum_j (-1)^{2l_1} (2j+1) \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & \mu \\ \mu_1 & \mu_2 & j \end{Bmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & j \\ \lambda_1 & \lambda_2 & \mu \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (24.24)$$

¹⁾ Фактически коэффициент W Рака́ не равен в точности $6j$ -символу; они связаны соотношением

$$W(j_1 j_2 l_2 l_1; j_3 l_3) = (-1)^{j_1 + j_2 + l_1 + l_2} \begin{Bmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix}.$$

В это соотношение входят четыре $3j$ -символа и соответственно имеются четыре тройки чисел j и l , которые должны образовывать векторные треугольники. Три члена каждой тройки (например, $l_1 j_2 l$) входят в различные столбцы $6j$ -символов и либо все три находятся в верхней строке, либо два из них стоят в нижней строке, а третий — в верхней. Наоборот, $6j$ -символы были определены только для тех случаев, когда эти четыре тройки (т. е. $j_1 j_2 j$, $j_1 l_2 l$, $l_1 j_2 l$, $l_1 l_2 j$) образуют векторные треугольники. Все остальные $6j$ -символы мы положим теперь равными нулю. Было бы довольно трудно запомнить положение каждого j и l в $6j$ -символе в (24.24), но мы сразу же покажем, что все те $6j$ -символы, которые составлены из одних и тех же j и в которых одни и те же тройки должны образовывать векторные треугольники, равны. В результате (если отвлечься от знака) оказывается довольно легко запомнить соотношение (24.24), которое ясно показывает переход от связи j_1 с j_2 (и l_1 с l_2) к связи j_1 с l_2 и l_1 с j_2 . Все эти числа могут быть целыми или полуцелыми.

Введем теперь сокращенное обозначение, упомянутое в конце предыдущего раздела. Оно заключается, в сущности, в опускании всех индексов строк. *Свободные* индексы строк одинаковы в обеих частях и могут иметь любое значение, поэтому их можно не выписывать. Далее, нет необходимости указывать, являются ли они ковариантными или контравариантными, если только запомнить, что они имеют одну и ту же природу в обеих частях. Индексы, по которым производится *свертка*, можно также не выписывать, так как по ним в любом случае производится суммирование. Однако в этом случае необходимо указать, какие индексы являются ковариантными, а какие — контравариантными; это будет делаться с помощью точки сверху или снизу. *При перестановке двух точек у двух j , по индексам которых произведено суммирование, возникает множитель $(-1)^{2j}$* , так как

$$f_{\mu}^j g_{\nu}^{\mu} = C_{\nu}^j f_{\nu}^j C_{\lambda}^{\mu} g_{\lambda}^{\mu} = (-1)^{j+\mu} f_j^{-\mu} (-1)^{j-\mu} g_{-\mu}^j = (-1)^{2j} f_{\nu}^j g_{\mu}^j.$$

Следовательно, соотношение (24.24) в сокращенных обозначениях имеет вид

$$(j_1 l_2 j) (l_1 j_2 l) = (-1)^{2l} \sum_j (2j+1) \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{matrix} \right\} (j_1 j_2 j) (l_1 l_2 j). \quad (24.24a)$$

Если изменить положение точек в левой части равенства, возникает множитель $(-1)^{2l} = (-1)^{2l_1+2j_2}$; при изменении их положения в правой части возникает множитель $(-1)^{2j} = (-1)^{2j_1+2j_2}$.

Соотношения ортогональности (24.19) в сокращенных обозначениях принимают вид

$$(j_1 j_2 j)(j_1 j_2 j') = (2j + 1)^{-1} \delta(j, j'), \quad (24.25)$$

где символ $\delta(j, j')$ равен нулю, если $j \neq j'$ или если соответствующие индексы не равны, и равен 1, если $j = j'$ и соответствующие индексы равны и стоят на тех местах в левой части равенства, которые указаны точками в правой части. Следовательно,

$$\delta(j, j') = (-1)^{2j} \delta(j', j). \quad (24.25a)$$

Разумеется, не всегда можно пользоваться сокращенными обозначениями; в частности, ими нельзя пользоваться в случае, когда одно и то же j входит дважды в одну и ту же часть соотношения, причем по индексу соответствующей проекции суммирование не производится. В этом случае одно и то же j встречается дважды и в другой части равенства, так что в вопросе о том, какой из индексов должен быть отождествлен с j , возникает неоднозначность. По этой причине сокращенными обозначениями нельзя пользоваться в релятивистских расчетах (там все индексы относятся к одному и тому же пространству). В настоящем же случае использование сокращенных обозначений делает многие вычисления более прозрачными.

Ввиду наличия суммирования по j в правой части (24.24) оно не дает явного выражения $6j$ -символа. Такое выражение может быть получено, если умножить (24.24a) на $(l_1 l_2 j_3)$ и свернуть по индексам моментов l_1 и l_2 :

$$\begin{aligned} (j_1 l_2 l')(l_1 j_2 l)(l_1 l_2 j_3) &= \\ &= (-1)^{2l_1} \sum_j (2j + 1) \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{matrix} \right\} (j_1 j_2 j)(l_1 l_2 j)(l_1 l_2 j_3). \end{aligned}$$

Точки у l_1 в левой части можно поменять местами; при этом исчезнет множитель $(-1)^{2l_1}$ в правой части. Последние два множителя справа сокращаются после суммирования с $2j + 1$ в силу (24.25); j следует заменить на j_3 , а его индекс, где он свободен, будет иметь то же самое положение, что и индекс момента j_3 . Следовательно,

$$(j_1 l_2 l_3)(l_1 j_2 l_3)(l_1 l_2 j_3) = \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\} (j_1 j_2 j_3). \quad (24.246)$$

Это, по-видимому, наиболее важное соотношение, содержащее коэффициенты Ракá; мы воспользуемся им в следующем разделе при вычислении матричных элементов неприводимых тензорных операторов. Оно показывает, что вследствие циклической симметрии $3j$ -символов столбцы $6j$ -символа можно подвергать циклической перестановке. Аналогичным образом перестановка j_1 с j_2 и l_1 с l_2

в (24.24) приводит к появлению в левой части множителя $(-1)^{j_1+j_2+l_1+l_2}$, а в правой — множителя $(-1)^{2l_2-2l_1+j_1+j_2+l_1+l_2+2j}$. Отношения этих $3j$ -символов, входящих в обе части равенства, изменяются так, что появляется множитель $(-1)^{2l_2-2l_1+2j}$, который равен 1, поскольку векторы l_1, l_2, j должны образовывать векторный треугольник. Сочетание этих двух результатов показывает, что $6j$ -символ остается неизменным, если его столбцы переставлены произвольным образом. Наконец, перестановка j_1 с l_1 и j_2 с l_2 приводит к появлению в левой части (24.24) множителя $(-1)^{2j}$ (вследствие перестановки ковариантного и контравариантного λ) и в правой части — множителя $(-1)^{2j_1-2l_1+2j}$. Отношение этих множителей также равно 1, поскольку обе пары j_1j и l_1l образуют векторные треугольники с j_2 . Следовательно, $6j$ -символ не меняется, если переставить первые два столбца. Комбинация этого результата с предыдущим показывает, что $6j$ -символ не меняется при перестановке любых двух столбцов. Всего имеется 24 перестановки j , не меняющих $6j$ -символ; это все те перестановки, которые переставляют произвольным образом четыре тройки векторных треугольников¹⁾. Между $6j$ -символами существуют другие соотношения. В частности, соотношения симметрии могут быть записаны в более явном виде, если (24.24б) умножить на полностью контравариантный $3j$ -символ от $j_1j_2j_3$ и свернуть по всем относящимся к ним индексам.

Наиболее простая общая формула для вычисления $6j$ -символа следует из (24.24б). Чтобы получить ее, выберем некоторые специальные значения для μ_1, μ_2, μ_3 ; положим $\mu_1 = -j_1, \mu_2 = j_1 - j_3, \mu_3 = j_3$, что обеспечивает наиболее простые выражения для $3j$ -символов, которые только могут быть получены в общем случае. На аналогичном выборе μ неявно основано вычисление $6j$ -символов при выводе формул Хёнля — Кронига. Несколько иное выражение для $3j$ -символов было дано в работе Ракá²⁾. Тем не менее вычисление остается весьма трудоемким. Однако имеются обширные таблицы $6j$ -символов или эквивалентных им величин. Таблица Шарпа и др.³⁾ является, пожалуй, наиболее приемлемой. Отметим

¹⁾ Подробности см. в цитированной на стр. 338 монографии Эдмондса и в цитированной на стр. 352 работе Виденхарна, Блатта и Роуза.

²⁾ См. цитированную на стр. 227 работу Ракá.

³⁾ Sharp, Kennedy, Sears, Hoyle, Tables of Coefficients for Angular Distribution Analysis, CRT-556, Atomic Energy of Canada, 1954. См. также Simon, Van der Sluis, Biedenharn, Oak Ridge National Laboratory Report 1679, 1954; Ohi, Ishidzu, Horie, Yanagawa, Tanabe, Sato, Ann. Tokyo Astron. Obs., 1953—1955; Rotenberg, Bivins, Metropolis, Wooten, The $3-j$ and $6-j$ Symbols, Cambridge (в печати); K. M. Howell, Tables of $6-j$ Symbols, University of Southampton.

лишь три довольно тривиальных случая. Если $j_2 = 0$, то векторы l_1, j_2, l_3 будут составлять векторный треугольник только при $l_3 = l_1$. Аналогично из треугольника j_1, j_2, j_3 следует $j_1 = j_3$. Поэтому при $j_2 = 0$ все не обращающиеся в нуль $6j$ -символы будут иметь вид

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 0 & j_1 \\ j_2 & j & j_2 \end{Bmatrix} = \frac{(-1)^{j+j_1+j_2}}{\sqrt{2j_1+1} \sqrt{2j_2+1}}. \quad (24.26)$$

Симметрия $6j$ -символов позволяет сместить 0 в любое положение. При $j_2 = 1/2$ имеем два типа $6j$ -символов:

$$\begin{Bmatrix} j_1 - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & j_1 \\ j_2 & j & j_2 - \frac{1}{2} \end{Bmatrix} = (-1)^j \left[\frac{(J+1)(J-2j)}{2j_1(2j_1+1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{1/2}, \quad (24.26a)$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 - \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & j_1 \\ j_2 - \frac{1}{2} & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{j-\frac{1}{2}} \left[\frac{\left(j_1 - \frac{1}{2}\right)\left(j_2 - \frac{1}{2}\right)}{2j_1(2j_1+1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{1/2}, \quad (24.26б)$$

где $J = j_1 + j_2 + j$.

Наконец, при $j_2 = 1$ имеются четыре типа $6j$ -символов

$$\begin{Bmatrix} j_1 - 1 & 1 & j_1 \\ j_2 & j & j_2 - 1 \end{Bmatrix} = (-1)^j \left[\frac{J(J+1)(J-2j-1)(J-2j)}{(2j_1-1)2j_1(2j_1+1)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{1/2}, \quad (24.26в)$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 - 1 & 1 & j_1 \\ j_2 - 1 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^{j-1} \left[\frac{(J-2j_1)(J-2j_1+1)(J-2j_2)(J-2j_2+1)}{(2j_1-1)2j_1(2j_1+1)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{1/2}, \quad (24.26г)$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j_1 \\ j_2 - 1 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^j \left[\frac{2(J+1)(J-2j)(J-2j_1)(J-2j_2+1)}{2j_1(2j_1+1)(2j_1+2)(2j_2-1)2j_2(2j_2+1)} \right]^{1/2}, \quad (24.26д)$$

$$\begin{Bmatrix} j_1 & 1 & j_1 \\ j_2 & j & j_2 \end{Bmatrix} = (-1)^j \frac{j(J+1) - j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{[j_1(2j_1+1)(2j_1+2)j_2(2j_2+1)(2j_2+2)]^{1/2}}. \quad (24.26е)$$

Последняя формула, если подставить $j_1 = L$, $j_2 = S$, $j = J$, будет эквивалентна правилу интервалов Ланде.

Поскольку $6j$ -символы не зависят от вида, в котором взяты неприводимые представления, то, казалось бы, можно найти их, исходя из характеристик представлений. Это не вполне верно, так как при определении этих символов были наложены условия на знак. Однако имеются выражения с $6j$ -символами, которые не зависят от этих условий относительно знака, как, например, квадрат $6j$ -символа. Действительно, квадрат $6j$ -символа может быть выражен в виде тройного интеграла по группе

$$\left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\}^2 = \\ = h^{-3} \int \int \int \chi_1(R_1) \chi_2(R_2) \chi_3(R_3) \chi'_1(R_2 R_3^{-1}) \chi'_2(R_3 R_1^{-1}) \times \\ \times \chi'_3(R_1 R_2^{-1}) dR_1 dR_2 dR_3,$$

где χ_l — характер представления $\mathfrak{D}^{(j_l)}$, а χ'_l — характер представления $\mathfrak{D}^{(l_l)}$. Мы не будем приводить здесь подробного вывода этой формулы.

Кроме упомянутых выше, $6j$ -символы удовлетворяют большому числу других соотношений. В частности, можно показать, что матрица

$$(R_{lj}) = \sqrt{2l+1} \sqrt{2j+1} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j \\ l_1 & l_2 & l \end{matrix} \right\}$$

ортогональна. Вследствие того, что столбцы $6j$ -символов могут быть переставлены, каждый такой символ является элементом трех вещественных ортогональных матриц, если отвлечься от множителей, аналогичных

$$(2l+1)^{1/2} (2j+1)^{1/2}.$$

$6j$ -символы могут быть определены для довольно большого класса групп. В связи с этим возникает вопрос о том, определяют ли их значения группу. Этот вопрос до настоящего времени еще не решен.

Матричные элементы бесспиновых тензорных операторов

Формулу (21.19) для матричных элементов тензорного оператора можно было бы переписать с помощью $3j$ -символов; однако проще вывести ее заново. Так как рассматриваемый оператор является скаляром по отношению к вращениям спиновых координат, его ранг ω по отношению к вращениям всех координат равен его рангу p по отношению к вращениям обычных координат. Мы опустим все квантовые числа N , N' и т. д., которые не существенны в настоящий момент, и напомним

$$(\Psi_m^J, T^\sigma \Psi_{m'}^{J'}) = (O_R \Psi_m^J, O_R T^\sigma O_R^{-1} O_R \Psi_{m'}^{J'}). \quad (24.27)$$

Обе части этого соотношения равны, так как оператор O_R является унитарным. Поскольку $\Psi_m^{J'}$ и Ψ_m^J принадлежат пред-

ставлениям $\mathfrak{D}^{(J')}$ и $\mathfrak{D}^{(J)}$, а T^σ является тензорным оператором порядка p [см. (21.166)],

$$(\Psi_m^J, T^\sigma \Psi_{m'}^{J'}) = \sum_{\tau} \sum_{\mu, \mu'} \mathfrak{D}^{(J)}(R)_{\mu m}^* \mathfrak{D}^{(p)}(R^{-1})_{\sigma \tau} \mathfrak{D}^{(J')}(R)_{\mu' m'} (\Psi_{\mu}^J, T^\sigma \Psi_{\mu'}^{J'}).$$

В силу унитарности представления $\mathfrak{D}^{(p)}(R^{-1})_{\sigma \tau} = \mathfrak{D}^{(p)}(R)_{\tau \sigma}^*$. Интеграл по всей группе слева дает множитель $\int dR = h$. Справа получают дважды контравариантный и ковариантный, а также контравариантный и дважды ковариантный $3j$ -символы. Поэтому

$$(\Psi_m^J, T^\sigma \Psi_{m'}^{J'}) = (J^m, p^\sigma, J_{m'}^{J'}) T_{JJ'}, \quad (24.27a)$$

где

$$T_{JJ'} = \sum_{\tau} \sum_{\mu, \mu'} (-1)^{2J+2p} (J_{\mu}, p_{\tau}, J_{\mu'}^{J'}) (\Psi_{\mu}^J, T^\sigma \Psi_{\mu'}^{J'})$$

не зависит от m, m' и σ . Эта формула требует только, чтобы J и J' были хорошими квантовыми числами и чтобы T был неприводимым тензорным оператором ранга $\omega = p$ по отношению к вращениям всех координат. Величина $T_{JJ'}$ в (24.27a) представляет произведение $(-1)^{J-p-J'} \sqrt{2J'+1}$ на соответствующую величину из (21.19); в остальном эти два соотношения полностью эквивалентны. Заметим, что ковариантная компонента первого сомножителя скалярного произведения играет роль контравариантной компоненты. Причина этого заключается в том, что при вычислении скалярного произведения нужно взять величину, комплексно-сопряженную первому множителю.

Предположим теперь, что имеет место связь Рессела — Саундера и что Ψ_m^J и $\Psi_{m'}^{J'}$ могут быть выражены с помощью (24.156) через функции $\mathfrak{E}_{\nu \mu}^{SL}$ и $\mathfrak{E}_{\nu' \mu'}^{S'L'}$, имеющие соответствующие квантовые числа для спина и орбитального момента. Так как T^σ является бесспиновым оператором или по крайней мере скаляром относительно вращений спиновых координат, матричный элемент (24.27) не обращается в нуль только при $S = S'$. Поэтому положим $S = S'$ и, в силу (24.156), получим

$$(\Psi_m^J, T^\sigma \Psi_{m'}^{J'}) = \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} \times \\ \times (J_m, S^\nu, L^\mu) (J_{m'}^{J'}, S^{\nu'}, L^{\mu'}) (\mathfrak{E}_{\nu \mu}^{SL}, T^\sigma \mathfrak{E}_{\nu' \mu'}^{S'L'}). \quad (24.28)$$

Скалярное произведение в правой части не зависит от J и J' , так что это выражение позволит нам сравнивать не только матричные элементы между состояниями с определенными J и J' , но также и матричные элементы между всеми состояниями двух мультиплетов. Рассматриваемые состояния отличаются не только магнитными квантовыми числами m и m' , но также и значениями

полного момента количества движения; J может принимать все значения от $|S-L|$ до $S+L$, а J' — все значения от $|S-L'|$ до $S+L'$.

Первый $3j$ -символ в (24.28) происходит от первого множителя скалярного произведения. Чтобы придать этому соотношению „релятивистски инвариантный вид“, превратим ковариантные индексы в контравариантные, и наоборот. Вычисление, сходное с вычислением, приводящим к (24.18а), показывает, что

$$(J_m, S^\nu, L^\mu) = (-1)^{2J} (J^m, S_\nu, L_\mu). \quad (24.28a)$$

[Вместо $(-1)^{2J}$ можно было бы написать $(-1)^{2S+2L}$, причем в показатель входят *либо* ковариантные, *либо* контравариантные векторы.] Поскольку T^σ также является неприводимым тензором ранга p относительно вращений обычных координат, к нему применимо и соотношение (24.27а). Запишем его в виде

$$(\Xi_{\nu\mu}^{SL}, T^\sigma \Xi_{\nu'\mu'}^{SL'}) = \delta_{\nu\nu'} (L^\mu, p^\sigma, L_{\mu'}) T_{SL, SL'}. \quad (24.29)$$

$T_{SL, SL'}$ не только не зависит от μ, σ, μ' , как и раньше, но также не зависит от ν , поскольку T^σ является скаляром по отношению к спиновым переменным. Комбинируя (24.27а) и (24.29) с (24.28), получаем

$$\begin{aligned} (J^m, p^\sigma, J_{m'}) T_{JJ'} = \\ = (-1)^{2J} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} (J^m, S_\nu, L_\mu) (J_{m'}, S^\nu, L'^{\mu'}) \times \\ \times (L^\mu, p^\sigma, L_{\mu'}) T_{SL, SL'}. \end{aligned} \quad (24.29a)$$

Это равенство должно быть тождеством по m, m', σ . В самом деле, ясно, что участвующим здесь тождеством является (24.24б), и после приведения знаков находим

$$T_{JJ'} = (-1)^{2J-L+S+J'+p} \begin{Bmatrix} J & p & J' \\ L' & S & L \end{Bmatrix} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} T_{SL, SL'}. \quad (24.30)$$

Эта общая формула применима в случае связи Рессела — Саундерса и дает отношения матричных элементов между всеми состояниями двух мультиплетов для оператора, который является неприводимым тензором ранга p относительно обычных координат, но инвариантен при вращениях спинов. При $p=1$ она содержит формулы Хёнля — Кронига. Аналогичное соотношение с заменой ролей L и S применимо к оператору, который инвариантен относительно вращений обычных координат, но преобразуется как неприводимый тензор ранга q при вращениях спиновых координат.

Взаимодействие между спином и внешним магнитным полем является таким оператором (с $q = 1$), а множитель в формуле Ланде (23.24) является, в сущности, коэффициентом Рака, или $6j$ -символом. Мы не будем дальше рассматривать этот вопрос, так как наиболее важные результаты уже были получены в предыдущей главе путем прямых вычислений.

Общие двусторонние тензорные операторы

Свойства $6j$ -символов представляют значительный принципиальный интерес. Практическая их польза зависит от числа конкретных задач, которые они упрощают, от значения этих задач и от простоты пользования этими символами. Таблицы $6j$ -символов, очевидно, более громоздки, чем большинство математических таблиц, поскольку они зависят от шести переменных. В этом отношении они более сложны, чем даже коэффициенты векторного сложения, которые зависят по существу только от пяти переменных. Задача настоящего раздела приводит к понятиям, которые часто называют $9j$ -символами и которые зависят от девяти переменных, причем предшествующие замечания относятся к ним в еще большей степени¹⁾.

Рассмотрим теперь двусторонний тензорный оператор $T_{qp}^{\rho\sigma}$ или, вернее, как уже указано в (24.1), неприводимый тензор²⁾

$$T_{\omega}^{\tau} = (\omega^{\tau}, q_{\rho}, p_{\sigma}) T_{qp}^{\rho\sigma} \quad (24.31)$$

который преобразуется согласно (24.1a) при одновременных вращениях спиновых и обычных координат. Предположив связь Рессела — Саундерса, выразим Ψ_m^J и $\Psi_{m'}^{J'}$ через соответствующие Ξ с помощью (24.156) и, пользуясь сокращенными обозначениями, получаем

$$\begin{aligned} (\Psi_m^J, T_{\omega}^{\tau} \Psi_{m'}^{J'}) &= \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} \times \\ &\times (J_m S' L') (\omega^{\tau} q.p.) (J_{m'}' S' L') (\Xi_{..}^{SL}, T_{qp}^{\rho\sigma} \Xi_{..}^{S'L'}). \end{aligned} \quad (24.32)$$

Поскольку мы не определили контравариантных компонент волновых функций, все их индексы являются нижними. Последний матричный элемент может быть записан в виде

$$(\Xi_{\nu\mu}^{SL}, T_{qp}^{\rho\sigma} \Xi_{\nu'\mu'}^{S'L'}) = (S^{\nu}, q^{\rho}, S_{\nu}') (L^{\mu}, p^{\sigma}, L_{\mu}') T_{SL, S'L'}, \quad (24.32a)$$

¹⁾ См. K. Smith, J. W. Stevenson, Argonne National Laboratory Report 5776.

²⁾ Заметим, что оператор (24.31) отличается от оператора (24.1) множителем $(-1)^{q-p-\omega} \sqrt{2\omega+1}$, который входит в (24.16).

что аналогично (24.27а) или (24.29). Напишем также

$$(\Psi_m^J, T_\omega \Psi_m^{J'}) = (J^m, \omega^\tau, J'_m) T_{JJ'}. \quad (24.326)$$

Это соотношение по-прежнему справедливо, так как оно опирается только на предположение, что J и J' являются хорошими квантовыми числами. Мы хотим снова выразить $T_{JJ'}$ через $T_{SL, S'L'}$, а также показать, что правые части (24.32) и (24.326) одинаковым образом зависят от m, m' и τ . Чтобы получить „релятивистски инвариантный“ вид соотношения, отождествляющего (24.32) с (24.326), следует изменить положение всех индексов первого $3j$ -символа в (24.32). Это всегда следует делать по отношению к символам, происходящим от первого множителя скалярного произведения; в данном случае это вводит множитель $(-1)^{2J}$. Мы получаем

$$(J, \omega, J') T_{JJ'} = (-1)^{2J} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} (JS, L)(\omega q, p) \times \\ \times (J'S'L')(S'q'S')(L'p'L') T_{SL, S'L'}. \quad (24.33)$$

Отношение суммы произведений пяти $3j$ -символов в правой части к $3j$ -символу в левой части есть в сущности $9j$ -символ:

$$\left\{ \begin{array}{ccc} J & S & L \\ \omega & q & p \\ J' & S' & L' \end{array} \right\}. \quad (24.E.5)$$

$9j$ -символ не обращается в нуль только в том случае, когда векторы каждой строки и каждого столбца образуют векторные треугольники. Мы не будем подробно обсуждать определение и свойства $9j$ -символов. Покажем лишь, как выражение в правой части (24.33) может быть сведено с помощью $6j$ -символов к одному $3j$ -символу. Тот же прием может применяться ко всем выражениям, которые могут приводить к инвариантным соотношениям с отдельными $3j$ -символами.

Произведение первого и последнего $3j$ -символов в правой части (24.33) имеет вид произведения, входящего в (24.24а), за исключением циклической перестановки j , которая может быть компенсирована с помощью (24.10а). Поэтому

$$(pL'L')(JS, L) = (-1)^{2J} \sum_j (2j+1) \left\{ \begin{array}{ccc} p & S & j \\ J & L' & L \end{array} \right\} (pSj')(jL'L'). \quad (24.34)$$

Мы замечаем, что второй $3j$ -символ в правой части (24.33) содержит p , четвертый содержит S и оба они содержат q . Следова-

тельно, p и S могут быть переведены в один $3j$ -символ с помощью коэффициента Рака́:

$$(S'Sq')(p\omega q.) = (-1)^{2p} \sum_j (2j+1) \left\{ \begin{matrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{matrix} \right\} (S'\omega j')(pSj). \quad (24.34a)$$

Произведение двух последних соотношений, просуммированное должным образом по индексам, соответствующим p и S , может быть упрощено с помощью соотношений ортогональности (24.25):

$$\begin{aligned} & (p'L'L')(JS'L')(S'Sq')(p.\omega q.) = \\ & = (-1)^{2J+2p} \sum_j (2j+1) \left\{ \begin{matrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{matrix} \right\} (JL'j)(S'\omega j'). \end{aligned} \quad (24.35)$$

Чтобы отождествить это выражение с правой частью (24.33), следует изменить положение индексов, соответствующих S . Это вводит лишь множитель $(-1)^{2S}$. После этого умножение на $(J'S'L') = (S'L'J')$ и соответствующая свертка по индексам величин S' и L' дает для произведения пяти $3j$ -символов в (24.33) выражение

$$(-1)^{2J+2p+2S} \sum_j (2j+1) \left\{ \begin{matrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{matrix} \right\} (JL'j)(S'\omega j')(S'L'J').$$

Оно имеет теперь вид (24.24б) и равно

$$(-1)^{2J+2\omega} \sum_j (-1)^{2j} (2j+1) \left\{ \begin{matrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & \omega & J' \\ S' & L' & j \end{matrix} \right\} (J\omega J').$$

Положение индексов величин j и S' следует сместить, а это вводит множитель $(-1)^{2j+2S'}$. Однако показатель может быть упрощен с помощью различных условий для квантовых чисел, образующих векторные треугольники. Окончательно получаем

$$\begin{aligned} T_{JJ'} & = (-1)^{2\omega} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} \times \\ & \times \sum_j (-1)^{2j} (2j+1) \left\{ \begin{matrix} p & S & j \\ J & L' & L \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} S' & \omega & j \\ p & S & q \end{matrix} \right\} \left\{ \begin{matrix} J & \omega & J' \\ S' & L' & j \end{matrix} \right\} T_{SL, S'L'}. \end{aligned} \quad (24.36)$$

Следует заметить, что имеются три существенно различных способа группировки множителей в правой части (24.33) и соответственно имеются три различных способа представить $9j$ -символ

в виде суммы произведений трех $6j$ -символов. Данный способ группировки был выбран здесь, чтобы упростить дальнейшие расчеты.

