представление группы G, которое, вообще говоря, будет приводимым. Мы обозначаем его $L \otimes M$ и называем (внутренним) кронекеровским произведением представлений L и M. Если мы определили все неприводимые представления G, то мы можем попытаться разложить $L \otimes M$ для каждой пары неприводимых представлений L и M и, таким образом, составить нечто вроде „таблицы умножения“ для нашей группы. Ясно, что случай (b) упомянутой выше задачи эквивалентен составлению таблицы умножения для представлений группы вращений. Эта задача имеет простой ответ, и мы приведем результат без доказательства:

$$D_j \otimes D_k = D_{|j-k|} \oplus D_{|j-k|+1} \oplus \cdots \oplus D_{j+k},$$

Эта формула известна как разложение Клебша-Гордана. Итерируя эту формулу, мы сможем найти разложение на неприводимые представления для любого произведения $L_1 \otimes L_2 \otimes \cdots \otimes L_n$, т. е. для ограничения на диагональ любого неприводимого представления группы $G \times G \times \cdots \times G$ (n множителей), где G — группа вращений.

3.3 Возмущения и теоретико-групповая классификация собственных значений

Пусть U — представление компактной группы G, и пусть L^1, L^2, L^3 ... — множество всех различных неприводимых представлений группы G („всех“ и „различных“, как всегда, с точностью до эквивалентности). Пусть H — самосопряженный оператор в $\mathcal{H}(U)$, который коммутирует со всеми U_x, $x \in G$, и имеет чисто точечный спектр. Пусть $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \mathcal{H}_3 \oplus \ldots$ — разложение $\mathcal{H}$, индуцированное однозначным разложением U на примарные представления, причем $\mathcal{H}_j$ — гильбертово пространство прямой суммы нескольких экземпляров $\mathcal{H}(L^j)$. Пусть $\lambda_1, \lambda_1 \ldots$ — собственные значения H и $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ — подпространство всех собственных векторов с собственным значением λ_j. Поскольку каждое U_x коммутирует с H, оно коммутирует со всеми P_{λ_j}, где P_{λ_j} — проектор на подпространство $\mathcal{H}_{\lambda_j}$, и, следовательно, переводит каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ в себя. Поэтому каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ определяет некоторое подпредставление U и разложение $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ на примарные задается, очевидно, таким разложением пространства:

$$\mathcal{H}_{\lambda_j} = (\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_1) \oplus (\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_2) \oplus \ldots.$$

Таким образом, $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ — попарно ортогональные подпространства, которые в сумме дают все $\mathcal{H}$. Далее, $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ представляет собой одновременно собственное подпространство для оператора H и пространство некоторого примарного представления U.

Можно показать, что $(x,t) \to e^{iHt}U_x$ — представление группы $G \times R$, где R — аддитивная группа прямой, и что $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ — подпространство примарного представления, определяемого неприводимым представлением $(x,t) \to e^{i\lambda_j t}L_x^k$. Отсюда следует, что каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ имеет размерность, либо равную 0 или ∞, либо кратную размерности d_k пространства $\mathcal{H}_(L^k)$. Поэтому, если U содержит неприводимые неодномерные компоненты, то некоторые из собственных подпространств H обязательно будут иметь размерность, большую 1.

Появление кратных собственных значений в квантовой механике называют *вырождением*. Мы видим, что симметрия H в смысле левой инвариантности H относительно компактной унитарной группы вызывает вырождение. Если каждое $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ пересекается только с одним $\mathcal{H}_k$ и если это пересечение имеет ту же размерность, что и $\mathcal{H}(L^k)$, т. е., другими словами, если H не имеет больше кратных собственных значений, чем это необходимо для его принадлежности $R(L)$, то говорят, что H не имеет случайных вырождений (относительно U). Если H не имеет *случайных* вырождений, то его собственные значения можно классифицировать с помощью неприводимых представлений L^j в том смысле,

что каждое собственное подпространство является в то же время пространством некоторого определенного L^j. В одном важном случае, с которым мы будем иметь дело, имеются случайные вырождения, но только такие, что с данным $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ пересекаются несколько *различных* $\mathcal{H}_k$. В таких случаях, т. е. в тех случаях, когда каждое пересечение $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ имеет размерность 0 или d_k, или, что эквивалентно, когда все примарные компоненты представления $(x,t) \to e^{iHt}U_x$ неприводимы, будем говорить, что нет *серьезных* вырождений.

