1956 г. Декабрь *Т. LX, вып. 4*

УСПЕХИ ФИЗИЧЕСКИХ НАУК

МЕТОД ТЕОРИИ ГРУПП В КВАНТОВОЙ ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА *)

(Точечная симметрия)

А. В. Соколов и В. П. Широковский

СОДЕРЖАНИЕ

1. Введение 618
2. Симметрия физических систем и ее связь с теорией групп . . . 620
3. Элементы теории групп 625
4. Основы теории представлений 628
5. Вычисление характеров. Произведение представлений. 632
6. Представления группы вращений 637
7. Бесконечно малые преобразования 644
8. Группа октаэдра 651
9. Применение теории групп в квантовой механике 655
10. Законы сохранения и полный набор физических величин 658
11. Задача атома водорода 663
12. Состояния электрона в кристаллическом поле 667
13. Расщепление атомных термов в кристалле без учета спина . . . 675
14. Расщепление атомных термов в кристалле с учетом спина 679
15. Правила отбора 683
16. Заключение 687

Целью настоящего обзора является изложение основных идей применения метода теории групп к квантовой физике твердого тела в форме, доступной для широкого круга физиков. До сих пор в советской литературе не имелось достаточно систематического изложения этого вопроса. Статья охватывает теоретический материал по точечной симметрии.

---

*) При составлении обзора авторами были использованы как учебная и научная литература, посвященная в той или иной мере вопросам применения теории групп к квантовой физике [1], так и специальная литература по теории групп и теории симметрии [2]. Однако в тексте обзора, как правило, не приводится ссылок на эти монографии, а указываются лишь журнальные источники.

1. ВВЕДЕНИЕ

Уже на заре развития современной квантовой теории выяснилось, что метод теории групп и, в особенности, теория представлений и характеров приобретают огромное значение в квантовой физике. Можно сказать, что в настоящее время нельзя заниматься физикой, не пользуясь в той или иной мере понятием о группе.

Однако в связи с тем, что теория групп и, в частности, теория представлений и характеров группы перестановок, впервые примененные в квантовой механике Вигнером и Нейманом[3], оказались весьма трудными даже для специалистов, появилась реакция, направленная против «групповой чумы» в квантовой механике. Физики (например, Дирак, Слейтер) встретили новые методы с неприязнью. Поэтому существовало и продолжает еще существовать распространенное мнение о том, что аппарат теории групп слишком сложен и тяжеловесен для широкого применения и что все результаты могут быть получены более простыми методами. В настоящее время уже ясно, что такое мнение является необоснованным и вредным.

Для того чтобы распространить результаты, полученные Гейзенбергом для атома гелия, на более сложные многоэлектронные системы, Вигнер и Нейман явно использовали теорию групп. В их исследованиях существенную роль играли перестановки электронов и обменная энергия. Истинной и единственной причиной успеха теории было то, что уравнение Шредингера остается инвариантным при перестановке электронов, т. е. что оно допускает группу перестановок одинаковых частиц. Это было началом ряда замечательных работ, позволивших полно классифицировать атомные спектры и подойти к изучению молекул и химических связей. С тех пор большая часть результатов, найденных с помощью теории групп, была получена другими методами, но эти методы являются не чем иным, как неявными применениями теории групп (теории симметрии), упрощенной принципом Паули.

Вторая серия работ, которой мы обязаны главным образом Вигнеру и Вейлю, показала, что не только группа перестановок играет существенную роль в квантовой физике. В работах этих авторов было установлено, что теория групп имеет принципиальное значение для понимания фундаментальных вопросов квантовой физики. Использование теории групп позволяет формулировать основные положения квантовой теории в самом общем виде, не прибегая ни к каким модельным представлениям.

Применение теории групп в квантовой механике и квантовой теории твердого тела позволяет разобраться в таких вопросах, как проблема вырождения, расщепление термов в кристалле, строго рассмотреть зонную теорию, и другие вопросы, которые с помощью обычных методов исследования или почти невыполнимы, в силу их громоздкости, или не могут быть даны с такой полнотой, как это позволяет сделать теория групп.

Теория групп дает возможность отделить те свойства системы, которые имеют геометрическое или кинематическое происхождение, от ее чисто динамических свойств, зависящих от природы взаимодействия между частицами системы, от вида потенциальной энергии. Только эти последние свойства требуют полного решения волнового уравнения, для остальных же свойств достаточно общего рассмотрения, в котором теория групп играет примерно такую же роль, как в кристаллографии.

Нежелание многих физиков применять простой по существу метод можно объяснить лишь необычностью аппарата и тем, что все имеющиеся монографии, посвященные применению теоретико-групповых методов к квантовой физике, изложены настолько тяжеловесно, что не под силу даже физикам-теоретикам.

Особое значение теория симметрии имеет в физике твердого состояния. Если в атомной физике еще можно обойтись, до некоторой степени, без строгого и последовательно развитого математического аппарата теории групп, то игнорирование последнего при изучении молекул и кристаллов должно с неизбежностью приводить к понижению общего уровня научных исследований в этих областях. Известно, что успехи определенных сторон теории твердого тела зависели от знания теории групп. Например, не решая волнового уравнения многоэлектронной системы кристалла, можно записать общий вид волновой функции системы и получить с ее помощью ряд важных выводов, имеющих принципиальное значение в теории твердого состояния.

Применение теории групп к квантовой физике твердого тела началось по существу с фундаментальной работы Бете[4]. В этой работе произведено теоретическое исследование расщепления полем кристалла уровней, вырожденных в свободном атоме (молекуле). Следующим весьма важным этапом является серия работ Зейтца[5], посвященных теории пространственных групп. В его работах даны основы для нахождения собственных функций, отвечающих симметрии данной пространственной группы, при использовании граничных условий Борна — Кармана. Зейтц показал, что эти функции всегда будут иметь вид блоховских функций. Упомянутыми работами Зейца и фундаментальной работой Боккарта, Смолуховского и Вигнера[6] было положено начало целой серии работ, посвященных зонной теории твердого тела. Боккарт, Смолуховский и Вигнер, пользуясь понятием группы волнового вектора, получили таблицы характеров неприводимых представлений групп симметрии простых решеток, а в работах Херринга и Деринга и Целера[7] этот метод был расширен и применен к более сложным решеткам. Оказывается, что рассмотрение зонной теории с использованием строгого аппарата теории групп позволяет выяснить некоторые тонкие вопросы, которые ускользают из поля зрения при обычных методах рассмотрения. Например, учет не только трансляционной, но и вращательной симметрии кристаллической решетки приводит к смыканию энергетических полос. Такое смыкание может оказать существенное влияние, например, на плотность электронных состояний, интенсивность рентгеновских спектров поглощения и испускания в металле и другие явления.

Следует отметить, что в зарубежной литературе за последние годы значительно увеличилось количество работ, в которых проблемы физики твердого тела решаются методами теории групп. Можно сказать, что теория групп стала рабочим аппаратом зарубежных физиков. Здесь мы упомянем лишь работы Деринга и Целера, Германа, Эллиота, Парментера, Дрессельхауза [8]. В исследованиях этих авторов рассматривается зонная теория атомных полупроводников и, в частности, вопрос о влиянии спин-орбитальной связи на магнитный резонанс в них.

В настоящей статье обсуждаются физические основы применения метода теории групп в квантовой механике и в физике твердого тела. В частности, рассматривается вопрос о законах сохранения и полном наборе физических величин; производится описание электронных состояний в кристаллическом поле. Весьма важная задача о расщеплении атомных термов в кристаллах рассмотрена в двух отдельных параграфах. Наконец, в последнем параграфе даются общие правила отбора.

2. СИММЕТРИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ И ЕЕ СВЯЗЬ С ТЕОРИЕЙ ГРУПП

Хотя рассмотрение физических задач с помощью метода теории групп весьма строго и изящно, но оно обладает тем недостатком, что является абстрактным и трудно обозримым, если не основывается на наглядных геометрических представлениях. Поэтому абстрактному рассмотрению физических систем сопутствуют на протяжении всего изложения геометрические представления.

Все существующие в природе тела обладают определенной симметрией. Различают изотропные тела — газы, жидкости и аморфные твердые тела, в которых физические свойства одинаковы по всем направлениям, и анизотропные тела, физические свойства которых в разных направлениях различны; это — кристаллы. В применении к физике теория групп представляет по существу теорию симметрических свойств физических систем.

Симметрия системы определяется совокупностью тех перемещений, которые совмещают систему саму с собой; об этих перемещениях говорят как об операциях (преобразованиях) симметрии.

Если требуется перевести систему τ из положения τ_1 в положение τ_2, то это можно сделать многими способами. Однако для нашего рассмотрения совершенно не важно, какой путь пройдет система при переходе из положения τ_1 в положение τ_2, а потому все движения, дающие этот переход, рассматриваются как эквивалентные, и из них выбирается простейшее. К числу таких простейших движений относятся: переносы, вращения и винтовые движения. Произвольное движение эквивалентно одному или совокупности нескольких из этих движений.

Вращение в пространстве характеризуется некоторой осью a и углом поворота φ вокруг этой оси. Если тело совмещается само с собой при повороте вокруг оси a на угол $2\pi/n$, то эта ось называется осью симметрии n-го порядка.

Рассмотрим теперь вместе с системой τ систему $\bar{\tau}$, получающуюся из первой путем зеркального отражения в некоторой плоскости σ. Систему и ее зеркальный образ нельзя совместить друг с другом с помощью обычных движений, это можно сделать лишь с привлечением операции зеркального отражения. Если τ_1 — некоторое положение системы τ и $\bar{\tau}_2$ — некоторое положение системы $\bar{\tau}$, то мы можем сначала отразить τ_1 в некоторой плоскости, а затем полученный таким образом зеркальный образ $\bar{\tau}_1$ совместить с $\bar{\tau}_2$ путем движения. Такой процесс называют операцией второго рода в отличие от обычных движений — операций первого рода. К числу простейших операций второго рода относятся отражения, отражения в плоскостях скольжения, зеркально-поворотные преобразования.

Отражение характеризуется некоторой плоскостью σ и обозначается через Σ. Зеркально-поворотное преобразование характеризуется наличием оси a и перпендикулярной к ней плоскости σ. Эта операция состоит из поворота вокруг a на угол φ и последующего отражения в плоскости σ. Говорят, что физическая система обладает зеркально-поворотной осью n-го порядка, если она совмещается сама с собой при повороте вокруг этой оси на угол $2\pi/n$ и последующем отражении в плоскости, перпендикулярной к оси. Для зеркально-поворотного преобразования вводят обозначение $S(\varphi)$.

Если угол поворота зеркально-поворотного преобразования $\varphi = \pi$, то эта операция приводит к инверсии относительно точки пересечения оси a и плоскости σ.

Элементами симметрии называют: центр симметрии, ось симметрии, плоскость симметрии и т. д. Им соответствуют операции симметрии: центру симметрии — инверсия, оси симметрии — поворот, плоскости симметрии — отражение в этой плоскости и т. д.

Обозначим две произвольные операции через M и L. Результат их последовательного применения есть снова некоторая операция N, которую будем называть произведением $LM = N$. Если M и L — обе операции второго рода, то операция M переведет систему из положения τ_1 в положение $\bar{\tau}_2$, а затем операция L переведет ее в положение τ_3. Но всегда можно прямо перевести систему из положения τ_1 в τ_3 при помощи движения. Таким образом, можно утверждать, что если M и L — обе операции второго рода, то их произведение будет операцией первого рода; если же одна из них будет операцией первого, а другая операцией второго рода, то их результирующая будет операцией второго рода.

Поясним определение произведения операций на примере вращений. Обозначим операцию вращения вокруг оси a на угол φ через $A(\varphi)$ и рассмотрим вращения

$$A(\varphi),\ A(2\varphi), \ldots,\ A(k\varphi), \ldots \tag{2,1}$$

Удобно считать, что вращение $A(k\varphi)$ есть результат k-кратного повторного применения вращения $A(\varphi)$. Тогда можно ряд вращений (2,1) символически записать в виде

$$A,\ A^2, \ldots,\ A^k, \ldots, \tag{2,2}$$

полагая $A(k\varphi) = A^k$. В целесообразности таких обозначений нас убеждают следующие рассуждения. Пусть

$$A(h\varphi) = A^h, \quad A(k\varphi) = A^k, \tag{2,3}$$

но тогда должно выполняться равенство

$$A^h \cdot A^k = A^{h+k}, \tag{2,4}$$

что действительно справедливо, так как произведенные друг за другом вращения на углы $k\varphi$ и $h\varphi$ эквивалентны вращению на угол $(h+k)\varphi$.

Употребляемые в кристаллографии углы всегда являются рациональными частями 2π. Пусть, например, $\varphi = 2\pi/3$. Тогда A^2 есть поворот на $4\pi/3$, а A^3 — поворот на 2π. Однако полный оборот эквивалентен повороту на 0, который поэтому необходимо ввести в рассмотрение. Поворот на 0 называют тождественным преобразованием и обозначают его через $A(0)$, A^0, E.

Если произвести вращение вокруг оси a на угол φ в противоположном направлении, то получится операция, обратная к A, которую целесообразно обозначить через A^{-1}. Действительно, применение прямого и обратного вращения дает тождественное преобразование; то же самое получается и на основании действий со степенями

$$A \cdot A^{-1} = E \text{ и вообще } A^k \cdot A^{-k} = E. \tag{2,5}$$

Если под L^{-1} всегда понимать операцию, обратную к L, то имеем:

$$L^{-1} \cdot L = L \cdot L^{-1} = E. \tag{2,6}$$

Легко проверить, что для операций симметрии справедлив ассоциативный закон

$$(L \cdot M) \cdot N = L \cdot (M \cdot N), \tag{2,7}$$

но, вообще говоря, не справедлив коммутативный:

$$L \cdot M \neq M \cdot L. \tag{2,8}$$

Укажем еще ряд важных свойств операций симметрии.

Если мы имеем плоскости σ и σ', образующие друг с другом угол α, и a — линия их пересечения, то легко проверить, что справедливо следующее соотношение:

$$\Sigma \cdot \Sigma' = A\,(2\alpha), \tag{2,9}$$

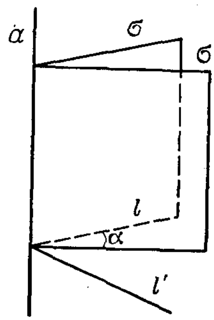

Рис. 1.

т. е. произведение двух отражений есть поворот вокруг линии пересечения отражающих плоскостей, причем угол поворота равен удвоенному углу между плоскостями. Действительно, из рис. 1 видно, что каждая точка прямой a остается неподвижной при обоих отражениях, а потому произведение отражений должно быть поворотом вокруг a. Если теперь l — какая-нибудь перпендикулярная к a прямая плоскости σ, то при отражении в σ она останется неизменной, а при отражении в σ' перейдет в некоторое положение l'. Угол $(\widehat{ll'}) = 2\alpha$ и есть угол поворота.

Если умножить (2,9) слева на Σ или справа на Σ', то, так как

$$\Sigma^2 = E, \tag{2,10}$$

получаем соответственно:

$$\Sigma = A\,(2\alpha)\,\Sigma', \quad \Sigma' = \Sigma A\,(2\alpha), \tag{2,9a}$$

т. е. произведение вращения и отражения, плоскость которого содержит ось вращения, есть снова отражение в плоскости, содержащей эту ось и составляющей с первой плоскостью угол, равный половине угла вращения.

Произведение двух вращений, оси которых пересекаются в некоторой точке O, будет снова вращением вокруг некоторой оси, проходящей через O. Действительно, пусть плоскости σ_1, σ_2, σ_3 образуют трехгранный угол с вершиной в точке O и с ребрами a, b и c. Обозначим углы между плоскостями через $\alpha/2$, $\beta/2$, $\gamma/2$ соответственно. Тогда согласно (2,10) имеем:

$$\Sigma_1\Sigma_3\Sigma_3\Sigma_2\Sigma_2\Sigma_1 = E,$$

но по (2,9)

$$\Sigma_1\Sigma_3 = C(\gamma),\ \Sigma_3\Sigma_2 = B(\beta),\ \Sigma_2\Sigma_1 = A(\alpha)$$

и, следовательно,

$$C(\gamma)\,B(\beta)\,A(\alpha) = E.$$

Умножая последнее равенство на $C^{-1}(\gamma)$ и учитывая (2,6), находим:

$$B(\beta)\,A(\alpha) = C^{-1}(\gamma). \qquad (2,11)$$

Важен следующий частный случай: произведение двух поворотов U и V на π, оси которых u и v пересекаются в некоторой точке O, будет снова вращением вокруг некоторой оси a, проходящей через точку O перпендикулярно к осям u и v, причем угол поворота будет равен удвоенному углу между осями. Действительно, из рис. 2 видно, что при повороте вокруг оси u на π ось a перевернется, а при повороте вокруг оси v снова вернется в начальное положение. Это означает, что ось a при результирующем повороте останется неподвижной и, следовательно, является осью поворота, т. е. произведение операций есть поворот вокруг оси a. Его величину легко определить, заметив, что при операции U ось u остается неподвижной, а при операции V переходит в положение u'. Следовательно, окончательно имеем:

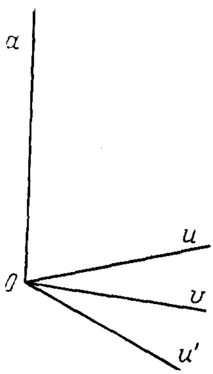

Рис. 2.

$$U\cdot V = A(2\widehat{uv}). \qquad (2,12)$$

Операции M и L называются перестановочными, если справедливо равенство

$$LM = ML.$$

В частности, перестановочными операциями являются:

1. Отражение и вращение вокруг перпендикулярной к плоскости отражения оси.

2. Поворот на π вокруг пересекающихся под прямым углом осей.

3. Отражения в двух перпендикулярных друг к другу плоскостях.

4. Инверсия перестановочна с любой операцией.

Совокупность всех операций симметрии данной физической системы называют ее группой симметрии. Изучение групп симметрии рационально производить с помощью общего аппарата теории групп.

3. ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ ГРУПП

Пусть имеется конечная или бесконечная совокупность $\mathfrak{G}$ элементов g_1, $g_2, \ldots g_k, \ldots$ Эта совокупность образует группу, если соблюдаются следующие условия:

1. Произведение $(g_i g_j)$ двух любых элементов совокупности, взятых в определенном порядке, является элементом той же совокупности $(g_i g_j) = g_k$.

2. В совокупность $\mathfrak{G}$ входит элемент e, удовлетворяющий соотношению

$$e g_k = g_k e = g_k,$$

называемый единичным.

3. Всякому элементу g_k совокупности $\mathfrak{G}$ соответствует в той же совокупности другой элемент g_k^{-1}, определяемый соотношением

$$g_k^{-1} g_k = g_k g_k^{-1} = e,$$

называемый обратным.

4. Произведение элементов подчиняется ассоциативному закону:

$$(g_i g_j) g_k = g_i (g_j g_k).$$

Коммутативный закон, вообще говоря, не имеет места, т. е. в общем случае

$$g_i g_j \neq g_j g_i.$$

Элемент, обратный произведению $g_i g_j$, равен

$$(g_i g_j)^{-1} = g_j^{-1} g_i^{-1}, \tag{3,1}$$

что легко доказать на основании третьего условия.

Если число g элементов группы $\mathfrak{G}$ конечно, то группу называют конечной и говорят, что ее порядок равен g. Если для какого-нибудь элемента группы $\mathfrak{G}$ справедливо равенство $g_k^n = e$, причем n — наименьшая степень, удовлетворяющая этому равенству, то n называют порядком элемента g_k.

Когда все элементы группы перестановочны между собой, то группу называют коммутативной (абелевой), в противном случае некоммутативной (неабелевой). Частным случаем абелевых групп являются циклические группы. Циклической называют группу, все элементы которой могут быть получены путем последовательного возведения в степень одного из них, т. е.

$$a,\ a^2, \ldots a^n = e.$$

Можно показать, что если $\mathfrak{G}$ — группа, а g_k — один из ее элементов, то имеет место соотношение $g_k \mathfrak{G} = \mathfrak{G}$.