Интересный частный случай имеет место при $\omega = 0$, т. е. если оператор T является инвариантом относительно одновременного вращения спиновых и обычных координат. Это имеет место, в частности, для энергии взаимодействия спина с орбитальным движением. Если $\omega = 0$, то должно быть $p = q$ и $J = J'$. Кроме того, поскольку второй $6j$ -символ не обращается в нуль только в том случае, если S' , ω и j образуют векторный треугольник, вклад в сумму дает только член с $j = S'$. Пользуясь выражением (24.26) для второго и третьего $6j$ -символов, после преобразования $6j$ -символа получаем

$$T_{JJ'} = (-1)^{J+L'+S+p} \frac{\sqrt{2J+1}}{\sqrt{2p+1}} \left\{ \begin{matrix} L & J & S \\ S' & p & L' \end{matrix} \right\} T_{SL, S'L'}, \quad (24.36a)$$

что в сущности снова представляет собой $6j$ -символ. При $p = 1$ это дает правило интервалов Ланде, а случай $p = 2$ соответствует спин-спиновому взаимодействию. $6j$ -символы появляются также в других разделах спектроскопии, таких, как определение волновых функций в сложных атомах. Они играют важную роль также в теории структуры ядра, β -распада, угловой корреляции между частицами или квантами, испущенными последовательно, в теории ядерных реакций и, последнее по счету, но не по важности, в определении ядерных волновых функций. Более подробные обзоры по данному вопросу упоминались ранее в настоящей главе.

ПРИНЦИП ПОСТРОЕНИЯ

1. Принцип построения¹⁾ позволяет оценить положения энергетических уровней атомов. Анализируя правила отбора, расщепление во внешних полях и т. д., можно в принципе определить такие характеристики отдельных уровней, как орбитальное квантовое число. Однако полезно было бы также получить некоторые сведения относительно области спектра, в которой следует искать уровень заданного типа. Принцип построения и выполняет эту задачу.

Однако основное значение принципа построения заключается не в его приложениях к анализу сложных спектров, а в том, что положения энергетических уровней определяют наиболее важные физические и химические свойства атомов. Так, например, сильная электроположительность щелочных металлов является следствием их способности освобождать электрон с поглощением относительно малой энергии; иначе говоря, основное состояние лежит не намного ниже основного состояния иона. Наоборот, инертность благородных газов по отношению к химическим реакциям объясняется особенно большой разницей между возбужденными и ионизованными состояниями, с одной стороны, и основным состоянием, с другой. Этот подход, играющий столь большую роль в атомной физике, берет свое начало в объяснении Н. Бором наиболее важных особенностей периодической системы элементов. Наиболее важными этапами в открытии принципа построения были, по-видимому, векторная модель Ланде — Зоммерфельда, формулировка нормальной связи Ресселом и Саундерсом и принцип запрета одинаковых состояний Паули. Ясная формулировка принципа построения была дана Ф. Хундом.

Чтобы получить оценку положения энергетических уровней, т. е. собственных значений уравнения Шредингера

$$\sum_k \left\{ -\frac{\hbar^2}{2m_k} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) - \frac{Ze^2}{r_k} \right\} \psi + \frac{1}{2} \sum_{i \neq k} \frac{e^2}{r_{ik}} \psi = E\psi, \quad (25.1)$$

¹⁾ См. примечание 2 на стр. 220.

начнем с упрощенного уравнения

$$\begin{aligned} H_0\psi &= (H_1 + H_2 + \dots + H_n)\psi = E\psi, \\ H_k &= -\frac{\hbar^2}{2m_k} \left(\frac{\partial^2}{\partial x_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial y_k^2} + \frac{\partial^2}{\partial z_k^2} \right) - \frac{Ze^2}{r_k} \end{aligned} \quad (25.1a)$$

(Z — заряд ядра), в котором мы пренебрегаем¹⁾ энергией взаимодействия электронов:

$$W = \sum_{k=2}^n \sum_{l=1}^{k-1} \frac{e^2}{r_{lk}}. \quad (25.16)$$

Затем попытаемся учесть это взаимодействие с помощью теории возмущений (см. гл. 17).

Метод теории возмущений пригоден только в том случае, когда потенциальная энергия электронов в поле ядра велика по сравнению с энергией взаимодействия W . Это условие выполнено лучше всего тогда, когда заряд ядра Z велик, а число электронов мало, т. е. в случае сильно ионизованных атомов. Применяемый здесь метод возмущений существенно отличается от приближенного метода, использованного в гл. 22 и 23: он никак не связан с малостью постоянной тонкой структуры

$$\alpha = \frac{e^2}{\hbar c} = \frac{1}{137,0},$$

что было существенно для законности сделанных ранее приближений. Фундаментальные константы e , \hbar и m входят в собственные значения уравнения (25.1) и во все приближения к ним в комбинации

$$\frac{me^4}{\hbar^2}, \quad (25.E.1)$$

что можно видеть сразу из соображений размерности: это единственное выражение с размерностью энергии, которое можно составить из m , e и \hbar (скорость света c не входит в нерелятивистское уравнение Шредингера). Поэтому рассматриваемое здесь приближение не является разложением энергии по степеням постоянной тонкой структуры или какой-либо другой малой постоянной подобного типа, за исключением, возможно, случая сильно ионизованных атомов, когда оно может рассматриваться как разложение по степеням $1/Z$.

Задача, связанная с нерелятивистским уравнением Шредингера (25.1), которую должна решить теория, рассматриваемая в дан-

¹⁾ Как будет показано ниже, такое предположение является слишком грубым.

ной главе, является отправным пунктом для рассмотрений предшествующих глав; она заключается в нахождении „невозмущенной системы“ или основной структуры. С этой точки зрения условия, при которых можно ожидать, что (25.1a) будет хорошим приближением для уравнения (25.1), как раз противоположны условиям, которые позволяют считать законным рассмотрение *модификаций* уравнения (25.1), описанных в предыдущих главах. Решения уравнения (25.1a) будут представлять хорошую основу для нахождения решений уравнения (25.1), если возмущение W , определяемое (25.16), мало. Если это верно, то собственные значения уравнения (25.1), на которые расщепляются собственные значения уравнения (25.1), будут лежать близко друг к другу. С другой стороны, расчет расщепления тонкой структуры становится более точным, если собственные значения уравнения (25.1) лежат далеко одно от другого.

Эти утверждения о соотношении между приближениями последних глав и настоящей главы указывают лишь общую тенденцию, и поэтому должно быть много случаев, когда непригодно ни одно из них, и много случаев, в которых оба приближения применимы и полезны.

При расчете уровней с помощью принципа построения весьма полезно то, что большая часть энергии взаимодействия электронов может быть учтена путем видоизменения потенциала ядра. Если, например, в атоме Li рассматриваются два так называемых K -электрона ($N=1$) и один более сильно возбужденный электрон, то последний почти всегда будет двигаться под действием потенциала ядра e/r , так как действительный потенциал ядра Ze/r будет „экранирован“ двумя K -электронами, которые почти наверняка находятся в окрестности ядра. Таким образом, использование в (25.1a) вместо кулоновского потенциала Ze^2/r видоизмененного потенциала дает более точные результаты. Разумеется, если такая подстановка делается в (25.1a), то выражение (25.16) также должно быть соответственно видоизменено, чтобы оно вместе с уравнением (25.1a) снова давало (25.1). Теория экранирования в квантовой механике была впервые введена Хартри. Она дает неожиданно хорошие результаты для уровней энергии и других свойств атомов¹⁾.

Вывод принципа построения, который мы теперь изложим, восходит к Слетеру²⁾. Хотя ни невозмущенная задача решения

¹⁾ D. R. Hartree, Proc. Cambr. Phil. Soc., 24, 89 (1928). См. также J. C. Slater, Phys. Rev., 35, 210 (1930); V. Fock, Zs. f. Phys., 61, 126 (1930); D. R. Hartree, The Calculation of Atomic Structures, New York, 1957 (см. перевод: Д. Хартри, Расчеты атомных структур, ИЛ, 1960).

²⁾ J. C. Slater, Phys. Rev., 34, 1293 (1929).

уравнения (25.1а), ни возмущение (25.1б) не содержат каким-либо образом спиновых координат, Слетер с самого начала вводит спиновые переменные. Это кажущееся усложнение в действительности значительно упрощает исследования, так как с самого начала мы ограничиваемся антисимметричными волновыми функциями. Таким путем в качестве собственных функций получаются не собственные функции $\psi_{x\mu}^{SL}$ (которые принадлежат к определенной строке представления $\mathbf{A}^{(S)}$ симметрической группы по отношению к перестановкам декартовых координат электронов), а функции $\Xi_{\nu\mu}^{SL}$, найденные в гл. 22, включающие также спиновые координаты и антисимметричные относительно перестановок всех координат электронов. Мультиплетное число для функций $\Xi_{\nu\mu}^{SL}$ проявляется во вращениях \mathbf{Q}_R спиновых координат: $\Xi_{\nu\mu}^{SL}$ принадлежит ν -й строке представления $\mathbf{D}^{(S)}$ относительно \mathbf{Q}_R .

2. Пусть собственные функции оператора \mathbf{H}_k (см. 17, п. 2) помечены одним индексом b :

$$\mathbf{H}_k \psi_b(x_k, y_k, z_k) = E_b \psi_b(x_k, y_k, z_k). \quad (25.2)$$

Тогда индекс „орбиты“ b означает комбинацию главного квантового числа N , квантового числа орбитального момента количества движения l и магнитного квантового числа μ . Предполагается, что случайное вырождение (совпадение собственных значений с одинаковыми N , но с разными l), которое имеет место в чисто кулоновом центральном поле в атоме водорода, снимается экранированием. Тогда уровни с разными l будут расщеплены даже при одинаковых N ; как детальная теория, так и эксперимент показывают, что уровни с одним и тем же N лежат ниже для меньших l , чем для больших l . Поскольку $\mathbf{H}_1, \mathbf{H}_2, \dots, \mathbf{H}_n$ различаются лишь тем, что они действуют на переменные различных электронов, собственные значения всех \mathbf{H}_k численно совпадают; их собственные функции также одинаковы, за исключением того, что они зависят от разных переменных.

При введении спиновой координаты s из каждой собственной функции $\psi_b(x_k, y_k, z_k)$ получаются две собственные функции

$$\psi_{b\sigma}(x_k, y_k, z_k, s_k) = \psi_b(x_k, y_k, z_k) \delta_{s_k \sigma} \quad (\sigma = \pm 1). \quad (25.3)$$

Следовательно, собственные функции оператора \mathbf{H}_0 , как функции всех координат $x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n$, являются произведениями

$$\begin{aligned} & \psi_{b_1 \sigma_1 b_2 \sigma_2 \dots b_n \sigma_n} = \\ & = \psi_{b_1 \sigma_1}(x_1, y_1, z_1, s_1) \psi_{b_2 \sigma_2}(x_2, y_2, z_2, s_2) \dots \psi_{b_n \sigma_n}(x_n, y_n, z_n, s_n) \end{aligned} \quad (25.4)$$

собственных функций операторов H_k . Каждые две функции $\psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$ и $\psi_{b'_1\sigma'_1 \dots b'_n\sigma'_n}$ ортогональны, если они различны; если $b_i \neq b'_i$, то скалярное произведение обращается в нуль после интегрирования по x_i, y_i, z_i , а если $\sigma_i \neq \sigma'_i$, то оно равно нулю, так как сумма по s_i обращается в нуль. Собственные функции (25.4) для всех 2^n систем значений чисел $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \dots, \sigma_n$ принадлежат собственному значению

$$E = E_{b_1} + E_{b_2} + \dots + E_{b_n}. \quad (25.4a)$$

Кроме того, поскольку гамильтониан инвариантен относительно перестановок O_P электронов, все собственные функции, которые получаются из $\psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$ путем применения операторов O_P , по-прежнему принадлежат собственному значению (25.4a):

$$O_P \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n} (1', 2', \dots, n') = \psi_{b_1\sigma_1} (1) \dots \psi_{b_n\sigma_n} (n), \quad (25.5)$$

где P — перестановка $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1' & 2' & \dots & n' \end{pmatrix}$ и число k означает четыре переменные x_k, y_k, z_k, s_k . Перестановка множителей преобразует правую часть (25.5) в $\psi_{b_{1'}\sigma_{1'}} (1') \dots \psi_{b_{n'}\sigma_{n'}} (n')$. Таким образом, если подставить снова $1, 2, \dots, n$ вместо $1', 2', \dots, n'$, то получим

$$O_P \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n} (1, 2, \dots, n) = \psi_{b_{1'}\sigma_{1'}} (1, 2, \dots, n). \quad (25.5a)$$

Ясно, что собственное значение оператора (25.5a),

$$E_{b_{1'}} + E_{b_{2'}} + \dots + E_{b_{n'}}$$

совпадает с собственным значением (25.4a).

Мы можем представить все собственные функции собственного значения (25.4a), получающиеся одна из другой при перестановках электронов, в виде последовательности

$$\psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}, O_{P_1} \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}, O_{P_2} \psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}; \quad (25.6)$$

эту последовательность мы назовем *конфигурацией*. Таким образом, конфигурация характеризуется n символами (b_k, σ_k) :

$$(b_1\sigma_1)(b_2\sigma_2) \dots (b_n\sigma_n) = (N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1)(N_2 l_2 \mu_2 \sigma_2) \dots (N_n l_n \mu_n \sigma_n) \quad (25.E.2)$$

независимо от порядка. Ясно, что из любой собственной функции (25.5a), к которой уже была применена перестановка, с помощью перестановок переменных получаются в точности те же самые собственные функции, как и из $\psi_{b_1\sigma_1 \dots b_n\sigma_n}$. Поэтому в символе (25.E.2) для конфигурации может быть предписан любой

порядок величин b , например порядок, определяемый неравенствами

$$\begin{aligned} N_i &\leq N_{i+1}, \\ l_i &\leq l_{i+1} \end{aligned} \quad \text{при } N_i = N_{i+1}, \quad (25.7)$$

$$\mu_i \leq \mu_{i+1} \quad \text{при } N_i = N_{i+1}, \quad l_i = l_{i+1} \quad (25.7a)$$

и

$$\sigma_i \leq \sigma_{i+1} \quad \text{при } N_i = N_{i+1}, \quad l_i = l_{i+1}, \quad \mu_i = \mu_{i+1}.$$

Каждая собственная функция принадлежит одной и только одной конфигурации, причем собственные функции различных конфигураций ортогональны, так как все различные функции вида (25.4) ортогональны.

Если оператор O_P применить к функциям заданной конфигурации, то получающиеся при этом функции можно выразить в виде линейных комбинаций первоначальных функций конфигурации; действительно, они тоже являются функциями конфигурации. Поэтому функциям (25.6) принадлежит некоторое представление группы операторов O_P , симметрической группы n -й степени. С помощью матрицы, приводящей это представление, можно образовать линейные комбинации функций (25.6), которые принадлежат неприводимым представлениям группы O_P . Наоборот, функции (25.6) могут быть записаны в виде линейных комбинаций этих „неприводимых“ функций. В силу принципа Паули, из этих неприводимых линейных комбинаций нам понадобятся только *антисимметричные* комбинации, т. е. антисимметричные компоненты последовательности $O_{P_x} \psi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$; соотношение (12.6) показывает, что эти комбинации даются в виде

$$\sum_P \varepsilon_P O_P O_{P_x} \psi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n} = \sum_P \varepsilon_P O_{P P_x} \psi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}, \quad (25.8)$$

где ε_P равно $+1$ для четных перестановок и равно -1 для нечетных; это и есть $D(R)_{xx}^*$ из (12.6) для антисимметричного представления. Антисимметричные компоненты (25.8) всех функций одной и той же конфигурации с точностью до знака совпадают; при $P_x = E$ функция (25.8) имеет как раз форму определителя¹⁾

$$\sqrt{n!} \cdot \chi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n} = \begin{vmatrix} \psi_{b_1 \sigma_1}(1) & \psi_{b_1 \sigma_1}(2) & \dots & \psi_{b_1 \sigma_1}(n) \\ \psi_{b_2 \sigma_2}(1) & \psi_{b_2 \sigma_2}(2) & \dots & \psi_{b_2 \sigma_2}(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{b_n \sigma_n}(1) & \psi_{b_n \sigma_n}(2) & \dots & \psi_{b_n \sigma_n}(n) \end{vmatrix}. \quad (25.8a)$$

¹⁾ Множитель $\sqrt{n!}$ введен с целью сохранить нормировку функции $\chi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$. Выражения вида (25.8a) часто называются определителями Слетера.

Поскольку функция $O_P \psi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$ отличается от функции $\psi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$ только перестановкой переменных, соответствующая антисимметричная комбинация отличается от (25.8а) только тем, что функция переменных x_k, y_k, z_k, s_k входит не в k -й, а в другой столбец. Поэтому снова можно получить первоначальную функцию с помощью перестановки столбцов, что вызывает, самое большее, изменение знака.

Наоборот, отсюда следует, что антисимметричные линейные комбинации (25.8а) являются единственными, которые можно образовать из функций (25.6). Если F антисимметрична, то, приравняв антисимметричные компоненты в обеих частях равенства

$$F = \sum_P c_P O_P \psi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n},$$

находим, что F с точностью до постоянного множителя равно $\chi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$, так как антисимметричная компонента каждого члена в правой части есть $\chi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$.

Таким образом, из функций заданной конфигурации можно образовать не больше одной антисимметричной линейной комбинации, причем нельзя построить ни одной такой комбинации, если в последовательности (25.Е.2) $\sigma_i = \sigma_k$ для каждой пары i, k , для которой $b_i = b_k$ (т. е. $N_i = N_k, l_i = l_k, \mu_i = \mu_k$). В этом случае две строки определителя (25.8а) были бы равны и он обращался бы в нуль.

Итак, каждая конфигурация, для которой $b_i = b_k$ и $\sigma_i = \sigma_k$, не имеет места одновременно для какой-либо пары i, k , дает одно состояние, разрешенное принципом Паули; конфигурация, для которой $b_i = b_k, \sigma_i = \sigma_k$, для какой-либо пары i, k исключается принципом Паули. Это и есть первоначальная формулировка принципа Паули, который до открытия квантовой механики мог быть сформулирован только для нашей „невозмущенной задачи“ (25.1а), т. е. для гамильтониана, в котором пренебрегается взаимодействием электронов и каждому электрону приписывается некоторая орбита. В квантовой механике принцип Паули в его первоначальной форме является частным случаем требования антисимметричности волновых функций¹⁾, которое справедливо для всех систем электронов.

Из первоначальной формы принципа Паули следует, в частности, что те комбинации b_1, b_2, \dots, b_n , для которых три орбиты

¹⁾ Впервые это было замечено В. Гейзенбергом и П. Дираком; этот вывод был отправной точкой теоретико-группового рассмотрения теории спектров.

$b_i = b_j = b_k$ совпадают, не могут описывать „разрешенные“ конфигурации. Для разрешенной конфигурации мы должны были бы иметь $\sigma_i \neq \sigma_k$ и $\sigma_j \neq \sigma_k$, что невозможно, так как σ может принимать лишь два значения: -1 и $+1$. В каждом орбитальном состоянии могут находиться, самое большее, два электрона.

3. Теперь мы можем определить число разрешенных состояний, энергия которых была бы равна (25.4а), если бы взаимодействие между электронами отсутствовало. Если бы все собственные значения E_k оператора H_k (рассматриваемого только как функция от x_k, y_k, z_k) были простыми, то следовало бы только сосчитать разрешенные конфигурации среди всех 2^n конфигураций, даваемых различными наборами значений величин σ . Если несколько функций принадлежат одному собственному значению E_k , то мы должны учесть каждую возможную комбинацию орбит b с энергией $E_{b_1} + E_{b_2} + E_{b_3} + \dots + E_{b_n} = E$ ¹⁾.

Нас интересует не только число состояний, на которые расщепляется состояние с энергией (25.4а) вследствие взаимодействия между электронами, но также их характеристики, т. е. их мультиплетное число и орбитальное квантовое число. Последнее имеет смысл, если система имеет вращательную симметрию, что выполняется для атомов, с которыми мы главным образом имеем дело.

Дальнейшее рассмотрение учитывает только симметрию относительно вращений спиновых координат и декартовых координат Q_R и P_R ; рассматривать симметрию относительно перестановок электронов нет необходимости. Вращение декартовых координат является операцией симметрии только в сферически симметричном случае, тогда как вращение спиновых координат всегда является операцией симметрии, поскольку ни исходная задача (25.1а), ни возмущение (25.1б) не содержат спиновых координат. Следовательно, вся задача инвариантна относительно всех операторов, действующих только на спиновые координаты. Мы можем ограничиться лишь вращениями Q_R , так как их уже достаточно для определения мультиплетного числа отдельных возмущенных уровней. Полная симметрия, которую следует учитывать, является прямым произведением O_P на Q_R , а в изотропном случае — также и на P_R .

4. Прежде всего рассмотрим анизотропный случай. Если применить оператор Q_R к антисимметричной линейной комбинации

¹⁾ Обычно предполагается, что только те комбинации орбит b дают одну и ту же энергию

$$E_{b_1} + E_{b_2} + \dots + E_{b_n} = E_{c_1} + E_{c_2} + \dots + E_{c_n}, \quad (25.E.3)$$

для которых отдельные энергии — в правой и левой частях (25.E.3) — попарно равны.

ции $\chi_{b_1\sigma_1} \dots b_n\sigma_n$ невозмущенного уровня E , мы снова получим антисимметричные собственные функции с тем же самым собственным значением; поэтому они могут быть выражены в виде линейных комбинаций первоначальных собственных функций. Коэффициенты разложения образуют представление группы вращений. Если неприводимое представление $\mathfrak{D}^{(S)}$ группы \mathbf{O}_R содержится в этом представлении A_S раз, то A_S является также числом антисимметричных уровней с мультиплетным числом S , которые возникают благодаря возмущению из уровня с $E = E_{b_1} + \dots + E_{b_n}$. Неприводимые компоненты представления группы вращений могут быть найдены непосредственно из матриц, соответствующих вращениям вокруг оси Z . Если представление $(\exp(im\varphi))$ двумерной группы вращений встречается a_m раз в этих матрицах, то неприводимое представление $\mathfrak{D}^{(S)}$ содержится в полном представлении $A_S = a_S - a_{S+1}$ раз (см. гл. 15, п. 1).

Если R — вращение на угол φ вокруг Z , то оператор \mathbf{O}_R означает просто умножение функций конфигурации (25.6) на $\exp\left[\frac{1}{2}i(\sigma_1 + \dots + \sigma_n)\varphi\right]$. То же самое имеет место и для антисимметричной линейной комбинации $\chi_{b_1\sigma_1} \dots b_n\sigma_n$, так что эта последняя принадлежит представлению группы вращений вокруг Z с магнитным квантовым числом $m = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n)$. Если собственное значение E имеет всего a_m разрешенных конфигураций с суммой $\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n = 2m$, то возмущение приводит к $a_S - a_{S+1}$ уровням, принадлежащим $\mathfrak{D}^{(S)}$ относительно вращений спиновых координат.

Поскольку предыдущие абзацы относятся к анизотропному случаю, рассмотрим пример, в котором все собственные значения E_k оператора \mathbf{H}_k простые. В случае четырех электронов, когда имеются два электрона на одной орбите и две орбиты с одним электроном каждая,

$$b_1 = b_2 \neq b_3 \neq b_4, \quad b_1 \neq b_4,$$

комбинации величин σ , представленные в табл. 7, дают каждая по одной антисимметричной собственной функции.

Таким образом,

$$a_0 = 2, \quad a_1 = 1, \quad a_2 = a_3 = \dots = 0,$$

и поэтому имеется $a_1 = 1$ уровень с представлением $\mathfrak{D}^{(1)}$ и $a_0 - a_1 = 1$ уровень с представлением $\mathfrak{D}^{(0)}$.

Уровень, имеющий $2S + 1$ антисимметричных собственных функций, принадлежащих $\mathfrak{D}^{(S)}$ относительно \mathbf{O}_R , имеет мультиплетное число S . Действительно, если ввести взаимодействие спинов, он распадается, вообще говоря (в случае анизотропии!),

ТАБЛИЦА 7

Пример антисимметричных комбинаций четырех электронов *

σ_1	σ_2	σ_3	σ_4	$\frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)$
-1	+1	-1	-1	-1
-1	+1	-1	+1	0
-1	+1	+1	-1	0
-1	+1	+1	+1	+1

* Поскольку $b_1 = b_2$, при подсчете числа конфигураций можно принять, что $\sigma_1 \leq \sigma_2$ [см. (25.7а)]. Но $\sigma_1 = \sigma_2$ запрещено принципом Паули, так что может встретиться только $\sigma_1 < \sigma_2$.

на $2S + 1$ компонент тонкой структуры. Легко проверить, что это определение мультиплетного числа совпадает с использованным ранее. Согласно гл. 22, каждая функция от s , которая принадлежит $\mathfrak{D}^{(S)}$ относительно \mathbf{Q}_P , принадлежит $\mathbf{A}^{(S)*}$ относительно \mathbf{Q}_R . Кроме того, для каждой антисимметричной функции F , которая принадлежит $\mathbf{A}^{(S)*}$ относительно \mathbf{Q}_P [см. соотношение (12.10)], функция

$$\sum_P \sum_x A^{(S)}(P)_{xx} \mathbf{Q}_P F = \frac{n!}{g_S} F \quad (25.9)$$

принадлежит $\bar{\mathbf{A}}^{(S)}$ относительно \mathbf{P}_P , а это и является определением мультиплетного числа. Последнее утверждение следует из (25.9) в силу антисимметричности F (т. е. $\mathbf{O}_P F = \varepsilon_P F$), тождества $\mathbf{Q}_P = \mathbf{P}_{P^{-1}} \mathbf{O}_P$ и равенства (22.17). Таким образом,

$$\begin{aligned} \sum_P \sum_x A^{(S)}(P)_{xx} \mathbf{P}_{P^{-1}} \mathbf{O}_P F &= \sum_P \sum_x A^{(S)}(P^{-1})_{xx}^* \mathbf{P}_{P^{-1}} \varepsilon_P F = \\ &= \sum_P \sum_x \bar{\mathbf{A}}^{(S)}(P^{-1})_{xx}^* \mathbf{P}_{P^{-1}} F, \end{aligned} \quad (25.9a)$$

поскольку $\varepsilon_P = \varepsilon_{P^{-1}}$, и $\mathbf{A}^{(S)}$ унитарно.

Под действием возмущения \mathbf{W} правильные линейные комбинации функций $\chi_{b_1 \sigma_1 \dots b_n \sigma_n}$ превращаются просто в функции \mathfrak{E}_m^S гл. 22, которые были образованы из готовых бесспиновых собственных функций уравнения Шредингера (25.1).

Важной чертой метода Слетера является то, что он позволяет полностью избежать рассмотрения симметрии уравнения Шредингера

(25.1) по отношению к перестановкам одних только декартовых координат, рассматривая вместо этого его инвариантность относительно вращений Q_R спиновых координат. Рассмотрим, например, правило отбора для мультиплетного числа уровней в оптических переходах (интеркомбинационный запрет). Это правило следует из того факта, что собственные функции с различными мультиплетными числами принадлежат различным представлениям группы перестановок P_P декартовых координат.) Мы не пользовались методом Слетера в таком виде, поскольку нас интересуют все свойства симметрии, и, когда возможно, мы используем их полностью.