Если H — наблюдаемая энергии квантовой системы, то можно убедиться в наличии вырождений, изменив систему так, чтобы нарушить симметрию. Тогда каждое λ_j распадается на столько различных значений, какова размерность $\mathcal{H}_{\lambda_j}$. Можно нарушить симметрию системы только частично, так, чтобы измененное H коммутировало с U_x для x из некоторой замкнутой подгруппы $K \subset G$. В этом случае λ_j распадается на меньшее количество частей, и природа этого расщепления λ_j будет тесно связана с разложением ограничений на подгруппу K соответствующих представлений L^k.

Пусть G, K, H и U те же, что и выше, и пусть для каждого $\varepsilon \in [0,1]$ задан самосопряженный оператор H^ε, такой, что $H^0 = H$. Мы предполагаем, что зависимость H^ε от ε удовлетворяет таким условиям гладкости, что все проводимые ниже построения имеют смысл и, кроме того, что $U_x H^\varepsilon = H^\varepsilon U_x$ для всех $x \in K$ и всех $\varepsilon \in [0,1]$.

Пусть λ_j — собственное значение H^0, и пусть нет серьезных вырождений, т. е. ограничение U на $\mathcal{H}_{\lambda_j}$ является прямой суммой различных неприводимых представлений. Пусть L^k — одно из них, P_{jk} — проектор на $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$.

Положим $H^\varepsilon - H^0 = W^\varepsilon$ и $W^\varepsilon_{jk} = P_{jk} W^\varepsilon P_{jk}$ (мы не будем сейчас останавливаться на трудностях, происходящих из-за сложения и вычитания неограниченных операторов). Тогда W^ε_{jk} — самосопряженный оператор в конечномерном гильбертовом пространстве $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$. Его смысл состоит в том, что собственные значения оператора

$$\frac{d}{d\varepsilon}\left[W^\varepsilon_{jk}\right]\Big|_{\varepsilon=0}$$

равны коэффициентам при членах первого порядка в разложении по степеням ε тех собственных значений H^ε, которые при $\varepsilon = 0$ сводятся к собственным значениям, соответствующим собственным векторам из $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$. Этот факт составляет основное утверждение теории возмущений первого порядка. Не заботясь о строгости, покажем, почему это происходит.

Пусть φ^ε — вектор в $\mathcal{H}$, аналитически зависящий от ε, так что мы можем писать

$$\varphi^\varepsilon = \varphi^0 + \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2 + \ldots,$$

где $\varphi^0 \in \mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$. Предположим, что φ^ε — собственный вектор H^ε с собственным значением

$$\lambda^\varepsilon = \lambda_j + a_1\varepsilon + a_2\varepsilon^2 + \ldots;$$

тогда

$$\left[H^0 + W^\varepsilon_{jk} + (W^\varepsilon - W^\varepsilon_{jk})\right]\left[\varphi^0 + \varepsilon\varphi_1 + \varepsilon^2\varphi_2 + \ldots\right] = \\ = (\lambda_j + a_1\varepsilon + a_2\varepsilon^2 + \ldots)(\varphi^0 + \varphi_1\varepsilon + \varphi_2\varepsilon^2 + \ldots).$$

Если мы воспользуемся линейностью операторов и дистрибутивным законом, а также тем, что $H^0(\varphi^0) = \lambda_j\varphi^0$, то после уничтожения свободных членов мы сможем разделить результат на ε и получить равенство

$$a_1\varphi^0 + \lambda_j\varphi_1 + \varepsilon(\ldots) + \varepsilon^2(\ldots) = H^0(\varphi_1) + \frac{W^\varepsilon_{jk}}{\varepsilon}(\varphi^0) + \frac{W^\varepsilon - W^\varepsilon_{jk}}{\varepsilon}(\varphi^0) + W^\varepsilon\varphi_1 + \varepsilon(\ldots).$$

Проектируя затем на $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ и устремляя ε к нулю, получаем

$$a_1\varphi^0 + \lambda_j P_{jk}(\varphi_1) = P_{jk}H^0(\varphi_1) + \lim_{\varepsilon\to 0} \frac{W^\varepsilon_{jk}(\varphi^0)}{\varepsilon}.$$

