Раздел 4

ТЕОРИЯ СИММЕТРИИ

ЛЕКЦИЯ 16

§ 53. Понятие симметрии в квантовой механике

Понятие симметрии играет исключительно важную роль и в классической, и в квантовой физике. Как известно, в классической механике знание свойств симметрии функции Лагранжа или функции Гамильтона системы позволяет найти интегралы движения, не прибегая к решению уравнений движения. В квантовой механике мы имеем дело с оператором Гамильтона — гамильтонианом, и свойства симметрии гамильтониана проявляются в разнообразных физических свойствах системы. В предыдущих разделах мы уже не раз встречались с примерами такого проявления. Задача данного раздела — систематизировать этот материал, изложить основные вопросы теории симметрии в квантовой механике на единой математической основе, показать еще не встречавшиеся нам типы симметрии и их следствия.

Говоря о свойствах симметрии гамильтониана, мы имеем в виду инвариантность гамильтониана при тех или иных преобразованиях пространства динамических переменных ξ, характеризующих систему. Так, гамильтониан частицы, движущейся в сферически-симметричном поле $V(r)$, инвариантен относительно произвольных поворотов системы координат в трехмерном пространстве; он инвариантен также относительно операции инверсии ($\mathbf{r} \to -\mathbf{r}$). Следствием сферической симметрии поля является сохранение момента количества движения частицы. Этот результат известен и в классической механике (хотя его математическая формулировка в классической и в квантовой механике не одна и та же). Однако в квантовой механике следствия сферической симметрии гораздо богаче, чем в классической. Из § 32 мы знаем, что к ним относится «обязательное» вырождение уровней частицы по магнитному квантовому числу — свойство, не имеющее аналога в классической механике. Другим примером чисто квантово-механического следствия симметрии может служить сохранение четности состояния, когда гамильтониан системы инвариантен относительно инверсии (см. § 12). Ниже мы обсудим три аспекта проблемы симметрии в квантовой механике: симметрия и интегралы движения; симметрия и вырождение энергетических уровней; симметрия и правила отбора. Проявления симметрии при столкновениях частиц будут рассмотрены в соответствующем разделе курса.

1. Симметрия и интегралы движения

Пусть ξ — совокупность динамических переменных квантовой системы в некотором n-мерном пространстве (конфигурационном пространстве). Введем оператор $\widehat{g}$ невырожденного линейного преобразования пространства, который ставит в соответствие вектору ξ другой вектор $\xi' = \widehat{g}\xi$. В общем случае оператор $\widehat{g}$ может зависеть от параметра или от нескольких параметров, которые мы обозначим символом η. Итак,

$$\xi' = \widehat{g}(\eta)\xi. \tag{53.1}$$

Поскольку преобразование невырожденное, существует обратный оператор $\widehat{g}^{-1}(\eta)$, осуществляющий соответствие:

$$\xi = \widehat{g}^{-1}(\eta)\xi'. \tag{53.2}$$

Примером рассматриваемого преобразования может служить поворот исходной системы кординат (x, y, z) на некоторый заданный угол вокруг заданной оси; например, поворот на угол α вокруг оси z:

$$\begin{aligned} x' &= x\cos\alpha + y\sin\alpha, \\ y' &= -x\sin\alpha + y\cos\alpha, \\ z' &= z. \end{aligned} \tag{53.3}$$

Оператор $\widehat{g}_z(\alpha)$ имеет в этом случае вид

$$\mathbf{r}' = \widehat{g}_z(\alpha)\mathbf{r}, \quad \widehat{g}_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{53.4}$$

Преобразование динамических переменных (53.1) индуцирует преобразование всех векторов $\psi(\xi)$ пространства состояний физической системы и соответствующее ему преобразование всех операторов физических величин:

$$\psi \to \psi' = \widehat{S}(\eta)\psi, \tag{53.5}$$

$$\widehat{F} \to \widehat{F}' = \widehat{S}\widehat{F}\widehat{S}^{-1}. \tag{53.6}$$

В § 20 было показано, что оператор $\widehat{S}(\eta)$ удовлетворяет в общем случае уравнению

$$\widehat{S}(\eta)\psi(\xi) = \psi(\widehat{g}^{-1}(\eta)\xi). \tag{53.7}$$

Отсюда мы получили, в частности, операторы трансляции $\widehat{T}(\mathbf{a})$ и поворота $\widehat{R}(\mathbf{n},\,\alpha)$, выразив их затем через операторы импульса $\widehat{\mathbf{p}}$ и момента импульса частицы $\widehat{\mathbf{l}}$ (соотношения (20.14) и (20.15)):

$$\widehat{T}(\mathbf{a}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\widehat{\mathbf{p}}}, \tag{53.8}$$

$$\widehat{R}(\mathbf{n},\,\alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{l}})}. \tag{53.9}$$

Пусть некоторое преобразование динамических переменных $\widehat{g}\xi$ оставляет без изменений гамильтониан системы $\widehat{H}$. Это означает, что оператор $\widehat{S}(\eta)$, соответствующий преобразованию $\widehat{g}(\eta)$, коммутирует с $\widehat{H}$:

$$\big[\widehat{H},\,\widehat{S}(\eta)\big] = 0. \tag{53.10}$$

Действительно, согласно (53.6) имеем

$$\widetilde{\widehat{H}} = \widehat{S}\widehat{H}\widehat{S}^{-1} = \widehat{H}, \quad \text{т. е.} \;\; \widehat{S}\widehat{H} = \widehat{H}\widehat{S}. \tag{53.11}$$

Из (53.10) следует, что если оператор $\widehat{S}(\eta)$ можно выразить через оператор какой-либо физической величины $\widehat{F}$, то этот оператор также коммутирует с $\widehat{H}$:

$$\big[\widehat{H},\,\widehat{F}\big] = 0, \tag{53.12}$$

а, следовательно, соответствующая физическая величина $\widehat{F}$ является интегралом движения для системы с гамильтонианом $\widehat{H}$.