Совокупность $\mathfrak{H}$, составленную из произвольного числа элементов группы $\mathfrak{G}$, называют подгруппой группы $\mathfrak{G}$, если эта совокупность сама является группой относительно операции, определенной в $\mathfrak{G}$. Число элементов h этой подгруппы называют порядком подгруппы $\mathfrak{H}$. Можно показать, что порядок подгруппы есть делитель порядка всей группы

$$g = hm. \tag{3,2}$$

Элементы g_i и g_j группы $\mathfrak{G}$ называются сопряженными в этой группе, если в $\mathfrak{G}$ имеется хотя бы один такой элемент g_k, что выполняется равенство

$$g_j = g_k g_i g_k^{-1}. \tag{3,3}$$

Геометрически к понятию сопряженных элементов можно подойти следующим образом. Рассмотрим операцию A (поворот) с элементом симметрии a (ось поворота) и операцию B с элементом симметрии b, а также операцию Q, которая преобразует элемент симметрии a в b. Покажем, что операция B является сопряженной к A, т. е.

$$B = QAQ^{-1}. \tag{3,4}$$

В то время как этот результат является общим, мы ограничимся при доказательстве случаем, когда A есть вращение $A = A(\varphi)$. Покажем, что B есть вращение. Для этого рассмотрим действие операции QAQ^{-1} на элемент b. Так как Q преобразует a в b, то Q^{-1} преобразует b в a. Действие операции A на результат будет оставлять его неизменным и, наконец, Q будет преобразовывать его снова в b. Так как результирующее вращение QAQ^{-1} оставляет b неизменным, то элемент симметрии b является осью вращения. Легко понять, что угол вращения вокруг оси b также должен быть равен φ. Таким образом, два поворота на одинаковый угол относятся к одному классу, если в числе элементов группы имеется операция, с помощью которой можно совместить одну ось поворота с другой. Точно так же два отражения в различных плоскостях относятся к одному классу, если какая-либо операция группы переводит одну плоскость в другую. О самих осях и плоскостях симметрии, направления которых могут быть совмещены друг с другом, говорят как об эквивалентных.

Если элемент g_j группы $\mathfrak{H}$ сопряжен с элементом g_i, то элемент g_i сопряжен с элементом g_j. Действительно, из (3,3) следует, если умножить справа на g_k, а слева на g_k^{-1}, то

$$g_i = g_k^{-1} g_j g_k,$$

т. е. g_i получается из g_j трансформированием элемента g_k^{-1}. Всякий элемент g_k сопряжен с самим собой, так как $g_k = e g_k e^{-1}$. Наконец, если

$$g_j = g_k g_i g_k^{-1} \text{ и } g_l = g_m g_j g_m^{-1},$$

то

$$g_l = (g_m g_k) g_i (g_m g_k)^{-1},$$

т. е. свойство сопряженности элементов транзитивно. Отсюда следует, что всякая группа $\mathfrak{G}$ распадается на непересекающиеся совокупности сопряженных элементов или, как говорят, на классы сопряженных элементов. Для абелевых групп каждый элемент составляет сам по себе класс, так как всегда справедливо $a_k a_i a_k^{-1} = a_i$. Единичный элемент составляет сам по себе класс в любой группе.

Произведение *) $K_i K_j$ двух классов сопряженных элементов K_i и K_j группы $\mathfrak{G}$ состоит из нескольких классов сопряженных элементов. Действительно, если g_i принадлежит K_i и g_j принадлежит K_j, то $K_i K_j$ состоит из элементов $g_i g_j$. Рассмотрим элементы, сопряженные $g_i g_j$:

$$g_k (g_i g_j) g_k^{-1} = (g_k g_i g_k^{-1})(g_k g_j g_k^{-1}),$$

т. е. всякий элемент, сопряженный с элементом $g_i g_j$ из $K_i K_j$, уже содержится в этом произведении. Значит, произведение $K_i K_j$ вместе со всяким элементом содержит и все сопряженные ему, а следовательно, и целиком весь соответствующий класс. Поэтому окончательно имеем:

$$K_i K_j = \sum_{k=1} c_{ijk} K_k . \tag{3,5}$$

Это равенство и выражает тот факт, что произведение двух классов сопряженных элементов будет состоять из совокупности некоторого числа классов сопряженных элементов.

Подгруппы $\mathfrak{H}$ и $g_k \mathfrak{H} g_k^{-1}$ группы $\mathfrak{G}$ будем называть сопряженными подгруппами. Подобно тому как группа распадается на классы сопряженных элементов, так совокупность всех подгрупп группы $\mathfrak{G}$ распадается на непересекающиеся классы сопряженных подгрупп.

Подгруппа, совпадающая со своей сопряженной, называется нормальным делителем или инвариантной подгруппой группы $\mathfrak{G}$. Следовательно, если подгруппа $\mathfrak{N}$ есть нормальный делитель, то для каждого элемента g_k группы $\mathfrak{G}$ имеют место равенства

$$g_k \mathfrak{N} g_k^{-1} = \mathfrak{N} \text{ или } g_k \mathfrak{N} = \mathfrak{N} g_k. \tag{3,6}$$

Таким образом, нормальный делитель коммутирует с любым элементом группы. Если n_i принадлежит нормальному делителю $\mathfrak{N}$, то всякий сопряженный элемент $g_k n_i g_k^{-1}$ также принадлежит $\mathfrak{N}$, т. е.

---

*) Под произведением $K_i K_j$ классов следует понимать результат умножения каждого из элементов K_i на каждый из элементов K_j.

нормальный делитель содержит весь соответствующий элементу n_i класс. Действительно, если n_i принадлежит $\mathfrak{N}$, то $n_i \mathfrak{N} = \mathfrak{N}$. Трансформируем это равенство и, воспользовавшись (3,6), находим:

$$g_k n_i \mathfrak{N} g_k^{-1} = g_k n_i g_k^{-1} \mathfrak{N} = \mathfrak{N}.$$

Следовательно, элемент $g_k n_i g_k^{-1}$ принадлежит $\mathfrak{N}$. Это условие одновременно является и достаточным для того, чтобы подгруппа была нормальным делителем.

Введем еще следующие определения.

1. Пусть $\mathfrak{M}$ — произвольная совокупность из некоторого числа элементов группы $\mathfrak{G}$. Подгруппа, состоящая из всех элементов группы, равных произведениям конечного числа степеней совокупности $\mathfrak{M}$, называется подгруппой, порожденной совокупностью $\mathfrak{M}$, и обозначается через $\{\mathfrak{M}\}$.

2. Группа $\mathfrak{G}$ называется прямым произведением своих подгрупп $\mathfrak{H}_1, \mathfrak{H}_2, \ldots, \mathfrak{H}_n$, если выполнены следующие требования: а) элементы любых двух подгрупп $\mathfrak{H}_i$ и $\mathfrak{H}_j$ при $i \neq j$ перестановочны между собой; б) всякий элемент g_k из $\mathfrak{G}$ однозначно представляется в виде произведения

$$g_k = h_1 h_2 \ldots h_n,$$

где h_i — элемент $\mathfrak{H}$ при $i = 1, 2, \ldots, n$. Прямое произведение обычно обозначают через

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{H}_1 \times \mathfrak{H}_2 \times \ldots \times \mathfrak{H}_n.$$

4. ОСНОВЫ ТЕОРИИ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Элементам группы можно сопоставить некоторые конкретные образы, в частности матрицы 1, 2, ... порядков. Например, тождественному преобразованию, инверсии и отражению в плоскости, перпендикулярной к оси z, соответствуют преобразования координат

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix},$$

что в матричной форме запишется в виде

$$\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix},$$

$$\begin{pmatrix} -x \\ -y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} x \\ y \\ -z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}.$$

Таким образом, можно говорить, что операции симметрии представлены через матрицы третьего порядка:

$$E=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{pmatrix},\quad I=\begin{pmatrix}-1&0&0\\0&-1&0\\0&0&-1\end{pmatrix},\quad \Sigma_z=\begin{pmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&-1\end{pmatrix}.$$

В общем случае элементы группы можно представлять матрицами более высокого порядка.

Линейными подстановками с n переменными называются преобразования вида

$$\left.\begin{aligned}y_1&=a_{11}x_1+\ldots+a_{1n}x_n,\\ &\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\ y_n&=a_{n1}x_1+\ldots+a_{nn}x_n,\end{aligned}\right\}\tag{4,1}$$

или сокращенно

$$\mathbf{y}=A\mathbf{x}.\tag{4,1a}$$

Подстановка полностью определяется матрицей коэффициентов

$$A=\begin{pmatrix}a_{11}\ldots a_{1n}\\ \ldots\ldots\\ \ldots\ldots\\ a_{n1}\ldots a_{nn}\end{pmatrix}.\tag{4,2}$$

Поэтому, говоря о линейных подстановках, мы фактически говорим об их матрицах, так как совершенно не важно, какой смысл приписывается величинам $\mathbf{x}$.

Под произведением двух подстановок будем понимать результат их последовательного применения. Если к величинам $\mathbf{x}$ применить подстановку A, переводящую их в $\mathbf{y}$, а затем к получившимся величинам $\mathbf{y}$ — подстановку B, переводящую их в $\mathbf{z}$, то операция C, переводящая $\mathbf{x}$ в $\mathbf{z}$, будет равна BA. Это означает, что определенное таким способом произведение подстановок приводит в матричных образах к перемножению их матриц. Очевидно, что эта операция подчиняется ассоциативному закону. Далее, пусть подстановка A переводит величины $\mathbf{x}$ в $\mathbf{y}$. Тогда обратной подстановкой будет подстановка, переводящая $\mathbf{y}$ в $\mathbf{x}$, и ее матрица равна A^{-1}. Эта матрица существует только в том случае, когда A неособенная, т. е. $\mathrm{Det}\,A\neq 0$. Наконец, всегда существует тождественная подстановка с единичной матрицей. Таким образом, совокупность всех неособенных линейных подстановок данной размерности образует группу, называемую группой линейных подстановок Γ.

Если матрицы A и B связаны соотношением $B = QAQ^{-1}$, то говорят, что B получается из A трансформированием Q. Группу линейных подстановок Γ', получающуюся из другой группы линейных подстановок Γ трансформированием некоторой неособенной матрицей, будем называть эквивалентной с Γ. Об эквивалентных группах будем говорить как о равноценных и рассматривать только одну из них.

Если все матрицы группы подстановок унитарны (ортогональны), то группу называют унитарной (ортогональной) группой подстановок. Можно показать, что всякая конечная (вещественная) группа подстановок эквивалентна унитарной (ортогональной) группе подстановок.

Группа подстановок называется приводимой, если ее можно преобразовать так, чтобы все ее матрицы имели вид

$$A = \begin{pmatrix} A_1 & 0 \\ 0 & A_2 \end{pmatrix}. \tag{4,3}$$

Такая группа определяется своими составляющими частями:

$$\Gamma_1 = E_1,\ A_1,\ B_1,\ \ldots;$$

$$\Gamma_2 = E_2,\ A_2,\ B_2, \ldots$$

То обстоятельство, что Γ указанным способом преобразуется в приводимую группу, выражается равенством

$$\Gamma = \Gamma_1 + \Gamma_2.$$

В общем случае, если Γ можно привести так, что составляющие Γ_k каждая встречается n_k раз, то пишут:

$$\Gamma = n_1\Gamma_1 + \ldots + n_k\Gamma_k + \ldots \tag{4,4}$$

Γ_k в свою очередь могут разлагаться дальше, но в конце концов приходят к таким составляющим частям, которые не поддаются дальнейшему приведению. Такие группы подстановок называются неприводимыми. Общий результат можно сформулировать следующим образом: каждая конечная группа подстановок или неприводима, или полностью приводима к сумме неприводимых групп.

Пусть имеется группа $\mathfrak{G}$ и пусть каждому ее элементу g_k поставлена в соответствие из некоторой совокупности матриц степени n матрица $A(g_k)$ так, что для любых g_i и g_j из $\mathfrak{G}$ справедливо равенство

$$A(g_i g_j) = A(g_i) \cdot A(g_j). \tag{4,5}$$

Очевидно, в этом случае совокупность матриц степени n образует группу. Будем говорить, что эта группа линейных подстановок образует n-мерное представление группы $\mathfrak{G}$, а переменные, которые преобразуюся согласно указанным матрицам, станем называть базисом представления. В случае, если группа линейных подстановок неприводима, представление называют неприводимым; в противном случае — приводимым. Заметим, что разложение представления на неприводимые части означает, что пространство базисных векторов разбивается на подпространства, каждое из которых при преобразованиях группы преобразуется само в себя. Очевидное одномерное представление группы мы получим, сопоставляя каждому элементу g_k одномерную единичную матрицу, т. е. просто число 1. Это представление называется единичным.

Без вывода запишем соотношения ортогональности для матричных элементов двух неприводимых представлений, считая (что всегда возможно) представления унитарными:

$$\sum_{g_k} a_{\varkappa\lambda}(g_k)\, b^*_{\nu\mu}(g_k) = \begin{cases} 0, & A(g_k)\,\Phi\,B(g_k) \\ \frac{g}{n}\delta_{\varkappa\nu}\delta_{\lambda\mu}, & A(g_k) = B(g_k). \end{cases} \tag{4,6}$$

Сумму диагональных элементов матрицы $A(g_k)$ в некотором неприводимом представлении называют характером элемента g_k в этом представлении и пишут $X(g_k)$. Сопряженные элементы группы имеют одинаковые характеры. Следовательно, характеры являются функциями классов сопряженных элементов, поэтому их часто обозначают через $X_j^{(m)}$, где верхний значок показывает номер представления, а нижний — номер класса.

Между системами характеров неприводимых представлений существуют следующие соотношения ортогональности:

$$\sum_{g_k} X^{(m)}(g_k)\, X^{(l)}(g_k) = g\delta_{ml}. \tag{4,7}$$

Оно легко получается из соотношения (4,6), если в нем положить $\varkappa = \lambda$, $\nu = \mu$ и просуммировать по λ и μ.

На основании формул (4,4) и (4,7) можно показать, что необходимое и достаточное условие эквивалентности двух неприводимых представлений состоит в равенстве их систем характеров.

Приводимое представление группы $\mathfrak{G}$ единственным образом разбивается на сумму неприводимых представлений. Действительно, пусть

$$\Gamma = a_1\Gamma_1 + \ldots + a_r\Gamma_r = b_1\Gamma_1 + \ldots + b_r\Gamma_r.$$

Обозначим характер Γ через X, тогда для каждого элемента группы имеет место равенство

$$\mathrm{X} = a_1 \mathrm{X}^{(1)} + \ldots + a_r \mathrm{X}^{(r)} = b_1 \mathrm{X}^{(1)} + \ldots + b_r \mathrm{X}^{(r)}.$$

Отсюда по формуле (4,7) получаем:

$$\sum_{g_k} \mathrm{X}(g_k)\, \mathrm{X}^{(m)}(g_k) = a_m g = b_m g$$

и, следовательно, $a_m = b_m$.

Источником, из которого получаются все неприводимые представления группы, является представление с помощью регулярной группы подстановок. Такое представление можно построить, если в качестве базисных векторов взять элементы группы, расположенные в определенном порядке, а каждому элементу группы сопоставлять матрицу, осуществляющую ту же перестановку элементов, которая происходит при умножении группы на данный элемент. В этом представлении

$$\mathrm{X}(e) = g, \quad \mathrm{X}(g_k) = 0. \tag{4,8}$$

Обозначим регулярное представление через Π и разложим его на неприводимые составляющие:

$$\Pi = n_1 \Gamma_1 + \ldots + n_r \Gamma_r.$$

Приравнивая характеры обеих частей этого равенства и учитывая (4,8), получим:

$$\sum_{k=1}^{r} n_k \mathrm{X}^{(k)}(g_i) = g \delta g_i e.$$

Умножая это равенство на $\mathrm{X}^{(l)*}(g_i)$ и суммируя по всем элементам $\mathfrak{G}$, согласно (4,7), находим:

$$n_l = \mathrm{X}^{(l)}(e). \tag{4,9}$$

Таким образом, регулярное представление группы содержит каждое неприводимое представление столько раз, какова его размерность.

Можно показать, что число различных неприводимых представлений группы равно числу классов сопряженных элементов r.

5. ВЫЧИСЛЕНИЕ ХАРАКТЕРОВ. ПРОИЗВЕДЕНИЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ

Знание строя абстрактной группы позволяет вычислить все r систем простых характеров. Для этого можно воспользоваться умножением классов. Нам уже известно, что имеют место соотношения (3,5)

$$K_i K_j = \sum_{k=1}^{r} c_{ijk} K_k.$$

Рассмотрим теперь для какого-нибудь представления матрицу, равную сумме матриц всех элементов класса K_i, и обозначим ее через $M_i^{(m)}$. Тогда будем иметь:

$$M_i^{(m)} M_j^{(m)} = \sum_{k=1}^{r} c_{ijk} M_k^{(m)}. \tag{5,1}$$

Заметим еще, что матрица $M_i^{(m)}$ перестановочна со всеми элементами неприводимого представления, а следовательно, должна быть скалярной, т. е.

$$M_i^{(m)} = x_i^{(m)} E_{n_m}.$$

Если h_i — порядок K_i, то, очевидно,

$$\mathrm{X}\left(M_i^{(m)}\right) = h_i \mathrm{X}_i^{(m)}.$$

С другой стороны,

$$\mathrm{X}\left(M_i^{(m)}\right) = x_i^{(m)} n_m,$$

откуда

$$\frac{x_i^{(m)}}{h_i} = \frac{\mathrm{X}_i^{(m)}}{n_m}. \tag{5,2}$$

Равенство (5,1) равносильно следующему:

$$x_i^{(m)} x_j^{(m)} = \sum_{k=1}^{r} c_{ijk} x_k^{(m)}. \tag{5,3}$$

Тогда получается система r уравнений:

$$\left.\begin{array}{l} x_i^{(m)} x_1^{(m)} = \sum\limits_{k=1}^{r} c_{i1k} x_k^{(m)}, \\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\ x_i^{(m)} x_r^{(m)} = \sum\limits_{k=1}^{r} c_{irk} x_k^{(m)}. \end{array}\right\} \tag{5,4}$$

Из чисел $x_i^{(m)}$ по крайней мере $x_1^{(m)} \neq 0$, но эта система имеет отличные от нуля решения относительно $x_1^{(m)} \ldots x_r^{(m)}$ только при условии

$$\begin{vmatrix} c_{i11} - x_i & c_{i12} & \ldots & c_{i1r} \\ c_{i21} & c_{i22} - x_i & \ldots & c_{i2r} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ c_{ir1} & c_{ir2} & \ldots & c_{irr} - x_i \end{vmatrix} = 0. \tag{5,5}$$

Числа c_{ijk} все известны, если мы знаем строй группы, следовательно, это уравнение дает возможность найти все r значений числа $x_i^{(m)}$. Порядки классов h также известны из строя группы, так что после решения уравнений (5,5) для всех i найдены числа $X_i^{(m)}/n_m$. Затем из формулы (4,7) теории характеров, которую можно записать в виде

$$\sum_{k=1}^{r} \frac{X_k^{(m)}}{n_m} \frac{X_k^{(m)*}}{n_m} = \frac{g}{n_m^2},$$

определяем n_m и, наконец, окончательно находим $X_i^{(m)}$.

Заметим еще, что размерности неприводимых представлений n_m часто можно найти более простым путем. Из формул (4,8) и (4,9) получаем:

$$\sum_{m=1}^{r} X^{(m)}(e) X^{(m)}(g_k) = g\delta_{g_k e}$$

или, вспомнив, что $X^{(m)}(e) = n_m$, будем иметь:

$$n_1^2 + n_2^2 + \ldots + n_r^2 = g. \tag{5,6}$$

Следовательно, если мы сможем показать, что порядок группы g разбивается единственным образом на сумму заданного числа квадратов целых чисел, то мы фактически найдем размерности представлений.

При рассмотрении некоторых задач квантовой физики (например, сложение моментов, правила отбора и других) весьма важно знать свойства произведения представлений.