Хотя должны существовать случаи, в которых можно получить больше сведений о системе из рассмотрения перестановок P_P декартовых координат, чем из учета одних только Q_R , удивительно, насколько полные результаты, вытекающие более прямо из инвариантности относительно группы P_P , дает группа оператора Q_R .

Существенным условием применимости метода Слетера является то, чтобы внутренние координаты рассматриваемых частиц могли принимать только два значения. Если бы имели дело с частицами, имеющими три возможные ориентации (спиновый момент равен \hbar , а не $\hbar/2$, как, например, в случае ядра азота), то вместо $\mathfrak{D}^{(1/2)}$ в соотношении, определяющем операторы Q_R [соотношение (21.66)], появилось бы $\mathfrak{D}^{(1)}$. Это оказало бы очень малое влияние на рассуждения в настоящей главе. Однако заключения, которые можно было бы вывести в такой теории из инвариантности относительно вращений (относительно Q_R), были более ограниченными, чем следствия инвариантности по отношению к P_P . Действительно, в этом случае несколько уровней, определяемых уравнением Шредингера, совпадают, и это совпадение не могло бы быть объяснено из рассмотрения одних только Q_R . Тогда необходимо было бы либо ввести другие операторы, нарушая тем самым простоту теории, или использовать симметрию относительно операторов P_P , как это было сделано в первом выводе принципа построения¹⁾. В этом заключается причина того, что мы рассматривали в этой книге перестановки декартовых координат частиц и представления симметрической группы, и того, почему была явно показана эквивалентность Q_R с P_P для электронов.

5. Основное различие между сферически симметричным случаем и асимметричным заключается в том, что в сферически симметричном случае собственные значения $E_{l_k}^{N_k}$ операторов H_k , рассматриваемых только как функции от x_k, y_k, z_k , не являются

¹⁾ См. E. Wigner, Zs. f. Phys., 43, 624 (1927), § 21—25; M. Delbrück, Zs. f. Phys., 51, 181 (1928). Фактически уровни, возникающие из некоторой конфигурации, быстрее могут быть определены с помощью методов, изложенных в указанных статьях, чем методом, изложенным в настоящей книге. Однако изложенный здесь метод (принадлежащий Слетеру) является более наглядным и легче запоминается.

простыми, а $(2l_k + 1)$ -кратно вырожденными ¹⁾, и что мы должны определить не только мультиплетное число, но также и квантовое число орбитального момента количества движения уровней, отвечающих полному гамильтониану. Невозмущенные уровни определяются указанием главного и орбитального квантовых чисел орбитальных состояний

$$N_1 l_1, N_2 l_2, \dots, N_n l_n. \quad (25.E.4)$$

Чтобы получить все конфигурации невозмущенных уровней (25.E.4), мы должны для μ и σ в символе конфигурации

$$(N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1) (N_2 l_2 \mu_2 \sigma_2) \dots (N_n l_n \mu_n \sigma_n) = (b_1 \sigma_1) (b_2 \sigma_2) \dots (b_n \sigma_n) \quad (25.E.2)$$

взять все возможные значения ($|\mu_k| < l_k$, $\sigma_k = \pm 1$). В (25.E.2) мы можем ограничить значения N_k , l_k и μ_k условиями (25.7) и, поскольку мы хотим работать только с разрешенными конфигурациями, (25.7а) можно заменить на

$$\sigma_i < \sigma_{i+1} \text{ при } N_i = N_{i+1}, \quad l_i = l_{i+1}, \quad \mu_i = \mu_{i+1}. \quad (25.7б)$$

Для каждой разрешенной конфигурации существует одна антисимметричная собственная функция (25.8а).

Если применить операции $Q_R P_{R'}$ к этим антисимметричным линейным комбинациям собственных функций (25.E.4) и выразить получающиеся при этом функции через исходные функции,

$$\begin{aligned} & Q_R P_{R'} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} = \\ & = \sum_{\mu', \sigma'} \Delta(R, R')_{\mu_1' \sigma_1' \dots \mu_n' \sigma_n'; \mu_1 \sigma_1 \dots \mu_n \sigma_n} \chi_{N_1 l_1 \mu_1' \sigma_1' \dots N_n l_n \mu_n' \sigma_n'}, \quad (25.10) \end{aligned}$$

то матрицы $\Delta(R, R')$ будут образовывать представление прямого произведения групп операторов Q_R и $P_{R'}$. Если неприводимое представление $\mathfrak{D}^{(S)}(R) \times \mathfrak{D}^{(L)}(R')$ содержится в $\Delta(R, R')$ A_{SL} раз, то число уровней с мультиплетным числом S и орбитальным квантовым числом L , которые возникли из уровня (25.E.4) благодаря возмущению W , будет равно A_{SL} . Соответствующие линейные комбинации функций χ снова образуют первое приближение функций для вычисления величин, которые в гл. 22 были обозначены через $E_{\nu\mu}^{SL}$.

Чтобы определить числа A_{SL} , снова достаточно — как это будет показано — найти матрицы $\Delta(R, R')$, в которых R и R' являются

¹⁾ Если бы N_k действительно имели вид, указанный в (25.1), то все собственные значения $E(N_k, l_k)$ ($l_k = 0, 1, 2, \dots, N_k - 1$) с одним и тем же N_k совпадали. Однако мы предположили, что кулоновское поле достаточно изменено экранированием, чтобы вырождение всех собственных значений было снято, т. е. собственные значения были расщеплены.

вращениями вокруг оси Z . Если R — вращение на угол α вокруг Z , то мы имеем

$$Q_{\{\alpha 00\}} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} = e^{\frac{1}{2} i (\sigma_1 + \dots + \sigma_n) \alpha} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}. \quad (25.11)$$

При вычислении $P_{\{\alpha' 00\}} \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}, \dots, \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}$ оператор $P_{\{\alpha' 00\}}$ может быть применен к отдельным сомножителям; при этом все множители с магнитными квантовыми числами μ_k остаются без изменения, если не считать появления множителя $\exp(i \mu_k \alpha')$. Поэтому имеем

$$P_{\{\alpha' 00\}} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} = e^{i (\mu_1 + \dots + \mu_n) \alpha'} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}, \quad (25.11a)$$

поскольку это выполняется для всех собственных функций конфигурации

$$(N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1) (N_2 l_2 \mu_2 \sigma_2) \dots (N_n l_n \mu_n \sigma_n)$$

и, таким образом, для всех их линейных комбинаций. Соотношение (25.11a) выражает то обстоятельство, что Z -компоненты моментов количества движения отдельных электронов просто аддитивны. Из соотношений (25.11) и (25.11a) следует, что

$$\begin{aligned} & Q_{\{\alpha 00\}} P_{\{\alpha' 00\}} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n} = \\ & = e^{\frac{1}{2} i (\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) \alpha} e^{i (\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n) \alpha'} \chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}. \end{aligned} \quad (25.12)$$

Матрицы $\Delta(R, R')$, соответствующие вращению спиновых координат на угол α вокруг Z , а декартовых — на угол α' , являются диагональными матрицами; диагональным элементом, соответствующим собственной функции $\chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}$, является $\exp[i(\nu\alpha + \mu\alpha')]$, где

$$\nu = \frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) \quad \text{и} \quad \mu = (\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n).$$

Поэтому след этой матрицы получается путем сложения всех $\exp[i(\nu\alpha + \mu\alpha')]$ для всех разрешенных конфигураций. Характеры представления $\Delta(R, R')$ (R и R' — вращения вокруг оси Z), получаемые таким путем, могут быть сведены в таблицу типа приведенной на стр. 223, если каждому ν сопоставить строку и каждому μ — столбец и поместить на их пересечении столько крестиков, сколько имеется разрешенных конфигураций с

$$\frac{1}{2} (\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n) = \nu \quad \text{и} \quad \mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n = \mu.$$

В качестве примера рассмотрим два электрона, невозмущенные энергии которых равны и соответствуют p -состоянию ($l = 1$). Разрешенные конфигурации представлены в табл. 8.

ТАБЛИЦА 8

Разрешенные конфигурации* двух электронов в вырожденных p -состояниях

Конфигурация	μ_1	σ_1	μ_2	σ_2	μ	ν
1	(-1	-1)	(-1	1)	-2	0
2	(-1	-1)	(0	-1)	-1	-1
3	(-1	-1)	(0	1)	-1	0
4	(-1	-1)	(1	-1)	0	-1
5	(-1	-1)	(1	1)	0	0
6	(-1	1)	(0	-1)	-1	0
7	(-1	1)	(0	1)	-1	1
8	(-1	1)	(1	-1)	0	0
9	(-1	1)	(1	1)	0	1
10	(0	-1)	(0	1)	0	0
11	(0	-1)	(1	-1)	1	-1
12	(0	-1)	(1	1)	1	0
13	(0	1)	(1	-1)	1	0
14	(0	1)	(1	1)	1	1
15	(1	-1)	(1	1)	2	0

* В обозначениях символов конфигураций опущены главные и орбитальные квантовые числа, так как они соответственно равны 2 и 1. Поэтому вместо $(2^1 \mu_k \sigma_k)$ стоит $(\mu_k \sigma_k)$.

В последних двух столбцах записаны соответственно $\mu = \mu_1 + \mu_2$ и $\nu = \frac{1}{2}(\sigma_1 + \sigma_2)$. В табл. 9 крестик поставлен в соответствующем месте пересечения для каждой строки табл. 8.

ТАБЛИЦА 9

Разрешенные Z -компоненты спинового и орбитального моментов для двух эквивалентных p -электронов

ν	μ				
	-2	-1	0	1	2
-1		+	+	+	
0	+	++	+++	++	+
1		+	+	+	

Эта таблица дает характеры элементов группы $O_{\{\alpha 00\}} P_{\{\alpha' 00\}}$ в представлении $\Delta(R, R')$. С другой стороны, характер этого элемента в неприводимом представлении $\mathfrak{D}^{(S)} \times \mathfrak{D}^{(L)}$ равен

$$\sum_{\nu\mu} [\mathfrak{D}^{(S)}(\{\alpha 00\}) \times \mathfrak{D}^{(L)}(\{\alpha' 00\})]_{\nu\mu; \nu\mu} = \sum_{\mu=-L}^L \sum_{\nu=-S}^S e^{i(\nu\alpha + \mu\alpha')}. \quad (25.13)$$

Он был бы представлен в табл. 9 прямоугольником из отдельных крестиков, простирающимся по ν от $-S$ и до $\nu = S$ и по μ от $-L$ до $\mu = L$. Если характер, представленный в табл. 9, рассматривать как сумму неприводимых характеров, т. е. как сумму прямоугольных полей крестиков, то числа $a_{\nu\mu}$ крестиков на пересечении ν -й строки и μ -го столбца будут суммой чисел A_{SL} представлений $\mathfrak{D}^{(S)} \times \mathfrak{D}^{(L)}$ с $S \geq |\nu|$ и $L \geq |\mu|$, содержащихся в $\Delta(R, R')$:

$$a_{\nu\mu} = A_{S, L} + A_{S+1, L} + A_{S+2, L} + \dots + \\ + A_{S, L+1} + A_{S+1, L+1} + \dots + A_{S, L+2} + A_{S+1, L+2} + \dots \quad (25.14)$$

Здесь A_{SL} является также числом уровней с мультиплетным числом S и орбитальным квантовым числом L , которые получаются из уровня (25.Е.4) при введении возмущения. Согласно (25.14),

$$A_{SL} = a_{SL} - a_{S+1, L} - a_{S, L+1} + a_{S+1, L+1}. \quad (25.14a)$$

Это показывает, что неприводимые компоненты представления $\Delta(R, R')$ действительно полностью определяются характерами тех элементов, в которых R и R' являются вращениями вокруг оси Z , так как эти характеры могут быть разложены на неприводимые характеры (25.13) только одним способом¹⁾.

Для уровней в табл. 8 из равенства (25.14a) следует, что $A_{11} = 1$, $A_{02} = 1$, $A_{00} = 1$, а все остальные A_{SL} равны нулю. Поэтому два эквивалентных p -электрона²⁾ дают по одному уровню 3P , 1D и 1S . В табл. 10 вместо крестика, представляющего уровень, характер представления которого включает $\exp [i(\nu\alpha + \mu\alpha')]$, поставлен символ уровня.

¹⁾ Это связано с тем, что каждый класс группы прямого произведения O_R и $P_{R'}$ содержит элемент, в котором R и R' являются вращениями вокруг оси Z . Поскольку в любом представлении все элементы одного и того же класса имеют одинаковые характеры, характеры этих элементов определяют все характеры полностью.

²⁾ Состояния с орбитальными квантовыми числами $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ называются s, p, d, f, \dots -орбитами. Две орбиты эквивалентны, если их главные квантовые числа одинаковы. Следовательно, конфигурация, рассмотренная в табл. 9, является конфигурацией (Np, Np) или $(Np)^2$. Уровни системы в целом, соответствующие $L = 0, 1, 2, \dots$, обозначаются через S, P, D, \dots , причем мультиплетность $(2S + 1)$ дается цифрой у символа уровня слева сверху, а значение J — индексом справа внизу; например, $P_0, {}^3P_1$ или 3P_2 и т. д. См. также гл. 8.

ТАБЛИЦА 10

Разрешенные уровни для двух p -электронов

ν	μ				
	-2	-1	0	1	2
-1		3P	3P	3P	
0	1D	1D 3P	1S 1D 3P	1D 3P	1D
1		3P	3P	3P	

6. Можно определить также четность полученных уровней. Для собственных функций одноэлектронной задачи четность определяется квантовым числом l орбитального момента количества движения [равенство (19.17)]: $\omega = (-1)^l$. Поэтому имеем ($O_l = P_l$ означает инверсию)

$$O_l \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) = P_l \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots P_l \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) =$$

$$= (-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_n} \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \psi_{\mu_2 \sigma_2}^{N_2 l_2}(2) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n), \quad (25.15)$$

независимо от μ_k и σ_k . Четность всех собственных функций собственного значения (25.Е.4) равна $(-1)^{l_1 + l_2 + \dots + l_n}$ и такова же четность всех возмущенных уровней. Таким образом, четность уровней, возникающих из (25.Е.4), положительна, если сумма орбитальных квантовых чисел для отдельных орбит $l_1 + l_2 + \dots + l_n$ является четной, и отрицательна, если эта сумма является нечетной. Отсюда, помимо прочего, следует, что электрические дипольные переходы между уровнями, возникающими из одного и того же невозмущенного уровня (25.Е.4), запрещены правилом Лапорта.

7. В заключение изложим вычисление первого приближения для сдвигов уровней энергии.

Обозначим функции

$$\chi_{N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1 \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n}$$

с $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n = \mu$ и $\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n = 2\nu$, крестики для которых стоят на ν_μ -м месте в табл. 9, через $\chi_{\nu_\mu 1}, \chi_{\nu_\mu 2}, \chi_{\nu_\mu 3}, \dots$. Правильные линейные комбинации $f_{\nu_\mu 1}, f_{\nu_\mu 2}, \dots$, принадлежащие ν_μ -й строке некоторого представления $\mathfrak{D}^{(S)} \times \mathfrak{D}^{(L)}$, могут быть записаны в виде линейных комбинаций одних лишь функций $\chi_{\nu_\mu 1}, \chi_{\nu_\mu 2}, \chi_{\nu_\mu 3}, \dots$:

$$f_{\nu_\mu x} = \sum_{\lambda} u_{x\lambda} \chi_{\nu_\mu \lambda}. \quad (25.16)$$

Матрица преобразования унитарна, так как $\chi_{\nu\mu}$ и $f_{\nu\mu}$ являются ортогональными наборами:

$$\begin{aligned} \delta_{xx'} &= (f_{\nu\mu x}, f_{\nu\mu x'}) = \sum_{\lambda\lambda'} (u_{x\lambda}\chi_{\nu\mu\lambda}, u_{x'\lambda'}\chi_{\nu\mu\lambda'}) = \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} u_{x\lambda}^* u_{x'\lambda'} \delta_{\lambda\lambda'} = \sum_{\lambda} u_{x\lambda}^* u_{x'\lambda}. \end{aligned} \quad (25.17)$$

Поправка первого приближения по энергии возмущения к собственному значению, соответствующему функции $f_{\nu\mu}$, есть $(f_{\nu\mu}, \mathbf{W}f_{\nu\mu})$. Сумма энергий возмущения для всех x , т. е. для всех уровней с $S \geq |\nu|$, $L \geq |\mu|$, может быть вычислена до нахождения u :

$$\begin{aligned} \sum_x (f_{\nu\mu x}, \mathbf{W}f_{\nu\mu x}) &= \sum_x \sum_{\lambda\lambda'} u_{x\lambda}^* u_{x\lambda'} (\chi_{\nu\mu\lambda}, \mathbf{W}\chi_{\nu\mu\lambda'}) = \\ &= \sum_{\lambda\lambda'} \delta_{\lambda\lambda'} (\chi_{\nu\mu\lambda}, \mathbf{W}\chi_{\nu\mu\lambda'}) = \sum_{\lambda} (\chi_{\nu\mu\lambda}, \mathbf{W}\chi_{\nu\mu\lambda}). \end{aligned} \quad (25.18)$$

Отсюда сумма энергий возмущения для уровней с мультиплетным числом S и орбитальным квантовым числом L , возникающих из (25.Е.4), имеет вид по аналогии с (25.14а)

$$\begin{aligned} \sum_x \Delta E_{SLx} &= \sum_{\lambda} [(\chi_{SL\lambda}, \mathbf{W}\chi_{SL\lambda}) - (\chi_{S+1L\lambda}, \mathbf{W}\chi_{S+1L\lambda}) - \\ &- (\chi_{SL+1\lambda}, \mathbf{W}\chi_{SL+1\lambda}) + (\chi_{S+1L+1\lambda}, \mathbf{W}\chi_{S+1L+1\lambda})]. \end{aligned} \quad (25.18a)$$

Если уровень (25.Е.4) невозмущенной задачи дает лишь один уровень с мультиплетным числом S и орбитальным квантовым числом L , то его энергия определяется непосредственно выражением (25.18а); в этом случае (25.18а) сводится к квадратурам.

При вычислении входящего в (25.18а) скалярного произведения

$$\begin{aligned} &(\chi_{N_n l_n \mu_n \sigma_n} \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n, \mathbf{W}\chi_{N_n l_n \mu_n \sigma_n} \dots N_n l_n \mu_n \sigma_n) = \\ &= \frac{1}{n!} \sum_{P P'} (\varepsilon_P \mathbf{O}_P \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n} (1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n} (n), \mathbf{W} \varepsilon_{P'} \mathbf{O}_{P'} \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n} (1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n} (n)) \end{aligned} \quad (25.19)$$

унитарный оператор $\varepsilon_P \mathbf{O}_P$ можно перенести, поставив перед вторым множителем в виде $\varepsilon_P \mathbf{O}_P^{-1}$; поскольку этот оператор коммутирует с \mathbf{W} , он может быть скомбинирован с $\varepsilon_{P'} \mathbf{O}_{P'}$. Теперь можно произвести суммирование по $P^{-1}P' = T$ вместо суммирования по P' ,

что дает просто $n!$. Тогда правая часть (25.19) принимает вид

$$\frac{1}{2} \left(\psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n), \sum_{i \neq k} W_{ik} \sum_T \varepsilon_T \mathbf{O}_T \times \right. \\ \left. \times \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) \right),$$

где оператор энергии возмущения \mathbf{W} представлен в виде суммы членов \mathbf{W}_{ik} , соответствующих взаимодействию отдельных пар электронов.

Рассмотрим один конкретный член \mathbf{W}_{ik} . Подробно он может быть записан в форме

$$\sum_T \sum_{s_1 \dots s_n} \int \dots \int \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1)^* \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n)^* \mathbf{W}_{ik} \varepsilon_T \mathbf{O}_T \times \\ \times \psi_{\mu_1 \sigma_1}^{N_1 l_1}(1) \dots \psi_{\mu_n \sigma_n}^{N_n l_n}(n) dx_1 \dots dz_n. \quad (25.20)$$

Если здесь T действует не только на i -й и k -й электроны [т. е. T не является ни тождественным преобразованием, ни транспозицией (ik)], а преобразует, скажем, j в j' , то (25.20) обращается в нуль при интегрировании по x_j, y_j, z_j и суммировании по s_j в силу ортогональности собственных функций $\psi_{\mu_j \sigma_j}^{N_j l_j}$ и $\psi_{\mu_{j'} \sigma_{j'}}^{N_{j'} l_{j'}}$, поскольку в разрешенной конфигурации одновременное выполнение равенств $N_j = N_{j'}, l_j = l_{j'}, \mu_j = \mu_{j'}$ и $\sigma_j = \sigma_{j'}$ невозможно. Таким образом, при вычислении члена \mathbf{W}_{ik} достаточно считать T тождественным преобразованием и транспозицией (ik) . В обоих случаях интегрирование по декартовым координатам и суммирование по спиновым координатам всех электронов, отличных от i и k , дает множитель 1, и (25.20) принимает вид

$$\sum_{s_i' s_k} \int \dots \int \psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(i) \psi_{\mu_k \sigma_k}^{N_k l_k}(k) \mathbf{W}_{ik} \left[\psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(i) \psi_{\mu_k \sigma_k}^{N_k l_k}(k) - \right. \\ \left. - \psi_{\mu_k \sigma_k}^{N_k l_k}(i) \psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(k) \right] dx_i dy_i dz_i dx_k dy_k dz_k. \quad (25.20a)$$

Если сюда подставить $\psi_{\mu_i \sigma_i}^{N_i l_i}(i) = \psi_{\mu_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_i) \sigma_{s_i \sigma_i}$ и т. д. (\mathbf{r}_i означает декартовы координаты x_i, y_i, z_i i -го электрона), то суммирование по s_i, s_k может быть выполнено; тогда получим

$$\int \dots \int \psi_{\mu_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_i) \psi_{\mu_k}^{N_k l_k}(\mathbf{r}_k) \mathbf{W}_{ik} \left[\psi_{\mu_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_i) \psi_{\mu_k}^{N_k l_k}(\mathbf{r}_k) - \right. \\ \left. - \delta_{\sigma_i \sigma_k} \psi_{\mu_k}^{N_k l_k}(\mathbf{r}_i) \psi_{\mu_i}^{N_i l_i}(\mathbf{r}_k) \right] dx_i dy_i dz_i dx_k dy_k dz_k. \quad (25.21)$$

Складывая интегралы (25.21) для всех $\binom{n}{2}$ пар ik и всех разрешенных конфигураций $(N_1 l_1 \mu_1 \sigma_1)$, $(N_2 l_2 \mu_2 \sigma_2)$, ..., $(N_n l_n \mu_n \sigma_n)$, для которых $\mu_1 + \mu_2 + \dots + \mu_n = \mu$ и $\sigma_1 + \sigma_2 + \dots + \sigma_n = 2\nu$, получаем суммы (25.18) энергий возмущения для всех уровней, возникающих из (25.Е.4), для которых $S \geq |\nu|$ и $L \geq |\mu|$. Тогда (25.18а) дает первое приближение изменения энергии, просуммированного по всем уровням с заданными S и L .

За дальнейшими подробностями этого расчета, в частности вычисления интегралов (25.21), которое в определенных случаях может быть произведено без явных вычислений, отсылаем читателя к оригинальной работе Слетера¹⁾. Там же даны интересные численные примеры.

¹⁾ См. примечание на стр. 379.

ОБРАЩЕНИЕ ВРЕМЕНИ

Обращение времени и антиунитарные операторы

Группа симметрии изолированной системы содержит, помимо вращений и отражений, рассмотренных в предыдущих главах, смещения в пространстве и во времени, а также переходы к движущимся системам координат¹⁾. Число состояний такой системы бесконечно велико, и оператор энергии имеет непрерывный спектр. Это обстоятельство уже было разъяснено ранее в гл. 17. Из бесконечной совокупности всех состояний можно выбрать конечное множество состояний: состояния с нулевым импульсом и определенной энергией. Ограничение состояниями с нулевым импульсом соответствует точке зрения спектроскопии, где рассматривается только *внутренняя энергия* атомных или молекулярных систем, а не их кинетическая энергия. Фактически точность спектроскопических измерений часто ограничена движением атомов или молекул; в таких случаях предпринимаются все меры для уменьшения скорости движения, насколько это возможно.

Ограничение нулевым импульсом исключает переходы к движущимся системам координат. Оно фактически исключает также и операторы смещения: волновая функция частицы с нулевым импульсом инвариантна относительно пространственных смещений, а смещение во времени на t приводит к умножению ее на довольно тривиальный множитель $\exp(-iEt/\hbar)$, где E является энергией этого состояния. С другой стороны, как уже упоминалось раньше, постулат нулевого импульса может быть заменен предположением о статическом внешнем поле, как, например, поле неподвижного ядра. Это исключает также и трансляционную симметрию и переход к движущимся системам координат как элементы симметрии. На первый взгляд кажется, что наша задача не имеет новых элементов симметрии, кроме уже рассмотренных. Это, однако, не вполне верно: остается дополнительный элемент сим-

¹⁾ Изложение в этом и следующем разделах настоящей главы следует в основной статье автора в *Gött. Nachr., Math.-Phys.*, 546 (1932). См. также G. Lüders, *Zs. f. Phys.*, 133, 325 (1952).

метрии — преобразование $t \rightarrow -t$. Оно преобразует состояние φ в состояние $\theta\varphi$, в котором все скорости (включая „вращение“ электрона) имеют противоположные направления по отношению к направлениям в состоянии φ . (Поэтому термин „обращение направления движения“ является, по-видимому, более точным, хотя и более длинным, чем термин „обращение времени“.) Весьма важна связь между обращением времени и изменением, которое система испытывает в течение определенного промежутка времени. Зависимость от времени описывается уравнением Шредингера

$$\frac{\partial \varphi}{\partial t} = -\frac{i}{\hbar} H\varphi. \quad (26.1)$$

Обозначим стационарные состояния и соответствующие значения энергии через Ψ_k и E_k . Тогда в течение промежутка времени t состояние $\varphi_0 = \sum_k a_k \Psi_k$ претерпевает изменение:

$$\varphi_0 = \sum_k a_k \Psi_k \rightarrow \varphi_t = \sum_k a_k e^{-iE_k t/\hbar} \Psi_k. \quad (26.1a)$$

Преобразование, описываемое (26.1a), называется „смещением во времени на t “. Оно является унитарной операцией.

Следующие четыре операции, выполненные последовательно над произвольным состоянием, приводят к тому, что система возвращается в свое первоначальное состояние. Первая операция — обращение времени, вторая — смещение во времени на t , третья — снова обращение времени, а четвертая — опять смещение во времени на t . Эти четыре операции, взятые вместе, возвращают систему в ее исходное состояние, так как смещение во времени после его обращения сдвигает систему по времени назад. Два обращения времени, с другой стороны, компенсируются в смысле направления скоростей. Поэтому можно сказать, что операции

(Смещение во времени на t) \times (Обращение времени) \times (Смещение во времени на t) \times (Обращение времени)

эквивалентны единичному оператору. С другой стороны,

$$\begin{aligned} & (\text{Смещение во времени на } t) \times (\text{Обращение времени}) = \\ & = (\text{Обращение времени}) \times (\text{Смещение во времени на } -t), \end{aligned} \quad (26.1b)$$

причем операторы, соответствующие двум частям равенства (26.1b), могут отличаться, самое большее, числовым множителем с модулем 1, который не имеет физического значения.