В качестве примера рассмотрим изолированную систему N бесспиновых частиц, которые могут быть связаны между собой какими-то силами. Гамильтониан такой системы

$$\widehat{H}\sum_i \frac{\widehat{\mathbf{p}}_i^2}{2\mu_i} + \sum_{i<j} V(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|) \tag{53.13}$$

инвариантен относительно преобразования трансляции при любом сдвиге $\mathbf{a}$; это есть следствие однородности нашего пространства. Оператор трансляции $\widehat{T}(a)$ для системы N частиц есть произведение соответствующих одночастичных операторов (53.8) и, следовательно, выражается через оператор полного импульса системы

$$\widehat{T}(\mathbf{a}) = e^{\frac{i}{\hbar}\mathbf{a}\widehat{\mathbf{P}}}, \tag{53.14}$$

$$\widehat{\mathbf{P}} = \sum_{i=1}^{N} \widehat{\mathbf{p}}_i. \tag{53.15}$$

Таким образом, из свойства однородности пространства вытекает коммутационное соотношение

$$[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{P}}] = 0 \tag{53.16}$$

и, следовательно, закон сохранения полного импульса изолированной физической системы.

Если же система находится в однородном поле, гамильтониан инвариантен только относительно трансляций, перпендикулярных полю; значит, в этом случае сохраняется только поперечная компонента полного импульса.

Аналогичным способом можно показать, что из свойства изотропности пространства вытекает закон сохранения полного орбитального момента системы бесспиновых частиц:

$$[\widehat{H}, \widehat{\mathbf{L}}] = 0, \tag{53.17}$$

где

$$\widehat{\mathbf{L}} = \sum_{i=1}^{N} [\mathbf{r}_i \times \widehat{\mathbf{p}}_i]. \tag{53.18}$$

Для этого, отправляясь от (53.9), надо построить оператор поворота для системы частиц

$$\widehat{R}(\mathbf{n}, \alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\left(n \sum\limits_{i=1}^{N} \widehat{\mathbf{l}}_i\right)} = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{L}})} \tag{53.19}$$

и воспользоваться соотношением (53.10).

Сложнее обстоит дело с частицами, обладающими спином. В лекции 10 мы сформулировали основные положения математической теории спина в полной аналогии с теорией орбитального момента. Продолжая эту аналогию, построим оператор поворота для спиновой волновой функции в форме (53.9):

$$\widehat{R}_s(\mathbf{n},\, \alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{s}})} \tag{53.20}$$

(в частном случае $s = \frac{1}{2}$ свойства этого оператора уже разбирались в упр. 10.12). Полный оператор поворота, трансформирующий при повороте системы координат и пространственную, и спиновую части волновой функции частиц, есть произведение соответствующих операторов:

$$\widehat{R}(\mathbf{n},\, \alpha) e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{l}})} e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{s}})} = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{J}})}; \quad \widehat{\mathbf{J}} = \widehat{\mathbf{l}} + \widehat{\mathbf{s}}. \tag{53.21}$$

Выражение (53.21) естественно обобщается на случай системы многих частиц; в этом случае $\widehat{\mathbf{J}}$ — оператор полного момента количества движения всей системы:

$$\widehat{\mathbf{J}} = \sum_{i=1}^{N} (\widehat{\mathbf{l}}_i + \widehat{\mathbf{s}}_i). \tag{53.22}$$

Гамильтониан изолированной системы частиц со спином имеет более сложный вид, нежели (53.13). Однако независимо от характера спиновых взаимодействий он, как и гамильтониан (53.13), инвариантен относительно любых поворотов: это есть следствие изотропности пространства. Значит, согласно (53.10) он коммутирует с оператором (53.21):

$$\left[\widehat{H},\, e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{J}})}\right] = 0, \tag{53.23}$$

откуда следует *закон сохранения полного момента изолированной системы*:

$$\left[\widehat{H},\, \widehat{\mathbf{J}}\right] = 0. \tag{53.24}$$

Подчеркнем, что если частицы обладают спином, то ни сохранение полного орбитального момента (соотношение (53.17)), ни сохранение полного спина системы (соотношение $\left[\widehat{H},\, \widehat{\mathbf{S}}\right] = 0$) не вытекают из общих свойств симметрии пространства. Сохранение этих величин может быть лишь следствием особых свойств гамильтониана системы; например, орбитальный момент и спиновый момент системы сохраняются по отдельности, если отсутствует спин-орбитальное взаимодействие.

2. Симметрия и вырождение энергетических уровней

Рассмотрение этого вопроса мы начнем с доказательства одной важной теоремы: если среди интегралов движения некоторой физической системы есть такие, что их операторы не коммутируют между собой, то энергетические уровни этой системы вырождены.