Введем понятие прямого произведения представлений группы $\mathfrak{G}$. Рассмотрим два базиса $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ неприводимых представлений A и B с составляющими $x_1 \ldots x_n$ и $y_1 \ldots y_m$ соответственно. Приведем в соответствие этим векторам другой вектор $\mathbf{z}$, составляющие которого являются произведениями $x_i y_j$ $(i = 1 \ldots n,\ j = 1 \ldots m)$. Тогда получается система из nm новых величин, которые могут служить базисом для некоторого нового представления размерности nm. С помощью базиса этого представления можно определить новое преобразование C

$$\mathbf{z} = C\mathbf{z}', \tag{5,7}$$

являющееся следствием исходных преобразований

$$\mathbf{x} = A\mathbf{x}', \quad \mathbf{y} = B\mathbf{y}'. \tag{5,8}$$

Так как преобразования (5,8) в составляющих можно представить в виде

$$x_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik}x'_k,$$

$$y_j = \sum_{l=1}^{m} b_{jl}y'_l, \tag{5,8a}$$

то имеем:

$$x_i y_j = \sum_{k,l} a_{ik}b_{jl}x'_k y'_l$$

и, следовательно, коэффициент перед $x'_k y'_l$

$$a_{ik}b_{jl} = c_{ij,\,kl} \tag{5,9}$$

будет элементом матрицы C, находящимся на пересечении строки ij и колонки kl. Эта матрица порядка nm называется прямым (кронекеровским) произведением исходных и записывается в виде

$$C = A \times B.$$

Поэтому представление, базисом которого служат составляющие $\mathbf{z}$, называют прямым произведением исходных представлений.

Характер представления, являющегося прямым произведением двух других, равен произведению характеров обоих сомножителей:

$$\mathrm{X}(C) = \sum_{ij} C_{ij,\,ij} = \sum_{ij} a_{ii}b_{jj} = \sum_{i} a_{ii} \sum_{j} b_{jj} = \mathrm{X}(A)\,\mathrm{X}(B). \tag{5,10}$$

Полученное представление будет, вообще говоря, приводимым; оно неприводимо лишь в случае, когда одно из исходных представлений одномерно.

Оба перемножаемых неприводимых представления могут, в частности, совпадать. Тогда следует различать два случая: когда базисы $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ различны и когда они совпадают.

Пусть мы имеем два различных базиса $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$, осуществляющих одно и то же представление Γ. Прямое произведение представления самого на себя $\Gamma \times \Gamma$ имеет базис из n^2 величин $x_i y_j$ и его характеры определяются по формуле

$$\mathrm{X}(A \times A) = [\mathrm{X}(A)]^2.$$

Это представление, как мы уже указывали, будет приводимым. Частичное приведение может быть выполнено сразу. Одно из представлений, на которые разбивается данное, будет осуществляться $n(n+1)/2$ величинами $x_i y_j + x_j y_i$, а другое $n(n-1)/2$ величинами вида $x_i y_j - x_j y_i$ (нетрудно понять, что величины каждого из этих наборов преобразуются только друг через друга). Первое произведение называется симметрическим произведением представления самого на себя, и его характеры обозначаются через $[\mathrm{X}^2]$, а второе — антисимметрическим произведением, и его характеры обозначаются через $\{\mathrm{X}^2\}$.

Легко определить характеры симметрического произведения. Действительно,

$$\begin{aligned} A(x_i y_j + x_j y_i) &= \sum_k a_{ik} x_k \sum_l a_{jl} y_l + \sum_m a_{jm} x_m \sum_h a_{ih} y_h = \\ &= \sum_{k,l} a_{ik} a_{jl} x_k y_l + \sum_{m,h} a_{jm} a_{ih} x_m y_h = \\ &= \sum_{k,l} (a_{ik} a_{jl} + a_{jk} a_{il}) x_k y_l = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{k,l} (a_{ik} a_{jl} + a_{jk} a_{il}) \cdot (x_k y_l + x_l y_k). \end{aligned}$$

Отсюда для характера имеем:

$$[\mathrm{X}^2](A) = \frac{1}{2} \sum_{i,j} (a_{ii} a_{jj} + a_{ij} a_{ji}).$$

Но так как

$$\sum_i a_{ii} = \mathrm{X}(A), \qquad \sum_{i,j} a_{ij} a_{ji} = \mathrm{X}(A^2),$$

то окончательно получаем формулу

$$[\mathrm{X}^2](A) = \frac{1}{2} \{[\mathrm{X}(A)]^2 + \mathrm{X}(A^2)\}, \tag{5,11}$$

позволяющую определить характеры симметрического произведения представления самого на себя по характерам исходного представления. Совершенно аналогичным образом найдем для характеров антисимметрического произведения формулу

$$\{\mathrm{X}^2\}(A) = \frac{1}{2}\{[\mathrm{X}(A)]^2 - \mathrm{X}(A^2)\}. \tag{5,12}$$

Если же наборы **x** и **y** совпадают, то можно определить лишь симметрическое произведение.

Теперь можно указать еще один способ получения неприводимых представлений и их характеров, который часто оказывается полезным. Пусть группа $\mathfrak{G}$ является прямым произведением двух групп $\mathfrak{A}$ и $\mathfrak{B}$:

$$\mathfrak{G} = \mathfrak{A} \times \mathfrak{B}.$$

Пусть неприводимые представления $\mathfrak{A}$ будут $A_1, A_2, \ldots, A_p$, а группы $\mathfrak{B}$ будут $B_1, B_2, \ldots, B_q$. Тогда мы получим все неприводимые представления группы $\mathfrak{G}$, умножая прямым образом каждое представление $\mathfrak{A}$ на каждое представление $\mathfrak{B}$, т. е. образуя произведения

$$\Gamma_k = A_m \times B_n. \tag{5,13}$$

Характер элемента $g_{ij} = a_i b_j$ определяется по формуле

$$\mathrm{X}^{(k)}(g_{ij}) = \mathrm{X}^{(m)}(a_i)\,\mathrm{X}^{(n)}(b_j). \tag{5,14}$$

6. ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУППЫ ВРАЩЕНИЙ

Некоторые физические системы, например атом водорода, совпадают сами с собой при повороте на любой угол относительно оси, проходящей через некоторую фиксированную точку в произвольном направлении. Иначе говоря, их группой симметрии является группа вращений вокруг закрепленного центра. Элементы группы вращений определяются значениями трех параметров, два из которых задают направление оси поворота, а третий — угол поворота вокруг этой оси. Поэтому группу вращений называют трехпараметрической.

Отыскание всех представлений группы вращений сводится к тому, чтобы привести в соответствие ее преобразованиям некоторые матрицы унитарной группы, зависящей от трех параметров.

Примером группы, представляющей группу вращений, является унимодулярная группа преобразований $\mathfrak{U}_2$ двух комплексных переменных, операции которой имеют вид

$$\Delta = \begin{cases} \xi' = \alpha\xi + \beta\eta, \\ \eta' = -\beta^*\xi + \alpha^*\eta. \end{cases} \tag{6,1}$$

Она получается из группы всевозможных отображений двумерного комплексного пространства самого на себя:

$$\xi' = \alpha\xi + \beta\eta, \quad \eta' = \gamma\xi + \delta\eta, \qquad \Delta = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}, \tag{6,2}$$

если на матрицы преобразования наложить условие унимодулярности, т. е. потребовать, чтобы Δ была унитарной и имело место

$$\operatorname{Det} \Delta = 1. \tag{6,3}$$

Действительно, для того чтобы преобразование Δ было унитарным, должно выполняться условие

$$\Delta^{-1} = \tilde{\Delta}^*, \tag{6,4}$$

где $\tilde{\Delta}$ означает матрицу, транспонированную к Δ. Используя (6,3) и (6,4), нетрудно показать, что $\delta = \alpha^*$ и $\gamma = -\beta^*$, т. е., действительно, преобразование Δ может быть представлено в виде

$$\Delta = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\beta^* & \alpha^* \end{pmatrix} \tag{6,5}$$

с дополнительным условием $\alpha\alpha^* + \beta\beta^* = 1$, вытекающим из (6,3) и сводящим число независимых переменных от четырех к трем.

С помощью стереографической проекции можно показать, как сопоставить всякому вращению A (элементу группы вращений) некоторое преобразование Δ с вполне определенными коэффициентами α и β.

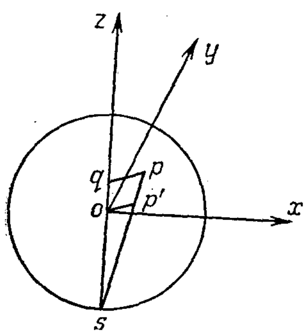

Рис. 3.

Рассмотрим трехмерное пространство с координатными осями x, y, z и сферу $\mathfrak{C}$ с центром в начале координат и радиусом, равным единице (рис. 3). Пусть координаты полюса s будут 0, 0, -1 и p — переменная точка на сфере. Прямая sp пересечет плоскость xy в некоторой точке p', и мы имеем, таким образом, вполне определенное соответствие между точками сферы $\mathfrak{C}$ и точками плоскости xy, причем точке сферы s соответствует бесконечно удаленная точка плоскости. Установленное соответствие точек и дает нам стереографическую проекцию сферы на плоскость.

Выведем формулы, дающие стереографическую проекцию. Пусть pq — перпендикуляр из точки p на ось z. Из подобия треугольников имеем $qp/op' = qs/os = 1 + oq/1$, так как $os = 1$, и тогда

$qp = (1 + oq)\, op'$. Обозначив через (xyz) координаты точки p и через $(x'y')$ координаты точки p', можем написать:

$$qp = (1 + z)\, op'.$$

Проектируя параллельные отрезки op' и qp на оси x и y, получим:

$$\begin{aligned} x &= (1 + z)\, x', \\ y &= (1 + z)\, y'. \end{aligned} \tag{6,6}$$

Уравнение сферы дает нам квадратное уравнение для z, решая которое, находим:

$$z = \frac{\pm 1 - (x'^2 + y'^2)}{1 + (x'^2 + y'^2)}. \tag{6,7}$$

Но для всех точек $(x'y')$ на конечном расстоянии имеем $z > -1$ и, следовательно, в (6,7) следует брать знак $+$. Пользуясь еще (6,6), получим выражение (xyz) через $(x'y')$:

$$x = \frac{2x'}{1 + x'^2 + y'^2}, \quad y = \frac{2y'}{1 + x'^2 + y'^2}, \quad z = \frac{1 - (x'^2 + y'^2)}{1 + x'^2 + y'^2}. \tag{6,8}$$

Введем комплексную координату

$$\zeta = x' + iy'.$$

Тогда (6,8) можно представить в виде

$$x + iy = \frac{2\zeta}{1 + \zeta\zeta^*}, \quad x - iy = \frac{2\zeta^*}{1 + \zeta\zeta^*}, \quad z = \frac{1 - \zeta\zeta^*}{1 + \zeta\zeta^*}. \tag{6,9}$$

Наконец, выбрав однородные комплексные координаты ξ и η такие, что $\zeta = \eta/\xi$, и подчиняющиеся условию

$$\xi\xi^* + \eta\eta^* = 1, \tag{6,10}$$

получим:

$$x = \eta\xi^* + \xi\eta^*, \quad y = -i(\eta\xi^* - \xi\eta^*), \quad z = \xi\xi^* - \eta\eta^*. \tag{6,11}$$

Всякой паре чисел ξ, η соответствует точка на сфере, так как согласно (6,11) равенство (6,10) эквивалентно $x^2 + y^2 + z^2 = 1$. При всяком унитарном преобразовании должно быть

$$\xi'\xi'^* + \eta'\eta'^* = \xi\xi^* + \eta\eta^*,$$

и следовательно, точка сферы преобразуется в точку сферы. Легко убедиться в том, что при этом сохраняются углы между радиусами-векторами, проведенными из центра o к различным точкам сферы. Следовательно, мы имеем дело с вращением.

Всякому преобразованию Δ типа (6,1) соответствует, следовательно, вращение A; обратное не вполне верно, ибо если изменить знаки у α и β, то ξ' и η' изменяют знак ($\xi' = -\xi$, $\eta' = -\eta$), но x', y', z' согласно (6,11) остаются без изменения. Вследствие этого всякому вращению A соответствует два преобразования унимодулярной группы $\mathfrak{U}_2$: Δ и $-\Delta$. Так как преобразования линейны, то произведению A_2A_1 двух последовательных вращений соответствует произведение $\Delta_2\Delta_1$. Следовательно, группа $\mathfrak{U}_2$ является двумерным двузначным представлением группы вращений. α и β в (6,1) называют параметрами Кэйли-Клейна. Через углы Эйлера они выражаются следующим образом:

$$\left.\begin{aligned} \alpha &= \exp\left[-\frac{i(\varphi+\psi)}{2}\right]\cos\frac{\theta}{2}, \\ \beta &= -i\exp\left[-\frac{i(\varphi-\psi)}{2}\right]\sin\frac{\theta}{2}. \end{aligned}\right\} \qquad (6,12)$$

Тогда матрица Δ в (6,5) примет вид

$$\begin{pmatrix} \exp\left[-\frac{i(\varphi+\psi)}{2}\right]\cos\frac{\theta}{2} & -i\exp\left[-i\frac{\varphi-\psi}{2}\right]\sin\frac{\theta}{2} \\ -i\exp\left[\frac{i\varphi-\psi}{2}\right]\sin\frac{\theta}{2} & \exp\left[\frac{i(\varphi+\psi)}{2}\right]\cos\frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \qquad (6,13)$$

Очевидно, что при повороте вокруг оси z на 2π матрица (6,13) умножается на -1. Таким образом, физически равноценным операциям поворотов на 0 и 2π в найденном представлении соответствуют две различные матрицы. Это и есть выражение отмеченной выше двузначности. Смысл этой двузначности будет выяснен позже.

Рассмотренный метод дает нам сразу бесконечное множество представлений группы вращений, так как все представления группы $\mathfrak{U}_2$ являются также ввиду (6,12), очевидно, представлениями группы вращений и их легко построить.

Образуем тензоры унитарного пространства ξ, η. Тензор ранга n будет иметь $n+1$ составляющих:

$$\xi^n,\ \xi^{n-1}\eta, \ldots,\ \xi^{n-r}\eta^r, \ldots,\ \xi\eta^{n-1},\ \eta^n. \qquad (6,14)$$

Возьмем компоненту $\xi^{n-r}\eta^r$ и осуществим над ξ и η преобразование (6,1). Тогда получим:

$$\xi'^{n-r}\eta'^r = (\alpha\xi + \beta\eta)^{n-r}(-\beta^*\xi + \alpha^*\eta)^r = \sum_{k=0}^{n} a_{ik}^{(n)}\xi^{n-k}\eta^k. \qquad (6,15)$$

Отсюда видно, что составляющие тензора при преобразовании (6,1) линейно преобразуются друг через друга, определяя матрицу преобразования

$$A^{(n)} = \left(a_{ik}^{(n)}\right).$$

Преобразование (6,15) не является унитарным, но становится таковым, если нормировать компоненты тензора, положив

$$q_k = \frac{\xi^{n-k}\eta^k}{\sqrt{(n-k)!\,k!}}. \tag{6,16}$$

Отметим здесь, что при вращении $A(\psi)$ с углом вращения ψ вокруг оси z, при котором, согласно (6,13), ξ умножается на $\exp\left(-\frac{i\psi}{2}\right)$, а η на $\exp\left(\frac{i\psi}{2}\right)$, компонента q_k умножается на $\exp\left[-\frac{i}{2}(n-2k)\psi\right]$.

Таким образом, каждому повороту с углами Эйлера φ, θ, ψ соответствует матрица $A^{(n)}$. Матрицы $A^{(n)}$ перемножаются между собой как матрицы Δ. Следовательно, мы получили бесконечное множество представлений группы, порождаемое каждое тензором ранга $n = 0, 1, \ldots$ В квантовых обозначениях положим $n = 2j$ и представления будем обозначать символом D_j, понимая под этим $(2j+1)$-мерное представление группы вращений. Кроме того, обозначим $j - k = m$; тогда выражение для q_k примет симметрическую форму:

$$q_m^{(j)} = \frac{\xi^{j+m}\eta^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}, \quad m = j,\ j-1, \ldots, -j, \tag{6,17}$$

ибо $k = j - m$ и $n - k = 2j - j + m = j + m$. Так как произведению матриц представления (6,1) соответствует произведение матриц представления $\left(a_{ik}^{(n)}\right)$, то мы будем иметь, таким образом, линейное представление группы (6,1) размерности $(2j+1)$, т. е. унитарная группа будет изображаться матрицами размерности $(2j+1)$.

Перейдем теперь к определению элементов матриц преобразования. Принимая во внимание (6,17) и (6,1), будем иметь:

$$q_m^{(j)\prime} = \frac{\xi'^{j+m}\eta'^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}} = \frac{(\alpha\xi + \beta\eta)^{j+m}(-\beta^*\xi + \alpha^*\eta)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}},$$

и нам надо представить правую часть в виде линейной комбинации величин $q_m^{(j)}$. Элементарные вычисления дают

$$q_m^{(j)'}=\sum_{k=0}^{j+m}\sum_{k'=0}^{j-m}(-1)^{j-m-k'}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}{(j+m-k)!\,(j-m-k')!k!k'!}\times$$
$$\times\,\alpha^{j+m-k}\alpha^{*k'}\beta^{k}\beta^{*j-m-k'}\xi^{2j-k-k'}\eta^{k+k'}. \qquad (6{,}18)$$

Если считать $p!=\infty$, когда p есть целое отрицательное число, то в (6,18) можно производить суммирование по k и k' от $-\infty$ до $+\infty$, так как лишние слагаемые будут содержать в знаменателе множитель, равный бесконечности, и обратятся в нуль. Введем вместо k' новую переменную суммирования $s=j-k-k'$, по которой тоже можно производить суммирование от $-\infty$ до $+\infty$ по целым значениям или полуцелым, смотря по тому, будет ли j целым или полуцелым. Таким образом, получим:

$$q_m^{(j)'}=\sum_{k,s}(-1)^{k+s-m}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}{(j+m-k)!\,(k+s-m)!\,k!\,(j-k-s)!}\times$$
$$\times\,\alpha^{j+m-k}\alpha^{*j-k-s}\beta^{k}\beta^{k+s-m}\xi^{j+s}\eta^{j-s}.$$

Но согласно (6,17) имеем:

$$\xi^{j+s}\eta^{j-s}=\sqrt{(j+s)!\,(j-s)!}\,q_s^{(j)}$$

и окончательно получаем искомую линейную зависимость в виде

$$q_m^{(j)'}=\sum_{k,s}(-1)^{k+s-m}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+s)!\,(j-s)!}}{(j+m-k)!\,(k+s-m)!\,k!\,(j-k-s)!}\times$$
$$\times\,\alpha^{j+m-k}\alpha^{*j-k-s}\beta^{k}\beta^{*k+s-m}q_s^{(j)}, \qquad (6{,}19)$$

откуда для элементов матриц имеем:

$$d_{ms}^{(j)}=\sum_{k}(-1)^{k}\frac{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!\,(j+s)!\,(j-s)!}}{(j+m-k)!\,(k+s-m)!\,k!\,(j-k-s)!}\times$$
$$\times\,\alpha^{j+m-k}\alpha^{*j-k-s}\beta^{k}\beta^{*k+s-m}. \qquad (6{,}20)$$

Здесь значки m, s пробегают значения от $-j$ до $+j$, а суммирование по k ведется от наибольшего из 0, $m-s$ до наименьшего из $j+m$, $j-m$. Появляющийся постоянный множитель $(-1)^{s-m}$ можно отбросить, так как представление всегда определяется с точностью до эквивалентности.

Отметим без доказательства, что полученные матрицы D_j дают неприводимые линейные представления унитарной группы. Придавая j ряд значений

$$j = 0,\ \frac{1}{2},\ 1,\ \frac{3}{2},\ \ldots,$$

получаем бесчисленное множество этих линейных представлений.