Поскольку θ является оператором симметрии, он оставляет вероятности перехода между двумя состояниями Ψ и Φ без изменения:

$$|(\Psi, \Phi)|^2 = |(\theta\Psi, \theta\Phi)|^2. \quad (26.2)$$

Тогда из Приложения к гл. 20 (стр. 276) следует, что θ может быть нормирован таким образом, чтобы он удовлетворял одному из двух уравнений (20.29). Обсуждение в Приложении к гл. 20 уже показывает, что он удовлетворяет *второй* возможности, именно той, которая могла быть исключена для всех чисто пространственных операций симметрии. Это можно также заключить из (26.1a), но это видно более ясно, если проследить ход рассуждений в указанном Приложении. Доказательство становится наиболее простым, если набор ортогональных функций Ψ_1, Ψ_2, \dots отождествить с собственными функциями гамильтониана; тогда Ψ_i являются стационарными состояниями. При этом $\theta\Psi_i$ будут тоже стационарными состояниями, так что Ψ_i и $\theta\Psi_i$ соответствуют одним и тем же значениям энергии.

Если бы первая возможность из (20.29) была применима также к оператору θ , последний был бы линейным оператором. Это приводит к противоречию, откуда следует, что для θ реализуется вторая возможность из (20.29). Чтобы прийти к этому противоречию, снова рассмотрим произвольное состояние Φ_0 и разложим его по стационарным состояниям:

$$\Phi_0 = \sum a_x \Psi_x. \quad (26.3)$$

Предполагаемая линейность оператора θ приводит к

$$\theta\Phi_0 = \sum a_x \theta\Psi_x, \quad (26.3a)$$

и, так как $\theta\Psi_x$ тоже является стационарным состоянием с энергией E_x , по истечении промежутка времени t оно перейдет в состояние $\exp(-iE_x t/\hbar) \theta\Psi_x$. Следовательно, состояние $\theta\Phi_0$ через время t становится состоянием

$$\sum a_x e^{-iE_x t/\hbar} \theta\Psi_x. \quad (26.3b)$$

Это состояние должно совпадать с состоянием, получаемым при применении оператора θ к

$$\Phi_{-t} = \sum a_x e^{iE_x t/\hbar} \Psi_x.$$

Если оператор θ является линейным, то это состояние имеет вид

$$\theta\Phi_{-t} = \sum a_x e^{iE_x t/\hbar} \theta\Psi_x, \quad (26.3b)$$

а эта функция, вообще говоря, не является кратной (с постоянным множителем) функции (26.3b), так как показатели имеют другой знак. Следовательно, предположение о том, что θ является линейным оператором, приводит к противоречию, и θ должен удовлетворять второй возможности из (20.29); иначе говоря, функ-

ция $\theta\Phi_0$ с точностью до постоянного множителя должна быть равна

$$\frac{a_1}{a_1^*} (a_1^* \theta \Psi_1 + a_2^* \theta \Psi_2 + a_3^* \theta \Psi_3 + \dots).$$

Так как мы можем свободно выбрать постоянный множитель в определении $\theta\Phi_0$, выберем его равным a_1^*/a_1 , так что

$$\theta\Phi_0 = \theta \left(\sum a_x \Psi_x \right) = \sum a_x^* \theta \Psi_x. \quad (26.4)$$

Оператор, удовлетворяющий соотношению (26.4) для любого набора величин a_1, a_2, \dots и заданной полной ортогональной системы Ψ_x , будем называть *антилинейным*. Тогда он будет удовлетворять аналогичному соотношению по отношению к любой системе функций. В частности, если $\Phi_1 = \sum b_x \Psi_x$, мы имеем

$$\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1 = \alpha \sum a_x \Psi_x + \beta \sum b_x \Psi_x = \sum (\alpha a_x + \beta b_x) \Psi_x,$$

так что

$$\begin{aligned} \theta(\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1) &= \theta \left(\sum (\alpha a_x + \beta b_x) \Psi_x \right) = \sum (\alpha a_x + \beta b_x)^* \theta \Psi_x = \\ &= \alpha^* \sum a_x^* \theta \Psi_x + \beta^* \sum b_x^* \theta \Psi_x = \alpha^* \theta \Phi_0 + \beta^* \theta \Phi_1. \end{aligned}$$

Это последнее соотношение,

$$\theta(\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1) = \alpha^* \theta \Phi_0 + \beta^* \theta \Phi_1, \quad (26.5)$$

которое справедливо для любых Φ_0, Φ_1 и любых двух чисел α, β , является обычным определением антилинейного оператора. Оно следует из того факта, что для оператора обращения времени осуществляется вторая возможность (20.29), а также из нормировки (26.4), принятой для $\theta \left(\sum a_x \Psi_x \right)$. Помимо того, что оператор θ антилинеен, он удовлетворяет еще соотношению (26.2) для любой пары функций. Оператор, удовлетворяющий (26.2) и (26.5), будет называться *антиунитарным*, и будет выведена нормальная форма антиунитарного оператора.

Простейшим антиунитарным оператором является переход к комплексно-сопряженным величинам. Эту операцию мы обозначим через K . Действие K заключается в замене выражения, к которому он применяется, на комплексно-сопряженное:

$$K\varphi = \varphi^*. \quad (26.6)$$

Ясно, что оператор K является антилинейным. Поскольку

$$(K\Psi, K\Phi) = (\Psi^*, \Phi^*) = (\Psi, \Phi)^*, \quad (26.6a)$$

K удовлетворяет также соотношению (26.2). Следовательно, он является антиунитарным. Кроме того, он обладает важным свойством:

$$K^2 = 1. \quad (26.6b)$$

В самом деле,

$$K^2\Phi = K(K\Phi) = K\Phi^* = (\Phi^*)^* = \Phi.$$

Рассмотрим произведение $U = \theta K$ антиунитарного оператора θ и K . Оно линейно:

$$\begin{aligned} U(\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1) &= \theta K(\alpha\Phi_0 + \beta\Phi_1) = \theta(\alpha^*\Phi_0^* + \beta^*\Phi_1^*) = \\ &= \alpha\theta\Phi_0^* + \beta\theta\Phi_1^* = \alpha\theta K\Phi_0 + \beta\theta K\Phi_1 = \alpha U\Phi_0 + \beta U\Phi_1. \end{aligned}$$

Кроме того, θK оставляет абсолютную величину скалярного произведения инвариантной, так как оба его сомножителя обладают этим свойством. Поэтому оно удовлетворяет предположениям, изложенным в Приложении к гл. 20, с первой возможностью из (20.29), и, следовательно, унитарно. Отсюда следует, что *всякий антиунитарный оператор, в частности θ , может быть записан в виде произведения некоторого унитарного оператора и оператора комплексного сопряжения K*

$$\theta K = U, \quad \theta = UK. \quad (26.7)$$

Это нормальный вид антиунитарных операторов. Из него следует, что θ удовлетворяет соотношениям (26.4) и (26.5), а также соотношению

$$(\theta\Phi, \theta\Psi) = (UK\Phi, UK\Psi) = (K\Phi, K\Psi),$$

так что (26.6a) справедливо для любого антиунитарного оператора:

$$(\theta\Phi, \theta\Psi) = (\Phi, \Psi)^* = (\Psi, \Phi). \quad (26.8)$$

Заметим далее, что произведение двух антиунитарных операторов унитарно:

$$U_1 K U_2 K \Phi = U_1 K U_2 \Phi^* = U_1 (U_2 \Phi^*)^* = U_1 U_2^* \Phi$$

или

$$U_1 K U_2 K = U_1 U_2^*. \quad (26.9)$$

Аналогичным образом произведение унитарного и антиунитарного операторов антиунитарно.

Оператор обращения времени имеет еще одно важное свойство: хотя $\theta\Phi$, вообще говоря, не совпадает с состоянием Φ , состояние $\theta^2\Phi = \theta\theta\Phi$ совпадает с состоянием Φ . Следовательно, $\theta^2\Phi$ может отличаться от Φ только постоянным множителем. Покажем, что этот множитель равен либо $+1$, либо -1 . Если записать $\theta = UK$, то

$$\theta^2 = UKUK = UU^* = c1. \quad (26.10)$$

В силу унитарности U , имеем $UU^\dagger = 1$, так что (26.10) приводит к $U^* = cU^\dagger$ или $U = cU^T$. Переход к транспонированным опера-

торам в этом равенстве дает $U^T = cU$, так что $U = cU^T = c^2U$. Это снова дает $c = \pm 1$, так что U может быть либо симметричным, либо антисимметричным и

$$\theta^2 = \pm 1. \quad (26.10a)$$

Читатель без труда узнает здесь те же рассуждения, которые привели к (24.36). Позднее мы увидим, что верхний знак отвечает простой теории Шредингера и теории, учитывающей спин, если число электронов четно. Нижний знак относится к теории с учетом спина, когда число электронов или, в более общем случае, число частиц с полуцелым спином нечетно.

Соотношение (26.10a) выполняется не только для самого обращения времени, но и для произведения обращения времени на другую операцию симметрии. То, что последовательность двух обращений времени восстанавливает первоначальное состояние, является следствием инволюционного характера¹⁾ физического оператора обращения времени. Соотношение $\theta^2 = c1$ и выражает это свойство. Однако тот факт, что c может быть равным только $+1$ или -1 , является математическим следствием антиунитарности θ . Здесь положение совершенно иное, чем то, с которым мы имели дело в случае вращений. Если R — вращение на π , то как физическая операция она инволюционна. Тем не менее O_R^2 может быть кратным единичной матрице с любым множителем модуля 1. Поскольку O_R содержат свободный множитель, этот оператор можно нормировать так, чтобы $O_R^2 = 1$. Фактически нормировка, произведенная в гл. 20, дает $O_R^2 = 1$, если число электронов четно, и $O_R^2 = -1$, если оно нечетно. Это, однако, является следствием нормировки, тогда как соотношение (26.10a) выполняется автоматически. Действительно, замена θ на $\omega\theta$ с $|\omega| = 1$ (что вполне допустимо) не меняет θ^2 вовсе: $\omega\theta\omega = \omega\omega^*\theta\theta = \theta^2$.

Определение оператора обращения времени

С точки зрения обращения времени существуют два важных класса физических величин. Координаты, полная энергия и кинетическая энергия принадлежат к первому классу. Вероятность определенного значения λ любой из этих величин одинакова для φ и для $\theta\varphi$, независимо от того, каково φ . Эти величины либо не связаны со временем, либо содержат четную степень временной переменной. В результате обращение направления движения не оказывает никакого влияния на эти величины. Скорость, импульс,

¹⁾ Инволюцией мы называем такую операцию, квадрат которой является тождественной операцией.

момент количества движения, а также проекции спина на заданное направление принадлежат ко второму классу операторов. Если какая-либо из этих величин имеет значение λ в состоянии φ , то она имеет значение $-\lambda$ в состоянии $\theta\varphi$. Эти величины содержат нечетную степень временной переменной. Разумеется, существуют физические величины, как, например, координата плюс скорость, которые не принадлежат ни к одному из этих классов. Нам, однако, не придется иметь дело с величинами подобного рода.

Операторы, соответствующие величинам первого класса, коммутируют с θ . Действительно, если q является таким оператором, а φ_x — состояние, в котором q имеет значение λ_x , то $q\varphi_x = \lambda_x\varphi_x$. Так как q имеет значение λ_x также и для $\theta\varphi_x$, имеем также $q\theta\varphi_x = \lambda_x\theta\varphi_x$. Следовательно, если φ — произвольная волновая функция $\varphi = \sum a_x\varphi_x$, то в силу линейности q имеем

$$\theta q\varphi = \theta q \sum a_x\varphi_x = \theta \sum a_x\lambda_x\varphi_x = \sum a_x^*\lambda_x\theta\varphi_x, \quad (26.11a)$$

поскольку величины λ_x вещественны. С другой стороны,

$$q\theta\varphi = q\theta \sum a_x\varphi_x = q \sum a_x^*\theta\varphi_x = \sum a_x^*q\theta\varphi_x = \sum a_x^*\lambda_x\theta\varphi_x. \quad (26.11b)$$

Отсюда следует, что если q — оператор первого класса, то

$$\theta q = q\theta. \quad (26.11)$$

С другой стороны, если оператор p принадлежит ко второму классу, те же аргументы приводят к тому, что

$$\theta p = -p\theta \quad (26.12)$$

и θ антикоммутирует с этими операторами. Предыдущее рассуждение является строгим только в том случае, если q и p имеют точечные спектры; однако можно показать, что соотношения (26.11) и (26.12) справедливы для всех операторов соответственно первого и второго классов.

Рассмотрим сначала простую теорию Шредингера, которая не учитывает спина. Если мы напишем $\theta = UK$, то из $\theta x = x\theta$, где x — любая из координат, получим

$$UKx\varphi = Ux\varphi^* = xUK\varphi = xU\varphi^*, \quad (26.13)$$

так что U коммутирует с операцией *умножения* на любую из координат. Так как операторы импульса $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ принадлежат ко второму классу операторов, из (26.12) имеем

$$UK \frac{\hbar}{i} \frac{\partial \varphi}{\partial x} = -\frac{\hbar}{i} U \frac{\partial \varphi^*}{\partial x} = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} UK\varphi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial (U\varphi^*)}{\partial x}. \quad (26.13a)$$

Мнимая единица i в выражении для оператора импульса компенсирует знак минус в (26.12) и U коммутирует с операцией *дифференцирования*.

ференцирования по любой из координат. Отсюда можно заключить, что \mathbf{U} должно быть просто умножением на постоянную с модулем 1. Поскольку эта постоянная может быть выбрана произвольно, положим ее равной 1; тогда для теории, не учитывающей спина, получим

$$\theta = \mathbf{K}, \quad \theta\varphi = \varphi^*. \quad (26.14)$$

Это показывает, что волновые функции стационарных состояний могут быть выбраны вещественными, что в данном случае совершенно очевидно, поскольку гамильтониан является вещественным. Однако следует заметить, что соотношения (26.14) справедливы только в том случае, если операторы координат и импульсов берутся в виде x и $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}$ (см. гл. 4). Если использовать „импульсные координаты“ и подставить $i\hbar \frac{\partial}{\partial p}$ вместо обычных координат, а умножение волновой функции на „импульсную“ переменную p для импульсных координат, то θ становится равным \mathbf{UK} , где \mathbf{U} не является единичным оператором, а производит подстановку — p вместо p :

$$\mathbf{U}\varphi(-p_1, -p_2, \dots, -p_f) = \varphi(p_1, p_2, \dots, p_f). \quad (26.14a)$$

Рассмотрим теперь теорию, учитывающую спин. Оператор \mathbf{U} должен удовлетворять соотношениям (26.13) и (26.13a) также и в этом случае, но этих условий недостаточно для полного определения \mathbf{U} ; они показывают лишь, что \mathbf{U} не действует на декартовы координаты, но тем не менее может действовать на спиновые координаты. В этом отношении он имеет свойства, противоположные свойствам бесспиновых операторов в гл. 20. Чтобы полностью определить $\theta = \mathbf{UK}$, необходимо рассмотреть поведение спиновых переменных $s_{1x}, s_{1y}, s_{1z}, \dots, s_{nx}, s_{ny}, s_{nz}$ при обращении времени. Спиновые переменные как моменты количества движения принадлежат ко второму классу операторов, так что они антикоммутируют с θ . Поскольку все s_{ix} вещественны, для всех $i = 1, 2, \dots, n$ имеем

$$\theta s_{ix} = \mathbf{UK} s_{ix} = \mathbf{U} s_{ix} \mathbf{K}.$$

Это выражение должно быть равно $-s_{ix}\theta = -s_{ix}\mathbf{UK}$, так что s_{ix} антикоммутирует с \mathbf{U} . То же самое имеет место для s_{iz} , которые тоже все вещественны. С другой стороны, мнимый оператор s_{iy} коммутирует с \mathbf{U} . Следовательно,

$$\mathbf{U} s_{ix} = -s_{ix} \mathbf{U}, \quad \mathbf{U} s_{iy} = s_{iy} \mathbf{U}, \quad \mathbf{U} s_{iz} = -s_{iz} \mathbf{U}. \quad (26.13b)$$

Оператором, удовлетворяющим этим требованиям, является произведение всех мнимых спиновых операторов:

$$\mathbf{U} = s_{1y} s_{2y} \dots s_{ny}. \quad (26.15)$$

Действительно, с точностью до множителей, U — единственный оператор, который удовлетворяет соотношениям (26.136). Предположим, что существует второе решение $U_1 U$ этих уравнений. Тогда мы находим, что U_1 должен коммутировать со всеми s_{ix} , s_{iy} , s_{iz} и, следовательно, с

$$c_1 s_{1z} + c_2 s_{2z} + \dots + c_n s_{nz} \quad (26.E.1)$$

при всех значениях c . Однако матрица, коммутирующая со всеми этими матрицами, является диагональной матрицей, так как при надлежащем выборе величин c никакие два диагональные элемента матрицы (26.E.1) не равны. С другой стороны, ни один матричный элемент матрицы

$$(s_{1y} + s_{1z})(s_{2y} + s_{2z}) \dots (s_{ny} + s_{nz}) \quad (26.E.2)$$

не обращается в нуль, так что только постоянная матрица коммутирует как с (26.E.1), так и с (26.E.2). Поскольку постоянная в θ остается еще свободной, можно написать

$$\theta = s_{1y} s_{2y} \dots s_{ny} K \quad (26.15a)$$

или

$$\begin{aligned} \theta \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = t^{-s_1} \dots t^{-s_n} \Phi(x_1, y_1, z_1, -s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, -s_n)^*. \end{aligned} \quad (26.15b)$$

Легко проверить, что $\theta^2 = 1$, если n четно, и $\theta^2 = -1$, если n нечетно. Существует другая форма оператора θ , которая получается, если заметить, что $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{0, \pi, 0\}) = t s_y$. Так как $Q_{\{0, \pi, 0\}}$ заключается в применении $\mathfrak{D}^{(1/2)}(\{0, \pi, 0\})$ к каждой спиновой переменной, сравнение с (26.15a) показывает, что

$$\theta = (-t)^n Q_{\{0, \pi, 0\}} K. \quad (26.15b)$$

Выведем, наконец, соотношения между оператором обращения времени θ и унитарными операторами O_R или O_u , которые соответствуют вращениям систем координат. Поскольку вращения и обращение времени коммутируют как физические операции, $O_R \theta$ и θO_R могут отличаться только постоянным множителем c_R , который, однако, может зависеть от R . Следовательно,

$$\theta^{-1} O_R \theta = c_R O_R \quad \text{или} \quad \theta^{-1} O_u \theta = c_u O_u. \quad (26.16)$$

Произведение двух таких соотношений, в силу $O_R O_S = O_{RS}$, дает

$$c_R c_S O_{RS} = \theta^{-1} O_R \theta \theta^{-1} O_S \theta = \theta^{-1} O_{RS} \theta = c_{RS} O_{RS}. \quad (26.16a)$$

Поэтому числа c_R образуют представление группы вращений (или двумерной унитарной унитарной группы преобразований u). Так как единственное одномерное представление группы чистых вращений или унитарной группы есть тождественное представление $c_R = 1$, то

$$O_R \theta = \theta O_R \quad \text{или} \quad O_u \theta = \theta O_u \quad (26.17)$$

для всех собственных вращений. Это соотношение может быть проверено также прямым вычислением; оно эквивалентно соотношению

$$\mathfrak{D}^{(1/2)}(R) s_y = s_y \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)^*. \quad (26.17a)$$

Предыдущие рассуждения не исключают возможности того, что обе части соотношения (26.17) равны по абсолютной величине, но имеют противоположные знаки, если R является несобственным вращением. В соответствующем представлении (c_R) полной группы вращений (1) соответствует собственным вращением, а (-1) — вращением с определителем -1 . Однако легко проверить, что соотношение (26.17) справедливо и для оператора O_I пространственной инверсии. Поэтому оно справедливо для всех рассмотренных ранее операций симметрии.

Естественно, что рассуждения этого раздела не доказывают, что уравнения квантовой механики инвариантны относительно обращения времени. Они показывают, однако, что если эта инвариантность действительно имеет место, то оператор обращения времени $\theta = UK$ должен задаваться, с точностью до постоянного множителя, выражениями (26.14) или (26.15a) соответственно для простой теории или для теории, изложенной в гл. 20.

Преобразование собственных функций антиунитарными операторами

Симметрия по отношению к отражению времени не имеет далеко идущих следствий в теории атомных спектров. Она является гораздо более мощным средством при исследовании систем с более низкой симметрией, таких, например, как многоатомные молекулы или атомы в кристалле. Действительно, преобразование (26.15) было найдено впервые при исследовании вращения плоскости поляризации¹⁾, явления, которое проявляется в системах, не имеющих какой-либо плоскости симметрии. Однако важно

¹⁾ H. A. Kramers, Koninkl. Ned. Akad. Wetenschap. Proc., **33**, 959 (1930). Все значение обращения времени в классической теории было понято лишь недавно; см. H. Zocher, C. Török, Proc. Natl. Acad. Sci. (USA), **39**, 681 (1953).

отметить, что теория представлений групп линейными преобразованиями не дает полной математической основы для рассмотрения группы симметрии, содержащей антиунитарные операторы, и нам придется повторить некоторые из рассуждений гл. 11.

Как было указано ранее (наиболее явно при рассмотрении эффекта Штарка в гл. 23), группой, которую следует рассматривать для получения следствий из симметрии некоторой задачи, является не группа физических преобразований, а группа квантовомеханических операторов, соответствующих этим преобразованиям. Если число электронов нечетно, квантовомеханические операторы, которые соответствуют вращениям, изоморфны группе двумерных унитарных унимодулярных преобразований u и лишь гомоморфны группе вращений. Аналогичным образом, θ^2 соответствует в этом случае не $u = 1$, а $u = -1$. Полная группа состоит из преобразований O_u и θO_u , причем первые являются унитарными, а последние — антиунитарными. Правила умножения имеют вид

$$\begin{aligned} O_v O_u &= O_{vu}, & \theta O_v \cdot O_u &= \theta O_{vu}, \\ O_v \cdot \theta O_u &= \theta O_{vu}, & \theta O_v \cdot \theta O_u &= O_{\pm vu}. \end{aligned} \quad (26.18)$$

Последние два соотношения следуют из (26.17), причем в последнем соотношении верхний знак относится к четному, а нижний — к нечетному числу электронов. Правила умножения (26.18) показывают, что унитарные операторы образуют подгруппу (фактически нормальную подгруппу с индексом 2) и что антиунитарные операторы образуют смежный класс этой подгруппы. То же самое справедливо для всех групп, содержащих как унитарные, так и антиунитарные операторы.

Пересмотрим теперь изложение гл. 11, начиная с п. 5. Соотношение (11.23) будет справедливо также и для антиунитарных операторов θO_u , поскольку оно лишь выражает тот факт, что $\theta O_u \psi_x$ является собственной функцией, если таковой является ψ_x :

$$\theta O_u \psi_x = \sum_{\lambda} D(\theta O_u)_{\lambda x} \psi_{\lambda}. \quad (26.19)$$

Далее, остается в силе утверждение, что $D(\theta O_u)$ будут унитарными, если ψ_x ортонормированы. Это является следствием того, что, в силу (26.8), соотношение

$$(\theta O_u \psi_x, \theta O_u \psi_{\lambda}) = (O_u \psi_{\lambda}, O_u \psi_x) = (\psi_{\lambda}, \psi_x) = \delta_{\lambda x} \quad (26.20)$$

выполняется так же, как и для унитарных операторов. Унитарность матриц D [соотношение (11.32)] была прямым следствием соответствующего соотношения для унитарных операторов.

Произведение матриц $D(\theta O_v)$ и $D(O_u)$ или $D(\theta O_u)$ уже не будет равно $D(\theta O_v O_u) = D(\theta O_{uv})$ или $D(\theta O_v \theta O_u) = D(O_{\pm uv})$. В частности, если применить θO_v к (26.19), то благодаря унитарности этой матрицы имеем

$$\begin{aligned} \theta O_v \theta O_u \psi_x &= \sum_{\lambda} \theta O_v D(\theta O_u)_{\lambda x} \psi_{\lambda} = \sum_{\lambda} D(\theta O_u)_{\lambda x}^* \theta O_v \psi_{\lambda} = \\ &= \sum_{\lambda \mu} D(\theta O_u)_{\lambda x}^* D(\theta O_v)_{\mu \lambda} \psi_{\mu}, \end{aligned}$$

так что

$$D(\theta O_v) D(\theta O_u)^* = D(\theta O_v \theta O_u) = D(O_{\pm vu}). \quad (26.21a)$$

Аналогичным образом

$$D(\theta O_v) D(O_u)^* = D(\theta O_v O_u) = D(\theta O_{vu}), \quad (26.21b)$$

так что матрицы $D(O_u)$, $D(\theta O_u)$ уже не образуют представления группы соответствующих операторов. Правила умножения, которые справедливы для представлений,

$$D(O_v) D(O_u) = D(O_v O_u) = D(O_{vu}), \quad (26.21b)$$

$$D(O_v) D(\theta O_u) = D(O_v \theta O_u) = D(\theta O_{vu}), \quad (26.21r)$$

применимы только в том случае, если первый множитель соответствует унитарному оператору. В противном случае появляется матрица, комплексно-сопряженная со вторым D . Частным следствием этого является то, что

$$D((\theta O_u)^{-1}) = (D(\theta O_u))^*{}^{-1} = D(\theta O_u)^T. \quad (26.22)$$

В частности, матрица $D(\theta O_u)$ симметрична, если θO_u — антиунитарная инволюция: $(\theta O_u)^2 = 1$. Это имеет место также и для самого оператора обращения времени θ , если число электронов четно; это выполняется и для θO_u при нечетном числе электронов, если u соответствует вращению на π , так что $u^2 = -1$.

Если заменить ψ новыми линейными комбинациями

$$\psi'_{\mu} = \sum_{\nu} \alpha_{\nu \mu} \psi_{\nu}, \quad \psi_x = \sum_{\lambda} \beta_{\lambda x} \psi'_{\lambda}$$

с помощью преобразования $\alpha = \beta^{-1}$, то матрицы $D(O_u)$, которые соответствуют унитарному преобразованию O_u , заменяются, согласно (11.30), на

$$\bar{D}(O_u) = \alpha^{-1} D(O_u) \alpha. \quad (26.23a)$$

С другой стороны,

$$\begin{aligned} \theta O_u \psi'_\mu &= \theta O_u \sum_\nu \alpha_{\nu\mu} \psi_\nu = \sum_\nu \alpha_{\nu\mu}^* \theta O_u \psi_\nu = \\ &= \sum_\nu \sum_x \alpha_{\nu\mu}^* D(\theta O_u)_{x\nu} \psi_x = \sum_\nu \sum_x \sum_\lambda \alpha_{\nu\mu}^* D(\theta O_u)_{x\nu} \beta_{\lambda x} \psi'_\lambda, \end{aligned}$$

так что $D(\theta O_u)$ заменяется на

$$\bar{D}(\theta O_u) = \alpha^{-1} D(\theta O_u) \alpha^*. \quad (26.23б)$$

Это можно было бы получить уже из (26.21а) или (26.21б), поскольку \bar{D} удовлетворяет этим уравнениям лишь в том случае, если в преобразовании матриц, соответствующих антиунитарным преобразованиям, α заменить на α^* .

Системы уравнений (26.21) и (26.23) показывают, что матрицы, которые преобразуют собственные функции при операциях группы, не образуют представления этой группы, если группа содержит антиунитарные операторы. Решение уравнений (26.21) не дается непосредственно теорией представлений, а должно быть найдено путем специального вычисления. В частности, невозможно исключить знак комплексного сопряжения в (26.21а) и (26.21б) путем переопределения матриц $D(\theta O_u)$. Разделяя вещественные и мнимые части — как в волновых функциях, так и в преобразованиях — можно было бы придать этим уравнениям более естественный вид. Однако с ними легче обращаться в том виде, в котором они даны здесь.