Пусть $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ — два таких оператора. Согласно условию теоремы, справедливы соотношения

$$[\widehat{H}, \widehat{A}] = 0, \quad [\widehat{H}, \widehat{B}] = 0, \tag{53.25}$$

$$[\widehat{A}, \widehat{B}] \neq 0. \tag{53.26}$$

Последнее из них означает (см. § 4), что операторы $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ не имеют общей полной системы собственных функций, т. е. могут иметь какую-то общую собственную функцию лишь случайно. С точностью до таких отдельных совпадений можно утверждать, что если

$$\widehat{A}\varphi_n = A_n\varphi_n, \tag{53.27}$$

т. е. φ_n — собственная функция оператора $\widehat{A}$, то

$$\widehat{B}\varphi_n \neq \mathrm{const} \cdot \varphi_n. \tag{53.28}$$

Пусть φ_n — одновременно собственная функция оператора $\widehat{A}$ и $\widehat{H}$ (такой выбор обеспечивается первым соотношением (53.25)). Это значит, что

$$\widehat{H}\varphi_n = E_n\varphi_n, \tag{53.29}$$

где E_n — энергия некоторого уровня системы. Подействуем на правую и левую части этого равенства оператором $\widehat{B}$:

$$\widehat{B}(\widehat{H}\varphi_n) = \widehat{B}(E_n\varphi_n) \tag{53.30}$$

и переставим операторы $\widehat{B}$ и $\widehat{H}$, пользуясь вторым соотношением (53.25):

$$\widehat{H}(\widehat{B}\varphi_n) = E_n(\widehat{B}\varphi_n). \tag{53.31}$$

Полученное соотношение показывает, что функция $\widehat{B}\varphi_n$ тоже является собственной функцией гамильтониана, соответствующей собственному значению E_n. Однако согласно (53.28) она не сводится к φ_n. Таким образом, уровню E_n соответствуют по крайней мере две разные волновые функции — φ_n и $\widehat{B}\varphi_n$, т. е. этот уровень вырожден. Теорема доказана.

Легко увидеть связь доказанной теоремы с проблемой симметрии: под $\widehat{A}$ и $\widehat{B}$ мы можем понимать операторы двух преобразований динамических переменных системы, оставляющих неизменным гамильтониан системы и не коммутирующих между собой; если такие преобразования симметрии существуют, уровни системы вырождены.

Обратимся к хорошо известному примеру. Пусть бесспиновая частица находится в сферически-симметричном поле. Уровни такой системы вырождены с кратностью $2l + 1$. Проанализируем причину вырождения с точки зрения доказанной выше теоремы.

Гамильтониан $\widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V}(r)$ инвариантен относительно поворотов системы координат вокруг любой оси, проходящей через силовой центр (начало координат). Рассмотрим поворот вокруг осей x и y. Согласно (53.9) им соответствуют операторы

$$\begin{aligned} \widehat{R}_x(\alpha) &= e^{\frac{i}{\hbar}\alpha\widehat{l}_x}, \\ \widehat{R}_y(\beta) &= e^{\frac{i}{\hbar}\beta\widehat{l}_y}, \end{aligned} \tag{53.32}$$

которые коммутируют с гамильтонианом

$$\left[\widehat{H},\, \widehat{R}_x(\alpha)\right] = \left[\widehat{H},\, \widehat{R}_y(\beta)\right] = 0, \tag{53.33}$$

что соответствует сохранению проекций момента частицы на оси x и y.

$$\left[\widehat{H},\, \widehat{l}_x\right] = \left[\widehat{H},\, \widehat{l}_y\right] = 0. \tag{53.34}$$

Однако операторы (53.32) не коммутируют между собой (см. упр. 5.9):

$$\left[\widehat{R}_x(\alpha),\, \widehat{R}_y(\beta)\right] \neq 0 \tag{53.35}$$

(как не коммутируют между собой и операторы $\widehat{l}_x$, $\widehat{l}_y$). Таким образом, условие теоремы выполнено, и поэтому уровни системы вырождены.

Итак, вырождение энергетических уровней физической системы всегда указывает на то, что гамильтониан системы обладает какой-то совокупностью свойств симметрии, причем среди соответствующих операторов преобразования симметрии обязательно есть не коммутирующие между собой. Используя теорию симметрии на практике, мы будем придерживаться следующего нестрогого, но очень полезного правила: чем выше, полнее симметрия гамильтониана (т. е. чем большим количеством разных свойств симметрии он обладает), тем больше степень вырождения энергетических уровней системы, и наоборот.

Обратимся снова к примеру. Пусть заряженная бесспиновая частица находится в поле со сферически-симметричным потенциалом $V(r)$. Наложим на эту систему постоянное однородное магнитное поле $\mathscr{H}$. Мы знаем из § 51, что вырождение уровней по магнитному квантовому числу m в таком поле снимается (эффект Зеемана): каждый уровень E_{nl} расщепляется на $2l+1$ подуровней $E_{nl}(m)$, $m = l$, $l-1, \ldots, -l$. Это связано с тем, что симметрия гамильтониана возмущенной системы

$$\widehat{H} = \widehat{T} + V(r) - \widehat{\mu}_l \mathscr{H} \tag{53.36}$$

беднее, чем симметрия невозмущенного гамильтониана. При наложении магнитного поля сферическая симметрия исчезла, осталась лишь аксиальная симметрия: гамильтониан (53.36) инвариантен относительно любых поворотов вокруг оси, направленной по вектору $\mathscr{H}$. Однако повороты вокруг одной и той же оси коммутируют между собой, поэтому вырождение уровней исчезло.

Продолжим рассмотрение выбранного примера. Пусть теперь на нашу систему наложено не магнитное, а постоянное однородное электрическое поле $\mathscr{E}$. Мы знаем из теории эффекта Штарка (§ 51), что и в этом случае вырождение уровней снимается. Однако оно снимается не полностью, как при наложении магнитного поля, а частично: остается вырождение уровней системы по знаку проекции момента на направление поля

$$E_{nl}(m) = E_{nl}(-m). \tag{53.37}$$

В чем дело? Ведь и в случае магнитного поля, и в случае электрического поля возмущение меняет сферическую симметрию гамильтониана на аксиальную. Почему же характер расщепления уровней в этих двух случаях неодинаков?