Покажем еще, как разлагается на неприводимые представления прямое произведение $D_{j1} \times D_{j2}$. Начнем с вычисления характера. Так как сопряженные элементы имеют равные характеры, то достаточно вычислить характер поворота вокруг оси z, ибо в группе вращений любой поворот эквивалентен повороту на тот же самый угол вокруг оси z. Диагональные элементы матрицы вращения получаются из формулы (6,20) при $m = s$. Так как при повороте вокруг оси z угол θ равен 0, то в суммах (6,20) останутся члены только с $k = 0$, и мы получим:

$$d^{(j)}_{mm}(\varphi,\ 0) = e^{-im\varphi}.$$

Тогда для выражения характера находим:

$$\mathrm{X}_j = \sum_{m=-j}^{j} e^{-im\varphi},$$

или после элементарных вычислений имеем:

$$\mathrm{X}_j = \frac{\sin\left(j + \frac{1}{2}\right)\varphi}{\sin\frac{1}{2}\varphi}. \tag{6,21}$$

Характер прямого произведения двух представлений равен произведению характеров составляющих частей:

$$\mathrm{X}_{j_1}\mathrm{X}_{j_2} = \sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} e^{im_1\varphi} \sum_{m_2=-j_2}^{+j_2} e^{im_2\varphi} =$$

$$= \sum_{m_1=-j_1}^{+j_1} e^{im_1\varphi} \frac{e^{i(j_2+1)\varphi} - e^{-ij_2\varphi}}{e^{i\varphi} - 1}.$$

Это выражение мы должны представить в виде суммы характеров неприводимых представлений D_j, т. е. в виде

$$\sum_j \frac{e^{i(j+1)\varphi} - e^{ij\varphi}}{e^{i\varphi} - 1}.$$

Приравнивая оба выражения, сокращая на $(e^{i\varphi} - 1)$ и производя перемножение, получим:

$$e^{i(j_1+j_2+1)\varphi}+e^{i(j_1+j_2)\varphi}+\ldots-e^{-i(j_1-j_2)\varphi}-\ldots-e^{-i(j_1+j_2)\varphi}=$$
$$=\sum_j e^{i(j+1)\varphi}-e^{-ij\varphi}.$$

Комбинируя в левой части равенства попарно положительные и отрицательные члены, видим, что j должно пробегать ряд значений от j_1+j_2 до j_1-j_2, каждое по одному разу.

Таким образом, имеем:

$$D_{j_1}\times D_{j_2}=D_{j_1+j_2}+\ldots+D_{j_1-j_2}=\sum_{j=j_1+j_2}^{j_1-j_2} D_j. \qquad (6,22)$$

Это и есть искомое разложение.

7. БЕСКОНЕЧНО МАЛЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ

Группа вращений трехмерного пространства представляет собой пример бесконечной группы, элементы которой зависят от параметров, меняющихся непрерывным образом. Для группы вращений роль параметров могут играть, например, углы Эйлера. Группа вращений состоит из линейных преобразований, и зависимость группы от параметров сводится к тому, что элементы матриц, которые определяют упомянутые линейные преобразования, зависят от этих параметров. Для дальнейшего рассмотрения нам удобно ввести другие параметры. Всякое вращение можно изобразить вектором, исходящим из начала координат, направленным по оси вращения и по длине равным углу вращения. Проекции этого вектора на оси координат и будут служить нам параметрами. Тогда пространством параметров является шар радиуса π, в котором диаметрально противоположные точки поверхности отождествляются. Произведение двух вращений $A_\alpha\,(\alpha_x\alpha_y\alpha_z)$ и $A_\beta\,(\beta_x\beta_y\beta_z)$ есть вращение $A_\gamma=A_\beta A_\alpha$, где параметры γ_s, характеризующие элемент A_γ, являются однозначными функциями параметров α_s и β_s: $\gamma_s=f_s(\alpha,\ \beta)$.

Введем теперь так называемые бесконечно малые преобразования группы по формуле

$$I_k=\left(\frac{\partial A_\alpha}{\partial \alpha_k}\right)_{\alpha_s=0}. \qquad (7,1)$$

Символ I_k обозначает, очевидно, некоторую матрицу третьего порядка с численными элементами.

Произведем непосредственное вычисление матриц бесконечно малых преобразований для трёхмерной группы вращений. При вычислении $\hat{I}_k$ мы можем считать, что $\alpha_y = \alpha_z = 0$. Это означает, что рассматривается вращение вокруг оси x на угол α_x, что приводит к матрице преобразований

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha_x & -\sin\alpha_x \\ 0 & \sin\alpha_x & \cos\alpha_x \end{pmatrix}. \tag{7,2}$$

Дифференцируя эту матрицу по α_x и полагая $\alpha_x = 0$, получаем:

$$\hat{I}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \tag{7,3}$$

и аналогично

$$\hat{I}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{I}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{7,3a}$$

Элементарные вычисления приводят к трем соотношениям:

$$\hat{I}_x\hat{I}_y - \hat{I}_y\hat{I}_x = \hat{I}_z, \quad \hat{I}_y\hat{I}_z - \hat{I}_z\hat{I}_y = \hat{I}_x, \quad \hat{I}_z\hat{I}_x - \hat{I}_x\hat{I}_z = \hat{I}_y. \tag{7,4}$$

Пусть теперь операции группы действуют на некоторый трехмерный вектор

$$\mathbf{r}' = A_\alpha \mathbf{r}. \tag{7,5}$$

Разложим правую часть (7,5) в ряд по α_s и ограничимся членами первого порядка:

$$A_\alpha \mathbf{r} = \left[A_{\alpha_s=0} + \left(\frac{\partial A_\alpha}{\partial \alpha_x}\right)_{\alpha_s=0} \alpha_x + \left(\frac{\partial A_\alpha}{\partial \alpha_y}\right)_{\alpha_s=0} \alpha_y + \right.$$
$$\left. + \left(\frac{\partial A_\alpha}{\partial \alpha_z}\right)_{\alpha s=0} \alpha_z \right] \mathbf{r}, \tag{7,6}$$

откуда, имея в виду определение (7,1), получаем:

$$\mathbf{r}' = [1 + (\alpha_x\hat{I}_x + \alpha_y\hat{I}_y + \alpha_z\hat{I}_z)]\, \mathbf{r}. \tag{7,7}$$

Следовательно, вектор $\mathbf{r}$ в результате указанного преобразования испытывает следующее изменение:

$$\delta\mathbf{r} = (\alpha_x\hat{I}_x + \alpha_y\hat{I}_y + \alpha_z\hat{I}_z)\, \mathbf{r}.$$

Каждое слагаемое справа дает изменение $\mathbf{r}$ при бесконечно малом вращении вокруг одной из осей координат. Так, например, мы получаем следующие изменения составляющих (xyz) вектора $\mathbf{r}$ при повороте на малый угол α_x вокруг оси x:

$$\delta\mathbf{r} = \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \\ \delta z \end{pmatrix} = \alpha_x \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix},$$

откуда

$$\delta x = 0, \quad \delta y = -\alpha_x z, \quad \delta z = \alpha_x y. \tag{7,8}$$

Из формулы (7,7) следует, что бесконечно малому вращению соответствует оператор

$$1 + \alpha_x \hat{I}_x + \alpha_y \hat{I}_y + \alpha_z \hat{I}_z. \tag{7,9}$$

Пусть теперь $\psi(\mathbf{r})$ — функция координат. Тогда при повороте вокруг оси x на угол α_x ее координаты претерпят изменения (7,8). Этому повороту соответствует оператор $1 + \alpha_x \hat{I}_x$, который переводит функцию $\psi(xyz)$ в $\psi(x,\ y + \alpha_x z,\ z - \alpha_x y)$. Следовательно, имеем:

$$(1 + \alpha_x \hat{I}_x)\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) - \left(-\frac{\partial\psi}{\partial y} z + \frac{\partial\psi}{\partial z} y\right)\alpha_x,$$

откуда

$$\hat{I}_x = -\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right) \tag{7,10}$$

и аналогично

$$\left.\begin{aligned} \hat{I}_y &= -\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{I}_z &= -\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right). \end{aligned}\right\} \tag{7,10а}$$

Формулы (7,10) в векторной форме можно записать следующим образом:

$$\hat{\mathbf{I}} = -\left[\mathbf{r}\hat{\nabla}\right]. \tag{7,10б}$$

Выясним теперь более подробно связь сказанного выше о бесконечно малых преобразованиях с представлением группы вращений. Будем обозначать представление в окрестности тождественного преобразования матрицами $A(\alpha_x\alpha_y\alpha_z)$ порядка n, причем элементы матрицы — непрерывные и дифференцируемые функции параметров $\alpha_x,\ \alpha_y,\ \alpha_z$.

Вся задача сводится к нахождению бесконечно малых преобразований представления. Вместо искомых матриц $\hat{I}_x$, $\hat{I}_y$, $\hat{I}_z$ вводим новые матрицы:

$$\left.\begin{aligned} &\hat{L}_x = i\hat{I}_x, \ \hat{L}_y = i\hat{I}_y, \ \hat{L}_z = i\hat{I}_z, \\ &\hat{L}_p = \hat{L}_x + i\hat{L}_y, \ \hat{L}_q = \hat{L}_x - i\hat{L}_y. \end{aligned}\right\} \tag{7,11}$$

Перестановочные соотношения будут

$$\left.\begin{aligned} &\hat{L}_z\hat{L}_p - \hat{L}_p\hat{L}_z = \hat{L}_p, \\ &\hat{L}_z\hat{L}_q - \hat{L}_q\hat{L}_z = \hat{L}_q, \\ &\hat{L}_p\hat{L}_q - \hat{L}_q\hat{L}_p = 2\hat{L}_z. \end{aligned}\right\} \tag{7,12}$$

В представлении матрицами $A(\alpha_x\alpha_y\alpha_z)$ должно заключаться и представление абелевой подгруппы вращений вокруг оси z, элементам которой соответствуют матрицы $A(0, 0, \alpha_z)$. Для векторов, которые при этом будут играть роль базиса, преобразование будет иметь вид

$$A(0, 0, \alpha_z)\,\mathbf{v}_m = e^{-im\alpha_z}\mathbf{v}_m. \tag{7,13}$$

Отсюда получаем, основываясь на определении $\hat{I}_z$:

$$\hat{L}_z\mathbf{v}_m = i\hat{I}_z\mathbf{v}_m = i\left(\frac{\partial}{\partial\alpha_z}e^{-im\alpha_z}\right)\mathbf{v}_m = m\mathbf{v}_m.$$

Следовательно,

$$\hat{L}_z\mathbf{v}_m = m\mathbf{v}_m, \tag{7,14}$$

т. е. $\mathbf{v}_m$ есть собственный вектор оператора $\hat{L}_z$, соответствующий собственному значению m.

Лемма. Если некоторый вектор $\mathbf{v}_m$ есть собственный вектор оператора $\hat{L}_z$, соответствующий собственному значению m, то $L_p\mathbf{v}_m$ есть также собственный вектор $\hat{L}_z$, соответствующий собственному значению $(m+1)$, и аналогично $\hat{L}_1\mathbf{v}_m$ есть собственный вектор $\hat{L}_z$, соответствующий собственному значению $(m-1)$. По условию

$$\hat{L}_z\mathbf{v}_m = m\mathbf{v}_m,$$

а по (7,12)

$$\begin{aligned} \hat{L}_z\left(\hat{L}_p\mathbf{v}_m\right) &= \left(\hat{L}_p\hat{L}_z + \hat{L}_p\right)\mathbf{v}_m = \hat{L}_p\left(\hat{L}_z\mathbf{v}_m\right) + \hat{L}_p\mathbf{v}_m = \\ &= \hat{L}_p(m\mathbf{v}_m) + \hat{L}_p\mathbf{v}_m = (m+1)\left(\hat{L}_p\mathbf{v}_m\right) \end{aligned} \tag{7,15}$$

и аналогично для $\hat{L}_q$:

$$\hat{L}_z\left(\hat{L}_q\mathbf{v}_m\right)=(m-1)\left(\hat{L}_q\mathbf{v}_m\right). \qquad (7,16)$$

Число различных собственных значений для $\hat{L}_z$ не больше n. Обозначим собственное значение с наибольшей вещественной частью через j, и пусть $\mathbf{v}_j$ — соответствующий собственный вектор. Тогда согласно лемме будем иметь:

$$\hat{L}_z\left(\hat{L}_p\mathbf{v}_j\right)=(j+1)\left(\hat{L}_p\mathbf{v}_j\right), \qquad (7,17)$$

но такого собственного значения у $\hat{L}_z$ нет и, следовательно,

$$\hat{L}_p\mathbf{v}_j=0. \qquad (7{;}18)$$

В силу доказанной выше леммы векторы

$$\mathbf{v}_{j-1}=\hat{L}_q\mathbf{v}_j,\quad \mathbf{v}_{j-2}=\hat{L}_q\mathbf{v}_{j-1},\ \ldots, \qquad (7,19)$$

если они отличны от нуля, относятся к собственным значениям $(j-1)$, $(j-2)$, ... оператора $\hat{L}_z$. Последовательность векторов должна, конечно, привести к нулевому вектору, так как число различных собственных значений у $\hat{L}_z$ не больше n. Покажем, что при $m=j,\ j-1,\ \ldots$ имеет место формула

$$\hat{L}_p\mathbf{v}_m=\rho_m\mathbf{v}_{m+1}, \qquad (7,20)$$

где ρ_m — целые числа. По (7,18) она верна при $m=j$, причем $\rho_j=0$. Положим теперь, что формула верна при некотором $m=\mu$, и докажем ее для $m=\mu-1$. Согласно (7,17), (7,19) и (7,20) имеем:

$$\hat{L}_p\mathbf{v}_{\mu-1}=\hat{L}_p\hat{L}_q\mathbf{v}_\mu=\left(\hat{L}_q\hat{L}_p+2\hat{L}_z\right)\mathbf{v}_\mu=\hat{L}_q\left(\hat{L}_p\mathbf{v}_\mu\right)+2\hat{L}_z\mathbf{v}_\mu=$$
$$=\hat{L}_q\rho_\mu\mathbf{v}_{\mu+1}+2\mu\mathbf{v}_\mu=(\rho_\mu+2\mu)\mathbf{v}_\mu. \qquad (7,21)$$

Заметим, что при $\mu=j$ мы не пользуемся при этом формулой $\hat{L}_q\mathbf{v}_{\mu+1}=\mathbf{v}_\mu$, ибо $\rho_\mu=0$ при $\mu=j$. Этим доказано соотношение (7,20). Согласно (7,20)

$$\hat{L}_p\mathbf{v}_{\mu-1}=\rho_{\mu-1}\mathbf{v}_\mu,$$

и с учетом (7,21) имеем $\rho_{\mu-1}=\rho_\mu+2\mu$, откуда, производя последовательные вычисления, получаем:

$$\rho_\mu=j(j+1)-\mu(\mu-1).$$

Тогда

$$\hat{L}_p \mathbf{v}_m = [j(j+1) - m(m+1)]\, \mathbf{v}_{m+1}; \quad m = j, \quad j-1, \ldots \tag{7,22}$$

Пользуясь этим равенством, определим индекс s первого из векторов (7,19), равного нулю, т. е. $\mathbf{v}_s = 0$, но $\mathbf{v}_{s+1} \neq 0$. Тогда из (7,22) следует $\rho_s = 0$, т. е.

$$j(j+1) = s(s-1).$$

Решая квадратное уравнение, получим:

$$s = j,$$
$$s = -(j+1).$$

Значение $s = j$ следует отбросить, так как вектор $\mathbf{v}_j \neq 0$. Следовательно, имеем последовательность

$$\mathbf{v}_j, \quad \mathbf{v}_{j-1}, \ldots, \mathbf{v}_{-j+1}, \quad \mathbf{v}_{-j} \tag{7,23}$$

и число векторов $2j+1$. Отсюда видно, что j — либо целое, либо полуцелое.

Если $2j+1 = n$, то векторы (7,23) можно взять за орты. Это представление будет неприводимым. В случае $n > 2j+1$ мы получили бы, что представление $A^{(n)}$ приводимо. Но существует только одно, с точностью до эквивалентности, неприводимое представление данной размерности. Мы уже построили их с помощью углов Эйлера. Следовательно, такого рода представления исчерпывают все представления группы вращений данной размерности.

Вектора в соотношениях (7,19) и (7,22) можно умножать на любые множители. Последние можно подобрать так, чтобы имели место следующие окончательные соотношения:

$$\left.\begin{aligned} \hat{L}_p \mathbf{v}_m &= \sqrt{j(j+1) - m(m+1)}\, \mathbf{v}_{m+1}, \\ \hat{L}_q \mathbf{v}_m &= \sqrt{j(j+1) - m(m-1)}\, \mathbf{v}_{m-1}, \\ \hat{L}_z \mathbf{v}_m &= m \mathbf{v}_m. \end{aligned}\right\} \tag{7,24}$$

Подпространство $\mathbf{v}_j, \mathbf{v}_{j-1}, \ldots, \mathbf{v}_{-j}$ нашего векторного пространства преобразуется само в себя операциями $\hat{L}_p, \hat{L}_q, \hat{L}_z$, а следовательно, и бесконечно малыми вращениями $I_x, \hat{I}_y, \hat{I}_z$. Отсюда следует, что это подпространство преобразуется само в себя также всеми преобразованиями группы вращений, т. е. векторы $\mathbf{v}_j \ldots \mathbf{v}_{-j}$ определяют инвариантное подпространство $\mathfrak{R}_{2j+1}$. Преобразования этого подпространства образуют представление группы вращения, полностью определяемое уравнениями (7,24). В пространстве $\mathfrak{R}_{2j+1}$ оператор $\hat{L}_z$ имеет простые собственные значения $m=j,\ j-1,\ldots,-j$ с собственными векторами $\mathbf{v}_m$. Отметим еще, что все векторы пространства $\mathfrak{R}_{2j+1}$ являются собственными векторами оператора

$$\hat{L}^2=\hat{L}_x^2+\hat{L}_y^2+\hat{L}_z^2=\frac{1}{2}\left(\hat{L}_p\hat{L}_q+\hat{L}_q\hat{L}_p\right)+\hat{L}_z^2. \qquad (7,25)$$

Из (7,24) после простых вычислений получаем:

$$\hat{L}^2\mathbf{v}_m=j(j+1)\mathbf{v}_m. \qquad (7,26)$$

Определяемое формулами (7,24) представление степени $2j+1$ эквивалентно найденному в § 6 представлению, обозначенному через D_j. Действительно, в пространстве... $\xi^{n-r}\eta^r$ ... представления D_j базисные векторы $\xi^{n-r}\eta^r$ при вращении $(0,\ 0,\ \alpha_z)$ умножаются на $e^{-im\alpha_z}=e^{-\frac{1}{2}i(n-2r)\alpha_z}$, а следовательно значения

$$m=\frac{n}{2}-r\quad\left(=\frac{n}{2},\ \frac{n}{2}-1,\ldots,-\frac{n}{2}\right)$$

встречаются по одному разу. Если теперь построить в этом пространстве $\mathbf{v}_m$ подпространство $2j+1$ измерений вышеописанной структуры, то оно совпадает со всем пространством (так как оба имеют одинаковое число измерений). Величины $\mathbf{v}_m$ подпространства $(2j+1)$ измерений должны совпадать с произведением $\xi^{j+m}\eta^{j-m}$ представления D_j с точностью до численного множителя. Вводя численный множитель, получим:

$$\mathbf{v}_m=\frac{\xi^{j+m}\eta^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!\,(j-m)!}}. \qquad (7,27)$$

Эти $\mathbf{v}$ образуют одновременно, согласно (6,17), нормированную ортогональную систему.

Аналогичным образом можно доказать, что, когда j равно целому числу l, представление D_l, определенное формулой (7,24), совпадает с представлением, выраженным с помощью шаровых функций l-го порядка Y_l^m. Действительно, число последних равно $2l+1$, и поэтому наибольшее собственное значение оператора $\hat{L}_z$, значение $m=l$. Следовательно, шаровые функции Y_l^m преобразуются согласно неприводимому представлению D_l, т. е. мы можем выбрать нормирующий множитель шаровых функций Y_l^m таким образом, чтобы для них точно выполнялись соотношения (7,24). Отсюда также следует, что D_l является однозначным представлением.