Система матриц D , удовлетворяющих уравнениям (26.21), не является представлением группы унитарных и антиунитарных операторов O_u и θO_u в обычном смысле. Тем не менее таковы уравнения, возникающие из соображений инвариантности по отношению к операциям, связанным с обращением времени. Они будут называться *копредставлениями*, чтобы напоминать о знаке комплексного сопряжения в (26.21). Разумеется, понятие копредставления применимо только к группе операторов, когда некоторые из них антиунитарны.

Приведение копредставлений

Настоящий раздел представляет собой первый шаг в определении копредставлений, т. е. решений уравнений (26.21). Эта задача будет рассматриваться в этом и в следующем разделах как математическая задача. В частности, не будет предполагаться, что унитарные операторы O_u соответствуют вращениям, а также, что антиунитарные операторы содержат обращение времени. Чтобы упростить обозначения, обозначим унитарные операторы O_u

через u_1, u_2, u_3, \dots . Они образуют инвариантную подгруппу, которая будет называться *унитарной подгруппой*. Неприводимые представления этой подгруппы будут предполагаться известными; типичное неприводимое представление, предполагаемое унитарным, будет обозначено через $D(u)$. Антиунитарные операторы θO_u будут обозначены кратко через a_1, a_2, a_3, \dots . Тогда четыре уравнения (26.21) принимают вид

$$\begin{aligned} D(u_1)D(u_2) &= D(u_1u_2), & D(u)D(a) &= D(ua), \\ D(a)D(u)^* &= D(au), & D(a_1)D(a_2)^* &= D(a_1a_2). \end{aligned} \quad (26.21)$$

Два решения уравнений (26.21) будут называться эквивалентными, если они могут быть преобразованы одно в другое с помощью унитарной матрицы α , так что

$$\begin{aligned} \bar{D}(u) &= \alpha^{-1}D(u)\alpha, \\ \bar{D}(a) &= \alpha^{-1}D(a)\alpha^*, \end{aligned} \quad (26.23)$$

а решение уравнений (26.21) будет называться неприводимым, если оно не может быть сведено к приведенному виду с помощью преобразования (26.23). Матрица $D(u)$ не меняется, если $\alpha = \omega 1$ кратна единичной матрице; однако $D(a)$ умножается на $\omega^{-1}\omega^* = \omega^{*2}$. Следовательно, два решения уравнений (26.21) наверняка эквивалентны, если их $D(u)$ совпадают, а $D(a)$ отличаются общим численным множителем. Фиксируя общий фазовый множитель матриц $D(a)$, мы фиксируем фазовый множитель волновых функций, которые преобразуются с помощью $D(a)$; общий фазовый множитель всех волновых функций, принадлежащих различным строкам представления, остается свободным, пока рассматриваются унитарные операции симметрии. Дальнейшие вычисления могут быть сделаны более прозрачными, если предположить, что существуют волновые функции $\psi_1, \psi_2, \psi_3, \dots, \psi_f$, которые преобразуются под действием соответствующих операторов u и a согласно соотношениям

$$\begin{aligned} u\psi_x &= \sum_1^f D(u)_{\lambda x} \psi_\lambda, \\ a\psi_x &= \sum_1^f D(a)_{\lambda x} \psi_\lambda. \end{aligned} \quad (26.19a)$$

В физической задаче наиболее интересны именно эти волновые функции. Если интересоваться чисто математической задачей решения уравнений (26.21), то волновые функции ψ_x можно заменить векторами в „пространстве представления“. Это пространство представления имеет f измерений, где f — число строк и столбцов матриц D . Можно считать, что матрицы D действуют на векторы

в этом пространстве представления, причем $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ и $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ преобразуют x -й единичный вектор в векторы с λ компонентами $\mathbf{D}(\mathbf{u})_{x\lambda}$ и $\mathbf{D}(\mathbf{a})_{x\lambda}$ соответственно. Таким образом, можно предположить, что единичные векторы в пространстве представления играют роль волновых функций ψ . Однако следует ожидать, что использование понятия волновых функций сделает последующий анализ менее абстрактным, чем анализ, использующий пространство представления.

Матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{u})$, которые соответствуют унитарным преобразованиям, образуют представление унитарной подгруппы. Предположим, что $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ как представление унитарной подгруппы полностью приведено и что размерность l его первой неприводимой части $\Delta(\mathbf{u})$ не превышает размерности любой другой неприводимой части представления $\mathbf{D}(\mathbf{u})$. Это может быть сделано путем выбора соответствующих линейных комбинаций волновых функций (использования надлежащей системы координат в пространстве представления). Следовательно, мы имеем

$$u\psi_x = \sum_1^l \Delta(\mathbf{u})_{\lambda x} \psi_\lambda \quad \text{при } x \leq l. \quad (26.24)$$

Заметим, что Δ определено только для унитарных операторов, а $\Delta(\mathbf{a})$, например, не имеет смысла. Однако, поскольку $\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2$ и $\mathbf{a}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}$ входят в унитарную подгруппу, выражения вида $\Delta(\mathbf{a}_1\mathbf{a}_2)$ или $\Delta(\mathbf{a}^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a})$ вполне определены.

Рассмотрим, далее, l волновых функций

$$\psi'_x = \mathbf{a}_0\psi_x = \sum_1^l D(\mathbf{a}_0)_{\lambda x} \psi_\lambda \quad (x \leq l). \quad (26.25)$$

Суммирование в правой части должно производиться по всем волновым функциям, поскольку мы не делали никаких предположений относительно $\mathbf{D}(\mathbf{a})$. Оператор \mathbf{a}_0 в (26.25) является произвольным фиксированным антиунитарным оператором. Покажем, что ψ'_x принадлежат некоторому неприводимому представлению унитарной подгруппы. Рассмотрим

$$\begin{aligned} u\psi'_x &= \mathbf{u} \sum_\lambda D(\mathbf{a}_0)_{\lambda x} \psi_\lambda = \sum_\lambda \sum_\mu D(\mathbf{a}_0)_{\lambda x} D(\mathbf{u})_{\mu\lambda} \psi_\mu = \\ &= \sum_\mu [D(\mathbf{u})D(\mathbf{a}_0)]_{\mu x} \psi_\mu. \end{aligned} \quad (26.26)$$

Однако, согласно (26.21),

$$D(\mathbf{u})D(\mathbf{a}_0) = D(\mathbf{u}\mathbf{a}_0) = D(\mathbf{a}_0)D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*, \quad (26.26a)$$

так что

$$u\psi'_x = \sum_{\mu\lambda} D(\mathbf{a}_0)_{\mu\lambda} D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*_{\lambda x} \psi'_\mu = \sum_\lambda D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*_{\lambda x} \psi'_\lambda. \quad (26.26b)$$

Заметим, что мы использовали только соотношения (26.21), но не законы умножения операторов \mathbf{u} и \mathbf{a} .

Поскольку $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$ входит в унитарную подгруппу при $x \leq l$, мы имеем

$$D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)_{\lambda x} = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)_{\lambda x} \quad \text{при } \lambda \leq l$$

и

$$D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)_{\lambda x} = 0 \quad \text{при } \lambda > l.$$

Таким образом,

$$\mathbf{u}\psi'_x = \sum_1^l \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)_{\lambda x}^* \psi'_\lambda \quad (x \leq l), \quad (26.27)$$

и функции ψ'_x , являющиеся линейными комбинациями функций ψ , принадлежат l -мерному представлению

$$\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*. \quad (26.27a)$$

То, что эти матрицы образуют представления унитарной подгруппы, следует из (26.27). Это также следует из того факта, что Δ является таким представлением и что $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$ унитарно. Кроме того, представление $\bar{\Delta}$ должно быть неприводимым, так как оно содержится в $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ и так как это последнее не содержит представлений более низкой размерности, чем l .

Ниже мы обсудим связь между представлениями $\bar{\Delta}$ и Δ . Но сначала покажем, что волновые функции

$$\mathbf{a}\psi_x = \sum D(\mathbf{a})_{\mu x} \psi_\mu, \quad (26.28a)$$

$$\mathbf{a}\psi'_x = \sum \mathbf{a}D(\mathbf{a}_0)_{\lambda x} \psi'_\lambda = \sum \sum D(\mathbf{a}_0)_{\lambda x}^* D(\mathbf{a})_{\mu \lambda} \psi'_\mu \quad (26.28b)$$

при $x \leq l$ могут быть выражены линейно через ψ_x , ψ'_x , где снова $x \leq l$. Поскольку $\mathbf{D}(\mathbf{a}) = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)\mathbf{D}(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a})^*$, (26.28a) можно записать просто в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{a}\psi_x &= \sum D(\mathbf{a})_{\mu x} \psi_\mu = \sum \sum D(\mathbf{a}_0)_{\mu \nu} D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a})_{\nu x}^* \psi_\mu = \\ &= \sum_1^l \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a})_{\nu x}^* \psi'_\nu \quad (x \leq l). \end{aligned} \quad (26.29a)$$

Последний шаг следует из того, что $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a}$ входит в унитарную подгруппу и $x \leq l$, так что $D(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a})_{\nu x} = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a})_{\nu x}$ при $\nu \leq l$, а в противном случае обращается в нуль. Аналогичным образом из $\mathbf{D}(\mathbf{a})\mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{a}\mathbf{a}_0)$ следует, что при $x \leq l$ (26.28b) принимает вид

$$\mathbf{a}\psi'_x = \sum D(\mathbf{a}\mathbf{a}_0)_{\mu x} \psi_\mu = \sum_1^l \Delta(\mathbf{a}\mathbf{a}_0)_{\mu x} \psi_\mu. \quad (26.29b)$$

Теперь докажем следующую лемму: *Функции $\psi'_x = a_0 \psi_x$ (при $x \leq l$) либо могут быть выражены линейно через $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l$, либо все линейно независимы от них и друг от друга.* В процессе доказательства этой леммы мы часто будем иметь дело с функциями ψ_x и $\psi'_x = a_0 \psi_x$ при $x \leq l$. Поэтому удобно условиться, что в этом разделе x лежит между 1 и l . Заметим, прежде всего, что функции ψ'_x ортогональны друг другу, так как они принадлежат различным строкам неприводимого представления $\bar{\Delta}$. Следовательно, всякое линейное соотношение между ψ'_x и ψ_x можно привести к виду

$$\sum \alpha'_x \psi'_x = \varphi_1, \quad \varphi_1 = \sum \alpha_x \psi_x, \quad (26.30)$$

где $\varphi_1 \neq 0$. Тогда из (26.27) и свойства линейности u следует, что все $u\varphi_1$ также являются линейными комбинациями функций ψ'_x , причем это относится ко всем линейным комбинациям функций $u\varphi_1$. Представим все ψ'_x в виде линейных комбинаций функций $u\varphi_1$. Тогда они будут также линейными комбинациями функций ψ_x , откуда вытекает, что все ψ'_x являются линейными комбинациями функций ψ_x , если между ними имеет место одно соотношение вида (26.30).

Чтобы получить все ψ'_x как линейные комбинации функций $u\varphi_1$, преобразуем $\bar{\Delta}$ таким образом, чтобы функция φ_1 принадлежала первой строке. Это может быть достигнуто унитарным преобразованием, первым столбцом которого является $\alpha'_1, \alpha'_2, \dots, \alpha'_l$. Поэтому партнеры функции φ_1 могут быть получены как линейные комбинации функций $u\varphi_1$ с помощью (12.3а). Отсюда функции ψ'_x могут быть найдены путем преобразования, обратного упомянутому выше унитарному преобразованию. Таким образом, лемма доказана.

Если ψ'_x являются линейными комбинациями функций ψ_x , то из сделанного выше вычисления, начиная с (26.24) и (26.29а), следует, что $u\psi_x$ и $a\psi_x$ также являются линейными комбинациями этих функций. В этом случае копредставление приводится к l -мерной и $(f - l)$ -мерной частям. Все $D_{\lambda\mu}$ обращаются в нуль, если $\mu \leq l, \lambda > l$, причем то же справедливо и для $\mu > l, \lambda \leq l$. Последнее утверждение верно, так как все $D(u)$ и $D(a)$ унитарны. В результате $D(u)^\dagger = D(u^{-1})$ и, согласно (26.22), $D(a)^\dagger = D(a^{-1})$. Поскольку $D(u^{-1})_{\lambda\mu}$ и $D(a^{-1})_{\lambda\mu}$ имеют лишь нули в прямоугольнике $\lambda > l, \mu \leq l$, матрицы $D(u)_{\lambda\mu}$ и $D(a)_{\lambda\mu}$ будут иметь только нули при $\mu > l, \lambda \leq l$.

Если, с другой стороны, функции ψ_x и ψ'_x линейно независимы, то можно выбрать ортогональный набор, первыми l членами которого являются ψ_x , дальнейшими l членами — линейные комбинации

ψ_x и ψ'_x , а остальные — ортогональны как ψ_x , так и ψ'_x . Это может быть достигнуто применением метода Грама — Шмидта к функциям $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_l; \psi'_1, \psi'_2, \dots, \psi'_l, \psi_{l+1}, \psi_{l+2}, \dots, \psi_f$. Функции ψ_x и ψ'_x будут тогда линейными комбинациями первых $2l$ членов набора. Если u или a применяется к одному из первых $2l$ членов набора, то получающаяся при этом функция будет снова линейной комбинацией первых $2l$ членов. Это опять следует из вычисления, предшествующего данному обсуждению и приводящего к (26.24), (26.27), (26.29a) и (26.29б). Следовательно, если D взято в том виде, какой был только что описан для ортогонального набора, то все $D(u)_{\lambda\mu}$ и $D(a)_{\lambda\mu}$ обращаются в нуль при $\lambda \leq 2l, \mu > 2l$. Отсюда, как и раньше, вытекает, что D распадается на две части, одна из которых $2l$ -мерна, а другая — $(f - 2l)$ -мерна. Первая часть содержит только два неприводимых представления унитарной подгруппы Δ и $\bar{\Delta}$.

Приведение D может быть продолжено далее, если к $(f - l)$ -мерной или $(f - 2l)$ -мерной второй части применить тот же метод, какой применялся выше ко всему представлению D . В результате этого разложения каждая приведенная часть копредставления будет содержать либо одно неприводимое представление унитарной подгруппы, либо два таких представления, $\Delta(u)$ и $\bar{\Delta}(u) = \Delta(a_0^{-1}ua_0)^*$.

Нахождение неприводимых копредставлений

Неприводимые представления Δ и $\bar{\Delta}$ унитарной подгруппы могут быть либо неэквивалентными, либо эквивалентными. Первый из этих двух возможных случаев проще; поэтому сначала мы рассмотрим этот случай.

1. Если $\Delta(u)$ и $\Delta(a_0^{-1}ua_0)^*$ неэквивалентны, волновые функции ψ_x и $\psi'_x = a_0\psi_x$ ортогональны, так как они принадлежат различным представлениям унитарной подгруппы. Следовательно, первыми $2l$ членами ортогонального набора, определенного в предыдущем разделе, будут сами функции ψ_x и ψ'_x , а матрицы $D(u)$ и $D(a)$ даются соотношениями (26.24), (26.27), (26.29a) и (26.29б):

$$D(u) = \begin{pmatrix} \Delta(u) & 0 \\ 0 & \Delta(a_0^{-1}ua_0)^* \end{pmatrix}, \quad (26.31)$$

$$D(a) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(aa_0) \\ \Delta(a_0^{-1}a)^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (26.31a)$$

Разумеется, эти матрицы могут быть подвергнуты преобразованию подобия. В частности, если нужно заменить a_0 другим элементом

группы \mathbf{a}_1 , следует преобразовать с \mathbf{D} с помощью

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{a}_1)^* \end{pmatrix}.$$

Система матриц (26.31) и (26.31a) является, очевидно, неприводимой, если $\Delta(\mathbf{u})$ и $\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^*$ суть неэквивалентные неприводимые представления. Читатель может легко убедиться в том, что справедливость этого утверждения не зависит от выбора антиунитарного оператора \mathbf{a}_0 . Заметим, что $\mathbf{D}(\mathbf{a})$ должно преобразовываться согласно (26.23б).

2. В другом возможном случае представления $\Delta(\mathbf{u})$ и

$$\bar{\Delta}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0)^* = \beta^{-1} \Delta(\mathbf{u}) \beta \quad (26.32)$$

эквивалентны. При этом следует различать два случая: представление \mathbf{D} может иметь столько же строк и столбцов, сколько и Δ , или оно может иметь вдвое больше строк и столбцов. В первом случае матрицы $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ уже определены как

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \Delta(\mathbf{u}). \quad (26.32a)$$

В последнем случае можно принять, что $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ имеет вид

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) = \begin{pmatrix} \Delta(\mathbf{u}) & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Delta(\mathbf{u}) \end{pmatrix}. \quad (26.32b)$$

Матрицы, соответствующие унитарным операторам, определяются в обоих случаях. Чтобы определить $\mathbf{D}(\mathbf{a})$, мы должны более подробно рассмотреть представление Δ .

Применяя (26.32) к унитарному преобразованию $\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0$, получаем

$$\Delta(\mathbf{a}_0^{-2}\mathbf{u}\mathbf{a}_0^2)^* = \beta^{-1} \Delta(\mathbf{a}_0^{-1}\mathbf{u}\mathbf{a}_0) \beta. \quad (26.33)$$

Комплексное сопряжение же этого равенства вместе с (26.32) дает

$$\Delta(\mathbf{a}_0^{-2}) \Delta(\mathbf{u}) \Delta(\mathbf{a}_0^2) = \Delta(\mathbf{a}_0^{-2}\mathbf{u}\mathbf{a}_0^2) = \beta^{*-1} \beta^{-1} \Delta(\mathbf{u}) \beta \beta^*, \quad (26.33a)$$

поскольку \mathbf{a}_0^{-2} и \mathbf{a}_0^2 входят в унитарную подгруппу. Отсюда следует, что матрица $\beta \beta^* \Delta(\mathbf{a}_0^{-2})$ коммутирует со всеми матрицами $\Delta(\mathbf{u})$ неприводимого представления и является, следовательно, постоянной матрицей $\omega \mathbf{1}$; таким образом,

$$\beta \beta^* = \omega \Delta(\mathbf{a}_0^2). \quad (26.34)$$

В силу унитарности всех матриц в (26.34), имеем $|\omega| = 1$. Покажем, далее, что $\omega = \pm 1$. С этой целью подставим $\mathbf{u} = \mathbf{a}_0^2$ в (26.33),

что дает

$$\Delta(\mathbf{a}_0^2)^* = \beta^{-1} \Delta(\mathbf{a}_0^2) \beta, \quad (26.34a)$$

и выразим $\Delta \mathbf{a}_0^2$ с помощью (26.34):

$$\omega \beta^* \beta = \beta^{-1} (\omega^{-1} \beta \beta^*) \beta = \omega^{-1} \beta^* \beta. \quad (26.34b)$$

Таким образом, $\omega^2 = 1$, $\omega = \pm 1$. Поэтому либо

$$\beta \beta^* = \Delta(\mathbf{a}_0^2), \quad \beta = \Delta(\mathbf{a}_0^2) \beta^T, \quad (26.35a)$$

либо

$$\beta \beta^* = -\Delta(\mathbf{a}_0^2), \quad \beta = -\Delta(\mathbf{a}_0^2) \beta^T. \quad (26.35b)$$

Предшествующее рассмотрение имеет большое сходство с рассмотрением во втором разделе гл. 24. Оно указывает на различие между представлениями Δ , эквивалентными производному представлению $\bar{\Delta}$ из (26.27a), весьма похожее на различие между потенциально-вещественными и псевдовещественными представлениями для тех представлений, которые эквивалентны комплексно-сопряженным к ним. Легко убедиться в том, что при заданном Δ те же самые возможности (26.35a) и (26.35b) относятся независимо к выбору антиунитарного преобразования \mathbf{a}_0 .

Вернемся теперь к задаче определения неприводимых копредставлений. Эту задачу можно упростить, если заметить, что всякое \mathbf{a} может быть записано в виде произведения $\mathbf{u} \mathbf{a}_0$ с фиксированным \mathbf{a}_0 , но с переменным \mathbf{u} . Согласно второму уравнению (26.21),

$$\mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0). \quad (26.36)$$

Подставляя $\mathbf{u} \mathbf{a}_0$ вместо \mathbf{a} в два другие уравнения (26.21) и заменяя все \mathbf{a} произведением унитарного оператора на \mathbf{a}_0 , приводим эти уравнения к виду

$$\mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_1)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}_0 \mathbf{u}_1) = \mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}_0 \mathbf{u}_1 \mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a}_0),$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}_1 \mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_2 \mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u}_1 \mathbf{a}_0 \mathbf{u}_2 \mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{u}_1 \mathbf{a}_0 \mathbf{u}_2 \mathbf{a}_0^{-1} \mathbf{a}_0^2).$$

Если сюда подставить (26.36) и предположить, что $\mathbf{D}(\mathbf{u})$ образует представление унитарной подгруппы, то эти уравнения запишутся в виде

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_1)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}_0 \mathbf{u}_1 \mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) = \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0 \mathbf{u}_1 \mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0), \quad (26.37)$$

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}_1) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0) \mathbf{D}(\mathbf{u}_2)^* \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^* = \mathbf{D}(\mathbf{u}_1) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0 \mathbf{u}_2 \mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0^2). \quad (26.37a)$$

Первое из этих уравнений удовлетворяется, если соотношение

$$\mathbf{D}(\mathbf{u}_1)^* = \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)^{-1} \mathbf{D}(\mathbf{a}_0 \mathbf{u}_1 \mathbf{a}_0^{-1}) \mathbf{D}(\mathbf{a}_0)$$

имеет место для всякого u_1 . В этом выражении u_1 можно заменить на $a_0^{-1}ua_0$, после чего получим

$$D(a_0^{-1}ua_0)^* = D(a_0)^{-1}D(u)D(a_0). \quad (26.38)$$

Если это уравнение удовлетворяется для всех u и если $D(a)$ определено согласно (26.36), то третье уравнение (26.21) будет удовлетворяться. Предполагая теперь, что (26.38) выполняется, и вводя $a_0^{-1}ua_0$ вместо u_2 в (26.37а), это последнее уравнение можно заменить следующим:

$$D(a_0)D(a_0)^* = D(a_0^2). \quad (26.38a)$$

Это уравнение представляет собой частный случай последнего уравнения (26.21). Однако предыдущий анализ показывает, что если $D(a_0)$ удовлетворяет уравнениям (26.38) и (26.38а) и если другие $D(a)$ определены согласно (26.36), они будут удовлетворять всем уравнениям (26.21). Это позволяет значительно проще определить матрицы $D(a)$, которые вместе с $D(u)$, указанными в (26.32а) или (26.32б), образуют решение системы (26.21). Задача сводится к решению уравнений (26.38) или (26.38а), в которые входит только $D(a_0)$.

Рассмотрим прежде всего случай (26.32а), в котором D содержит Δ лишь один раз. Сравнение (26.32) с (26.38) показывает, что с точностью до несущественного множителя [см. замечание после (26.23) на стр. 339]

$$D(a_0) = \beta. \quad (26.39a)$$

Следовательно, уравнение (26.38а) будет удовлетворяться в том, и только том случае, если к Δ относится возможность (26.35а), так что соотношение (26.32а) может быть справедливо только в том случае, если для Δ имеют место соотношения (26.35а). Наоборот, те Δ , к которым применимо (26.35а), могут быть дополнены до копредставления полной группы с помощью (26.36):

$$D(a) = \Delta(aa_0^{-1})\beta. \quad (26.40a)$$

Если D содержит Δ дважды, $D(u)$ дается выражением (26.32б). Оно может быть также записано как прямое произведение $1 \times \Delta(u)$, т. е. как прямое произведение двумерной единичной матрицы и $\Delta(u)$. В этом случае частным решением уравнения (26.38) будет

$$D(a_0) = \begin{pmatrix} \beta & 0 \\ 0 & \beta \end{pmatrix} = 1 \times \beta. \quad (26.E.3)$$

Тогда наиболее общим решением уравнения (26.38) будет решение (26.Е.3), умноженное слева на матрицу

$$\begin{pmatrix} c_{11}1 & c_{12}1 \\ c_{21}1 & c_{22}1 \end{pmatrix} = c \times 1, \quad (26.Е.4)$$

которая коммутирует со всеми $D(u)$ вида (26.326). Это следует из леммы Шура гл. 9, теорема 2. Матрица c в правой части (26.Е.4) представляет собой произвольную матрицу с двумя строками и двумя столбцами, а (26.Е.4) — прямое произведение такой матрицы на единичную матрицу той же размерности, что и Δ . Поэтому общим решением уравнения (26.38) в этом случае будет

$$D(a_0) = \begin{pmatrix} c_{11}\beta & c_{12}\beta \\ c_{21}\beta & c_{22}\beta \end{pmatrix} = c \times \beta. \quad (26.396)$$

Поскольку $D(a_0)$ должно быть унитарным, матрица c также должна быть унитарной. Второе условие (26.38а) для $D(a_0)$ дает

$$(c \times \beta)(c^* \times \beta^*) = cc^* \times \beta\beta^* = D(a_0^2) = 1 \times \Delta(a_0^2).$$

В этом равенстве 1 представляет собой двумерную единичную матрицу. Из $\beta\beta^* = \pm \Delta(a_0^2)$ следует, что $cc^* = \pm 1$. Предположим, что в этом случае применим *нижний* знак; ниже будет показано, что представление становится приводимым, если взять верхний знак [и, следовательно, (26.35а)]. Тогда из условия унитарности $cc^+ = 1$ следует, что $c^* = -c^+ = -c^{*T}$, т. е. что c антисимметрична. Поскольку общий множитель во всех $D(a)$ остается произвольным, можно положить

$$c = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix},$$

а это дает в случае, когда для представления Δ осуществляется возможность (26.35б),

$$D(a) = \begin{pmatrix} 0 & \Delta(aa_0^{-1})\beta \\ -\Delta(aa_0^{-1})\beta & 0 \end{pmatrix}. \quad (26.406)$$

Остается еще рассмотреть лишь случай $cc^* = 1$. В этом случае c является симметричной унитарной матрицей. Согласно (24.46), она может быть записана в виде $r^{-1}\omega r$, где r — вещественная ортогональная матрица, а ω — диагональная матрица. Поэтому,

если D преобразуется с помощью

$$\alpha = r^{-1} \times 1. \quad (24.41)$$

(r двумерна, а 1 l -мерна), $D(u) = 1 \times \Delta$ не меняется, а $D(a_0) = c \times \beta$ переходит в $(r \times 1)(r^{-1}\omega r \times \beta)(r^{-1} \times 1) = \omega \times \beta$. Таким образом, это представление распадается на два l -мерных представления типа (26.40а).