Доказанная выше общая теорема подсказывает нам, что во втором случае возмущенный гамильтониан обладает помимо аксиальной симметрии еще какими-то свойствами симметрии, которые просто не видны с первого взгляда. Чтобы выявить их, сравним внимательнее операторы взаимодействия частицы с внешним полем в первом и во втором случаях (пусть при этом ось z направлена по вектору $\mathscr{H}$ или $\mathscr{E}$):

$$\Delta\widehat{H}_{\text{магн}} = -g\widehat{l}_z\mathscr{H} = (x\widehat{p}_y - y\widehat{p}_x)\mathscr{H}, \tag{53.38}$$

$$\Delta\widehat{H}_{\text{эл}} = -ez\mathscr{E}. \tag{53.39}$$

Действительно, видно, что оператор $\Delta\widehat{H}_{\text{эл}}$ инвариантен относительно отражений в любой плоскости, проходящей через ось симметрии (ось z), тогда как оператор $\Delta\widehat{H}_{\text{магн}}$ таким свойством симметрии не обладает. Поскольку операции отражения в плоскости и поворот вокруг оси, лежащей в ней, не коммутируют между собой, вырождение уровней при наложении электрического поля снимается не полностью.

Рассмотренный пример дает ключ к объяснению явления «случайного» вырождения уровней, с которым мы встретились в §§ 35 и 36. Напомним, что в двух случаях сферически-симметричного поля — кулоновское поле и изотропный гармонический осциллятор — уровни частицы оказываются вырожденными не только по m («обязательное» вырождение), но и по орбитальному квантовому числу l. Сейчас становится понятным, что «случайное» вырождение также должно иметь своей причиной какую-то особую дополнительную симметрию гамильтониана, которая просто оказывается «скрытой», незаметной для первого взгляда. Действительно, сферическая симметрия (вместе с симметрией относительно инверсии системы координат) не исчерпывает всех свойств симметрии гамильтониана частицы в кулоновском поле и гамильтониана сферически-симметричного гармонического осциллятора. Указать эти дополнительные свойства симметрии и показать, что соответствующие операторы не коммутируют с операторами поворотов, не просто, поскольку в обоих случаях они связаны не с привычными геометрическими преобразованиями, а с более сложными преобразованиями динамических переменных системы.

Мы не будем разбирать этот вопрос до конца. Отметим лишь, что в случае кулоновского поля полная симметрия гамильтониана отчетливо видна в некотором абстрактном 4-мерном пространстве и что «случайное» вырождение уровней связано в этом случае с наличием специфического для кулоновского поля интеграла движения — вектора Рунге–Ленца (см. упр. 9.11); легко проверить (упр. 16.5), что соответствующий оператор не коммутирует с оператором орбитального момента частицы. Для демонстрации богатой симметрии гармонического осциллятора удобно выразить его гамильтониан через операторы рождения и уничтожения квантов колебаний (см. § 25):

$$\widehat{H} = \hbar\omega\left(\sum_{i=1}^{3} \widehat{a}_i^{+}\widehat{a}_i + \frac{3}{2}\right). \tag{53.40}$$

Легко видеть, что гамильтониан (53.40) инвариантен относительно произвольного унитарного преобразования динамических переменных $\widehat{a}_i$

$$\widehat{a}_i \to \widehat{a}'_i = \sum_{k=1}^{3} u_{ik}\widehat{a}_k, \tag{53.41}$$

где

$$\widehat{u}\widehat{u}^+ = \widehat{I}. \tag{53.42}$$

Говорят, что «случайное» вырождение уровней сферического гармонического осциллятора отражает свойство унитарной симметрии его гамильтониана.

3. Симметрия и правила отбора

В предыдущих разделах не раз возникала следующая ситуация: рассматривая матричный элемент какой-то физической величины $\langle\alpha|\widehat{F}|\beta\rangle$, мы могли, не производя вычислений, точно сказать, что он равен нулю. Делалось это всякий раз путем выявления какого-либо качественного несоответствия между свойствами оператора $\widehat{F}$ и квантовыми числами состояний $|\alpha\rangle$ и $|\beta\rangle$.

Вот простой пример: чему равен матричный элемент оператора x^2 для состояний $|1s\rangle$ и $|2p,\, m\rangle$ атома водорода? Ответ: $\langle 1s|x^2|2p,\, m\rangle = 0$. Объяснение: четность состояния частицы с моментом l есть $(-1)^l$; таким образом, состояния $|1s\rangle$ и $|2p,\, m\rangle$ имеют противоположную четность, однако оператор x^2 четности не меняет, поэтому интеграл равен нулю. Другой пример: найти правило отбора по магнитному квантовому числу для матричных элементов $\langle n_1 l_1 m_1|\widehat{z}|n_2 l_2 m_2\rangle$. Ответ: $m_1 = m_2$. Объяснение: будем вычислять интеграл в сферических координатах; оператор $\widehat{z}$ не содержит азимутального угла φ; интегрирование по φ вводится к перекрыванию собственных функций оператора $\widehat{L}_z$, т. е. $\langle\Phi_{m_1}|\Phi_{m_2}\rangle = \delta_{m_1 m_2}$.