8. ГРУППА ОКТАЭДРА [4, 5, 9]

Проведем детальное изучение группы $\mathfrak{O}_h$. Такое рассмотрение отчасти имеет целью проиллюстрировать общие положения, изложенные в §§ 3, 4 и 5, а отчасти необходимо для последующего изложения, так как общие приемы исследования квантовомеханических систем с помощью теории групп поясняются далее именно на примере системы кубической симметрии. Начнем с описания группы $\mathfrak{O}$ (группа октаэдра). Системой осей этой группы является система осей симметрии куба: три оси четвертого порядка проходят через центры противоположных граней, четыре оси третьего порядка — через противоположные вершины и шесть осей второго порядка — через середины противоположных ребер (рис. 4).

Прежде чем производить разбиение элементов группы $\mathfrak{O}$ на классы сопряженных элементов, сделаем некоторые предварительные замечания. В § 3 уже указывалось, что две операции симметрии будут сопряжены, если они одного порядка и если соответствующие им элементы симметрии эквивалентны. Дополнительное замечание требуется в случае, когда сопряженными являются повороты вокруг одной и той же оси.

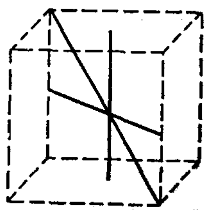

Рис. 4.

Пусть A — поворот вокруг некоторой оси a и A^{-1} — обратное преобразование. Очевидно, что прямое и обратное преобразования всегда имеют один и тот же порядок. Если теперь среди элементов группы имеется поворот на π вокруг оси, перпендикулярной к данной, то операции A и A^{-1} согласно общему правилу (см. § 3) оказываются сопряженными, так как такой поворот совмещает исходное положение оси a с противоположным.

Отражение в плоскости σ_h, перпендикулярной к оси a, также изменяет направление оси, но в то же время меняет и направление вращения. Следовательно, наличие σ_h не делает элементы A и A^{-1} сопряженными. Отражение в плоскости σ_v, проходящей через ось a, не меняет направления оси, но изменяет направление вращения. Поэтому при наличии σ_v элементы A и A^{-1} будут сопряженными.

Если повороты вокруг некоторой оси на один и тот же угол в противоположных направлениях сопряжены, то ось называется двусторонней.

Можно показать, что в группе $\mathfrak{O}$ все оси одинакового порядка эквивалентны и каждая из них двусторонняя. Поэтому 24 элемента группы распределяются по следующим пяти классам:

K_1 — состоящий из тождественного преобразования;
K_2 — состоящий из трех поворотов на π вокруг координатных осей;
K_3 — состоящий из трех поворотов на $\pi/2$ и трех поворотов на $3\pi/2$ вокруг координатных осей;
K_4 — состоящий из шести поворотов на π вокруг осей, проходящих через середины противоположных ребер;
K_5 — состоящий из четырех поворотов на $2\pi/3$ и четырех поворотов на $4\pi/3$ вокруг пространственных диагоналей куба.

Следовательно, группа октаэдра имеет пять неприводимых представлений. Сумма квадратов размерностей всех представлений должна равняться числу элементов группы. Единственным разложением числа 24 на сумму пяти квадратов будет

$$3^2+3^2+2^2+1^2+1^2,$$

т. е. группа октаэдра обладает двумя трехмерными представлениями, одним двумерным и двумя одномерными. Найдем таблицу умножения классов:

$$\begin{aligned}
&K_2K_2=3K_1+2K_2, &\quad &K_3K_3=K_4K_4=6K_1+2K_2+3K_5,\\
&K_2K_3=K_3+2K_4, & &K_3K_4=4K_2+3K_5,\\
&K_2K_1=2K_3+K_4, & &K_3K_5=K_4K_5=4K_3+4K_4,\\
&K_2K_5=3K_5, & &K_5K_5=8K_1+8K_2+4K_5.
\end{aligned}$$

Учитывая эти соотношения, составляем уравнения вида (5,5):

$$\begin{vmatrix}
-x_2 & 1 & 0 & 0 & 0\\
3 & 2-x_2 & 0 & 0 & 0\\
0 & 0 & 1-x_2 & 2 & 0\\
0 & 0 & 2 & 1-x_2 & 0\\
0 & 0 & 0 & 0 & 3-x_2
\end{vmatrix}=0,$$

$$\begin{vmatrix}
-x_3 & 0 & 1 & 0 & 0\\
0 & -x_3 & 1 & 2 & 0\\
6 & 2 & -x_3 & 0 & 3\\
0 & 4 & 0 & -x_3 & 3\\
0 & 0 & 4 & 4 & -x_3
\end{vmatrix}=0,$$

$$\begin{vmatrix} -x_4 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -x_4 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 4 & -x_4 & 0 & 3 \\ 6 & 2 & 0 & -x_4 & 3 \\ 0 & 0 & 4 & 4 & -x_4 \end{vmatrix} = 0,$$

$$\begin{vmatrix} -x_5 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & -x_5 & 0 & 0 & 3 \\ 0 & 0 & 4-x_5 & 4 & 0 \\ 0 & 0 & 4 & 4-x_5 & 0 \\ 8 & 8 & 0 & 0 & 4-x_5 \end{vmatrix} = 0.$$

Решая их, получаем:

$$x_2 = 3,\ 3,\ 3,\ -1,\ -1, \qquad x_3 = 6,\ -6,\ 0,\ 2,\ -2,$$
$$x_4 = 6,\ -6,\ 0,\ -2,\ 2, \qquad x_5 = 8,\ 8,\ -4,\ 0,\ 0$$

и, наконец, согласно общей теории, находим следующую таблицу характеров:

Таблица 1

0	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	−1	−1	1
Γ_3	2	2	0	0	−1
Γ_4	3	−1	−1	1	0
Γ_5	3	−1	1	−1	0

Не приводя длинных и утомительных вычислений, выпишем еще в явном виде матрицы двумерного и трехмерных представлений нашей группы:

Γ_3

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0, & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0, & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix};$$

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

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

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix}.$$

Γ_4

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

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

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix};$$

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

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Γ_5

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix};$$

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

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix};$$

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

$$\begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

В физических задачах чаще всего приходится иметь дело с группой $\mathfrak{D}_h$. Эта группа получается из группы $\mathfrak{D}$ добавлением центра инверсии. Она может быть представлена в виде прямого произведения группы $\mathfrak{D}$ и группы $\mathfrak{C}$, состоящей всего из двух элементов: единичного E и инверсии I. Поэтому ее представления и таблица характеров могут быть найдены с использованием правила, изложенного в § 5.

9. ПРИМЕНЕНИЕ ТЕОРИИ ГРУПП В КВАНТОВОЙ МЕХАНИКЕ

Движение всякой физической системы происходит в некотором силовом поле. Поле является материальным носителем тех сил, которые действуют на физическую систему. Наличие именно этого силового поля обусловливает свойства симметрии пространства, в котором движется система. Вот почему изучение свойств симметрии силовых полей, действующих на физическую систему, должно предшествовать изучению самой системы, так как ее поведение определяется именно этими полями.

Общим и хорошо развитым аппаратом, позволяющим изучать вытекающие из симметрии свойства физических систем, является теория групп. Применение теории групп в квантовой механике основано на том, что уравнение Шредингера, описывающее состояние системы (атома, молекулы, кристалла и т. д.), остается инвариантным при следующих преобразованиях симметрии данной системы:

1) при перестановках координат различных частиц, играющих одинаковую роль в системе;

2) при трансляциях, вращениях и отражениях пространства, не меняющих действующего в системе силового поля.

Если ядро в атоме рассматривается как неподвижный центр сил, то речь идет о вращениях вокруг этого центра и инверсии относительно него. Для атома в однородном поле группа вращений заменяется подгруппой вращений вокруг неподвижной оси, направленной по полю и отражений в плоскостях, проходящих через эту ось. В металле, в кристаллическом состоянии, волновое уравнение остается инвариантным относительно операций пространственной группы и т. д.

Наряду с этим следует еще учитывать инвариантность уравнения Шредингера (при отсутствии магнитного поля) по отношению к изменению знака времени. Уравнение Шредингера

$$\hat{H}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right)\psi(x, t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) \tag{9,1}$$

при замене t на $-t$ переходит в

$$\hat{H}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -t\right)\psi(x, -t) = -i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, -t). \tag{9,2}$$

Образуем теперь комплексно сопряженное от него

$$\hat{H}^*\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -t\right)\psi^*(x, -t) = i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi^*(x, -t). \tag{9,3}$$

Далее потребуем, чтобы имело место соотношение

$$\hat{H}^*\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, -t\right) \equiv \hat{H}\left(x, -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}, t\right). \tag{9,4}$$

Последнее требование выражает лишь тот факт, что оператор энергии вещественен и остается неизменным при изменении знака времени. Тогда равенства (9,1) и (9,3) показывают, что функции $\psi(x, t)$ и $\psi^*(x, -t)$ удовлетворяют одному и тому же уравнению.

Если ограничиться рассмотрением стационарных состояний, т. е. считать оператор энергии не зависящим явно от времени, то собственные функции в этом случае будут

$$\psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{iE}{\hbar} t} \tag{9,5}$$

и уравнение Шредингера примет вид

$$\hat{H}\left(x, -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}\right) \psi(x) = E\psi(x). \tag{9,6}$$

В этом случае наше последнее утверждение сводится к тому, что в электрическом поле ко всякому уровню энергии вместе с функцией $\psi(x)$ принадлежит и $\psi^*(x)$. Отсюда же непосредственно следует, что собственные функции невырожденных состояний автоматически оказываются вещественными, а для вырожденных состояний всегда могут быть приведены к вещественным путем подбора соответствующих линейных комбинаций.

Операцию образования комплексно сопряженного выражения можно рассматривать как операцию, которая переводит волновую функцию, используемую одним наблюдателем для описания некоторого состояния, в волновую функцию, которая используется для описания того же самого физического состояния наблюдателем в системе координат с противоположным направлением оси времени.

Преобразования симметрии, оставляющие инвариантным волновое уравнение, в каждом случае образуют группу. Операции, соответствующие элементам этих групп, дают вместе с тем преобразования волновых функций $\psi(x)$, если полагать, что всякое преобразование A, переводящее систему координат x в x', преобразует функцию ψ в ψ', причем

$$\psi'(x') \equiv \psi(x). \tag{9,7}$$

Покажем, что если ψ_k является собственной функцией оператора $\hat{\Omega}$ и принадлежит собственному значению ω_k, то функция $A\psi_k$, где A — произвольное преобразование группы симметрии оператора $\hat{\Omega}$, также будет собственной функцией $\hat{\Omega}$, соответствующей тому же собственному значению ω_k. Действительно, можно записать:

$$\Omega\psi_k = \omega_k\psi_k. \tag{9,8}$$

Подвергнув обе части уравнения (9,8) преобразованию A, получим:

$$A\hat{\Omega}\psi_k = \hat{\Omega}A\psi_k = \omega_k A\psi_k. \tag{9,9}$$

Отсюда следует, что функция $A\psi_k$ также является решением уравнения (9,8) с собственным значением ω_k.

Инвариантность оператора $\hat{\Omega}$, т. е. его «нечувствительность» к операциям группы симметрии, может быть выражена символически следующим образом:

$$A\hat{\Omega} = \hat{\Omega}A. \tag{9,10}$$

Если теперь применить доказанное выше утверждение к оператору Гамильтона $\hat{H}$, то получим хорошо известную теорему Вигнера. Если $\psi(x)$ является собственной функцией оператора энергии $\hat{H}$ и соответствует собственному значению E и $\hat{H}$ остается инвариантным под действием операции симметрии A, то $A\psi(x)$ будет точно также собственной функцией $\hat{H}$, соответствующей тому же собственному значению E.

При преобразовании системы координат, соответствующем элементу группы $\mathfrak{G}$, волновая функция ψ переходит в некоторую другую функцию. Производя поочередно все g преобразований группы (g — порядок группы), получим из ψ g различных функций. Однако некоторые из этих функций могут оказаться линейно зависимыми. Поэтому мы получим систему $f\,(f \leqslant g)$ линейно независимых функций $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_f$, которые при преобразованиях симметрии, входящих в рассматриваемую группу, переходят в систему $\psi_1', \psi_2', \ldots, \psi_f'$. При таком преобразовании A каждая новая ψ_i' является линейной комбинацией функций $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_f$, т. е.

$$\psi_i' = \sum_{k=1}^{f} a_{ik}\psi_k, \tag{9,11}$$

где a_{ik} — постоянные, зависящие от преобразования A. Систему (9,11) можно записать подробно в виде

$$\begin{pmatrix} \psi_1' \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_f' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdot & \cdot & \cdot & a_{1f} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{f1} & & & & a_{ff} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \psi_f \end{pmatrix}, \tag{9,12}$$

где (a_{ik}) есть матрица преобразования, соответствующая некоторому элементу группы симметрии. Такая запись означает, что элементы группы можно рассматривать как операторы, действующие на функции ψ, набор которых рассматривается как базис представления группы. Набор функций считаем ортонормированным. Отсюда следует, что понятие о матрице преобразования группы совпадает с понятием о матрице оператора в том виде, в каком им обычно пользуются в квантовой механике, а именно:

$$a_{ik} = \int \psi_k^* A \psi_i d\tau. \tag{9,13}$$

Из теоремы Вигнера непосредственно вытекает, что при преобразованиях симметрии волновые функции стационарных состояний системы, относящихся к одному и тому же уровню энергии, преобразуются друг через друга, т. е. осуществляют некоторое представление группы. Существенно то, что это представление неприводимо.

Таким образом, можно сделать вывод, что каждому уровню энергии системы соответствует некоторое неприводимое представление ее группы симметрии. Размерность этого представления определяет кратность вырождения данного уровня, т. е. число различных состояний с данной энергией. Следует подчеркнуть, что вырождение связано с наличием определенных групп симметрии, оставляющих инвариантным волновое уравнение квантовой механики, а снятие вырождения, хотя бы частичное, — с понижением симметрии *).

Заданием неприводимого представления определяются все свойства симметрии данного состояния, т. е. его поведение по отношению к различным преобразованиям симметрии. Таким образом, устанавливая и классифицируя различные возможные представления рассматриваемой группы, мы тем самым получаем классификацию собственных значений энергии и собственных функций системы (атома, молекулы, кристалла). На этом основывается групповая систематика термов.

10. ЗАКОНЫ СОХРАНЕНИЯ И ПОЛНЫЙ НАБОР ФИЗИЧЕСКИХ ВЕЛИЧИН [10]

Хорошо известно, что как в классической, так и в квантовой механике для физической системы, совершающей движение в некоторых определенных условиях, справедливы законы сохранения энергии, импульса и момента количества движения. Следует подчеркнуть, что само существование, выполнимость этих законов обусловлены свойствами пространства-времени, в котором движется система, точнее, тем, что пространственно-временной континуум допускает некоторые непрерывные группы преобразований. Для систем, движущихся в сложных силовых полях, эти законы перестают быть справедливыми, но естественно ожидать, что симметрия поля позволит определить новые характеристики системы, сохраняющиеся при движении системы в данном поле.

---

*) Мы не рассматриваем случайное вырождение, которое не может быть приписано ни симметрии системы, ни вещественности гамильтониана.

Интегралом движения в квантовой механике называется всякий оператор $\hat{A}$, который обладает свойством

$$\hat{A}\hat{H}=\hat{H}\hat{A}, \tag{10,1}$$

т. е. оператор, собственное значение которого может быть измерено одновременно с величиной энергии. Следовательно, интегралом движения является любой оператор группы симметрии, оставляющий неизменным оператор Гамильтона. Очевидно, что если выбрать величины

$$a_1,\ a_2, \ldots,\ a_n \tag{10,2}$$

собственных значений операторов

$$\hat{A}_1,\ \hat{A}_2, \ldots,\ \hat{A}_n, \tag{10,3}$$

соответствующих системе образующих элементов группы симметрии,

$$G=\{A_1, \ldots,\ A_m\}, \tag{10,4}$$

то будут получены все независимые сохраняющиеся физические величины. Иначе говоря, будут получены законы сохранения для физической системы, движущейся в поле данной симметрии.

С какой бы квантовомеханической системой мы ни имели дело, если только найден интеграл движения $\hat{A}$, то известно, что если в некотором состоянии движения оператор первоначально имел собственное значение a, то он и впредь всегда будет иметь то же самое собственное значение, так что можно привести в соответствие различным состояниям различные собственные значения $\hat{A}$ и получить таким образом нужную нам классификацию состояний. Такая классификация не является столь непосредственной, когда имеется несколько интегралов движения (10,3), которые не коммутируют друг с другом, так как в этом случае не существует состояний, в которых все (10,2) были бы одновременно измеримы. Существование некоммутирующих между собой интегралов движения является признаком того, что состояние вырождено. Действительно, в случае отсутствия вырождения гамильтонова функция сама по себе образует полный набор и поэтому каждый интеграл движения $\hat{A}_i$, поскольку он коммутирует с $\hat{H}$, является функцией $\hat{H}$ и, следовательно, коммутирует со всеми остальными $\hat{A}_j$.

Переходя к вырожденному случаю, при котором интегралы движения не коммутируют между собой, нам следует найти такую функцию этих интегралов движения, которая имела бы одно и то же значение во всех состояниях, соответствующих определенному уровню энергии E, так чтобы с их помощью можно было классифицировать уровни энергии системы. Нетрудно видеть, что эта функция должна зависеть от $\hat{H}$ и поэтому также должна коммутировать со всякой динамической переменной, которая коммутирует с $\hat{H}$, т. е. со всяким интегралом движения. Иными словами, задача сводится к нахождению такой функции интегралов движения, которая коммутировала бы со всеми $\hat{A}_i$. Если можно найти несколько таких функций, то все они должны коммутировать между собой, так что можно приписать им всем одновременно численные значения и таким образом получить полную классификацию уровней системы.

Нетрудно видеть, что такими функциями являются классы сопряженных элементов группы, оставляющей инвариантным оператор Гамильтона. Действительно, классы K_i всякой группы $\mathfrak{G}$ коммутируют между собой и каждый из них коммутирует с любым элементом группы (являющимся интегралом движения), т. е. имеют место соотношения:

$$K_iK_j = K_jK_i, \tag{10,5}$$

$$A_jK_i = K_iA_j. \tag{10,6}$$

Так как классы сопряженных элементов перестановочны между собой, а также и с гамильтонианом системы, то физические величины, соответствующие операторам $\hat{K}_i$, представляют набор одновременно измеримых величин. Однако, поскольку между классами сопряженных элементов существуют соотношения типа (3,5):

$$K_iK_j = \sum_{k=1}^{r} c_{ijk}K_k,$$

то операторы $\hat{K}_i$ не все независимы. Из полного набора классов можно выделить систему независимых классов, которые содержат образующие элементы группы (10,4). Следует заметить, что поскольку система образующих элементов выбирается не однозначно, то может оказаться, что различным выборам системы образующих (10,4) будет соответствовать различное число классов. Удобно подобрать систему образующих элементов (10,4) так, чтобы число классов, соответствующих ей, было наименьшим. Пусть такими классами будут

$$K_1,\ K_2, \ldots, K_p \tag{10,7}$$

с собственными значениями

$$\varkappa_1,\ \varkappa_2, \ldots, \varkappa_p. \tag{10,8}$$

Эти собственные значения представляют собой некоторые функции от собственных значений (10,2) операторов (10,3). Их численные величины находятся по формуле

$$\chi_j^{(i)} = \frac{h_j \mathrm{X}_j^{(i)}}{n_i}, \tag{10,9}$$

где h_j — число элементов в классе, n_i — размерность представления и $\mathrm{X}_j^{(i)}$ — характер j-го класса в i-м представлении. Заметим еще, что размерность представления есть не что иное, как характер единичного элемента $\mathrm{X}^{(i)}(E)$.