Резюмируя, мы можем сказать, что *имеются три типа неприводимых копредставлений*, т. е. неприводимых решений системы (26.21). Тип неприводимых копредставлений, который рассматривался раньше других, но который мы будем называть *третьим типом*, *содержит два неэквивалентных неприводимых представления унитарной подгруппы, Δ и*

$$\bar{\Delta}(u) = \Delta(a^{-1}ua)^*, \quad (26.27a)$$

где a — антиунитарный оператор. Заметим, что $\bar{\Delta}$ и Δ эквивалентны; соотношение между представлениями Δ и $\bar{\Delta}$ взаимно. *Копредставления первого типа содержат лишь одно неприводимое представление Δ унитарной подгруппы. В этом случае — который является наиболее частым — Δ и $\bar{\Delta}$ эквивалентны; матрица β , преобразующая Δ в $\bar{\Delta}$, удовлетворяет соотношению $\beta\beta^* = \Delta(a_0^2)$. Последний тип копредставлений, который будет называться *вторым типом*, *содержит одно и то же неприводимое представление Δ унитарной подгруппы дважды. Это Δ также эквивалентно $\bar{\Delta}$, но в этом случае для матрицы β , которая преобразует Δ в $\bar{\Delta}$, выполняется соотношение $\beta\beta^* = -\Delta(a_0^2)$. В третьем типе копредставлений Δ и $\bar{\Delta}$ неэквивалентны.* Эти три типа копредставлений даются парами соотношений (26.32а) и (26.40а), (26.32б) и (26.40б) и, наконец, (26.31) и (26.31а). Из этого перечня следует, что каждое неприводимое представление унитарной подгруппы содержится лишь в одном неприводимом копредставлении. Если Δ и $\bar{\Delta}$ эквивалентны, то Δ содержится в копредставлении лишь один раз, если оно удовлетворяет (26.35а), и два раза, если для него выполняется (26.35б). Отсюда также следует, что неприводимые части копредставления полностью определяются неприводимыми частями матриц, соответствующих унитарной подгруппе, и, следовательно, характером унитарной подгруппы. Копредставление, как и представление, не может быть разбито на неприводимые части двумя существенно различными способами. Отсюда, далее, следует, что антиунитарные операторы никогда не приводят к дополнительной классификации типов собственных значений (не приводят к новым квантовым числам) сверх той классификации, которая дается унитарной под-*

группой¹⁾. Они могут быть ответственны за совпадение собственных значений. Так, если Δ и $\bar{\Delta}$ неэквивалентны, собственное значение с представлением Δ всегда совпадает с собственным значением с представлением $\bar{\Delta}$. Антиунитарные операторы симметрии могут быть также ответственны за обращение матричных элементов в нуль.

Читателю рекомендуется проверить, что независимо от того, какой антиунитарный оператор играет роль a_0 в предшествующем вычислении, получается тот же самый тип расширения унитарного представления на копредставление. Для этого нужно лишь показать, что если в (26.32) заменить a_0 на другой антиунитарный оператор $u_0 a_0'$, соответствующее $\bar{\Delta}$ эквивалентно Δ , если последнему эквивалентно $\bar{\Delta}$, даваемое выражением (26.32). Оказывается, что если a_0 заменить на $u_0 a_0'$, то β из соотношения (26.32) заменяется на $\gamma = \Delta(u_0)\beta$. Далее, в зависимости от того, какому из соотношений (26.35а) или (26.35б) удовлетворяет β , γ будет удовлетворять тому же самому соотношению с заменой a_0 на $u_0 a_0'$. Все это следует из вышеизложенной теории, так как тип копредставления, содержащего определенное Δ , не может зависеть от произвола в выборе оператора a_0 .

Следствия инвариантности относительно обращения времени

Рассмотрим сначала случай, когда имеется *полная вращательная симметрия*. Представляется естественным выбрать в качестве a_0 сам оператор обращения времени θ . Все результаты, разумеется, не зависят от этого выбора. Из (26.17) и (26.32) следует, что в этом случае $\bar{\Delta} = \Delta^*$ или, если воспользоваться в этом случае стандартным обозначением для представлений,

$$\bar{\mathfrak{D}}^{(J)} = \mathfrak{D}^{(J)*}. \quad (26.42)$$

Матрицей β , преобразующей $\mathfrak{D}^{(J)}$ к этому виду, является матрица $C^{-1} = C^\dagger$ из (24.3). Следовательно, $\beta\beta^* = C^{-1}C^{\dagger*} = C^{-1}C^T$, и так как $C^T = C$ при целых J , то $\beta\beta^* = 1$. Как мы видели, в этом случае $\theta^2 = 1$, что соответствует либо простой теории Шредингера, не учитывающей спина, либо четному числу электронов. Поэтому справедливо соотношение (26.35а), и все копредставления относятся

¹⁾ Это не противоречит „типам“ в теории элементарных частиц. Они различаются группами операторов симметрии, выражающих одну и ту же физическую симметрию. Так, для частиц типов 1 и 2 $\theta^2 = (-1)^{2s}$, а для частиц типов 3 и 4 $\theta^2 = -(-1)^{2s}$, где s — спин частицы. Группа операторов имеет различные законы умножения для различных типов; каждый же набор законов умножения имеет лишь одно копредставление.

к первому типу. То же самое справедливо и для нечетного числа электронов. В этом случае J нечетно и $\beta\beta^* = C^{-1}C^T = -CC^T = -1$, так как при этом $C = -C^T$. Поскольку $\theta^2 = -1$, если число электронов нечетно, то все копредставления снова принадлежат к первому типу. В случае полной вращательной симметрии обращение времени не приводит к какому-либо дополнительному вырождению.

Однако соображения, связанные с обращением времени, приводят к существенным результатам относительно вещественности собственных функций. Так как в этом случае, согласно (26.39а) или (26.40а), $D(a_0) = D(\theta) = \beta = C$, в простой теории Шредингера можно написать

$$\theta\psi_\mu^l = \psi_\mu^{l*} = \sum_{\mu'} C_{\mu',\mu} \psi_{\mu'}^l = (-1)^{l-\mu} \psi_{-\mu}^l. \quad (26.43)$$

Здесь матрица C была подставлена в форме (24.6). Следует учесть, что из (26.43) вытекает определенный выбор фазового множителя; такой выбор был сделан, когда мы в (26.39а) положили $D(a)$ равным β , а не $\omega\beta^1$). В данном случае ψ_μ^l и $\psi_{-\mu}^l$ являются комплексно-сопряженными друг другу, если $l-\mu$ четно; при нечетном $l-\mu$ комплексно-сопряженными будут $-\psi_\mu^l$ и $\psi_{-\mu}^l$. В частности, ψ_0^l вещественны при четных l и чисто мнимы при нечетных l . Тот же результат может быть получен для G_μ^l в волновых функциях (19.18) атома гелия. Тогда из (19.19) и (19.19а) следует, что все G вещественны для четных состояний и чисто мнимы для нечетных. Разумеется, можно изменить все свойства вещественности, умножив все волновые функции, принадлежащие различным строкам некоторого представления, на общий множитель.

В теории, учитывающей спин, соотношение (26.43) заменяется следующим:

$$\begin{aligned} \theta\Psi_M^J(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots) &= \\ &= i^{-s_1-s_2-\dots-s_n} \Psi_M^J(\dots, x_k, y_k, z_k, -s_k, \dots)^* = \\ &= \sum_{M'} C_{M',M} \Psi_{M'}^J(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots) = \\ &= (-1)^{J-M} \Psi_{-M}^J(\dots, x_k, y_k, z_k, s_k, \dots). \end{aligned} \quad (26.43a)$$

В этом случае Ψ_M^J и Ψ_{-M}^J связаны с противоположными направлениями спина. Так, в частности, если $M=0$, волновая функ-

¹⁾ Этот выбор фазы отличается от выбора, сделанного в явном выражении волновых функций в гл. 15, множителем i^l . Иногда сферические гармоники удобно определять так, чтобы они включали этот множитель. См., в частности, цитированную на стр. 352 работу Биденхарна, Блатта и Роуза.

ция вещественна, если полный момент J и Z -компонента спинного момента оба четны или оба нечетны; волновая функция Ψ_0^J — чисто мнимая, если J четно, а Z -компонента спинного момента нечетна, или наоборот.

Предшествующие рассуждения соответствуют рассуждениям гл. 19 в той мере, в какой они дают информацию относительно волновых функций. Отсюда можно сделать ряд заключений относительно величины матричных элементов. С другой стороны, матричные элементы могут рассматриваться непосредственно. Это было сделано в гл. 21, где введено понятие о неприводимых тензорных операторах. Рассуждения, сходные с изложением в гл. 21, можно провести также с помощью антиунитарных операторов. Рассмотрим, в частности, симметричный (т. е. скалярный) оператор ρ , содержащий нечетную степень времени, т. е. такой, для которого справедливо (26.12). Таким оператором, например, является скалярное произведение координатного вектора и спинного (или орбитального) момента количества движения

$$xS_x + yS_y + zS_z \quad \text{или} \quad xL_x + yL_y + zL_z$$

для любой частицы, или скалярное произведение координаты и скорости и т. д. Среднее значение такого оператора равно нулю для любого стационарного состояния, кроме случая, когда отсутствует случайное вырождение. Действительно, в матричном элементе

$$\left(\sum a_\mu \Psi_\mu^J, \rho \sum a_\nu \Psi_\nu^J \right) \quad (26.E.5)$$

смешанные члены с $\mu \neq \nu$ обращаются в нуль, так как Ψ_μ^J и $\rho \Psi_\nu^J$ принадлежат различным строкам некоторого представления. Кроме того, обращается в нуль и член с $\mu = \nu$. В этом можно убедиться из (26.8) и (26.43а) следующим образом:

$$\begin{aligned} (\Psi_\mu^J, \rho \Psi_\mu^J) &= (\theta \rho \Psi_\mu^J, \theta \Psi_\mu^J) = -(\rho \theta \Psi_\mu^J, \theta \Psi_\mu^J) = \\ &= -(-1)^{2J-2\mu} (\rho \Psi_{-\mu}^J, \Psi_{-\mu}^J) = -(\Psi_{-\mu}^J, \rho \Psi_{-\mu}^J). \end{aligned} \quad (26.44)$$

Последнее равенство следует из того, что $2J - 2\mu$ всегда есть четное число и что ρ как оператор физической величины является эрмитовым. Согласно (26.44), $(\Psi_\mu, \rho \Psi_\mu)$ имеют противоположные знаки для μ и $-\mu$. Поскольку Ψ_μ и $\Psi_{-\mu}$ являются партнерами, а ρ — симметричный оператор, эти два выражения должны быть равны. Поэтому они обращаются в нуль, так же как и выражение (26.E.5). Имеется много подобных примеров, некоторые из которых приводят к определенным заключениям относительно вещественности или чистой мнимости матричных элементов. Так, например, если ρ удовлетворяет перечисленным выше условиям, но две волновые функции в матричном элементе

$$(\Psi_\mu^J, \rho \Psi_\mu^J) \quad (26.E.6)$$

не совпадают, то это скалярное произведение является чисто мнимым. При этом предполагается, что фазы функций Ψ_μ^j и Φ_μ^j определены так, что копредставление имеет одинаковый вид для обеих из них и, в частности, что для обеих выполняется соотношение (26.43а). Если p есть Z -компонента векторного оператора, имеющего подобные свойства относительно обращения времени, выражение (26.Е.6) вещественно. Эти результаты могут быть получены на основе аргументов, вытекающих из (26.44), и могут быть обобщены соответствующим образом на неприводимые тензорные операторы произвольного ранга.

Рассмотрим теперь противоположный случай *полного отсутствия пространственной симметрии*. В этом случае унитарная подгруппа сводится к единичному элементу и $\Delta = (1)$. Поэтому Δ и $\bar{\Delta}$ совпадают, а β есть произвольное число с модулем 1. Таким образом, $\beta\beta^* = (1)$. С другой стороны, $\theta^2 = 1$, если число электронов четно, но $\theta^2 = -1$, если оно нечетно. В результате копредставление (имеется только одно) относится к первому типу в первом случае, но ко второму типу, если число электронов нечетно и учитывается спин. В этом последнем случае все собственные значения двукратно вырождены: если выбрать $\beta = (1)$, то две волновые функции ψ_1, ψ_2 преобразуются при обращении времени согласно (26.40б),

$$\theta\psi_1 = -\psi_2, \quad \theta\psi_2 = \psi_1. \quad (26.45)$$

Это — теорема Крамерса о вырождении в ее первоначальном виде. Факт наличия вырождения следует уже из того, что если θ есть такой антиунитарный оператор, что $\theta^2 = -1$, то ψ и $\theta\psi$ всегда ортогональны. Это следует из (26.8):

$$(\psi, \theta\psi) = (\theta\theta\psi, \theta\psi) = (-\psi, \theta\psi). \quad (26.45а)$$

В случае четного числа электронов или, с другой стороны, для простой теории Шредингера вырождения нет, и соотношение

$$\theta\psi = \psi \quad (26.46)$$

справедливо для любого стационарного состояния, если фазовый множитель выбран надлежащим образом. Случай отсутствия пространственной симметрии, но при наличии инвариантности относительно обращения времени, важен для атомов в асимметричном электрическом поле, которое преобладает, в частности, в кристаллах низкой симметрии.

В качестве последнего примера рассмотрим случай однородного магнитного поля в направлении оси Z . Соответствующая унитарная

подгруппа была определена в гл. 18; она состоит из всех вращений $O_{\{\alpha, 0, 0\}}$ вокруг оси Z и произведений этих вращений на инверсию пространства O_I . Интересным моментом является здесь то, что обращение времени, как таковое, при этом не является элементом симметрии; таким элементом является лишь произведение обращения времени на операцию, которая обращает направление магнитного поля. Это достигается вращением вокруг любой оси в плоскости XY на угол π , а также отражением в любой плоскости, проходящей через ось Z . Произведение $\theta O_{\{0, \pi, 0\}}$ обращения времени и вращения на угол π вокруг Y может быть выбрано в качестве a_0 . Поэтому, поскольку θ и O_R коммутируют,

$$\begin{aligned} a_0^{-1} O_{\{\alpha, 0, 0\}} a_0 &= O_{\{0, \pi, 0\}}^{-1} \theta^{-1} O_{\{\alpha, 0, 0\}} \theta O_{\{0, \pi, 0\}} = \\ &= O_{\{0, \pi, 0\}}^{-1} O_{\{\alpha, 0, 0\}} O_{\{0, \pi, 0\}} = O_{\{\alpha, 0, 0\}}. \end{aligned}$$

Уравнение (26.32), определяющее β , принимает вид

$$\Delta(\{-\alpha, 0, 0\})^* = \beta^{-1} \Delta(\{\alpha, 0, 0\}) \beta, \quad (26.47)$$

причем уравнение, в которое входит пространственная инверсия, выполняется автоматически. Так как $\Delta(\{\alpha, 0, 0\}) = (e^{i\pi\alpha})$, уравнение (26.47) снова дает $\beta = (\omega)$, и все копредставления относятся к первому типу. Как и следовало ожидать, все собственные значения являются простыми при наличии магнитного поля. Однако, если взять в качестве β единичную матрицу, равенство (26.39а) показывает, что

$$\theta O_{\{0, \pi, 0\}} \psi_\mu = \psi_\mu \quad (26.47a)$$

или, подставляя произведение $(-i)^n O_{\{0, \pi, 0\}} K$ из (26.15в) вместо θ и $P_{\{0, \pi, 0\}} O_{\{0, \pi, 0\}}$ вместо $O_{\{0, \pi, 0\}}$,

$$(-i)^n O_{\{0, \pi, 0\}} K P_{\{0, \pi, 0\}} O_{\{0, \pi, 0\}} \psi_\mu = \psi_\mu.$$

Так как P и $O_{\{0, \pi, 0\}}$ вещественны и так как квадрат последнего оператора равен $(-1)^n$, получаем соотношение

$$i^n P_{\{0, \pi, 0\}} \psi_\mu^* = \psi_\mu \quad (26.47b)$$

или

$$\begin{aligned} i^n \psi_\mu^* (-x_1, y_1, -z_1, s_1, \dots, -x_n, y_n, -z_n, s_n)^* = \\ = \psi_\mu(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n), \quad (26.47b) \end{aligned}$$

которое выполняется при наличии произвольно сильного однородного магнитного поля вдоль оси Z . Выбор фазового множителя,

который следует из $\beta = (1)$, совпадает с выбором, который определяется выбором фазового множителя для Ψ_M^J при $M = \mu$ в (26.43а), так что соотношения (26.47) выполняются для Ψ_M^J также и без изменения фазового множителя. Они могут быть получены из (26.43а) путем применения к нему оператора $O_{\{0, \pi, 0\}}$ и использования трансформационных свойств функций Ψ_M^J , наряду с явным выражением для $\mathfrak{D}_{(\{0, \pi, 0\})}^{(J)}$.

ФИЗИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ И КЛАССИЧЕСКИЕ ПРЕДЕЛЫ КОЭФФИЦИЕНТОВ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ, $3j$ - И $6j$ -СИМВОЛОВ

Коэффициенты представлений, $3j$ -символы и коэффициенты Рака все являются типично квантовомеханическими величинами. Как и все квантовомеханические величины, они могут быть истолкованы как амплитуды вероятности. Задачей настоящей главы и является подробный разбор этого.

Значение момента количества движения¹⁾ $j\hbar$ и его проекции на заданное направление $\mu\hbar$ для некоторого состояния могут быть заданы одновременно. Волновые функции Ψ_{μ}^j представляют состояния, в которых момент количества движения и его Z -компонента определены именно таким образом. Однако невозможно указать определенные значения одновременно двух компонент момента количества движения. Волновая функция состояния, для которого проекция момента количества движения в направлении Z' равна $\mu\hbar$, есть $O_R\Psi_{\mu}^j$, где R — вращение, переводящее Z' в Z . Однако, кроме случая $j=0$, Z -компонента момента не имеет определенного значения в состоянии $O_R\Psi_{\mu}^j$; действительно, соотношение

$$O_R\Psi_{\mu}^j = \sum_{\mu'} \mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu} \Psi_{\mu'}^j, \quad (27.1)$$

показывает, что все возможные значения Z -компоненты момента количества движения имеют, вообще говоря, конечные вероятности. Вероятность значения $\mu'\hbar$ равна квадрату абсолютной величины коэффициента при $\Psi_{\mu'}^j$ в (27.1); иначе говоря, она равна $|\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu'\mu}|^2$. Это наиболее простое физическое истолкование коэффициентов представления. Ниже будет дана аналогичная интерпретация $3j$ - и $6j$ -символов.

В области больших квантовых чисел все больший смысл приобретают классические понятия. Следовательно, должно быть возможным определение состояний, в которых моменты количества

¹⁾ Если придерживаться более точно общих принципов квантовой механики, то следует говорить, что квадрат момента количества движения равен $j(j+1)\hbar^2$.

движения ограничены во всех направлениях узкими областями. Ниже мы покажем это. Аналогично, $3j$ - и $6j$ -символы в пределе больших квантовых чисел должны иметь интерпретацию с помощью обычных геометрических понятий. Такое истолкование должно сделать очевидным свойства симметрии этих символов. Это действительно будет так. Однако переход от квантовомеханических величин к их классическим аналогам ни в коей мере не является простым: они приближаются к классическим пределам только при усреднении их по некоторому разумному интервалу значений по крайней мере одного из индексов. По отдельности они испытывают колебания вокруг среднего; характер этих колебаний будет описан несколько более подробно ниже.

Коэффициенты представлений

Интерпретация величин

$$|\mathfrak{D}^{(j)}(R)_{\mu',\mu}|^2 = [d^{(j)}(\beta)_{\mu',\mu}]^2 \quad (27.E.1)$$

с помощью наблюдаемых величин, которая может быть дана по крайней мере в принципе, уже содержится в предыдущем разделе. Выражение (27.E.1) дает вероятность того, что Z -компонента момента количества движения равна $\mu'\hbar$, если Z' -компонента этой величины равна $\mu\hbar$, а полный момент количества движения¹⁾ равен $j\hbar$. Вращение R переводит направление Z' в направление Z . Угол между Z и Z' равен β , и, разумеется, (27.E.1) зависит только от β и не зависит от остальных эйлеровых углов вращения R . Аналогичная интерпретация матрицы преобразования спина одного электрона была дана после соотношений (20.20); истолкование коэффициентов представления, которое неявно содержится в (27.E.1), было подчеркнуто Гюттингером²⁾.

Из указанной интерпретации коэффициентов представлений следует ряд соотношений. Наиболее очевидным из них является то, что вероятность (26.E.1) симметрична относительно μ' и μ . Легко показать, что

$$d^{(j)}(\beta)_{\mu',\mu} = (-1)^{\mu-\mu'} d^{(j)}(\beta)_{\mu,\mu'}. \quad (27.2)$$

Другими соотношениями, для которых *квадрат* неявно содержится в интерпретации величины (27.E.1), являются (24.7) и (19.14).

Полагая $\mu = j$ в (27.1), получаем состояние, в котором момент количества движения параллелен оси Z' . Тогда вероятность того,

¹⁾ См. примечание на стр. 415.

²⁾ P. Güttinger, Zs. f. Phys., 73, 169 (1932).

что Z -компонента момента будет равна $\mu\hbar$, согласно (27.2) и (15.27а), есть

$$P(\mu) = \binom{2j}{j-\mu} \cos^{2j+2\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j-2\mu} \frac{1}{2} \beta. \quad (27.3)$$

Если j велико, то следует ожидать, что это выражение будет иметь максимум около $\mu_0 = j \cos \beta$ — того самого значения, которое μ принимает согласно классической теории. Вероятность $P(\mu)$ может быть вычислена в окрестности μ_0 наиболее просто, если принять, что $\mu_0 = j \cos \beta$ есть целое число. Поскольку j велико, это ограничение не является существенным. Тогда, если $\mu > \mu_0$,

$$\begin{aligned} P(\mu) &= \frac{(2j)!}{(j-\mu)!(j+\mu)!} \cos^{2j+2\mu} \frac{1}{2} \beta \sin^{2j-2\mu} \frac{1}{2} \beta = \\ &= \frac{(j-\mu_0)(j-\mu_0-1)\dots(j-\mu-1)}{(j+\mu_0+1)(j+\mu_0+2)\dots(j+\mu)} \left(\operatorname{tg}^2 \frac{1}{2} \beta\right)^{\mu_0-\mu} P(\mu_0) \end{aligned}$$

или, так как

$$\operatorname{tg}^2 \frac{1}{2} \beta = \frac{1 - \cos \beta}{1 + \cos \beta} = \frac{j - \mu_0}{j + \mu_0},$$

$$P(\mu) = \frac{1 \left(1 - \frac{1}{j - \mu_0}\right) \left(1 - \frac{2}{j - \mu_0}\right) \dots \left(1 - \frac{\mu - \mu_0 - 1}{j - \mu_0}\right)}{\left(1 + \frac{1}{j + \mu_0}\right) \left(1 + \frac{2}{j + \mu_0}\right) \dots \left(1 + \frac{\mu - \mu_0}{j + \mu_0}\right)} P(\mu_0).$$

Если $\mu - \mu_0 \ll j \pm \mu_0$, это выражение весьма близко к

$$P(\mu) \approx \frac{e^{-(\mu - \mu_0)^2/2(j - \mu_0)}}{e^{(\mu - \mu_0)^2/2(j + \mu_0)}} P(\mu_0) = e^{-j(\mu - \mu_0)^2/(j^2 - \mu_0^2)} P(\mu_0). \quad (27.4)$$

Та же самая формула относится к случаю $\mu < \mu_0$. В квантовой теории $P(\mu)$ имеет гауссово распределение около значения μ_0 , которое имела бы величина μ в классической теории. Результат не был бы таким простым, если бы мы рассматривали состояние $\mathcal{O}_R \Psi_\mu^j$ с $\mu \neq j$, так как момент количества движения такого состояния может иметь, даже в классической теории, любое направление, составляющее угол ϑ с осью Z' , где $\cos \vartheta = \mu/j$. Лишь в случае $\mu = \pm j$ это направление единственно; тогда оно совпадает соответственно с Z' и $-Z'$.

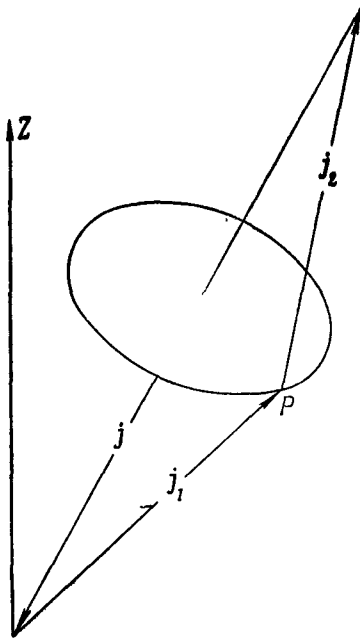
Коэффициенты векторного сложения

Наиболее прямое физическое истолкование $3j$ -символов, или коэффициентов векторного сложения, следует из соотношения (24.20) или многочисленных эквивалентных ему соотношений. Согласно

(24.20), выражение

$$(2j+1) \binom{j \quad x \quad \lambda}{m \quad j_1 \quad j_2} = (2j+1) \binom{j \quad j_1 \quad j_2}{-m \quad x \quad \lambda} \quad (27.E.2)$$

есть вероятность того, что Z -компоненты векторов j_1 и j_2 равны x и λ , если эти векторы складываются в j , причем направление j таково, что его Z -компонента равна m . Связь между j , j_1 и j_2



Фиг. 14. Геометрическая интерпретация $3j$ -символа.

Моменты количества движения j_1 и j_2 , складываясь, дают полный момент количества движения j с Z -компонентой m . Вероятность того, что Z -компоненты векторов j_1 и j_2 равны соответственно x и $\lambda = m - x$, дается при этих условиях выражением (27.E.2). Асимптотическое значение этой вероятности пропорционально полной длине дуги окружности, лежащей между плоскостями $z = x$ и $z = x + 1$.

становится более симметричной, если j заменить на $-j$, так что три вектора j_1 , j_2 , j , складываясь, дают нуль. Сложение в классической теории показано на фиг. 14. Вектор j_1 может быть направлен к любой точке окружности, а вектор j_2 начинается из этой точки. Ясно, что если длины j_1 , j_2 , j векторов j_1 , j_2 , j и проекции x , λ и m (где $x + \lambda + m = 0$) этих векторов на ось Z заданы, то вся конфигурация векторов j_1 , j_2 , j определена с точностью до поворотов всей фигуры вокруг оси Z . Числа j_1 , j_2 , j , x , λ , m могут поэтому быть характеризованы геометрическими свойствами этой фигуры, инвариантными относительно вращений вокруг оси Z .

Дуги окружности как конечные точки вектора j_1 (см. фиг. 14), имеющие равную длину, равновероятны. Следовательно, если двигаться с постоянной скоростью по окружности, обходя ее всю за единицу времени, то время, которое будет затрачено на прохо-

ждение между плоскостями $z = x$ и $z = x + 1$, даст вероятность значения x для проекции j_1 на ось Z . В точке P на плоскости $z = x$ касательная к окружности направлена по $[j_1 j_2]$, а единичный вектор в этом направлении равен $[j_1 j_2] / |[j_1 j_2]|$. Проекцией этого вектора на направление оси Z будет $[j_1 j_2] \cdot e_z / |[j_1 j_2]|$, где e_z — единичный вектор в направлении оси Z . Следовательно, если двигаться по окружности со скоростью v , то перемещение в направлении оси Z происходит со скоростью

$$v \frac{[j_1 j_2] \cdot e_z}{|[j_1 j_2]|},$$

а время, которое конец вектора проводит между плоскостями $z = x$ и $z = x + 1$, является обратным этой величине, точнее, пропорциональным удвоенной обратной величине этого отношения, так как интервал $(x, x + 1)$ по z проходится дважды при движении по окружности. Поскольку длина окружности равна $2\pi |[j_1 j_2]| / j$, то и скорость v равна этой величине. Отсюда следует, что вероятность того, что Z -компонента j_1 лежит между x и $x + 1$, равна

$$\frac{2 |[j_1 j_2]|}{|[j_1 j_2] \cdot e_z| v} = \frac{2 |[j_1 j_2]|}{|[j_1 j_2] \cdot e_z|} \frac{j}{2\pi |[j_1 j_2]|}. \quad (27.5)$$

Так как эта вероятность также дается выражением (27.Е.2), причем $-m$ заменено на m , классическим аналогом квадрата $3j$ -символа является

$$\begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ m & x & \lambda \end{pmatrix} \approx \frac{\delta_{m+x+\lambda, 0}}{2\pi |[j_1 j_2] \cdot e_z|}. \quad (27.6)$$

Коэффициент $j/(2j + 1)$ мы заменили на $1/2$. Как уже упоминалось выше, числа $j, j_1, j_2, m, x, \lambda$ определяют векторы j_1, j_2, j (где $j_1 + j_2 + j = 0$) с точностью до вращения всей фигуры, образованной из этих векторов, вокруг оси Z . Однако правая часть равенства (27.6), очевидно, инвариантна относительно такого вращения. Она равна обратной величине произведения 4π на площадь проекции треугольника, образованного векторами j_1, j_2, j , на плоскость XY . Последний способ описания показывает также, что соотношение (27.6) инвариантно относительно перестановки векторов j_1, j_2, j . Поскольку $j_1 + j_2 + j = 0$, это можно видеть также из (27.6).