Очень часто правило отбора формулируется как целая совокупность условий, налагаемых на квантовые числа состояний, для которых вычисляется матричный элемент. Так, в последнем примере мы можем учесть, что оператор $\widehat{z}$ меняет четность состояния. Это дает условие $(-1)^{l_1} = -(-1)^{l_2}$. Далее, вычисляя угловую часть интеграла $\langle n_1 l_1 m_1|\widehat{z}|n_2 l_2 m_2\rangle$ (при этом удобно воспользоваться формулой (Д7.19)), мы видим, что этот интеграл пропорционален коэффициенту Клебша–Гордана $\langle 10,\, l_2 m_2|l_1 m_1\rangle$, который отличен от нуля, только если выполнено «правило треугольника» (41.23): $\mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \mathbf{1} = 0$ (заметим, что единица $\mathbf{1}$ входит в это символическое соотношение как некий момент количества движения, присущий оператору $\widehat{z}$). Итак, полная совокупность условий, выражающих правила отбора для матричных элементов $\langle n_1 l_1 m_1 | \widehat{z} | n_2 l_2 m_2 \rangle$, есть

$$m_1 = m_2, \quad (-1)^{l_1} = -(-1)^{l_2}, \quad \mathbf{l}_1 + \mathbf{l}_2 + \mathbf{l} = 0, \tag{53.43}$$

или, более компактно,

$$m_1 = m_2, \quad l_1 = l_2 \pm 1. \tag{53.44}$$

Общую и строгую математическую основу получения правил отбора для всевозможных матричных элементов в квантовой механике дает теория групп. К изложению ее применения в квантовой механике мы и перейдем.

§ 54. Применение теории групп в квантовой механике

В данном параграфе мы познакомимся с основными направлениями применения теории групп в квантовой механике. При этом общие положения абстрактной теории групп будут считаться известными; мы лишь кратко напомним их, вводя нужные нам обозначения.

1. Некоторые общие положения абстрактной теории групп

1. *Группой* называется конечная или бесконечная совокупность элементов a, b, $c, \ldots$, удовлетворяющая следующим требованиям:

а) определена операция произведения элементов:

$$ab = c,$$

б) среди элементов группы есть единичный элемент E, определенный соотношениями

$$Ea - aE = a,$$

в) справедлив ассоциативный закон перемножения элементов группы:

$$(ab)c = a(bc),$$

г) каждый элемент группы a имеет обратный a^{-1}:

$$aa^{-1} = a^{-1}a = E.$$

Примеры.

1) Группа инверсии, состоящая из двух элементов: i (оператор инверсии) и единичного элемента E, является примером группы второго порядка. Обозначается I.

2) Группа поворотов в 3-мерном пространстве относительно произвольной оси на произвольный угол. Обозначается R_3. Содержит бесконечное число элементов; является примером непрерывной группы.

3) Группа поворотов на произвольный угол вокруг фиксированной оси (группа поворотов в плоскости). Обозначается R_2.

4) Группа отражений в плоскости — группа второго порядка. Обозначается σ_h. Содержит оператор отражения в плоскости σ_h и единичный элемент E.

5) Группа поворотов на угол, кратный $2\pi/n$ (где n — целое число), вокруг фиксированной оси — группа n-го порядка. Обозначается C_n. Элемент группы, представляющий поворот на угол $2\pi k/n$ (k — целое число), обозначается C_n^k.

2. *Подгруппой* называется часть элементов группы, сама образующая группу. Например, группа R_2 есть подгруппа группы R_3 (обозначаем $R_2 \subset R_3$).

3. Пусть две группы — G и G' — не имеют общих элементов (кроме единичного), и все элементы одной группы (a, b, $c, \ldots$) коммутируют с элементами другой (a', b', $c', \ldots$). Тогда, очевидно, совокупность элементов aa', $ab', \ldots$ тоже составляет группу, порядок которой равен произведению порядков групп G и G'. Эта новая группа называется *прямым произведением групп* G и G' и обозначается $G \times G'$.

Пример: прямое произведение группы инверсии и группы трехмерных вращений. Обозначается $O_3 = R_3 \times I$.

4. Пусть в некотором линейном пространстве L задано множество операторов $\widehat{T}(g)$, где $g = a, b, \ldots$ — элементы некоторой группы G. Если выполняется условие

$$\widehat{T}(ab) = \widehat{T}(a)\widehat{T}(b), \tag{54.1}$$

то $\widehat{T}(g)$ — *представление группы* G. Общие свойства представлений групп:

$$\text{а)}\quad \widehat{T}(E) = \widehat{I}, \qquad \text{б)}\quad \widehat{T}(a^{-1}) = [T(a)]^{-1}. \tag{54.2}$$

Пространство L называется *пространством представления* $\widehat{T}(g)$.

5. Если в L есть подпространства, инвариантные для всех $\widehat{T}(g)$, то представление $\widehat{T}(g)$ называется *приводимым*. Пишем:

$$L = \sum_{\alpha}^{\oplus} L^{\alpha}, \tag{54.3}$$

т. е. пространство L есть *прямая сумма таких инвариантных подпространств* $L^{(\alpha)}$. Если L нельзя разложить на инвариантные подпространства, то представление $\widehat{T}(g)$ называется *неприводимым*.

6. Совокупность линейно независимых элементов (векторов) $\{V_{\mu}^{(\alpha)}\}_{\mu=1}^{f_\alpha l}$, принадлежащих инвариантному подпространству $L^{(\alpha)}$ и удовлетворяющих соотношению

$$\widetilde{V}_{\mu}^{(\alpha)} \equiv \widehat{T}(g) V_{\mu}^{(\alpha)} = \sum_{\mu'=1}^{f\alpha} D_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(g) V_{\mu'}^{(\alpha)}, \tag{54.4}$$

называется *базисом представления*, а соответствующие матрицы $D_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(g)$ — *матрицами представления*. Как видно из (54.4) и (54.1), матрицы представления группы удовлетворяют соотношению

$$D_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(ab) = \sum_{\nu=1}^{f\alpha} D_{\mu'\nu}^{(\alpha)}(a) D_{\nu\mu}^{(\alpha)}(b), \tag{54.5}$$

т. е. сами образуют представление группы. Число f_α называется *размерностью представления*.