Единичный элемент сам по себе составляет класс, которому должна соответствовать некоторая сохраняющаяся величина, так как всегда имеет место

$$\hat{E}\hat{H} = \hat{H}\hat{E}.$$

Это соотношение выражает, следовательно, «закон сохранения кратности вырождения»: если некоторый энергетический уровень замкнутой системы обладает определенной кратностью вырождения, то эта кратность сохраняется со временем. Вспоминая, что различным представлениям соответствуют различные уровни энергии и, вообще говоря, не по одному, так как энергия существенно зависит от вида потенциальной энергии, а не только от симметрических свойств потенциала, можно записать:

$$E(\nu, \varkappa_1, \ldots, \varkappa_p). \tag{10,10}$$

Заданием величин

$$\nu, \varkappa_1, \ldots, \varkappa_p \tag{10,11}$$

состояние системы еще не определяется полностью, так как, согласно теореме § 9, к набору (10,11) вместе со всякой функцией $\psi(x)$ будет принадлежать и функция $A\psi(x)$, а следовательно, будет иметь место вырождение. Кратность вырождения определяется, согласно общим теоретико-групповым рассмотрениям, размерностью представления, по которому преобразуются функции данного уровня энергии. Если часть образующих элементов группы перестановочна между собой, то собственные значения соответствующих им операторов могут быть найдены одновременно с набором (10,11). Пусть их собственные значения будут

$$\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_q. \tag{10,12}$$

Тогда состояние системы полностью описывается совокупностью величин

$$\nu, \varkappa_1, \ldots, \varkappa_p, \alpha_1, \ldots, \alpha_q, \tag{10,13}$$

которую можно назвать полным набором физических величин, необходимых для описания рассматриваемой квантовомеханической системы. Таким образом, состояние системы будет описываться волновой функцией вида

$$\psi = \psi_{\nu, \varkappa_i, \alpha_j}(x). \tag{10,14}$$

Уже здесь можно высказать следующие замечания.

1. Всякое преобразование симметрии можно рассматривать как преобразование, переводящее функцию $\psi_{\nu, \varkappa_l, \alpha_j}(x)$ в некоторую функцию $\psi'_{\nu, \varkappa_l, \alpha_j}(x)$ или как преобразование набора (10,12) в некоторый другой набор. Отсюда следует, что полное снятие вырождения будет осуществляться при симметрии, оставляющей набор (10,12) инвариантным. Наличие случайного вырождения продиктовано тем, что два значения набора (10,12) равноправны между собой по причинам, обусловленным ни симметрией системы, ни вещественностью гамильтониана.

2. Указанный нами способ нахождения сохраняющихся величин и полного набора позволяет сразу указать, какие из найденных величин не потеряют свой смысл при изменении симметрии и, следовательно, будут пригодны для описания новой системы.

3. Кроме того, такое рассмотрение дает возможность произвести относительное разбиение всех характеристик системы на внешние и внутренние. Внешние характеристики описывают движение всей системы в целом, тогда как внутренние обусловлены взаимодействием отдельных частей системы.

11. ЗАДАЧА АТОМА ВОДОРОДА

Уравнение Шредингера, описывающее движение электрона в центральном поле, может быть записано в виде

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\psi}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\right.$$
$$\left.+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}\right]+\frac{2m}{h^2}\left[E-V(r)\right]\psi=0. \qquad (11,1)$$

Нас будут интересовать решения этого уравнения, соответствующие дискретной ветви спектра собственных значений. В этом случае решения (11,1) имеют вид

$$\psi_{n,l,m_l}(r,\ \theta,\ \varphi)=R_{n,l}(r)\,Y_l^{m_l}(\theta,\ \varphi), \qquad (11,2)$$

а собственные значения будут

$$E=E(n,\ l), \qquad (11,3)$$

где n — главное квантовое число, определяемое видом потенциальной энергии; l — квантовое число квадрата момента количества движения; m_l — квантовое число проекции момента количества движения на ось z.

Группой симметрии уравнения Шредингера с центрально-симметрическим потенциалом является группа полной сферической симметрии $\mathfrak{K}_h$. Эта группа содержит повороты вокруг любой оси, проходящей через центр, на любой угол и отражения в любой плоскости, проходящей через ту же точку. Она содержит в качестве подгруппы группу $\mathfrak{K}$ всех пространственных поворотов. Группа $\mathfrak{K}_h$ может быть получена из группы $\mathfrak{K}$ добавлением центра симметрии

$$\mathfrak{K}_h = \mathfrak{K}_i \times \mathfrak{C}_i. \tag{11,4}$$

Сферические функции $Y_l^{m_l}(\theta, \varphi)$, входящие в решение (11,2), преобразуются согласно неприводимым представлениям D_l группы вращений. Иными словами, по представлениям D_l с целым l преобразуются собственные функции электронов без учета спина. Представления D_j с полуцелым индексом j дают закон преобразования угловой части собственных функций электрона при учете спина. Следует отметить еще, что чисто спиновые функции, которые будем обозначать через $\xi(\sigma)$, $\eta(\sigma)$, преобразуются согласно представлению $D_{1/2}$.

Однако поскольку, исходя из уравнения Шредингера, нельзя получить собственные функции «спинового» электрона, то обычно принимают, что собственные функции, описывающие состояния электрона с учетом спина, являются произведениями координатных функций на чисто спиновые, т. е.

$$\left.\begin{aligned} \psi &= \psi_{n, l, m_l}(r, \theta, \varphi)\, \xi(\sigma), \\ \psi &= \psi_{n, l, m_l}(r, \theta, \varphi)\, \eta(\sigma). \end{aligned}\right\} \tag{11,5}$$

Эти функции преобразуются по представлению, являющемуся прямым произведением представлений D_l и $D_{1/2}$. Однако это представление приводимо:

$$D_l \times D_{1/2} = D_{l+1/2} + D_{l-1/2}, \tag{11,6}$$

т. е. при учете спина терм с данной орбитой расщепляется на два уровня, энергия каждого из которых определяется квантовым числом квадрата полного момента количества движения электрона

$$j = l \pm \frac{1}{2}. \tag{11,7}$$

Из (11,7) видно, что одно и то же значение j может быть получено двояко:

$$j = l + \frac{1}{2}, \quad j = (l+1) - \frac{1}{2}. \tag{11,8}$$

Отвечающие этим значениям j уровни энергии различаются поведением соответствующих им собственных функций при инверсии, а именно, функции с четным l при инверсии не меняют свой знак, функции же с нечетным l меняют знак на обратный.

Таким образом, можно записать, что состояния электрона при учете спина будут описываться собственными функциями вида

$$\psi_s^* = \psi_{n,\, j,\, l,\, m_j}(r,\ \theta,\ \varphi,\ \sigma) \tag{11,9}$$

с собственными значениями

$$E = E(n,\ j,\ l). \tag{11,10}$$

Теперь проведем исследование этой же задачи по схеме § 10. Как уже указывалось, гамильтониан системы остается инвариантным под воздействием операций группы $\mathfrak{K}_h$. В качестве образующих элементов группы можно выбрать бесконечно малые преобразования [см. (7,10)]

$$\left.\begin{aligned} \hat{I}_x &= -\left(y\frac{\partial}{\partial z} - z\frac{\partial}{\partial y}\right), \\ \hat{I}_y &= -\left(z\frac{\partial}{\partial x} - x\frac{\partial}{\partial z}\right), \\ \hat{I}_z &= -\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) \end{aligned}\right\} \tag{11,11}$$

и инверсию I. Операторы бесконечно малых преобразований (11,11) с точностью до постоянного множителя совпадают с операторами проекций момента количества движения $\hat{J}$ на оси x, y и z соответственно. Таким образом, из условия инвариантности гамильтониана по отношению к вращениям следует закон сохранения момента количества движения $\hat{J}$.

Заметим теперь, что операторы (11,11) не перестановочны между собой, а потому их собственные значения не могут быть определены одновременно. Это означает, что будет иметь место вырождение.

Группа $\mathfrak{K}_h$ распадается на следующие классы сопряженных элементов:

E — единичный элемент;
$K(u)$ — все повороты на данный угол u;
I — инверсия;
$IK(u)$ — повороты с инверсией.

Характеры ее представлений приводятся в таблице 2.

Обозначая поворот на угол φ вокруг оси z через $C(\varphi)$, можем написать:

$$C(\varphi)\,\psi = e^{im\varphi}\psi. \tag{11,12}$$

Таким образом, операторы, представляющие полный набор физических величин, будут

$$\hat{K}(u),\quad \hat{I},\quad \hat{C}(\varphi). \tag{11,13}$$

Как известно, всякое конечное движение $A(t)$ может быть выражено через соответствующее ему бесконечно малое преобразование X в виде

$$A(t)=e^{Xt}. \tag{11,14}$$

Согласно этому поворот на угол u вокруг некоторой произвольной оси может быть записан следующим образом:

$$\exp\left[\left(\hat{I}_x \sin\theta' \cos\varphi' + \hat{I}_y \sin\theta' \sin\varphi' + \hat{I}_z \cos\varphi'\right) u\right]. \tag{11,15}$$

Для того чтобы получить оператор класса, надо проинтегрировать

Таблица 2

$\mathfrak{K}_h$	E	$K(u)$	I	$I \cdot K(u)$
Γ_j	$(2j+1)$	$\dfrac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)u}{\sin\frac{1}{2}u}$	$(2j+1)$	$\dfrac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)u}{\sin\frac{1}{2}u}$
Γ'_j	$(2j+1)$	$\dfrac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)u}{\sin\frac{1}{2}u}$	$-(2j+1)$	$-\dfrac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)u}{\sin\frac{1}{2}u}$

(11,15) по всем возможным направлениям вращения. Следовательно,

$$\hat{K}(u)=\frac{1}{4\pi}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\exp\left[\left(\hat{I}_x \sin\theta' \cos\varphi' + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \hat{I}_y \sin\theta' \sin\varphi' + \hat{I}_z \cos\theta'\right) u\right] \sin\theta' \, d\varphi' \, d\theta'. \tag{11,16}$$

Собственные значения этого оператора находятся по формуле (10,9) с учетом таблицы 2 и равны

$$\frac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)u}{(2j+1)\sin\frac{1}{2}u}=\varkappa(j,\ u), \tag{11,17}$$

т. е. справедливо равенство

$$\hat{K}(u)\psi=\varkappa(j,\ u)\psi. \tag{11,18}$$

Если теперь разложить левую и правую части (11,18) в ряд по u

и, считая u малым, ограничиться первыми членами разложения, то будем иметь*):

$$\left[1+\frac{u^2}{3}\left(I_x^2+I_y^2+I_z^2\right)\right]\psi=\left[1-\frac{u^2}{3}\,j(j+1)\right]\psi. \qquad (11{,}19)$$

Отсюда следует, что

$$\left(I_x^2+I_y^2+I_z^2\right)\psi=-j(j+1)\,\psi \qquad (11{,}20)$$

или

$$\hat{J}^2\psi=j(j+1)\psi. \qquad (11{,}21)$$

Таким образом, можно сказать, что оператор (11,16) с собственными значениями (11,17) представляет собой величину, тесно связанную с квадратом момента количества движения.

Оператор $\hat{I}$ имеет собственные значения, равные ± 1, и, как хорошо известно, характеризует четность состояния. Следовательно, окончательно можно записать:

$$E=E(n,\ j,\ \pm 1). \qquad (11{,}22)$$

(Еще раз отметим, что квантовое число n не может быть определено из симметрии задачи.) Так как термы с данным j и данной четностью $(2j+1)$-кратно вырождены, то различные состояния, принадлежащие данному уровню, можно различать по собственным значениям оператора $\hat{C}(\varphi)$. Легко показать, что этот оператор в предельном случае малых φ переходит в оператор проекции момента количества движения на ось z с собственными значениями m_j. Следовательно, для волновой функции электрона в поле центральных сил получаем:

$$\psi=\psi_{n,\,j,\,\pm 1,\,m_j}(r,\ \theta,\ \varphi,\ \sigma). \qquad (11{,}23)$$

12. СОСТОЯНИЯ ЭЛЕКТРОНА В КРИСТАЛЛИЧЕСКОМ ПОЛЕ [4,11]

Когда электрон находится в кристаллическом поле, то уравнение Шредингера для него остается инвариантным лишь под действием операций симметрии этого кристаллического поля. Иными словами, среди движений электрона, оставляющих инвариантными уравнение Шредингера, уже не будет бесконечно малых преобразований,

*) В левой части производится разложение подинтегрального выражения (11,16) в ряд по u; затем, выполнив почленное интегрирование по θ' и φ', находят результат (11,19).

что в свою очередь ведет к нарушению обычных законов сохранения. Теперь роль сохраняющихся величин будут играть некоторые квазивеличины, связанные, как это показано ранее, с симметрией исследуемого поля.

Группой симметрии уравнения Шредингера, описывающего стационарные состояния электрона в кубическом кристалле, является группа $\mathfrak{O}_h$. В качестве ее образующих элементов можно выбрать:

A — поворот на $\frac{\pi}{2}$ вокруг оси x;

B — поворот на $\frac{\pi}{2}$ вокруг оси y;

I — инверсия относительно начала координат.

Так как A и B не перестановочны между собой, то собственные значения соответствующих им операторов не могут быть определены одновременно, откуда следует, что будет иметь место вырождение. Для того чтобы найти полный набор сохраняющихся величин, надо произвести прежде всего разбиение элементов группы $\mathfrak{O}_h$ на классы сопряженных элементов и выбрать среди них независимые.

Хорошо известно, что в любой группе единичный элемент образует сам по себе класс. Характер этого класса совпадает с размерностью представления, т. е. с кратностью вырождения соответствующего уровня. Кроме того, поскольку инверсия перестановочна со всеми элементами любой точечной кристаллографической группы, то она также составляет отдельный класс. Собственные значения оператора инверсии равны ± 1 и, как уже говорилось, характеризуют четность состояния. Обе эти характеристики — размерность и четность — могут быть определены сразу и мы будем считать их впредь уже известными. Тогда достаточно будет рассмотреть лишь класс, состоящий из поворотов на $\pi/2$ вокруг координатных осей. Если считать оператор класса равным сумме операторов, соответствующих всем входящим в него элементам группы, деленной на число элементов в классе, то уравнение для определения собственных значений и собственных функций оператора класса имеет вид

$$\hat{K}\psi_i = \frac{\chi^{(i)}}{n_i}\psi_i, \qquad (12,1)$$

где $\chi^{(i)}$ — характер класса; n_i — размерность представления.

Таким образом, можно сказать, что энергетический терм в кубическом кристалле будет характеризоваться определенной кратностью вырождения, определенной чётностью и определенным собственным значением $\varkappa$ оператора $\hat{K}$, которые находятся по формуле (12,1). Вырожденные состояния можно различать друг с другом по собственным значениям α оператора $\hat{C}$, соответствующего операции поворота вокруг оси z на угол $\frac{\pi}{2}$. Итак, в кубическом кристалле возможны следующие типы энергетических состояний (табл. 3).

Таблица 3

Энергетический терм	Кратность вырождения	Четность	χ	a
E_1	1	Четный	1	1
E_1'	1	Нечетный	1	1
E_2	1	Четный	-1	-1
E_2'	1	Нечетный	-1	-1
E_3	2	Четный	0	$1, -1$
E_3'	2	Нечетный	0	$1, -1$
E_4	3	Четный	$-\frac{1}{3}$	$-1, i, -i$
E_4'	3	Нечетный	$-\frac{1}{3}$	$-1, i, -i$
E_5	3	Четный	$\frac{1}{3}$	$1, i, -i$
E_5'	3	Нечетный	$\frac{1}{3}$	$1, i, -i$

Для того чтобы выяснить, какой физический смысл имеют операторы $\hat{K}$ и $\hat{C}$, удобно представить их через бесконечно малые преобразования. Тогда операторы поворотов вокруг координатных осей на конечный угол можно записать в виде

$$\left.\begin{aligned} \hat{A}(u) &= e^{\hat{I}_x u}, \\ \hat{B}(u) &= e^{\hat{I}_y u}, \\ \hat{C}(u) &= e^{\hat{I}_z u}, \end{aligned}\right\} \qquad (12,2)$$

где $\hat{I}_x$, $\hat{I}_y$, $\hat{I}_z$ — операторы бесконечно малых вращений вокруг осей x, y и z соответственно.

Так как, по определению, оператор рассматриваемого класса можно представить в виде

$$\hat{K}(u) = \frac{1}{6}\left[\hat{A}(u) + \hat{A}^{-1}(u) + \hat{B}(u) + \hat{B}^{-1}(u) + \hat{C}(u) + \hat{C}^{-1}(u)\right], \qquad (12,3)$$

то, учитывая (12,2) и вспоминая, что операторы бесконечно малых вращений связаны с операторами проекций момента количества движения на координатные оси соотношениями (6,11)

$$\hat{L}_x = i\hat{I}_x,\ \hat{L}_y = i\hat{I}_y,\ \hat{L}_z = i\hat{I}_z,$$

окончательно будем иметь:

$$\hat{K}(u) = \frac{1}{3}\left[\cos\hat{L}_x u + \cos\hat{L}_y u + \cos\hat{L}_z u\right], \tag{12,4}$$

а также

$$\hat{C}(u) = e^{-i\hat{L}_z u}. \tag{12,5}$$

Следовательно, можно сделать вывод, что оператор $\hat{K}(u)$ с собственными значениями $\varkappa$ представляет некоторую сохраняющуюся физическую величину, тесно связанную с полным моментом количества движения системы, а оператор $\hat{C}(u)$ с собственными значениями α — физическую величину, аналогичную проекции момента количества движения на ось z. Для того чтобы определить собственные функции этих операторов, надо решить уравнения:

$$\hat{K}(u)\psi(\theta,\ \varphi) = \varkappa\psi(\theta,\ \varphi), \tag{12,6}$$

$$\hat{C}(u)\psi(\theta,\ \varphi) = \alpha\psi(\theta,\ \varphi). \tag{12,7}$$

Однако решение так поставленной задачи сопряжено с большими математическими трудностями,и потому мы подойдем к исследованию вопроса несколько иным способом, а именно попытаемся определить, какие комбинации сферических функций $Y_l^m(\theta,\ \varphi)$ $(m = -l,\ \ldots,\ +l)$, т. е. собственных функций квадрата момента количества движения электрона в атоме, удовлетворяют этим условиям. Используемые сферические функции будем предполагать нормированными. Тогда возможны три пути решения вопроса, два из которых кратко изложены ниже, а третий — более подробно в § 13.

1. Разложим оператор (12,4) в ряд по степеням u:

$$\hat{K}(u) = 1 + \frac{1}{3}\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^k\frac{u^{2k}}{(2k)!}\hat{L}_k, \tag{12,8}$$

где

$$\hat{L}_k = \hat{L}_x^{2k} + \hat{L}_y^{2k} + \hat{L}_z^{2k}. \tag{12,9}$$

Зная, как действуют на функции $Y_l^m\ (m = -l,\ \ldots\ +l)$ операторы $\hat{L}_x$, $\hat{L}_y$, $\hat{L}_z$, можно определить результат действия на эти функции и операторов $\hat{L}_x^{2k}$, $\hat{L}_y^{2k}$, $\hat{L}_z^{2k}$. Затем можно найти собственные функции и собственные значения операторов $\hat{L}_k$ и, следовательно, также собственные функции и собственные значения оператора $\hat{K}(u)$.

2. Известно, что сферические функции преобразуются согласно неприводимым представлениям D_l группы вращений. Следовательно, операторы (12,2), а вместе с ними и оператор $\hat{K}(u)$ в форме (12,3), могут быть представлены через соответствующие им в этом представлении матрицы. Диагонализируя полученную так матрицу для $\hat{K}(u)$ и находя ее собственные векторы, мы и определим собственные функции и собственные значения указанного оператора.

Опуская элементарные, но громоздкие вычисления, приведем лишь таблицу окончательных результатов.

Приведенные в таблице 4 функции являются собственными функциями операторов (12,4) и (12,5). Но из таблицы видно, что одним и тем же собственным значениям этих операторов могут удовлетворять несколько собственных функций. Следовательно, для того чтобы получить собственные функции, удовлетворяющие уравнению Шредингера данной возмущенной задачи и обладающие нужной симметрией, требуется составить линейные комбинации функций, принадлежащих к одним и тем же собственным значениям уравнений (12,6) и (12,7). Из таблицы также видно, что энергетические термы различаются величиной

$$\frac{1}{n}\sum_{\mu}\cos\mu u, \tag{12,10}$$

где n — кратность вырождения, а состояния — величиной

$$e^{i\mu u}, \tag{12,11}$$

причем

$$\mu = 0,\ \pm 1,\ 2 \tag{12,12}$$

естественно назвать проекцией квазимомента на ось z.