Явное выражение для классического предела $3j$ -символа через входящие в него индексы имеет вид

$$4\pi \begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ m & m_1 & m_2 \end{pmatrix}^2 \approx \frac{\delta_{m_1 + m_2 + m, 0}}{\left[A^2 + \frac{1}{4} (j^2 m_1 m_2 + j_1^2 m_2 m + j_2^2 m m_1) \right]^{1/2}}, \quad (27.6a)$$

где A^2 — квадрат площади треугольника со сторонами j, j_1, j_2 :

$$16A^2 = -j^4 - j_1^4 - j_2^4 + 2j^2j_1^2 + 2j^2j_2^2 + 2j_1^2j_2^2. \quad (27.66)$$

Как и ранее, можно указать классический аналог только квадрата квантовомеханической величины $3j$ -символа. Это естественно, потому что $3j$ -символы являются амплитудами, которые, подобно ψ , не имеют непосредственного классического аналога. По этой причине следует ожидать, что (27.6) справедливо только при усреднении по одному из индексов по некоторой разумной области. Можно, однако, воспользоваться классическими понятиями для интерпретации как \mathfrak{D} , так и коэффициентов векторного сложения; получаемые при этом выражения¹⁾ воспроизводят также и знак этих величин. Эти полуклассические выражения применимы только при условии, что все квантовые числа велики, но они показывают, что коэффициенты \mathfrak{D} и $3j$ -символы имеют осциллирующий характер в той области, в которой наши формулы законны в среднем. Из данной нами интерпретации $3j$ -символов можно было бы заключить, что эти величины обращаются в нуль, если m_1 принимает значение, лежащее либо ниже наинизшей точки окружности на фиг. 14, либо выше наивысшей точки этой окружности. Знаменатель выражения (27.6а) в этих случаях становится мнимым. Однако полуклассические выражения показывают, что $3j$ -символы не обращаются в нуль при таких m_1 ; они лишь экспоненциально убывают выше и ниже значений m_1 , соответствующих наинизшей и наивысшей точкам окружности на фиг. 14.

Если $m = -j$, вектор j на фиг. 14 становится антипараллельным оси Z , а χ и λ должны определяться при этом однозначно из классической теории. Обозначим их значения через χ_0 и λ_0 . Тогда

$$\chi_0 + \lambda_0 = j, \quad (27.7)$$

а квадрат высоты треугольника, перпендикулярной стороне j , равен

$$j_1^2 - \chi_0^2 = j_2^2 - \lambda_0^2. \quad (27.7a)$$

Эти два уравнения определяют χ_0 и λ_0 . В квантовой теории вероятность того, что проекции векторов j_1 и j_2 принимают значения χ и λ , дается выражением (27.Е.2). Эта вероятность будет обозначена через $P(\chi, \lambda)$. Входящий в (27.Е.2) $3j$ -символ при $m = -j$

¹⁾ См. A. R. Edmonds, *Angular Momentum in Quantum Mechanics*, Princeton, 1957, Sect. 2.7, App. 2; P. Brussard, J. H. Tolhoek, *Physica*, 23, 955 (1957).

определяется выражениями (17.27б) и (24.9а):

$$\begin{aligned} & \begin{pmatrix} j & j_1 & j_2 \\ -j & x & \lambda \end{pmatrix} = \\ & = \frac{(-1)^{2j_1+j_2-\lambda} \delta_{x+\lambda, j} [(2j)! (j_1+j_2-j)! (j_1+x)! (j_2+\lambda)!]^{1/2}}{[(j+j_1+j_2+1)! (j-j_2+j_2)! (j+j_1-j_2)! (j_1-x)! (j_2-\lambda)!]^{1/2}}. \end{aligned} \quad (27.8) \end{aligned}$$

Поэтому

$$P(x, \lambda) = \text{const} \frac{(j_1+x)! (j_2+\lambda)!}{(j_1-x)! (j_2-\lambda)!}, \quad (27.9)$$

где постоянная не зависит от x и λ .

Дальнейшие вычисления упрощаются, если предположить, что классические значения величин x и λ , т. е. x_0 и λ_0 , являются целыми числами. Поскольку искомое выражение $P(x, \lambda)$ будет интересоваться нас только при больших значениях j , а также x и λ , это предположение не является существенным. Если $x = x_0 + n$, $\lambda = \lambda_0 - n$ с положительным n , то мы имеем

$$\begin{aligned} \frac{P(x, \lambda)}{P(x_0, \lambda_0)} &= \frac{(j_1+x_0+1)(j_1+x_0+2)\dots(j_1+x_0+n)}{(j_2-\lambda_0+1)(j_2-\lambda_0+2)\dots(j_2-\lambda_0+n)} \times \\ &\times \frac{(j_1-x_0)(j_1-x_0-1)\dots(j_1-x_0-n+1)}{(j_2+\lambda_0)(j_2+\lambda_0-1)\dots(j_2+\lambda_0-n+1)}. \end{aligned} \quad (27.9a)$$

В силу (27.7а)

$$(j_1+x_0)(j_1-x_0) = (j_2-\lambda_0)(j_2+\lambda_0).$$

Если разделить числитель и знаменатель выражения (27.9а) на n -ю степень последнего выражения и принять, что n мало по сравнению с $j_1 \pm x$ и $j_2 \pm \lambda$, то все множители в (27.9а) будут лишь незначительно отличаться от 1. Поэтому (27.9а) может быть преобразовано с помощью формулы

$$(1+h_1)(1+h_2)\dots(1+h_n) = e^{h_1+h_2+\dots+h_n},$$

что дает, в силу (27.7) и (27.7а),

$$\frac{P(x, \lambda)}{P(x_0, \lambda_0)} \approx \frac{\exp[-x_0 n^2 / (j_1^2 - x_0^2)]}{\exp[\lambda_0 n^2 / (j_2^2 - \lambda_0^2)]} = \exp\left(-\frac{j n^2}{j_1^2 - x_0^2}\right). \quad (27.9б)$$

Та же формула применима и при отрицательных n .

Последнее выражение для вероятности отклонения x от его классического значения x_0 на величину n имеет большое сходство с (27.4), т. е. с вероятностью отклонения μ от его классического значения μ_0 . Эта вероятность снова имеет наибольшее значение при $x = x_0$ и является при больших квантовых числах j , j_1 , j_2 , x , λ гауссовым распределением около x_0 . Действительно, при

больших квантовых числах имеется большое сходство между $3j$ -символами и коэффициентами представления¹⁾. Это очевидно уже из фиг. 14, которая становится схемой, лежащей в основе интерпретации коэффициентов представлений, если устранить из нее вектор j_2 и ту часть вектора j , которая лежит выше плоскости окружности.

Коэффициенты Рака

Физическая интерпретация $6j$ -символа наиболее ясно следует из разложения (24.22) волновой функции X_M^{JJ} , описывающей состояние, в котором полный момент частиц 1 и 2 равен J , по волновым функциям $\Phi_M^{j'j}$, соответствующим состояниям, в которых полный момент частиц 1 и 3 равен j' :

$$X_M^{JJ} = \sum_{j'} V_{2j+1} V_{2j'+1} (-1)^{2j_1} \begin{Bmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{Bmatrix} \Phi_M^{j'j}. \quad (27.10)$$

Коэффициент $c(jJM; j'j'M') = \delta_{JJ'} \delta_{MM'} c^J(j; j')$ выражен в (27.10) через $6j$ -символ, согласно (24.23а). Отсюда следует, что выражение

$$(2j+1)(2j'+1) \begin{Bmatrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{Bmatrix}^2 \quad (27.E.3)$$

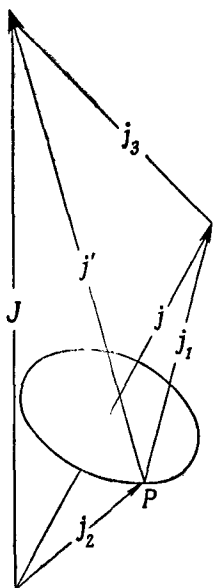
дает вероятность того, что сумма моментов количества движения j_1 и j_3 имеет длину j' , причем моменты j_1 и j_2 связаны в вектор j , имеющий длину j , а j_3 связан с этим вектором, в результате чего получается момент количества движения с абсолютной величиной J . Фиг. 15 показывает связь между этими шестью векторами; они образуют тетраэдр (вообще говоря, неправильный).

Если длины векторов j_1 , j_2 , j , j_3 , J фиксированы, плоскость, проходящая через векторы j_1 , j_2 , j , может еще быть повернута вокруг j . Точка P на фиг. 15 описывает тогда окружность с центром в некоторой точке на j . Равные дуги этой окружности имеют равные вероятности. Вероятность заданного значения величины j' может быть вычислена с помощью метода, использованного при интерпретации $3j$ -символов. Единичным вектором, касательным к окружности в точке P , является $[\mathbf{j}_1 \mathbf{j}_2] / |\mathbf{j}_1 \mathbf{j}_2|$. Вероятность для единичного интервала j' обратно пропорциональна проекции этого вектора на j' ; иначе говоря, она пропорциональна выражению

$$\frac{|\mathbf{j}_1 \mathbf{j}_2|}{|\mathbf{j}_1 \mathbf{j}_2| \cdot j' / j'}.$$

¹⁾ См. цитированную на стр. 338 монографию Эдмондса.

Коэффициент пропорциональности при этом есть обратная величина половины длины окружности, т. е. величина, обратная к $\pi | [j_1 j_2] | / j$.



Фиг. 15. Геометрическая интерпретация коэффициентов Рака.

Моменты количества движения j_1 и j_2 , складываясь, дают суммарный момент j . Этот момент в свою очередь складывается с j_3 , приводя к полному моменту количества движения J . Вероятность того, что моменты j_3 и j_1 складываются в суммарный момент с абсолютной величиной j' , дается через коэффициенты Рака выражением (27.Е.3). Асимптотическое значение этой вероятности пропорционально длине дуги окружности, точки которой находятся на расстояниях от j' до $j' + 1$ от конца вектора J .

Поэтому в пределе больших квантовых чисел j выражение (27.Е.3) принимает вид

$$(2j + 1)(2j' + 1) \left\{ \begin{matrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{matrix} \right\}^2 \approx \frac{| [j_1 j_2] | j'}{| [j_1 j_2] \cdot j'} \frac{j}{\pi | [j_1 j_2] |}. \quad (27.11)$$

Заменяя $j/(2j + 1)$ и $j'/(2j' + 1)$ на $1/2$, получаем

$$\left\{ \begin{matrix} J & j_2 & j' \\ j_1 & j_3 & j \end{matrix} \right\}^2 \approx \frac{1}{4\pi | [j_1 j_2] \cdot j'}. \quad (27.12)$$

Квадрат $6j$ -символа принимает асимптотическое значение, равное обратной величине произведения 24π на объем тетраэдра, образованного векторами, входящими в $6j$ -символ. Приближение к асимптотическому значению имеет тот же характер, что и в случае $3j$ -символов; можно ожидать, что только среднее от левой части (27.12) по крайней мере по одному из j сходится к правой части.

ОБОЗНАЧЕНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ

В этом Приложении дается сводка обозначений и определений координат, вращений и фаз, которые были приняты в американском издании настоящей книги. Они совпадают с обозначениями, принятыми Роузом²⁾, и имеют то преимущество, что позволяют сохранить обозначения волновых функций Кондона и Шортли³⁾, коэффициентов представлений Вигнера (принятых также в немецком издании настоящей книги) (и наиболее широко используемые³⁻⁵⁾), определения коэффициентов векторного сложения, причем произведен переход от левой системы координат, первоначально использованной автором, к более широко используемой правой системе координат. Таким образом, сведена к минимуму возможность возникновения недоразумений, происходящих вследствие различия в обозначениях и определениях по сравнению с существующей литературой по физике, а также устранены недостатки левой системы координат.

Более полная сводка соотношений между фазами и обозначениями, используемыми различными авторами, для коэффициентов представлений, коэффициентов векторного сложения и $6j$ -символов дана Эдмондсом⁵⁾.

1. Координаты

Прямоугольные координаты, используемые в настоящей книге, таковы, что при (положительном) вращении положительного направления оси x в направлении (положительной) оси y правый винт двигался бы вдоль положительного направления оси z . Сфе-

1) Это приложение было добавлено в издании 1959 г.

2) См. цитированную на стр. 215 монографию М. Роуза.

3) См. цитированную на стр. 186 монографию Е. Кондона и Г. Шортли.

4) См. цитированные на стр. 227 работы Рака.

5) См. цитированную на стр. 338 монографию Эдмондса.

рические координаты (r, θ, φ) определяются соотношениями (см. фиг. 7 на стр. 185)

$$\begin{aligned} r &= \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}, \\ \theta &= \arccos \frac{z}{r}, \\ \varphi &= \arcsin \frac{y}{\sqrt{x^2 + y^2}}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

2. Вращения

Вращение R определяется углами Эйлера $\{\alpha, \beta, \gamma\}$. Каждому вращению сопоставляется оператор \mathbf{P}_R , который а) вращает поле вокруг оси Z на угол α , б) вращает поле вокруг оси Y на угол β и в) вращает поле вокруг оси Z на угол γ . Оси координат остаются фиксированными при этих вращениях поля. С каждым вращением связано также преобразование координат, представляемое матрицей \mathbf{R}_R , которая а) осуществляет вращение координат вокруг оси Z на угол γ , б) вращение координат вокруг новой оси Y на угол β и в) вращение координат вокруг новой оси Z на угол α . Таким образом¹⁾,

$$\begin{aligned} \mathbf{R}_R &= \mathbf{R}_{\{\alpha\beta\gamma\}} = \\ &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & -\sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & \sin \gamma & 0 \\ -\sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Вращение системы координат посредством $\mathbf{R}_{\{\alpha\beta\gamma\}}$ физически полностью эквивалентно обратному вращению поля посредством $\mathbf{P}_{\{\alpha\beta\gamma\}^{-1}} = \mathbf{P}_{\{\pi-\gamma, \beta, -\pi-\alpha\}}$; иначе говоря,

$$f(\mathbf{R}_R \mathbf{r}) = (\mathbf{P}_{R^{-1}} f)(\mathbf{r}), \quad (\text{A.3})$$

где запись $(\mathbf{P}_{R^{-1}} f)$ подчеркивает то обстоятельство, что оператор \mathbf{P} дает новую функцию координат \mathbf{r} . Пусть

$$\mathbf{P}_{R^{-1}} f(\mathbf{r}) = g(\mathbf{r}). \quad (\text{A.4})$$

¹⁾ См. соотношения от (15.14а) до (15.15) в основном тексте книги.

Тогда $f(\mathbf{r}) = \mathbf{P}_R g(\mathbf{r})$, и (А. 3) принимает вид соотношения (11.19), которое было использовано для определения ¹⁾ оператора \mathbf{P}_R :

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R g(\mathbf{r}') &= g(\mathbf{r}), \\ \mathbf{r}' &= \mathbf{R}_R \mathbf{r}. \end{aligned} \quad (\text{А. 5})$$

Заметим здесь для связи с дальнейшим, что, согласно (А. 2), матрица $\mathbf{R}_{\{\alpha, \beta, \gamma\}}$ переводит точку $(0, 0, z_1)$ с полярными координатами $(\mathbf{r} = z_1, \theta = 0, \varphi = 0)$ в точку (x', y', z') с полярными координатами $(\mathbf{r}' = z_1, \theta' = \beta, \varphi' = \pi - \alpha)$.

3. Представления группы вращений и сферические гармоники

Соотношение (11.23) и (11.26) определяет матрицу представления посредством оператора \mathbf{P}_R и функций-партнеров $\psi_\lambda(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n)$:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}_R \psi_\nu(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) &= \\ &= \sum_x D(R)_{\nu x} \psi_x(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n) \end{aligned} \quad (\text{А. 6})$$

или, что равносильно,

$$\begin{aligned} \psi_\nu(x'_1, y'_1, z'_1, \dots, x'_n, y'_n, z'_n) &= \\ &= \sum_x D(R)_{\nu x}^* \psi_x(x_1, y_1, z_1, \dots, x_n, y_n, z_n), \end{aligned} \quad (\text{А. 7})$$

где

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{R}_R \mathbf{r}_i.$$

Для случая группы вращений функциями-партнерами являются сферические гармоники $Y_{l,m}(\theta, \varphi)$, где $-l \leq m \leq +l$, а матрица представления есть $\mathfrak{D}^{(l)}(R)_{km}$. Тогда, согласно (А. 6),

$$Y_{l,m}(\theta', \varphi') = \sum_k \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{mk}^* Y_{l,k}(\theta, \varphi). \quad (\text{А. 8})$$

Это соотношение определяет сферические гармоники для всех θ' и φ' через их значения при $\theta = 0, \varphi = 0$ и через $\mathfrak{D}_{km}^{(l)}$:

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \sum_k \mathfrak{D}^{(l)}(R)_{mk}^* Y_{l,k}(\theta = 0, \varphi = 0). \quad (\text{А. 9})$$

Здесь R должно быть вращением, матрица которого \mathbf{R}_R переводит точку на оси Z на расстоянии r от начала в точку с полярными коор-

¹⁾ При вычислении произведений вида $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R f(x)$ следует рассматривать операторы в порядке слева направо, как указано в гл. 11. Только этим путем можно обеспечить равенство $\mathbf{P}_S \mathbf{P}_R = \mathbf{P}_{SR}$ (см. гл. 11, стр. 128).

динатами r, θ, φ . Как мы заметили в предыдущем разделе настоящего Приложения, этим вращением является $R = \{\pi - \varphi, +\theta, +\gamma\}$. В гл. 15 было показано, что только $Y_{l,0}$ не равно нулю в точке $\theta = \varphi = 0$. Поэтому равенство (A. 9) есть просто

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = \mathfrak{D}^{(l)}(\{\pi - \varphi, +\theta, +\gamma\})_{m0}^* Y_{l0}(\theta = 0, \varphi = 0). \quad (\text{A. 10})$$

В соответствии с определением в книге Кондона и Шортли примем, что $Y_{l0}(0, 0)$ вещественно и положительно; тогда

$$Y_{l,m}(\theta, \varphi) = (\text{const}) \cdot (-1)^m e^{im\varphi} d^{(l)}(\theta)_{m0}. \quad (\text{A. 11})$$

Это соотношение между сферическими гармониками и коэффициентами представлений было установлено в соотношении (19.86). Данное здесь определение сферических гармоник совпадает с определением Кондона и Шортли.

4. Коэффициенты векторного сложения

Как упоминалось в гл. 17, матрица $S_{Lm; \mu\nu}^{(l, \bar{l})} = s_{L, \mu, \nu}^{(l, \bar{l})} \delta_{m, \mu+\nu}$ не определяется полностью требованием, чтобы она приводила к тем линейным комбинациям произведений $\Psi_{\mu}^{(l)} \Psi_{\nu}^{(\bar{l})}$, которые принадлежат $(\mu + \nu)$ -й строке представления $\mathfrak{D}^{(L)}$. Равенство (17.21) указывает выбор, при котором коэффициенты векторного сложения являются однозначными:

$$s_{L, l, -\bar{l}}^{(l, \bar{l})} = \left| s_{L, l, -\bar{l}}^{(l, \bar{l})} \right| > 0. \quad (\text{A. 12})$$

В этом выборе Кондон и Шортли, а также Рака, Роуз и Эдмондс (см. цитированные выше работы и монографии этих авторов) следуют Вигнеру.

$3j$ -символы, использованные в гл. 24, выражаются через коэффициенты векторного сложения следующим образом:

$$\begin{pmatrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{j_1 - j_2 - m_3}}{\sqrt{2j_3 + 1}} s_{j_3 m_3 m_2}^{(j_1 j_2)} \delta_{m_1 + m_2 + m_3, 0}. \quad (\text{A. 13})$$

5. Коэффициенты Рака и $6j$ -символы

Коэффициенты повторной связи, или $6j$ -символы, используемые в тексте, связаны с коэффициентами W Рака следующим образом:

$$W(j_1 j_2 l_1 l_2; j_3 l_3) = (-1)^{j_1 + j_2 + l_1 + l_2} \left\{ \begin{matrix} j_1 & j_2 & j_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{matrix} \right\}. \quad (\text{A. 14})$$

Приложение Б

СВОДКА ФОРМУЛ

Теория возмущений

$$V_{lk} = (\psi_l, V\psi_k), \quad (5.8)$$

$$F_k = E_k + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} \frac{|V_{lk}|^2}{E_k - E_l}, \quad (5.10)$$

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \psi_l. \quad (5.11)$$

Теория групп

Символ \sum_R означает суммирование по всем элементам группы для конечных групп; для непрерывных групп он означает интеграл Гурвица

$$\sum_R J_R = \sum_R J_{SR}. \quad (7.1), (10.5)$$

Соотношения ортогональности для унитарных неприводимых представлений группы порядка h имеют вид

$$\sum_R D^{(j')}(R)_{\mu'\nu'}^* D^{(j)}(R)_{\mu\nu} = \frac{h}{l_j} \delta_{j'j} \delta_{\mu'\mu} \delta_{\nu'\nu}, \quad (9.32)$$

где l_j — размерность представления $D^{(j)}$. Для характеров $\chi^{(j)}(R) = \sum_{\mu} D^{(j)}(R)_{\mu\mu}$ имеем

$$\sum_R \chi^{(j')}(R)^* \chi^{(j)}(R) = h \delta_{j'j}. \quad (9.33)$$

Для непрерывных групп $h = \sum_R 1$ заменяется на $\int dR$ [соотношения (10.12), (10.13)].

Представления и собственные функции

Из

$$P_R f(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (11.19)$$

где x_j и x'_j связаны вещественным ортогональным преобразованием R

$$x'_j = \sum_i R_{ji} x_i \quad \text{или} \quad x_i = \sum_j R_{ji} x'_j, \quad (11.18)$$

следует, что

$$P_{SR} = P_S P_R. \quad (11.20)$$

Также из

$$P_R \psi_x = \sum_x D(R)_{xx'} \psi_{x'} \quad (11.23)$$

и $P_S P_R^* = P_{SR}$ следует

$$D(SR) = D(S) D(R). \quad (11.25)$$

Наконец, из

$$P_R f_x^{(j)} = \sum_\lambda D^{(j)}(R)_{\lambda x} f_\lambda^{(j)} \quad \text{и} \quad P_R g_{x'}^{(j')} = \sum_{\lambda'} D^{(j')}(R)_{\lambda' x'} g_{\lambda'}^{(j')}$$

следует

$$(f_x^{(j)}, g_{x'}^{(j')}) = \frac{\hbar}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{xx'} \sum_\lambda (f_\lambda^{(j)}, g_\lambda^{(j')}). \quad (12.8)$$

Неприводимые представления трехмерной группы вращений

$$\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{m'm} = e^{im'\alpha} d^{(j)}(\beta)_{m'm} e^{im\gamma}, \quad (15.8)$$

$$\mathfrak{D}^{(j/2)}(\{\alpha\beta\gamma\}) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix}, \quad (15.16)$$

$$\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{j\mu} = \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2}\beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma}, \quad (15.27a)$$

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \sum_{\mu=-j}^j e^{i\mu\varphi}. \quad (15.28)$$

Представление $\mathfrak{D}^{(l)} \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ содержит один и только один раз каждое из представлений $\mathfrak{D}^{(L)}$, где

$$L = |l - \bar{l}|, |l - \bar{l}| + 1, \dots, l + \bar{l} - 1, l + \bar{l}, \quad (17.14)$$

$$\mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu, \mu'} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu, \nu'} = \sum_{L=|l-\bar{l}|}^{l+\bar{l}} s_{L\mu, \nu'}^{(l\bar{l})} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\mu'+\nu'; \mu+\nu} s_{L\mu\nu}^{(l\bar{l})}, \quad (17.166)$$

$$s_{L\mu L-\mu}^{(l\bar{l})} = \frac{(-1)^{l-\mu} \sqrt{(2L+1)! (l+\bar{l}-L)!}}{\sqrt{(L+l+\bar{l}+1)! (L+l-\bar{l})! (L-l+\bar{l})!}} \times \\ \times \sqrt{\frac{(l+\mu)! (\bar{l}+L-\mu)!}{(l-\mu)! (\bar{l}-L+\mu)!}}, \quad (17.276)$$

$$\sum_{\mu} s_{L, \mu, m-\mu}^{(l\bar{l})} s_{L', \mu, m-\mu}^{(l\bar{l})} = \delta_{LL'}, \\ \sum_L s_{L, \mu, m-\mu}^{(l\bar{l})} s_{L, \mu', m-\mu'}^{(l\bar{l})} = \delta_{\mu\mu'}. \quad (17.28)$$

Теория спина Паули

$$\mathbf{Q}_R \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \sum_{t_1=\pm 1} \dots \sum_{t_n=\pm 1} \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2} s_1, \frac{1}{2} t_1} \dots \\ \dots \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2} s_n, \frac{1}{2} t_n} \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \dots, x_n, y_n, z_n, t_n) \quad (21.66)$$

$$\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R. \quad (21.8)$$

Неприводимые тензоры

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\rho)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\rho\sigma} \mathbf{T}^{(\sigma)}, \quad (21.166)$$

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = (\Psi_{\mu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(\rho)} \Psi_{\mu'}^{N'j'}), \quad (21.18)$$

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = s_{j'\mu\rho}^{(j\omega)} \delta_{\mu+\rho, \mu'} T_{Nj; N'j'}. \quad (21.19)$$

Здесь $s_{j'\mu\rho}^{(j\omega)}$ равны нулю, если

$$|j - \omega| > j' \quad \text{или} \quad j' > j + \omega.$$

Бесконечно малые вращения

Оператор бесконечно малых вращений декартовых координат имеет вид

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{L}_z \Psi = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{P}_{\{\alpha 00\}} \Psi \Big|_{\alpha=0}; \quad (18.7)$$

для спиновых координат

$$\frac{1}{2} (s_1 + s_2 + \dots + s_n) \Psi = \frac{1}{\hbar} \mathbf{S}_z \Psi = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} \Psi \Big|_{\alpha=0}; \quad (23.23a)$$

а для всех координат одновременно

$$\frac{1}{\hbar} (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z) = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} \Big|_{\alpha=0}. \quad (23.30a)$$

3j-символы

1. Соотношение между 3j-символами и коэффициентами векторного сложения:

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{J_1 - J_2 - m_3}}{\sqrt{2J_3 + 1}} S_{J_3, m_1, m_2}^{(J_1, J_2)} \delta_{m_1 + m_2 + m_3, 0}. \quad (24.9a)$$

2. Симметрия 3j-символов:

$$\begin{aligned} (-1)^{J_1 + J_2 + J_3} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} J_1 & J_3 & J_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} J_3 & J_2 & J_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_2 & J_1 & J_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}, \quad (24.10) \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & J_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & J_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}, \quad (24.10a)$$

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{J_1 + J_2 + J_3} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.10b)$$

6j-символы

1. Связь с 3j-символами:

$$(J_1 l_2 l') (l_1 j_2 l) = (-1)^{2l_1} \sum_j (2j + 1) \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} (J_1 J_2 j') (l_1 l_2 j), \quad (24.24a)$$

$$(J_1 l_2, l'_3) (l'_1 j_2 l_3) (l_1, l_2 j_3) = \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} (J_1 J_2 J_3) \quad (24.24b)$$

(относительно использованных здесь ковариантных обозначений см. гл. 24).