7. Матрицы приводимых представлений имеют квазидиагональный («ящичный») вид:

$$\widehat{D}(g) = \begin{pmatrix} \square & & & 0 \\ & \square & & \\ & & \square & \\ 0 & & & \square \end{pmatrix}. \tag{54.6}$$

где отличные от нуля элементы находятся в квадратах, каждый из которых соответствует одному неприводимому представлению. Свойство (54.6) записывается также в виде формулы *разложения приводимого представления на неприводимые*:

$$\widehat{D}(g) = \sum_{\alpha}^{\oplus} a^{(\alpha)} \widehat{D}^{(\alpha)}(g). \tag{54.7}$$

8. Базисные векторы разных неприводимых представлений ортогональны друг другу:

$$\langle V_\mu^{(\alpha)} | V_\nu^{(\beta)} \rangle = \lambda^{(\alpha)} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu}. \tag{54.7a}$$

Базисные векторы одного неприводимого представления нормированы одинаково. Как следует из (54.7a),

$$\langle V_\mu^{(\alpha)} | V_\mu^{(\alpha)} \rangle = \lambda^{(\alpha)}. \tag{54.8}$$

9. Прямые произведения базисных векторов двух представлений группы также образуют базис некоторого представления группы:

$$\widehat{T}(g) \big[V_\mu^{(\alpha)} \cdot V_\nu^{(\beta)} \big] = \sum_{\mu'=1}^{f\alpha} \sum_{\nu'=1}^{f\beta} D_{\mu'\mu}^{(\alpha)}(g) D_{\nu'\nu}^{(\beta)}(g) \big[V_{\mu'}^{(\alpha)} \cdot V_{\nu'}^{(\beta)} \big]. \tag{54.9}$$

Оно называется *прямым произведением представлений* $\widehat{D}^{(\alpha)}$ и $\widehat{D}^{(\beta)}$ и обозначается $\widehat{D}^{(\alpha)} \times \widehat{D}^{(\beta)}$.

10. Прямое произведение двух неприводимых представлений группы является, вообще говоря, приводимым представлением и может быть разложено на неприводимые представления:

$$\widehat{D}^{(\alpha)} \times \widehat{D}^{(\beta)} = \sum_{\gamma}^{\oplus} a^{(\gamma)} \widehat{D}^{(\gamma)}. \tag{54.10}$$

Базисные векторы неприводимых представлений $\widehat{D}^{(\gamma)}$ имеют вид линейных комбинаций прямых произведений базисных векторов представлений $\widehat{D}^{(\alpha)}$ и $\widehat{D}^{(\beta)}$:

$$\big[V^{(\alpha)} \cdot V^{(\beta)} \big]_\rho^\gamma = \sum_{\mu,\,\nu} \langle \alpha\mu,\, \beta\nu | \gamma\rho \rangle V_\mu^{(\alpha)} V_\nu^{(\beta)}. \tag{54.10a}$$

Коэффициенты $\langle \alpha\mu,\, \beta\nu | \gamma\rho \rangle$, которые иногда называют *обобщенными коэффициентами Клебша–Гордана*, образуют унитарную матрицу. Из (16.54.10a) следует соотношение

$$V_\mu^{(\alpha)} \cdot V_\nu^{(\beta)} = \sum_{\gamma\rho} \langle \alpha\mu,\, \beta\nu | \gamma\rho \rangle \big[V^{(\alpha)} \cdot V^{(\beta)} \big]_\rho^\gamma. \tag{54.11}$$

2. Теоретико-групповая классификация стационарных состояний квантовых систем

Пусть $\widehat{T}(g)$ — представление группы преобразований симметрии гамильтониана системы $\widehat{H}$. Это означает, что для всех g («на всей группе») выполняется соотношение (53.11):

$$\widehat{T}(g)\widehat{H}\widehat{T}^{-1}(g) = \widehat{H}, \tag{54.12}$$

т. е.

$$\left[\widehat{T}(g),\, \widehat{H}\right] = 0. \tag{54.13}$$

Пусть далее $\{\psi_\mu^{(n)}\}_{\mu=1}^{f_n}$ — совокупность линейно независимых решений стационарного уравнения Шредингера, соответствующих уровню E_n:

$$\widehat{H}\psi_\mu^{(n)} = E_n\psi_n^{(m)}, \quad \mu = 1,\, 2,\, \ldots,\, f_n, \tag{54.14}$$

f_n — кратность вырождения уровня. Подействуем на обе части соотношения (54.14) оператором $\widehat{T}(g)$. С учетом (54.13) получаем

$$\widehat{H}\{\widehat{T}(g)\psi_\mu^{(n)}\} = E_n\{\widehat{T}(g)\psi_\mu^{(n)}\}. \tag{54.15}$$

Последнее соотношение показывает, что совокупность волновых функций каждого уровня системы образует инвариантное подпространство по отношению ко всей группе преобразований симметрии гамильтониана:

$$\widetilde{\psi}_\mu^{(n)} \equiv \widehat{T}(g)\psi_\mu^{(n)} = \sum_{\mu'=1}^{f_n} D_{\mu'\mu}^{(n)}(g)\psi_{\mu'}^{(n)}. \tag{54.16}$$

Это подпространство, а также соответствующие ему матрицы представления $D_{\mu'\mu}^{(n)}(g)$ либо неприводимы, либо их можно разложить на неприводимые части. Таким образом, совокупность квантовых чисел $\{n\}$, нумерующих уровень E_n, есть совокупность индексов, характеризующих неприводимые представления соответствующей группы. Кратность этих неприводимых представлений определяет кратность вырождения соответствующих уровней системы.