На основании всего вышеизложенного можно сделать следующие выводы. Для электрона в поле кубической симметрии сохраняющимися величинами являются энергия электрона, квазимомент количества движения, описываемый оператором класса $\hat{K}(u)$, и квазипроекция момента количества движения на ось z, описываемая оператором $e^{-i\hat{L}_z u}$. Энергетические уровни нумеруются квантовыми числами ν и $\varkappa$, причем ν зависит от вида потенциальной энергии и не может быть определено из соображений симметрии, а $\varkappa$ — собственное значение оператора $\hat{K}$. Вырожденные состояния нумеруются квантовым числом μ, определяемым с точностью до сравнения по модулю 4.

Таблица 4

Атомный терм	Собственное значение оператора $\hat{K}(u)$	$\hat{K}\left(\frac{\pi}{2}\right)$	$C(u)$ при $u=\frac{\pi}{2}$	Собственные функции	Терм
s	1	1	$1=1$	Y_0^0	E_1
p	$\frac{1}{3}[1+2\cos u]$	$\frac{1}{3}$	$e^{iu}=i$	Y_1^{-1}	E_5'
			$1=1$	Y_1^0	
			$e^{-iu}=-i$	Y_1^1	
d	$\frac{1}{2}[1+\cos 2u]$	0	$e^{2iu}=-1$	$\frac{\sqrt{2}}{2}\left(Y_2^2+Y_2^{-2}\right)$	E_3
			$1=1$	Y_2^0	
	$\frac{1}{3}[2\cos u+\cos 2u]$	$-\frac{1}{3}$	$e^{2iu}=-1$	$\frac{\sqrt{2}}{2}\left(Y_2^2-Y_2^{-2}\right)$	E_4
			$e^{iu}=i$	Y_2^{-1}	
			$e^{-iu}=-i$	Y_2^1	

Продолжение таблицы 4

Атомный терм	Собственное значение оператора $\hat{K}(u)$	$\hat{K}\left(\frac{\pi}{2}\right)$	$C(u)$ при $u=\frac{\pi}{2}$	Собственные функции	Терм
f	$\cos 2u$	-1	$e^{2iu}=-1$	$\frac{\sqrt{2}}{2}\left(Y_3^2-Y_3^{-2}\right)$	E_2'
	$\frac{1}{3}\left[\frac{5}{4}\cos u+\cos 2u+\frac{3}{4}\cos 3u\right]$	$-\frac{1}{3}$	$e^{2iu}=-1$	$\frac{\sqrt{2}}{2}\left(Y_3^2+Y_3^{-2}\right)$	E_4'
			$e^{iu}=i$	$\frac{\sqrt{6}}{4}Y_3^3-\frac{\sqrt{10}}{4}Y_3^{-1}$	
			$e^{-iu}=-i$	$\frac{\sqrt{6}}{4}Y_3^{-3}-\frac{\sqrt{10}}{4}Y_3^1$	
	$\frac{1}{3}\left[1+\frac{3}{4}\cos u+\frac{5}{4}\cos 3u\right]$	$\frac{1}{3}$	$e^{iu}=i$	$\frac{\sqrt{10}}{4}Y_3^3+\frac{\sqrt{6}}{4}Y_3^{-1}$	E_5'
			$1=1$	Y_3^0	
			$e^{-iu}=-i$	$\frac{\sqrt{10}}{4}Y_3^{-3}+\frac{\sqrt{6}}{4}Y_3^{-1}$	

Продолжение таблицы 4

Атомный терм	Собственное значение оператора $\hat{K}(u)$	$\hat{K}\left(\frac{\pi}{2}\right)$	$C(u)$ при $u=\frac{\pi}{2}$	Собственные функции	Терм
g	$\left[\frac{7}{12}+\frac{5}{12}\cos 4u\right]$	1	$1=1$	$\sqrt{\frac{7}{12}}\,Y_4^0+\sqrt{\frac{5}{24}}\,(Y_4^4+Y_4^{-4})$	E_1
	$\frac{1}{2}\left[\frac{5}{12}+\cos 2u+\frac{7}{12}\cos 4u\right]$	0	$1=1$	$\sqrt{\frac{5}{12}}\,Y_4^0-\sqrt{\frac{7}{24}}\,(Y_4^4-Y_4^{-4})$	E_3
			$e^{2iu}=-1$	$\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_4^2+Y_4^{-2})$	
	$\frac{1}{3}\left[\frac{1}{4}\cos u+\cos 2u+\frac{7}{4}\cos 3u\right]$	$-\frac{1}{3}$	$e^{2iu}=-1$	$\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_4^2-Y_4^{-2})$	E_4
			$e^{iu}=i$	$\sqrt{\frac{1}{8}}\,Y_4^{-1}-\sqrt{\frac{7}{8}}\,Y_4^3$	
			$e^{-iu}=-i$	$\sqrt{\frac{1}{8}}\,Y_4^1-\sqrt{\frac{7}{8}}\,Y_3^{-3}$	
	$\frac{1}{3}\left[\frac{7}{4}\cos u+\frac{1}{4}\cos 3u+\cos 4u\right]$	$\frac{1}{3}$	$e^{iu}=i$	$\sqrt{\frac{7}{8}}\,Y_4^{-1}+\sqrt{\frac{1}{8}}\,Y_5^3$	E_5
			$1=1$	$\frac{\sqrt{2}}{2}(Y_4^4-Y_4^{-4})$	
			$e^{-iu}=-i$	$\sqrt{\frac{7}{8}}\,Y_4^1+\sqrt{\frac{1}{8}}\,Y_4^{-3}$	

13. РАСЩЕПЛЕНИЕ АТОМНЫХ ТЕРМОВ В КРИСТАЛЛЕ БЕЗ УЧЕТА СПИНА[4, 12]

Возмущение свободного атома при введении его в кристалл может происходить по двум причинам: с одной стороны, атом вступает в электронный обмен с другими атомами кристалла, с другой стороны, на атом в кристалле действует обусловленное остальными атомами электрическое поле определенной симметрии.

Электрическое поле кристалла вызывает расщепление термов невозмущенного атома, подобное расщеплению при эффекте Штарка и характерное для симметрии поля кристалла. В § 9 отмечалось, что если вырождение энергетических уровней системы связано с наличием одинаковых элементов симметрии, то, очевидно, снятие вырождения (расщепление термов) вызывается понижением симметрии. Действительно, если система, например атом, подвергается воздействию некоторого внешнего силового поля с симметрией более низкой, чем симметрия свободной от поля системы, то последняя как бы приспособляется к симметрии возмущающего поля и понижает свою симметрию до симметрии возмущения. Число компонент, на которые расщепляется терм свободного атома, растет с понижением симметрии.

В зависимости от величины расщепления различают три случая.

1. Расщепление, вызванное полем кристалла, значительно больше расстояний между различными мультиплетами ($s - p$, $p - d$, ... и т. д.), т. е. поле кристалла сильнее, чем взаимодействие электронов в атоме. В этом случае исходят из модели свободного атома с квантовыми числами n_i и l_i для отдельного электрона, а расщеплением термов за счет обменного взаимодействия пренебрегается. В первом приближении учитывается возмущение отдельных электронов полем кристалла, т. е. рассматриваются всевозможные ориентации момента количества движения l_i отдельного электрона относительно кристаллических осей и обусловленное этим расщепление терма атома. Во втором приближении следует учесть обмен электронов внутри атома. Это приводит к дальнейшему расщеплению терма, порядок которого сравним с расстоянием между различными мультиплетами. Наконец, спин-орбитальное взаимодействие даст обычное мультиплетное расщепление.

2. Расщепление, вызванное полем кристалла, мало́ сравнительно с расстоянием между разными мультиплетами, но велико по сравнению с расщеплением внутри отдельного мультиплета. В этом случае исходят из модели свободного атома с учетом расщепления терма за счет обменного взаимодействия, но без учета спин-орбитального взаимодействия. Такой атом следует поместить в кристалл и исследовать ориентацию его полного момента количества движения l относительно осей кристалла и обусловленное этим расщепление терма атома. Во втором приближении следует учесть спин-орбитальное взаимодействие.

3. Расщепление, вызванное полем кристалла, значительно меньшее расстояний между термами внутри мультиплета. Совершенно «готовый» атом (с учетом спин-орбитального взаимодействия) помещается в поле кристалла и исследуется расщепление его термов этим полем. Связь спин-орбита не разрушается полем кристалла и рассматривается ориентация полного момента количества движения j в кристалле.

Здесь рассматривается характерное возмущение атома, вызванное симметрией поля, и не принимается во внимание электронный обмен. Сразу же необходимо отметить, что указанное рассмотрение строго справедливо не в реальном кристалле, а скорее для атома, помещенного в поле определенной точечной симметрии, так как кристаллическая трансляционная инвариантность вызывает размытие уровней в полосы, т. е. приводит к зависимости энергии от квазиимпульса.

Метод расчета основан на том, что уравнение Шредингера для физической системы инвариантно по отношению к преобразованиям симметрии этой системы. При преобразованиях симметрии волновые функции стационарных состояний системы, относящихся к одному и тому же уровню энергии, преобразуются друг через друга, т. е. осуществляют представление группы симметрии. Размерность этого представления определяет кратность вырождения данного уровня, т. е. число различных состояний с данной энергией. Однако следует оговорить, что если некоторый набор функций и набор комплексно сопряженных с ним функций осуществляют различные неприводимые представления группы, то эти два комплексно сопряженных представления должны с физической точки зрения рассматриваться вместе, как одно представление с удвоенной размерностью.

Пусть физическая система подвергается воздействию некоторого возмущения. Рассмотрим, когда это возмущение может привести к расщеплению вырожденных уровней. Внешнее поле (возмущение) имеет само по себе некоторую собственную симметрию. Если симметрия поля та же или более высокая, чем симметрия невозмущенной системы, то симметрия возмущенного гамильтониана

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}$$

совпадает с симметрией невозмущенного оператора $\hat{H}_0$ и никакого расщепления уровней происходить не будет. Однако если симметрия возмущения ниже симметрии невозмущенной системы, то симметрия гамильтониана $\hat{H}$ будет совпадать с симметрией возмущения $\hat{W}$. Волновые функции, которые осуществляли неприводимое представление группы симметрии оператора $\hat{H}_0$, будут осуществлять также и представление группы симметрии возмущенного оператора $\hat{H}$, но это представление может оказаться приводимым, что и означает расщепление вырожденного уровня, т. е. полный набор функций разобьется на такие поднаборы, функции которых преобразуются только друг через друга при действии операций симметрии.

Посмотрим, как расщепятся термы при переходе от свободного атома к кубическому кристаллу (в этом параграфе мы будем пренебрегать наличием спина). Для этого найдем характеры классов сопряженных элементов группы $\mathfrak{O}$ в представлении, осуществляемом при помощи матриц представления группы вращения. Заметим еще, что при пренебрежении спином нам нет необходимости учитывать четность состояний по отношению к инверсии, так как она уже автоматически учитывается квантовым числом l. Вспоминая, какие операции содержит каждый класс, по формуле (6,21) находим:

$$\mathrm{X}_1 = \mathrm{X}_l(0) = 2l+1,$$
$$\mathrm{X}_2 = \mathrm{X}_4 = \mathrm{X}_l(\pi) = (-1)^l,\quad \mathrm{X}_5 = \mathrm{X}_l\left(\frac{2\pi}{3}\right) = \begin{cases} 1 & l \equiv 0 \bmod 3, \\ 0 & l \equiv 1 \bmod 3, \\ -1 & l \equiv 2 \bmod 3. \end{cases}$$
$$\mathrm{X}_3 = \mathrm{X}_l\left(\frac{\pi}{2}\right) = (-1)^{\left[\frac{l}{2}\right]},$$

По полученным формулам легко составить таблицу характеров представлений, получающихся при различных значениях l. Как уже говорилось, эти представления будут, вообще говоря, приводимыми, а следовательно, их можно разложить на неприводимые части, т. е. на неприводимые представления группы $\mathfrak{O}$. Результаты сведены в таблицу 5.

Таким образом, указанный способ позволяет нам определить, на какие составляющие расщепляется терм невозмущенной системы при введении ее в возмущающее поле, какова будет кратность вырождения новых термов. Естественно возникает вопрос о том, какие собственные функции невозмущенной задачи соответствуют каждому из новых термов, а для этого нужно узнать собственные функции, соответствующие каждому неприводимому представлению.

Пусть у нас имеется набор $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_n$ собственных функций невозмущенной задачи, осуществляющих некоторое представление Γ для группы симметрии возмущающего поля, и пусть $\Gamma_1, \Gamma_2, \ldots$ — неприводимые представления этой группы. Действуя на набор собственных функций операциями симметрии группы, мы выбираем из них сначала те, которые преобразуются по представлению Γ_1, затем те, которые преобразуются по представлению Γ_2 и т. д. Таким образом, мы узнаем, какого сорта функции соответствуют различным неприводимым представлениям, а следовательно, и то, какие функции будут принадлежать новым термам. Результат будет тот же самый, что и в § 12. Однако следует подчеркнуть, что в §§ 12 и 13 решаются, вообще говоря, совершенно разные задачи. В первом случае обсуждается вопрос об описании электронных состояний в поле кристалла кубической симметрии, во втором — вопрос об

Таблица 5

l	Характеры классов группы октаэдра в представлениях матрицами группы вращений					Разложение на неприводимые представления	Число термов
	K_1	K_2	K_3	K_4	K_5		
0	1	1	1	1	1	Γ_1	1
1	3	−1	1	−1	0	Γ_5	1
2	5	1	−1	1	−1	$\Gamma_3+\Gamma_4$	2
3	7	−1	−1	−1	1	$\Gamma_2+\Gamma_4+\Gamma_5$	3
4	9	1	1	1	0	$\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_4+\Gamma_5$	4
5	11	−1	1	−1	−1	$\Gamma_3+\Gamma_4+2\Gamma_5$	4
6	13	1	−1	1	1	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+2\Gamma_4+\Gamma_5$	6
7	15	−1	−1	−1	0	$\Gamma_2+2\Gamma_3+2\Gamma_4+2\Gamma_5$	6
8	17	1	1	1	−1	$\Gamma_1+2\Gamma_3+2\Gamma_4+2\Gamma_5$	7
9	19	−1	1	−1	1	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+2\Gamma_4+3\Gamma_5$	8
10	21	1	−1	1	0	$\Gamma_1+\Gamma_2+2\Gamma_3+3\Gamma_4+2\Gamma_5$	9
11	23	−1	−1	−1	−1	$\Gamma_2+2\Gamma_3+3\Gamma_4+3\Gamma_5$	9
12	25	1	1	1	1	$R+\Gamma_1$	11
$12p+q$	Здесь R обозначает регулярное представление					$Rp+$ составляющие части для $l=q$	

изменении атомных состояний под действием такого возмущающего поля. Совпадение результатов начинается с того момента, когда речь идет об определении собственных функций нулевого приближения, так как и в том и в другом случае исходными являются сферические функции.

14. РАСЩЕПЛЕНИЕ АТОМНЫХ ТЕРМОВ В КРИСТАЛЛЕ С УЧЕТОМ СПИНА [4, 12, 13]

При исследовании вопроса о расщеплении атомных термов в кристалле с учетом спина, т. е. при полуцелом j, возникает трудность, связанная с тем, что представления группы $\mathfrak{K}$ являются двузначными. Трудность состоит в том, что для разложения этих представлений на неприводимые представления кристаллографических групп необходимо знать с самого начала двузначные неприводимые представления кристаллографических групп, а обычная процедура дает лишь однозначные представления. Для отыскания двузначных представлений удобно применять следующий искусственный прием. Введем чисто формальным образом понятие о новом элементе группы (обозначим его посредством R) — повороте на 2π вокруг произвольной оси, как об элементе, отличном от единичного, но совпадающем с E при своем двукратном применении: $R^2 = E$. В соответствии с этим повороты A_n вокруг осей симметрии n-го порядка будут давать тождественное преобразование лишь после $2n$-кратного, а не n-кратного своего применения:

$$A_n^n = R, \quad A_n^{2n} = E.$$

Инверсия I как операция, коммутирующая со всяким поворотом, должна при двукратном применении по-прежнему давать E. Дополняя элементы группы кристалла элементами, которые получаются при умножении их на R, мы получаем так называемую двойную точечную группу. Порядок двойной группы вдвое больше порядка исходной группы. Двузначные представления действительной точечной группы будут, очевидно, однозначными представлениями соответствующей двойной группы, так что для их отыскания можно применять обычные приемы.

Число классов в двойной группе больше, чем в исходной, но, вообще говоря, не вдвое. Элемент R коммутирует со всеми другими элементами группы и потому составляет сам по себе класс. Действительно, R коммутирует как с инверсией, так и с любым вращением. Для операции отражения это следует из того, что последняя всегда может быть выражена в виде произведения поворота и инверсии.

Если ось симметрии двусторонняя, то в двойной группе это означает сопряженность элементов A_n^k и $RA_n^{n-k} = A_n^{2n-k}$. В связи с этим при наличии осей второго порядка распределение элементов по классам зависит также от того, являются ли эти оси двусторонними. В обычных группах это не существенно, так как $A_2 = A_2^{-1}$.

В число всех неприводимых представлений двойной точечной группы входят, во-первых, представления, совпадающие с однозначными представлениями простой группы, причем элементу R, как и E, соответствует единичная матрица, и, во-вторых, двузначные представления простой группы, причем элементу R соответствует отрицательная единичная матрица.

Рассмотрим теперь двойную группу октаэдра. Эта группа включает в себя 48 элементов, распределенных в восьми классах, так как классам K_1, K_3, K_5 простой группы должно соответствовать по два класса двойной группы, т. е. имеем:

$$
\begin{aligned}
&K_1 \to K_1', \ K_2', \\
&K_2 \to K_2, \\
&K_3 \to K_3', \ K_3'', \\
&K_4 \to K_4, \\
&K_5 \to K_5', \ K_5''.
\end{aligned}
$$

Двойная группа октаэдра, следовательно, обладает тремя двузначными представлениями, в том числе одним четырехмерным и двумя двумерными (так как $48 = 24 + 2^2 + 2^2 + 4^2$, 24 соответствует сумме квадратов размерностей однозначных представлений). Характеры классов двойной группы октаэдра, дающей двузначные представления простой группы октаэдра, приведены в таблице 6.

Таблица 6

$\mathfrak{D}'$	K_1'	K_1''	K_2	K_3'	K_3''	K_4	K_5'	K_5''
Γ_6	2	-2	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	1	-1
Γ_7	2	-2	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	1	-1
Γ_8	4	-4	0	0	0	0	-1	1

Теперь перейдем к обсуждению вопроса о расщеплении термов в кубическом кристалле при учете спина электрона. В § 13 уже указывалось, что в этом случае следует различать две возможности. Во-первых, кристаллическое поле может разрушить спин-орбитальную связь. Тогда под действием этого поля в кристалле отдельно ориентируется как орбита l, так и спин s. Ориентация орбиты приводит к тому, что термы с данным l расщепляются на некоторые составляющие, характерные для симметрии поля. Последующий учет «ориентированного» спина дает дополнительное расщепление этих составляющих частей. Во-вторых, спин-орбитальная связь может сохраниться и в кристаллическом поле. В этом случае следует с самого начала учитывать то, что наличие спина электрона приводит к расщеплению терма с данной орбитой l на два терма, характеризуемых значениями квантового числа полного момента количества движения $j\left(j=l\pm\frac{1}{2}\right)$. Поэтому в кристалле будет ориентироваться уже полный момент количества движения электрона, что также приводит к расщеплению термов с данным j.