2. Рассмотрим σ -ю компоненту \mathbf{T}^σ неприводимого тензора ранга p по отношению к декартовым координатам и ранга 0 (скаляр) по отношению к спиновым координатам. Оператор \mathbf{T}^σ является тогда неприводимым тензором ранга $\omega = p$ по отношению к вращениям всех координат. Для такого оператора другой возможной формой соотношения (21.19) является

$$(\Psi_\mu^{NJ}, \mathbf{T}^\sigma \Psi_{\mu'}^{N'J'}) = (J^\mu, p^\sigma, J_{\mu'}) T_{NJ; N'J'}. \quad (24.27a)$$

Величина $T_{NJ; N'J'}$ в соотношении (24.27a) есть произведение $(-1)^{J-p-J'} \sqrt{2J'+1}$ на $T_{NJ; N'J'}$ из (21.19). Если для обоих состояний Ψ_μ^{NJ} и $\Psi_{\mu'}^{N'J'}$ справедлива LS -связь, то

$$\begin{aligned} & T_{NJ; N'J'} = \\ & = (-1)^{2J-L+S+J'+p} \begin{Bmatrix} J & p & J' \\ L' & S & L \end{Bmatrix} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} T_{NSL; N'S'L'}. \end{aligned} \quad (24.30)$$

Антиунитарные операторы

Оператор θ является антиунитарным, если для любых двух состояний Ψ и Φ

$$(\theta\Phi, \theta\Psi) = (\Phi, \Psi)^* = (\Psi, \Phi) \quad (26.8)$$

и

$$\theta(\alpha\Phi + \beta\Psi) = \alpha^*\theta\Phi + \beta^*\theta\Psi. \quad (26.5)$$

Антиунитарный оператор обращения времени имеет вид

$$\theta = s_{1y} s_{2y} \dots s_{ny} \mathbf{K}, \quad (26.15a)$$

$$\theta = (-i)^n \mathbf{Q}_{\{0, \pi, 0\}} \mathbf{K}, \quad (26.15b)$$

где \mathbf{K} — оператор, заменяющий некоторую величину ее комплексно-сопряженной.

Законы умножения матриц, соответствующих антиунитарным операторам \mathbf{a} и унитарным операторам \mathbf{u} , записываются в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{u}_1) \mathbf{D}(\mathbf{u}_2) &= \mathbf{D}(\mathbf{u}_1 \mathbf{u}_2), \\ \mathbf{D}(\mathbf{a}) \mathbf{D}(\mathbf{u}^*) &= \mathbf{D}(\mathbf{a} \mathbf{u}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}) &= \mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{a}_1) \mathbf{D}(\mathbf{a}_2)^* &= \mathbf{D}(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2). \end{aligned} \quad (26.21)$$

ПРЕДМЕТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

- Абелевы группы, см. Группы абелевы**
Аксиальный вектор 237
Алгебра представлений 136
Антилинейные операторы 36, 389
Антисимметричная матрица 34
 — — представления 154
 — — собственные значения и собственные функции 125
Антиунитарные операторы 389
 — — в нормальном виде 390
Ассоциативность 13, 73
Атомные спектры 212
- Бесконечные группы** 108
Бора орбиты 214
 — условие частот 70
- Вейля метод получения представлений группы вращений** 189
Вектора компоненты 9
Векторного сложения коэффициенты 226
 — — — классические пределы 417
 — — — ковариантные и контравариантные 347
 — — — симметричная форма 343
 — — — таблицы 231
 — — модель 221, 312, 367
Векторные операторы 274, 288, 322, 326, 330
 — — матричные элементы 291
Векторов линейная независимость 19
 — ортогональность 35
 — полная система 20
 — сложение 9
Векторы аксиальные 237
 — в пространстве группы 100
- Векторы полярные** 244, 316, 322
 — физические 203
Величина физическая 62
Вероятность в квантовой механике 62
 — различных направлений спина, их взаимозависимость 272
Вещественная ортогональная матрица 35, 41, 172
Взаимодействие атома с магнитным полем 241, 330
 — спин-орбитальное 313, 330
 — спин-спиновое 332, 335
 — электронов 367
Водорода атом 213
 — — волновые функции 214, 253
 — — спектр 213
Возбуждение падающим излучением 67
Возмущений теория в случае вырождения 57
 — — правильные линейные комбинации 60, 145, 210, 226, 242, 306, 312, 376
 — — Рэлея — Шредингера 53
Волновая функция 46
 — — и физическое состояние 63
Волновое уравнение Шредингера 45
Волчок квантовомеханический 255
Вращательные состояния 265
Вращение 109, 127, 172, 265
 — декартовых координат 265, 269, 298
 — спиновых координат 269, 298, 309, 374
Вращений группа 109, 172, 180
 — — двумерная 173, 241
 — — и унимодулярная группа 192
 — группы интеграл Гурвица 176
 — — классы 174, 175, 181

- Вращений группы матрицы 173 181, 193, 205
 — — представления 175
 — — характеры 202
 — и отражений группа 172, 174, 211, 244
 Вращения и отражения 172, 319
 — — перестановка 310, 376
 — операторы без спина 127, 265
 — — для спинов только 268, 299
 — — их линейность и унитарность 276
 — — со спином 265, 268, 276, 283
 — ось 180
 — собственные и несобственные 172
 — угол 180
 Времени обращение 386
 — — оператор 390
 — — следствия из инвариантности относительно него 409, 412
 Вырождение собственных значений 51
 — — — нормальное 145
 — — — случайное 145
 Гамильтонов оператор 46, 61
 — — в магнитном поле 242, 330
 Гармонический осциллятор 43
 Гармонические полиномы 177, 185
 Гейзенберга матрицы 43
 Гелия атом 258, 335
 — ион 215
 Гипергеометрическая функция и матрицы представлений 257
 Главное квантовое число 216
 Главные оси, преобразование к ним 37, 41
 Гомоморфизм 86
 — унитарной группы на группу вращений 189
 Грама — Шмидта ортогонализация 140
 Группа вращений 109, 172, 180
 — диэдрическая 80
 — знакопеременная 153
 — определение 74
 — отражений 77, 174, 211, 249
 — перестановок 81, 132, 150
 — покрывающая 295
 — примеры 73, 77
 — простая 84
 — симметрическая 81, 132, 150
 — унитарная унимодулярная 192, 287
 Группа уравнения Шредингера 128
 Группы абелевы 74, 176
 — аксиомы 74
 — бесконечные 108
 — гомоморфизм 86
 — изоморфизм 79, 86
 — инфинитезимальные 111
 — конечные 75
 — Ли 111
 — непрерывные 108
 — параметры 109
 — порядок 75
 — представления, см. Представления группы
 — просто непрерывные и смешанно непрерывные 109, 111, 121
 — пространство 76, 108, 173
 — прямое произведение 206, 209
 — симметрии 79
 — циклические 78
 Групповые элементы (элементы группы) 74
 — — соседние 108
 Групповых элементов классы 81
 — — период 75
 — — порядок 75
 — — сопряжение 81
 Гурвица интеграл 119
 — — для двумерной группы вращений 176
 — — — смешанно непрерывных групп 121
 — — — трехмерной группы вращений 183
 Движение центра масс 212, 252
 Двухзначные представления, см. Представления многозначные
 Двумерная унитарная матрица 191
 Диагонализация матриц 32, 39
 Диагональная матрица 17
 — сумма, см. След
 Диагональный вид матриц 32
 Дипольное излучение 235
 Дирака релятивистский электрон 282
 Диэдрическая группа 80
 Единичная матрица 14, 25
 Жесткий ротатор 253

- Запрета принцип, см. Паули принцип
 Зеемана эффект 237, 317
 — — аномальный 332
 — — нормальный 244
 Знакопеременная группа 153
 Зоммерфельда постоянная тонкой структуры 313, 368
- Идемпотентные операторы** 144
 Излучение дипольное 235
 — квадрупольное 234
 — падающее на атом 67
 — поляризованное 239
 Измерение физической величины 62, 64
 Изоморфизм 79, 86
 Инвариантная плотность в пространстве параметров 116
 Инвариантность относительно вращений, следствия 274, 285
 Инвариантные операторы, см. Симметричные операторы
 Инвариантный интеграл, см. Гурвица интеграл
 Инверсия времени, см. Времени обращение
 — пространства 211, 238, 283
 Инволюторные физические операторы 391
 Индекс подгруппы 77
 Интегралы по непрерывным группам, см. Гурвица интеграл
 Интенсивности формулы, см. Хенля — Кронига формулы для интенсивностей
 Интервалов правило (Ланде) 332, 360, 366
 Интеркомбинационный запрет 235, 377
 Инфинитезимальные группы 111
- Каноническое преобразование** 66, 266, 280
 Квадратичная интегрируемость 45, 50
 Квадрупольное излучение 234
 Квантовая теория 43
 Квантовое число азимутальное (орбитальное) 217
 — — главное 216
 — — магнитное 217
 — — мультиплетное 217
 — — электрическое 246, 322
- Квантовое число орбитального момента количества движения (орбитальное) 217
 — — полного момента количества движения 220, 281, 316
 Квантовомеханическое твердое тело 253, 255
 Кейли — Клейна параметры 192
 Классические пределы коэффициентов представлений 415
 — — $3j$ -символов 418
 — — $6j$ -символов 421
 Классы группы 81
 — — перестановок 152
 — — и характер 103, 201
 — двумерной группы вращений 174, 175, 381
 — трехмерной группы вращений 181
 Клебша — Жордана коэффициенты, см. Коэффициенты векторного сложения
 Ковариантные и контравариантные коэффициенты представлений 351
 — — — $3j$ -символы 350
 Коммутативность и инвариантность 141
 Комплекс элементов 85
 Комплексно ортогональная матрица 35, 37
 Комплексное сопряжение и антиунитарные операторы 390
 Компоненты вектора 9
 — момента количества движения по оси 217
 — представлений неприводимые 106
 Конфигурации 373, 374
 — разрешенные для электронов 373, 378
 Конфигурационное пространство 44, 128
 Копредставление 398
 — неприводимые 403, 408
 — приведение 398
 Кососимметричная матрица 34
 Кристалл 247
- Ланде g -формула** 330, 363
 — правило интервалов 332, 360, 366
 Лапласа уравнение 177, 185
 Лапорта правило 236, 246, 316, 322
 Линейная независимость 19, 47
 Линейные комбинации «правильные» 60, 145

- Линейные преобразования координат 11
 — — произведение 12
 — — тензоров 218
 Линии ширина 71, 314
n-лучевик 251
- Магнитное квантовое число 217, 261, 288
 Магнитный момент 261
 Матриц диагонализация 32, 39
 — прямое произведение 27
 — размерность 11
 — свойства при преобразованиях подобия 18, 30
 — сложение 16, 24
 — собственные значения и собственные векторы 31
 — специальные виды 33
 — теоремы 13, 25, 190
 — умножение 12, 25
 — функции 19, 33
 Матрица антисимметричная 34
 — вещественная ортогональная 35, 41, 172
 — взаимная 15, 25
 — двумерная унитарная 191
 — диагональная 17
 — единичная 14, 25
 — квадратная 22, 23
 — комплексно ортогональная 35, 37
 — кососимметричная 34
 — мнимая 34
 — нулевая 16, 24
 — обратная 15, 25
 — прямоугольная 23
 — симметричная 34, 41, 124
 — эрмитово-сопряженная 34, 36
 Матрицы Паули 191
 — след 18
 — элементы 10, 11
 Матричные элементы 11, 66, 233
 — — бесспиновых тензорных операторов 323, 360
 — — векторного оператора 291
 Метрический тензор для $3j$ -символов 348, 349
 Мнимая матрица 34
 Момент количества движения, квантовое число полного момента 220, 281, 316
 — — — компонента по оси 217
 — — — орбитальный 217, 219
 — — — правила отбора 219, 220
- Момент количества движения, собственные функции 186, 254
 Мультиплетное расщепление 313
 — — и перестановки электронов 310
 — — и число антисимметричных собственных функций 375
 — — правило отбора 234
 — число 217
 Мультиплетность 218
- Непрерывность группы 108, 113, 294
 Непрерывные группы 108
 Непрерывный спектр 49, 213
 Неприводимость представлений 90
 — — группы вращений 176, 179, 188
 — — унитарной группы 200
 Неприводимые компоненты представления 106
 — — типы и число 189, 223
 — представления 90
 — секулярное уравнение 148
 — тензоры 288, 323, 337, 363
 Нечетная перестановка 152
 Нечетное число электронов 295
 Нечетные представления 195
 — уровни 318, 382
 Нормировка 35, 47
 Нормальная связь 314, 323
 — форма антиунитарных операторов 390
 Нулевая матрица 16, 24
- Обратная матрица 15, 25
 Обратное произведение элементов группы 74
 Операторы антилинейные 389
 — антиунитарные 389
 — бесконечно вырожденные 144
 — идемпотентные 144
 — инвариантные, см. Симметричные операторы
 — линейные 11, 47, 266, 278
 — проекционные 144
 — симметрические, см. Симметричные операторы
 — унитарные 35, 65, 266, 278
 — эрмитовы 48, 62
 Определитель и обратная матрица 15
 Оптические изомеры 259
 Орбитальный момент количества движения, квантовое число 217

- Орбитный момент количества движения, правила отбора 219
 Орбиты 369, 374
 — Бора 214
 Ортогонализация методом Грама — Шмидта 39
 Ортогональная матрица, см. Матрица вещественная ортогональная, Матрица комплексно ортогональная
 Ортогональности соотношения в непрерывных группах 123
 — — для неприводимых представлений 102
 — — — собственных функций 51, 140, 144
 — — — спиновых функций 302
 — — — характеров 102, 123, 144
 Ортогональность векторов 35
 — и унитарность представлений 135
 — собственных функций 51, 144
 — функций 47, 140
 Основная область 250
 — структура 301
 Ось вращения 180
 Отбора правила 219, 233, 250, 258, 314, 315
 — — в магнитном поле 238, 317
 — — — электрическом поле 245, 322
 — — со спином 316
 Отражений группа 77, 174, 211, 244
- Параметры вращений 173, 182, 183
 — группы 108
 — Кейли — Клейна 192
 Параметров пространства одно- и многосвязное 109, 295
 — — путь в нем 109, 113, 294
 Партнеры-функции 136
 Паули матрицы 191, 276
 — принцип (запрета) 154, 218, 300, 372, 373
 — — и заполнение электронных орбит 373
 — теория спина 262, 264
 Перестановки 150
 — и принцип Паули 299
 — четные и нечетные 152
 Перестановок группа, см. также Симметрическая группа
 — — электронов 130, 216, 298, 310, 370, 376
 — классы 151
 — циклы 150
- Перестановочные соотношения 44
 Перестановочный закон 74, см. также Коммутативность
 — — и матричное умножение 13
 Перехода вероятность 43
 — — под действием падающего излучения 66, 233
 — — правило сумм 319
 — — при измерении 64, 265
 Период элемента группы 75, 111
 Плотность инвариантная 116
 Повторная связь моментов количества движения 353
 Подгруппа 75
 — инвариантная 83
 — смежные с ней классы 76
 Подгруппы индекс 77
 — порядок 77
 Подобия преобразование, инвариантность относительно него 30
 — — матриц 18, 26, 30, 134
 Покрывающая группа 295
 Полнота систем векторов 21
 — собственных функций 51, 144
 Полуцелые представления 196
 Полярные векторы 244, 316, 322
 Поперечный эффект 239
 Порядок группы 75
 — элемента группы 75
 Построения принцип 220, 367
 Правильные линейные комбинации 210, 226, 242, 306, 312, 376
 Представление группы 89, 124, 132
 — — и собственные функции 124
 — — размерность его 90
 — — унитарность его 91, 123, 135
 — — характер его 102, 106, 142
 — принадлежащее собственному значению 145, 209
 — прямого произведения 207, 209, 223
 — симметрической группы 156, 306
 — с точностью до множителя 293
 — тождественное 153, 189
 — функции, принадлежание ему 142
 Представлений алгебра 136
 — ортогональность 98, 123
 — эквивалентность 90, 106
 — — и характеры 106
 Представления антисимметричные 154
 — двумерной группы вращений 177
 — — — и отражений 177
 — для электронных собственных функций 156
 — комплексно сопряженные 339

- Представления комплексные 340
 — коэффициенты, их классические пределы 415
 — многозначные 189, 196
 — непрерывных групп 114, 123
 — потенциально-вещественные 340
 — приведение 104
 — приводимые и неприводимые 90
 — присоединенные 154
 — псевдовещественные 340
 — точные и неточные 89
 — трехмерной группы вращений 185, 189, 201, 203
 — — — для четного или нечетного числа электронов 285
 — — — и отражений 211, 218
 — — — —целые и полужелые 196
 — унитарной группы 197
 — — — четные и нечетные 196
 — целые и полужелые 196
 — четные и нечетные 195
 Преобразование антилинейное 36
 — антиунитарное 276
 — каноническое 66, 266
 — к новой системе координат 65
 — линейное 11, 12, 203
 — подобия 18, 30, 134
 — собственное 10
 — унитарное 65
 Преобразований теория 61, 65
 Приведение копредставлений 398, 403
 — представления 104
 — — группы вращений 223
 — — симметрической группы 158
 Приводимые представления 90
 Присоединенные представления 154, 218, 307
 Продольный эффект 240
 Проекционные операторы 144
 Произведение комплексов 87
 — матриц 12
 — перестановок 80, 150
 — прямое групп 206
 — — матриц 27
 — скалярное векторов 35
 — — функций 47, 155, 263, 283
 — числа и вектора 9
 — — — матрицы 16
 Простая группа 84
 Просто непрерывная группа, см. Группы непрерывные
 Протона спин 282
 Прямое произведение групп 206, 209, 219, 319, 374
 Прямое произведение групп, неприводимые компоненты его 224
 — — матриц 26, 207, 209
 — — представлений 207, 209
 Разделения теории Эпштейна — Шварцшильда 43
 Размерность матрицы 11
 — представления 90
 Ракá коэффициенты 337, 352
 — — классический предел 422
 Расщепление собственных значений 58, 146
 — — — в магнитном поле 241, 317, 332
 — — — — электрическом поле 243, 319
 — спектральных линий 243, 318, 332
 Релятивистская теория электрона 282
 Рессела — Саундерса связь 323, 361
 Ридберга постоянная 213
 Ромбическая симметрия 247
 Ротатор 253
 Релея — Шредингера теория возмущений 53
 Секулярное уравнение 30, 60, 146
 Символы $3j$ - 344
 — — классический предел 417
 — — ковариантные и контравариантные 347
 — — симметрии 345
 — — сокращенное обозначение 356
 — $6j$ -354
 — — вычисление 359
 — — и группа 360
 — — классический предел 422
 — — симметрии 357
 — $9j$ -363
 Симметрии группа конфигурационного пространства 128
 — группы 79
 — свойства уравнений 217, 237, 246, 247, 373
 Симметрическая группа 81, 132, 150
 — — характеры представлений 167
 Симметричная матрица 31, 41, 124
 — — собственные значения и собственные функции 125
 Симметричные операторы 131, 140, 288, 334
 — — и коммутативность 141
 Скалярное произведение векторов 35

- Скалярное произведение функций 47, 155, 263, 283
 Скалярные операторы 288, 323
 След 17
 Слетера определитель 372
 Сложение векторов и матриц 9, 16, 24
 Смежный класс 76
 — — по инвариантной подгруппе 85
 Смешанно непрерывные группы 109, 111, 121
 Собственные векторы 31
 — — вещественной ортогональной матрицы 41, 172
 — — значения вырожденные 51, 145
 — — и результаты измерений 62
 — — классификация по представлениям групп 145, 209
 — — матрицы 31
 — — оператора 49
 — — расщепление во внутрикристаллических полях 247
 — — — в магнитном поле 242, 317
 — — — — электрическом поле 246, 322
 — — — — при возмущении 146
 — — уравнения Шредингера 49, 382
 — — четные и нечетные 218, 382
 — — функции 46, 50, 63
 — — и классификация по представлениям 126, 143, 209
 — — из трансформационных свойств 250, 276
 — — момента количества движения 186, 254
 — — ортогональность 50, 144
 — — полнота 144
 — — правильные линейные комбинации 210, 226, 242, 306
 — — простейших систем, см. Водорода атом, Гелия ион
 Собственный дифференциал 50
 Сокращенное обозначение $3j$ -символов 356
 Сопряженные элементы группы 74
 Состояние квантовомеханическое 61
 Сочетание преобразований 12
 — симметрий 206
 — — систем 221
 Спектр дискретный и непрерывный 49, 213
 — оператора 49
 Спин 219, 261
 — вероятность направления 273
 Спин и полный момент количества движения 281
 — — представления группы вращений 269
 — — — симметрической группы 156, 168
 — — четность 313
 Спина теория Паули 261
 Спиновые матрицы (Паули), 276
 — операторы 274
 — переменные 155, 262, 302, 308
 — силы 301, 313, 332, 366
 Спин-орбитальное взаимодействие 313, 330
 — спиновое взаимодействие 332, 335
 Спин ядра 282
 Статистическая интерпретация квантовой механики 61
 Субматрицы 29
 Сумм правило для вероятностей переходов 319
 Суперматрицы 28
 Сферическая симметрия s -состояния 253
 Сферические гармоники 186, 253

 Тензорные операторы 289
 — — двусторонние 363
 — — матричные элементы 324
 — — неприводимые 323, 337
 Тензоры и вращения 203
 — неприводимые 288, 323, 337, 363
 Тожественное представление 153, 189
 Тожество группы 74
 Тонкая структура 219, 298, 308
 — — волновые функции 312
 — — компоненты 312
 Тонкой структуры постоянная (Зоммерфельда) 313, 368
 Транспозиция 152
 Транспонированная матрица 33

 Угол вращения 180
 Унитарная матрица 35
 — унитарная группа 192, 287
 — — — гомоморфизм с группой вращений 192
 — — — представления 195
 Унитарное представление 91
 Уровни энергии 43
 Уширение уровней и линий 314

- Фактор-группа 84, 87
 Ферма теорема и теоремы о группах 78
 Физические величины 62
 Физическое истолкование коэффициентов представлений 415, 416
 — — $3j$ -символов 417
 — — $6j$ -символов 422
 Функции ортогональные 46
 — принадлежащие представлению 142
 — — строке представления 136
 Функциональный вектор 46
- Характер представления 102, 142
 — — группы вращений 188, 202
 — — симметрической группы 167
 — — унитарной группы 201
 Характеры и эквивалентность представлений 106
 — нормированные 103
 — ортогональные 102, 123, 188
 — элементов одного класса 103
 Хартри теория экранирования 369
 Хёнля — Кронига формулы для интенсивностей 318, 326, 362
- Циклические группы 78
 Циклы перестановок 150
- Четность 217, 313, 382
 — и орбитальный момент количества движения 258
 — — правила отбора 219, 236
 — — представления группы отражений 218
 Четные уровни 218, 382
 Четыре-группа 79
 Число подразделений 152, 168
 q -числа 43
- Шварца неравенства 56
 Шмидта (Грама—) метод ортогонализации 39
 Шпур, см. След
 Шредингера волновое уравнение 45
 Штарка эффект 237, 244, 319
 Шура лемма 93, 94
- Эйлеровы углы 110
 Эйштейна вероятности перехода 66
 Эквивалентность представлений 90, 106
 Экранирование кулоновского поля 369
 Электрическое квантовое число 246, 322
 Электронный спин 261
 Электрон-электронное взаимодействие 367
 Элементы группы 74
 Энергии уровни 43 (см. также Собственные значения уравнения Шредингера
 — — приближенные 382
 — — простейших систем, см. Водорода атом, Гелия ион
 — — физические и химические свойства атомов 367
 Эпштейна — Шварцшильда теория разделения 43
 Эрмитов оператор 48
 Эрмитова матрица 34, 37
 Эрмитово-сопряженная матрица 34, 36
- Ядерный спин 282
 Якоби полиномы, см. Гипергеометрическая функция

ОГЛАВЛЕНИЕ

От редактора перевода	5
Предисловие автора	7
Глава 1. Векторы и матрицы	9
Линейные преобразования	9
Линейная независимость векторов	19
Глава 2. Обобщения	22
Глава 3. Преобразование к главным осям	30
Специальные матрицы	33
Унитарные матрицы и скалярное произведение	35
Преобразование к главным осям для унитарных и эрмитовых матриц	37
Вещественные ортогональные и симметричные матрицы	41
Глава 4. Элементы квантовой механики	43
Глава 5. Теория возмущений	53
Глава 6. Теория преобразований и основания статистической интерпретации квантовой механики	61
Глава 7. Абстрактная теория групп	73
Теоремы для конечных групп	75
Примеры групп	77
Сопряженные элементы и классы	81
Глава 8. Инвариантные подгруппы	83
Фактор-группа	84
Изоморфизм и гомоморфизм	86
Глава 9. Общая теория представлений	89
Глава 10. Непрерывные группы	108
Глава 11. Представления и собственные функции	124
Глава 12. Алгебра теории представлений	136
Глава 13. Симметрическая группа	150
Приложение. Лемма о симметрической группе	169
Глава 14. Группы вращений	172

Глава 15. Трехмерная группа чистых вращений	185
Сферические гармоники	185
Гомоморфизм двумерной унитарной группы на группу вращений	189
Представления унитарной группы	195
Представления трехмерной группы чистых вращений	201
Глава 16. Представления прямого произведения	206
Глава 17. Характеристики атомных спектров	212
Собственные значения и квантовые числа	212
Модель векторного сложения	221
Приложение. Соотношение между биномиальными коэффициентами	231
Глава 18. Правила отбора и расщепление спектральных линий	233
Глава 19. Частичное определение собственных функций из их трансформационных свойств	250
Глава 20. Спин электрона	261
Физические основы теории Паули	261
Инвариантность описания относительно пространственных вращений	265
Связь с теорией представлений	269
Приложение. Линейность и унитарность операторов вращения	276
Глава 21. Квантовое число полного момента количества движения	281
Глава 22. Тонкая структура спектральных линий	298
Глава 23. Правила отбора и правила интенсивностей при учете спина	316
Формулы Хэнля — Кронига для интенсивностей	326
Формула Ланде	330
Правило интервалов	332
Глава 24. Коэффициенты Рака́	337
Комплексно-сопряженные представления	339
Симметричная форма коэффициентов векторного сложения	343
Ковариантные и контравариантные коэффициенты векторного сложения	347
Коэффициенты Рака́	352
Матричные элементы бесспиновых тензорных операторов	360
Общие двусторонние тензорные операторы	363
Глава 25. Принцип построения	367
Глава 26. Обращение времени	386
Обращение времени и антиунитарные операторы	386
Преобразование собственных функций антиунитарными операторами	395

Приведение копредставлений	398
Нахождение неприводимых копредставлений	403
Следствия инвариантности относительно обращения времени	409
Глава 27. Физическая интерпретация и классические пределы	
коэффициентов представлений $3j$ - и $6j$ -символов	415
Коэффициенты представлений	416
Коэффициенты векторного сложения	417
Коэффициенты Рака	422
Приложение А. Обозначения и определения	424
1. Координаты	424
2. Вращения	425
3. Представления группы вращений и сферические гармоники	426
4. Коэффициенты векторного сложения	427
5. Коэффициенты Рака и $6j$ -символы	427
Приложение Б. Сводка формул	428
Теория возмущений	428
Теория групп	428
Представления и собственные функции	429
Неприводимые представления трехмерной группы вращений	429
Теория спина Паули	430
Неприводимые тензоры	430
Бесконечно малые вращения	431
$3j$ -символы	431
$6j$ -символы	431
Антиунитарные операторы	432
Предметный указатель	433

Е. Вигнер

Т Е О Р И Я Г Р У П П