Мы видим, что при «симметрийном» подходе к классификации уровней квантовых систем «динамическая» задача о нахождении всех решений стационарного уравнения Шредингера заменяется задачей о нахождении всех неприводимых представлений группы симметрии гамильтониана, которая является стандартной задачей абстрактной теории групп.

3. Расщепление вырожденных уровней под влиянием возмущения

Пусть $\{\varphi_\mu^{(n)}\}_{\mu=1}^{f_n}$ — волновые функции невозмущенной системы гамильтонианом $\widehat{H}_0$, соответствующие вырожденному уровню ε_n:

$$\widehat{H}_0\varphi_\mu^{(n)} = \varepsilon_n\varphi_\mu^{(n)}; \tag{54.17}$$

f_n — кратность вырождения уровня. Выше мы показали, что эти функции образуют базис неприводимого представления $\widehat{D}^{(n)}$ группы преобразований симметрии гамильтониана $\widehat{H}_0$; назовем эту группу G. В § 49 было показано, что если система подвергается возмущению $\widehat{V}$, то расщепление уровня ε_n в низшем порядке по $\widehat{V}$ можно найти из решения секулярного уравнения (49.40):

$$\mathrm{Det}\,||\langle\varphi_\mu^{(n)}|\widehat{V}|\varphi_\nu^{(n)}\rangle - \Delta E_n\cdot\delta_{\mu\nu} = 0. \tag{54.18}$$

Каждый корень этого уравнения $\Delta E_{n,\,\lambda}$ дает поправку первого порядка к энергии ε_n невозмущенной системы:

$$\varepsilon_n \to E_{n,\,\lambda} = \varepsilon_n + \Delta E_{n,\,\lambda}. \tag{54.19}$$

Если уравнение (54.18) имеет кратные корни, то некоторые из подуровней $E_{n,\,\lambda}$ уровня ε_n оказываются вырожденными.

Теория групп позволяет установить характер расщепления уровней под влиянием возмущения, не только не решая секулярного уравнения, но и не вычисляя матричных элементов возмущения, т. е. не обращаясь к конкретному виду базисных функций $\varphi_\mu^{(n)}$ и оператора возмущения $\widehat{V}$. Оказывается, все дело в соотношении свойств симметрии возмущения $\widehat{V}$ и невозмущенного гамильтониана $\widehat{H}_0$. Здесь имеют место два случая.

В первом случае симметрия возмущения выше (или по крайней мере не ниже), чем симметрия гамильтониана $\widehat{H}_0$. Тогда симметрия возмущенного гамильтониана $\widehat{H} = \widehat{H}_0 + \widehat{V}$ определяется по-прежнему группой G. Следовательно, классификация уровней возмущенной системы остается такой же, как и в невозмущенной системе. Возмущение приводит лишь к сдвигу каждого уровня ε_n, но он не расщепляется, кратность его вырождения остается прежней.

В другом случае симметрия возмущения $\widehat{V}$ беднее, чем симметрия гамильтониана $\widehat{H}_0$; следовательно, и симметрия возмущенного гамильтониана $\widehat{H}$ беднее, чем симметрия $\widehat{H}_0$. Пусть она характеризуется группой $\widetilde{G}$, являющейся подгруппой группы G. В этом случае представление $\widehat{D}^{(n)}$, являющееся неприводимым по отношению ко всем элементам группы G, оказывается, вообще говоря, приводимым по отношению к элементам, образующим ее подгруппу $\widetilde{G}$:

$$\widehat{D}^{(n)}(\eta) = \sum_{\lambda}^{\oplus} a^{\lambda} \widetilde{\widehat{D}}^{(\lambda)}(\eta), \quad \eta \in \widetilde{G}; \tag{54.20}$$

здесь $\widetilde{\widehat{D}}^{(\lambda)}(\eta)$ — неприводимые представления группы $\widetilde{G}$. Иными словами, пространство базисных векторов $\{\varphi_{\mu}^{(n)}\}_{\mu=1}^{f_n}$ разбивается на инвариантные по отношению к преобразованиям подгруппы $\widetilde{G}$ подпространства, суммарная размерность которых равна f_n. Каждому неприводимому представлению $\widetilde{\widehat{D}}^{(\lambda)}$ подгруппы $\widetilde{G}$ соответствует согласно (54.15) свое собственное значение $E_{n,\lambda}$ гамильтониана $\widehat{H}$ с кратностью вырождения $\widetilde{f}_{\lambda}$. Число таких неприводимых представлений в разложении (54.20) дает число подуровней $E_{n,\lambda}$, на которые расщепляется уровень ε_n под влиянием возмущения.

Мы снова видим, что при «симметрийном» подходе к задаче о расщеплении уровней процедура решения уравнения Шредингера заменяется некоторой стандартной процедурой теории групп, а именно процедурой (54.20) разложения неприводимого представления группы на неприводимые представления ее подгруппы. Такой подход, конечно, является более общим.