Начнем рассмотрение с первого случая. Для этого воспользуемся тем, что расщепление термов с определенным l уже приведено в таблице 5. Кроме того, заметим, что чисто спиновые функции при преобразованиях группы октаэдра преобразуются по представлению Γ_6. Тогда достаточно рассмотреть произведения $\Gamma_i\times\Gamma_6$ ($i=1, 2, 3, 4, 5$), т. е. исследовать расщепление кристаллических термов при учете спина. Результаты вычислений сведены в таблице 7.

Таблица 7

Представление	Разложение $\Gamma_i\times\Gamma_6$ на неприводимые составляющие	Число термов	Представление	Разложение $\Gamma_i\times\Gamma_6$ на неприводимые составляющие	Число термов
Γ_1	$\Gamma_1\times\Gamma_6=\Gamma_6$	1	Γ_4	$\Gamma_4\times\Gamma_6=\Gamma_7+\Gamma_8$	2
Γ_2	$\Gamma_2\times\Gamma_6=\Gamma_7$	1	Γ_5	$\Gamma_5\times\Gamma_6=\Gamma_6+\Gamma_8$	2
Γ_3	$\Gamma_3\times\Gamma_6=\Gamma_8$	1			

Для того чтобы рассмотреть второй случай, следуя обычной процедуре, находим характеры представлений двойной группы октаэдра, осуществляемых матрицами группы вращений:

$$X_1'=-X_2'=(2j+1),\quad X_2=X_4=0,$$

$$X_3'=-X_3''=\begin{cases}\sqrt{2} & j\equiv\frac{1}{2}\mod 4,\\ 0 & j\equiv\frac{3}{2}\,\frac{7}{2}\mod 4,\\ -\sqrt{2} & j\equiv\frac{5}{2}\mod 4,\end{cases}$$

$$X_5'=-X_5''=\begin{cases}1 & j\equiv\frac{1}{2}\mod 3,\\ -1 & j\equiv\frac{3}{2}\mod 3,\\ 0 & j\equiv\frac{5}{2}\mod 3.\end{cases}$$

Затем производим их разложение на неприводимые представления двойной группы октаэдра. Результаты приведены в таблице 8, из которой видно, на какое число компонент расщепляется тот или иной терм с полуцелым j.

Таблица 8

j	Характеры классов группы O'			Разложение на неприводимые представления	Число термов
	K_1'	K_3'	K_5'		
$\frac{1}{2}$	2	$\sqrt{2}$	1	Γ_6	1
$\frac{3}{2}$	4	0	−1	Γ_8	1
$\frac{5}{2}$	6	$-\sqrt{2}$	0	$\Gamma_7+\Gamma_8$	2
$\frac{7}{2}$	8	$\sqrt{2}$	1	$\Gamma_6+\Gamma_7+\Gamma_8$	3
$\frac{9}{2}$	10	0	−1	$\Gamma_6+2\Gamma_8$	3
$\frac{11}{2}$	12	$-\sqrt{2}$	0	$\Gamma_6+\Gamma_7+2\Gamma_8$	4
$\frac{13}{2}$	14	$\sqrt{2}$	1	$\Gamma_6+2\Gamma_7+2\Gamma_8$	5
$\frac{15}{2}$	16	0	−1	$\Gamma_6+\Gamma_7+3\Gamma_8$	5
$\frac{17}{2}$	18	$-\sqrt{2}$	0	$2\Gamma_6+\Gamma_7+3\Gamma_8$	6
$\frac{19}{2}$	20	$\sqrt{2}$	1	$2\Gamma_6+2\Gamma_7+3\Gamma_8$	7
$\frac{21}{2}$	22	0	−1	$\Gamma_6+2\Gamma_7+4\Gamma_8$	7
$\frac{23}{2}$	24	$-\sqrt{2}$	0	$2\Gamma_6+2\Gamma_7+4\Gamma_8$	8
$\frac{25}{2}$	26	$\sqrt{2}$	1	$(2\Gamma_6+2\Gamma_7+4\Gamma_8)+\Gamma_6$	9
$12p+q$				$p(2\Gamma_6+2\Gamma_7+4\Gamma_8)$ + составляющие части для $j=q$	

Проследим, например, эволюцию p терма при обоих способах расчета. Как известно, функции p терма преобразуются по представлению D_1 группы вращения. В кубическом кристаллическом поле они будут преобразовываться по представлению Γ_5. Образуя произведение $\Gamma_5\times\Gamma_6=\Gamma_6+\Gamma_8$, получаем, что при учете спина происходит расщепление. Следуя другому способу, мы должны образовать произведение $D_1 \times D_{1/2} = D_{1/2} + D_{3/2}$. При понижении симметрии до кубической правая часть снова даст $\Gamma_6 + \Gamma_8$.

Совпадение результатов (такое совпадение можно доказать и в общем виде) не должно казаться странным, так как полное число компонент, на которые расщепляется терм, должно быть одним и тем же вне зависимости от того, учитывается ли сначала кристаллическое поле, а затем спин, или наоборот. Сила поля будет сказываться лишь на величине расщепления. Однако следует подчеркнуть целесообразность обоих способов рассмотрения, так как на втором этапе вычислений они отвечают по существу на совершенно разные вопросы. Первый способ фактически указывает на то, как расщепляется кристаллический терм при учете спина, второй — как расщепляется атомный терм с учетом спина в кристаллическом поле.

15. ПРАВИЛА ОТБОРА [12, 14]

Одной из важнейших задач квантовой физики является нахождение вероятностей перехода из одного квантового состояния в другое. Эта вероятность перехода, согласно общему правилу квантовой механики, пропорциональна квадрату матричного элемента энергии взаимодействия системы с возмущающим полем. Матричный элемент можно представить в виде

$$\int \Psi^* \hat{\Lambda} \Phi d\tau, \tag{15,1}$$

где Φ — волновая функция начального состояния системы; $\hat{\Lambda}$ — оператор взаимодействия, вызывающий переход, и Ψ — конечное состояние системы после перехода. Для того чтобы найти вероятность перехода, конечно, необходимо вычислить матричный элемент (15,1). Однако во многих случаях, исходя из общих свойств симметрии системы, можно установить (без всякого вычисления матричного элемента), что взаимодействие $\hat{\Lambda}$ не может вызвать перехода в некоторое конечное состояние Ψ. В этом случае матричный элемент энергии взаимодействия обращается в нуль. Обычно равенство или неравенство нулю матричного элемента выражают через определенные соотношения между квантовыми числами начального и конечного состояний системы. Такие правила, разрешающие лишь некоторые переходы, называются правилами отбора.

Теория групп, опираясь на свойства симметрии системы, позволяет найти правила отбора для матричных элементов любых взаимодействий, не производя явного вычисления интеграла (15,1). Метод основывается на следующем утверждении. Если ψ_i и φ_j — функции базисов неприводимых представлений A и B группы симметрии $\mathfrak{G}$, то интеграл от их произведения, взятый по всему пространству изменения переменных, равен нулю, если A и B не эквивалентны.

Действительно, так как взятый по всему пространству интеграл инвариантен по отношению к любому преобразованию системы координат, в том числе и по отношению к любому преобразованию Q группы симметрии $\mathfrak{G}$, то имеем:

$$\int \psi_i^* \varphi_j d\tau = Q \int \psi_i^* \varphi_j d\tau = \int \sum_{k=1}^{n} a_{ik}^* \psi_k^* \sum_{l=1}^{m} b_{jl} \varphi_l d\tau. \tag{15,2}$$

Суммируя это равенство по всем элементам группы, учитывая соотношения ортогональности (4,6) и то, что интеграл слева просто умножается на порядок группы g, получим:

$$g \int \psi_i^* \varphi_j d\tau = \sum_{k,\, l} \int \left(\sum_{Q} a_{ik}^* b_{jl} \right) \psi_k \varphi_l d\tau =$$
$$= \begin{cases} 0 \text{ при } A \text{ не} \sim B, \\ \dfrac{g}{n} \delta_{ij} \sum\limits_{k=1}^{n} \displaystyle\int \psi_k^* \varphi_k d\tau \text{ при } A = B. \end{cases} \tag{15,3}$$

Таким образом, наше утверждение доказано. Заметим еще, что в случае, когда представления A и B одинаковы, равенство или неравенство нулю интеграла определяется тем, какие из функций базисов неприводимых представлений входят в произведение под знаком интеграла.

Если теперь образовать выражение

$$\int \Psi^* \Phi' d\tau, \tag{15,4}$$

где Ψ и Φ — две произвольные функции, а не обязательно функции базисов неприводимых представлений, и учесть, что любую волновую функцию Ψ можно разложить на составляющие части ψ_i, каждая из которых преобразуется по представлению Γ_i, то из предыдущего утверждения сразу вытекает следующее. Для того чтобы интеграл (15,4) был отличен от нуля, необходимо, чтобы в разложении функций Ψ и Φ' были функции, преобразующиеся по одинаковым представлениям.

Под действием преобразований группы $\mathfrak{G}$ волновые функции Ψ, Φ и оператор взаимодействия $\hat{\Lambda}$ будут преобразовываться по некоторым представлениям Γ_ψ, Γ_φ и Γ_λ этой группы соответственно. Вообще говоря, эти представления будут приводимыми. Волновая функция

$$\Phi' = \hat{\Lambda} \Phi \tag{15,5}$$

преобразуется согласно прямому произведению представлений

$$\Gamma_\lambda \times \Gamma_\varphi = \Gamma_{\varphi'}, \tag{15,6}$$

которое также в общем случае приводимо. Тогда матричный элемент (15,4) обращается в нуль, если приводимые представления $\Gamma_{\varphi'}$ и Γ_ψ не содержат общих неприводимых представлений Γ_i.

Применение этого способа в значительной мере упрощается в тех случаях, когда представления Γ_ψ, Γ_φ и Γ_λ, согласно которым преобразуются Ψ, Φ и $\hat{\Lambda}$, являются неприводимыми. Тогда следует лишь исследовать, содержит ли произведение $\Gamma_{\varphi'}$ представление Γ_ψ. Если $\Gamma_{\varphi'}$ содержит Γ_ψ, то матричный элемент отличен от нуля, в противном случае он равен нулю.

Таким образом, мы можем установить правила отбора для переходов системы с одного энергетического уровня на другой. Однако нам еще не известно, из какого состояния данного уровня в какое состояние конечного уровня переходит система. Для этого нужно учесть, что отличный от нуля интеграл получается, вообще говоря, лишь при совпадающих в формуле (15,3) значках у дельта-символа, т. е. при $i = j$. Если мы будем нумеровать состояние по собственным значениям одной и той же для всех термов физической величины, то это даст нам правила отбора для квантовых чисел, соответствующих этой величине.

Диагональные матричные элементы (в отличие от элементов для переходов между различными энергетическими уровнями одного типа) требуют специального рассмотрения. В этом случае имеется всего одна, а не две различные системы функций, и их попарные произведения друг с другом осуществляют симметрическое произведение представления Γ_i самого на себя, а не прямое произведение $\Gamma_i \times \Gamma_i$. Поэтому наличие диагональных матричных элементов у векторной величины требует наличия единичного представления в разложении произведения $[\Gamma_i^2] \times \Gamma_\lambda$ или, что то же самое, наличия Γ_λ в $[\Gamma_i^2]$.

Проиллюстрируем все сказанное выше на примере электронных переходов в кубическом кристалле. Будем считать, что состояния описываются с помощью используемых в § 12 квантовых чисел. Рассмотрим дипольные переходы. В этом случае оператор взаимодействия может быть записан в виде

$$\hat{\Lambda} = e\mathbf{r} \tag{15,7}$$

и преобразуется под действием преобразований группы по неприводимому представлению Γ_5. Определим правила отбора для четности. Так как сам оператор при инверсии меняет знак, то для того чтобы интеграл

$$\int \psi_i^* e\mathbf{r}\varphi_j d\tau \tag{15,8}$$

был отличен от нуля, необходимо, чтобы функции были различной четности. Таким образом, получаем, что возможны переходы лишь из четного состояния в нечетное и обратно.

Теперь найдем из каких энергетических состояний в какие возможен переход. Для этого образуем произведения

$$\begin{aligned} &\Gamma_5 \times \Gamma_1 = \Gamma_5, && \Gamma_5 \times \Gamma_4 = \Gamma_2 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5, \\ &\Gamma_5 \times \Gamma_2 = \Gamma_4, && \Gamma_5 \times \Gamma_5 = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4 + \Gamma_5. \\ &\Gamma_5 \times \Gamma_3 = \Gamma_4 + \Gamma_5, && \end{aligned}$$

Симметрические произведения неприводимых представлений группы $\mathfrak{D}$ будут

$$\begin{aligned} &[\Gamma_1^2] = [\Gamma_2^2] = \Gamma_1, \\ &[\Gamma_3^2] = \Gamma_1 + \Gamma_3, \\ &[\Gamma_4^2] = [\Gamma_5^2] = \Gamma_1 + \Gamma_3 + \Gamma_4. \end{aligned}$$

Γ_5 не содержится ни в одном из них, а поэтому диагональные матричные элементы отсутствуют. Следовательно, возможны переходы

$$\Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_2,\ \Gamma_3,\ \Gamma_5, \quad \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_1,\ \Gamma_3,\ \Gamma_4$$

и, кроме того,

$$\Gamma_4 \leftrightarrow \Gamma_4, \quad \Gamma_5 \leftrightarrow \Gamma_5$$

для различных уровней одного типа. Поэтому для квантового числа $\varkappa$ на основании таблицы 3 получаем правила отбора

$$\left.\begin{aligned} \varkappa' &= \varkappa \pm \frac{1}{3}, \\ \varkappa' &= \varkappa \pm \frac{2}{3}, \end{aligned}\right\} \tag{15,9}$$

если ограничиться термами различных типов и дополнительные переходы

$$\varkappa' = \varkappa \tag{15,10}$$

для трехкратно вырожденных уровней E_4 и E_5 при переходах между различными однотипными уровнями.

Теперь определим состояния, для которых возможны переходы, т. е. правила отбора для квантового числа μ. Пусть нам, например, требуется определить состояния, между которыми совершаются переходы для z-составляющей электрического момента, т. е.

нужно определить, когда отличен от нуля матричный элемент

$$\int \psi^*_{\mu'} z \psi_\mu d\tau. \qquad (15,11)$$

Так как функция $z\psi_\mu = \psi'_\mu$, то из равенства (15,3) следует, что μ' должно равняться μ. Следовательно, окончательно имеем $\mu' = \mu$. Проводя аналогичные рассуждения для составляющих $x + iy$ и $x - iy$, находим $\mu' = \mu \pm 1$.

16. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изложенные в настоящем обзоре общие принципы исследования квантовомеханических систем с помощью теории групп показывают, что вопросы, лежащие в основании квантовой механики и квантовой физики твердого тела, могут быть рассмотрены с наибольшей глубиной и полнотой только при использовании аппарата теории групп.

Свойства симметрии физических систем должны шире использоваться при решении конкретных задач и особенно в случае сложных квантовомеханических систем, где точные количественные расчеты не могут быть проведены, и поэтому важно получить возможно большее количество результатов общими методами. Кроме того, выводы, получаемые с помощью теории групп, являются наиболее строгими в силу феноменологического характера самой теории симметрии.

Общие принципы, изложенные в §§ 9 и 10, могут быть применены к исследованию любых квантовомеханических систем и будут давать тем более полные результаты, чем выше симметрия задачи. В обзоре эти общие принципы были проиллюстрированы на трех конкретных задачах. Во-первых, была исследована задача об определении электронных состояний системы по ее свойствам симметрии. Изложению этого вопроса посвящены §§ 11 и 12. Во-вторых, решалась задача о расщеплении атомных термов в поле определенной симметрии (§§ 13, 14). В-третьих, были найдены правила отбора для квантовых переходов в кристалле (§ 15).

Однако уже сейчас видно, что теория групп приобретает еще большее значение при исследовании зонной структуры эгергетического спектра твердых тел. В частности, особенно важным является вопрос о смыкании полос при учете полной пространственной симметриц. Наличие спин-орбитальной связи приводит к частичному устранению этого смыкания. Полное и достаточно общее изучение этого вопроса безусловно важно для физики твердого тела.

Наконец, точка зрения на многоэлектронную теорию, изложенная в работах Вольца и Хакена[15], позволяет применять теоретико-групповые методы и при учете взаимодействия между электронами, т. е. в чисто многоэлектронной задаче.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Э. Бауер, Введение в теорию групп и ее приложения к квантовой физике, ОНТИ НКТП СССР, 1937.
   Ван дер Варден, Метод теории групп в квантовой механике, ОНТИ НКТП СССР, 1938.
   М. В. Волькенштейн, М. А. Ельяшевич, В. И. Степанов, Колебания молекул, Гостехиздат, 1949.
   Г. Герцберг, Атомные спектры и строение атомов, ИЛ, 1948.
   Г. Герцберг, Спектры и строение двухатомных молекул, ИЛ, 1949.
   Г. Герцберг, Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул, ИЛ, 1949.
   П. А. М. Дирак, Основы квантовой механики, ОНТИ НКТП, СССР, 1937.
   Ф. Зейтц, Современная теория твердого тела, Гостехиздат, 1949.
   Л. Ландау и Е. Лифшиц, Квантовая механика, Гостехиздат, 1948.
   S. Bhagavantam, T. Venkaterayudu, Theory of groups and its application to physical problem, 1951.
   F. Mandl, Quantum Mechanics, London, 1954.
   H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig, 1931.
   E. Wigner, Gruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Momspektren, Braunschweig, 1931.
2. А. Курош, Теория групп, Гостехиздат, 1947.
   Ф. Мурнаган, Теория представлений групп, ИЛ, 1950.
   В. Смирнов, Курс высшей математики, т. 3, ч. 1, Гостехиздат, 1951.
   Е. Федоров, Симметрия кристаллов, Изд. АН СССР, 1949.
   Н. Чеботарев, Теория групп Ли, Гостехиздат, 1940.
   О. Ю. Шмидт, Абстрактная теория групп, ГИТТЛ, 1933.
   A. Schöenflies, Kristallsystem und Kristallstruktur, 1891.
   A. Speiser, Die Theorie der Gruppen von endlichen Ordnung, Berlin, 1937.
3. E. Wigner, Zeits. f. Phys. **40** 883 (1927); **43** 624 (1927).
   J. v. Neuman, E. Wigner, Zeits. f. Phys. **47** 203 (1928).
4. H. Bethe, Ann. d. Phys. **3**, 133 (1929).
5. F. Seitz, Zeits. f. Kristallogr. **88**, 433 (1934); **90**, 289 (1935); **91**, 336 (1935); **94**, 100 (1936). Ann. of Math. **37**, 17 (1936).
6. L. Bouckaert, Smoluchowski, E. Wigner, Phys. Rev. **50**, 58 (1936).
7. C. Herring, J. Franklin, Inst. **233**, 525 (1942).
   W. Döring, V. Zehler, Ann. d. Phys. **13**, 214 (1953).
8. F. Herman, Phys. Rev. **93**, 1214 (1954).
   R. Elliott, Phys. Rev. **96**, 266, 280 (1954).
   R. Parmenter, Phys. Rev. **100**, 573 (1955).
   G. Dresselhaus, Phys. Rev. **100**, 580 (1955).
9. J. Rosenthal, G. Marphy, Rev. of Mod. Phys. **8**, 317 (1936).
10. E. Noether, Göttingen. Nachr. 235 (1918).
    E. Bessel-Hagen, Math. Ann. **84**, 258 (1921).
    E. Hill, Rev. of Mod. Phys. **23**, 253 (1951).
    А. Соколов, В. Широковский, ФММ **3**, 22—25 (1956).
11. А. Соколов, В. Широковский, ФММ, **4**, 1 (в печати).
12. K. H. Hellwege, Ann. d. Phys. 4, 95, 127, 136, 143, 150 (1948).
13. W. Opechowski, Physica **7**, 552 (1940).
14. H. Bethe, Zeits. f. Phys. **60**, 218 (1930).
15. H. Volz, H. Haken, Zeits. f. Phys. Chemie **198**, 61 (1951).
    H. Haken, Zeits. f. Naturforsch. **9a**, 228 (1954).
    H. Volz, Halbleiterprobleme, т. I, Braunschweig, 1954.