4. Теория групп и правила отбора

Применяя теорию групп к установлению правил отбора для квантово-механических матричных элементов, мы будем опираться на понятие *неприводимого тензорного оператора*. Совокупность f_k операторов $\{\widehat{F}_{\chi}^{(k)}\}_1^{f_k}$ называется неприводимым тензорным оператором по отношению к некоторой группе G, если она удовлетворяет следующему соотношению:

$$\widetilde{\widehat{F}}_{\varkappa}^{(k)} = \sum_{\varkappa'} D_{\varkappa'\varkappa}^{(k)}(g) \widehat{F}_{\varkappa'}^{(k)}, \tag{54.21}$$

т. е. если в результате преобразований, образующих группу G, компоненты тензора $\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}$ преобразуются друг через друга по неприводимым представлениям $D^{(k)}$ этой группы.

Рассмотрим матричный элемент неприводимого тензорного оператора $\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}$ группы G в обкладках базисных векторов двух произвольных неприводимых представлений $D^{(\alpha)}$ и $D^{(\beta)}$ этой группы: $\langle\psi_{\mu}^{(\alpha)}|\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}|\psi_{\nu}^{(\beta)}\rangle$. Векторы $|\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}\psi_{\nu}^{(\beta)}\rangle$, где $\varkappa = 1, 2, \ldots, f_k$, $\nu = 1, 2, \ldots, f_\beta$, образуют базис представления $D^{(k)} \times D^{(\beta)}$ группы G, которое, вообще говоря, является приводимым. Согласно (54.11) их можно представить в виде линейных комбинаций базисных векторов неприводимых представлений $D^{(\gamma)}$, на которые разбивается прямое произведение представлений $D^{(k)} \times D^{(\beta)}$; для этого надо воспользоваться коэффициентами Клебша–Гордана группы G:

$$|\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}\psi_{\nu}^{(\beta)}\rangle = \sum_{\gamma\rho}\langle k\varkappa,\, \beta\nu|\gamma\rho\rangle\{\widehat{F}^{(k)}\psi^{(\beta)}\}_{\rho}^{\gamma}. \tag{54.22}$$

Подставляя (54.22) в матричный элемент $\langle\psi_{\mu}^{(\alpha)}|\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}|\psi_{\nu}^{(\beta)}\rangle$, воспользуемся свойством ортогональности базисных векторов разных неприводимых представлении группы (соотношение (54.7а)):

$$\langle\psi_{\mu}^{(\alpha)}|\{\widehat{F}^{(k)}\psi^{(\beta)}\}_{\rho}^{\gamma}\rangle \sim \delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\rho}. \tag{54.23}$$

В итоге получаем

$$\langle\psi_{\mu}^{(\alpha)}|\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}|\psi_{\nu}^{(\beta)}\rangle \sim \langle k\chi,\, \beta\nu|\alpha\mu\rangle. \tag{54.24}$$

Соотношение (54.24) может служить универсальной основой для получения правил отбора в квантовой механике. Оно показывает, что необходимым условием существования ненулевого матричного элемента $\langle\psi_{\mu}^{(\alpha)}|\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}|\psi_{\nu}^{(\beta)}\rangle$ является требование, чтобы неприводимое представление $D^{(\alpha)}$ содержалось в разложении прямого произведения неприводимых представлений $D^{(k)}$ и $D^{(\beta)}$:

$$D^{(\alpha)} \subset D^{(k)} \times D^{(\beta)}. \tag{54.25}$$

Практическое применение правила (54.25) к установлению правил отбора для произвольных операторов предполагает, что мы умеем выразить любой оператор $\widehat{F}$ через неприводимые тензорные операторы $\widehat{F}_{\varkappa}^{(k)}$ соответствующей группы. Мы познакомимся с этой процедурой в следующей лекции на примере группы трехмерных вращений.

Упражнения к лекции 16

16.1. Указать все преобразования, образующие группу симметрии куба.

16.2. То же для тетраэдра.

16.3. Показать, что компоненты радиус-вектора x и y образуют базис двумерного представления группы C_4 (повороты вокруг оси z). Найти матрицы этого представления.

16.4. То же для группы C_3.

16.5. Найти коммутационное соотношение для оператора вектора Рунге–Ленца (упр. 9.11) и оператора орбитального момента частицы в кулоновском поле.

ЛЕКЦИЯ 17

§ 55. Группа трехмерных вращений и ее представления

Представление группы трехмерных вращений R_3 (а также более широкой группы $O_3 = R_3 \times I$) осуществляют операторы поворота (53.21):

$$\widehat{R}(\mathbf{n},\, \alpha) = e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{J}})}. \tag{55.1}$$

В качестве базиса неприводимого представления этой группы можно взять векторы состояний $|jm\rangle$, в которых определен полный момент системы и его проекция на ось z:

$$\widehat{R}(\mathbf{n},\, \alpha)|jm\rangle = \sum_{m'=-j}^{j} D^{(j)}_{m'm}(\mathbf{n},\, \alpha)|jm'\rangle. \tag{55.2}$$

Матрицы неприводимых представлений группы R_3

$$D^{(j)}_{m'm}(\mathbf{n},\, \alpha) = \langle jm'|e^{\frac{i}{\hbar}\alpha(\mathbf{n}\widehat{\mathbf{J}})}|jm\rangle \tag{55.3}$$

имеют размерность $(2j+1) \times (2j+1)$ и называются *матрицами конечных поворотов*. Они обладают свойством унитарности:

$$\sum_{m=-j}^{j} D^{(j)}_{m_1 m}(\mathbf{n},\, \alpha) D^{(j)*}_{m_2 m}(\mathbf{n},\, \alpha) = \delta_{m_1 m_2}. \tag{55.4}$$