Но H^0 коммутирует с P_{jk} и $H^0 P_{jk}(\varphi_1) = \lambda_j P_{jk}(\varphi_1)$, поэтому

$$\lim_{\varepsilon\to 0} \frac{W^\varepsilon_{jk}}{\varepsilon}(\varphi^0) = a_1\varphi^0,$$

т. е. φ^0 является собственным вектором оператора $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(W^\varepsilon_{jk}/\varepsilon)$ с собственным значением a_1. Предполагая, что имеется полное множество собственных векторов, аналитически зависящих от ε и сводящихся при $\varepsilon = 0$ к элементам $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ мы приходим к выводу, что в первом приближении собственные значения H^ε, на которые расщепляется λ_j, имеют вид $\lambda_j + \varepsilon a_1^{(r)}$, где $a_1^{(1)}, a_2^{(2)}, \ldots$ — собственные значения оператора $\lim\limits_{\varepsilon\to 0}(W^\varepsilon_{jk}/\varepsilon)$ и k пробегает все значения, для которых $\mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k \neq 0$. В случае, когда нет случайных вырождений, k будет однозначно определяться числом j.

Излишне говорить, что подведение строгой основы под это формальное построение теории возмущений включает целый ряд нетривиальных математических задач. Этим задачам посвящена обширная литература, к которой мы отсылаем читателя за дальнейшими подробностями. В Трудах Международного математического конгресса 1950 г. (Proceedings of the 1950 International Congress of Mathematics) был включен краткий обзор Реллиха результатов в этой области, достигнутых к тому времени. Рефераты более поздних работ, принадлежащих таким авторам, как Като, Надь и Вольф, можно найти в *Mathematical Reviews*.

Возвращаясь к теории групп, попытаемся найти связь расщепления λ_j на $\lambda_j + \varepsilon a_1^{(r)}$ и разложения ограничения L^k на подгруппу K. Для простоты мы будем рассматривать только тот случай, когда нет случайных вырождений, т. е. когда для каждого j существует единственное $k = k(j)$, такое, что $\mathcal{H}_{\lambda_j} = \mathcal{H}_{\lambda_j} \cap \mathcal{H}_k$ и $P_j = P_{jk} \neq 0$. Поскольку $U_x P_j = P_j U_x$ для всех x, мы сразу найдем, что $U_x P_j W^\varepsilon P_j = P_j W^\varepsilon P_j U_x$ для всех x из K. Таким образом, $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ коммутирует с ограничением U на $\mathcal{H}_{\lambda_j} = \mathcal{H}_{k(j)}$ и подгруппу K. Но ограничение U на $\mathcal{H}_{k(j)}$ есть в точности неприводимое представление $L^{k(j)}$ группы G. Ограничение $L^{k(j)}$ на K имеет разложение $L^{k(j)} = \sum\limits_i l(k(j), i)N_i$, где N_i — неприводимые представления подгруппы K и функция кратности $(k, i) \to l(k, i)$ зависит только от K и G. Пусть

$$\mathcal{H}_{\lambda_j} = \mathcal{H}_{k(j)} = \mathcal{H}^{N_1}_{\lambda_j} \oplus \mathcal{H}^{N_2}_{\lambda_j} \oplus \ldots \mathcal{H}^{N_t}_{\lambda_j} \ldots$$

— однозначное разложение $\mathcal{H}_{\lambda_j}$, соответствующее разложению ограничения $L^{k(j)}$ на подгруппу K на примарные компоненты. Тогда $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ переводит $\mathcal{H}^{N_i}_{\lambda_j}$ в себя и собственные значения $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ в $\mathcal{H}^{(i)}_{\lambda_j}$ имеют кратность, кратную размерности d_i представления N_i.

Если H^ε не имеет случайных вырождений, то $W^\varepsilon_{j,k(j)}$ будет иметь в точности столько различных собственных значений, сколько (не обязательно различных) неприводимых компонент имеет ограничение на K представления $L^{k(j)}$. Каждое из этих собственных значений будет иметь кратность, равную размерности соответствующего N. Таким образом, собственное значение λ_j оператора H^0, соответствующее неприводимому представлению $L^{k(j)}$ группы G, расщепляется при переходе к H^ε на столько значений, сколько неприводимых компонент имеет ограничение $L^{k(j)}$ на K.

В частности, мы видим, что собственные значения оператора H^ε можно снабдить двойным индексом k, i. Первый индекс k указывает, какое неприводимое представление группы G соответствует тому собственному значению H^0, расщеплением которого

получено это собственное значение H^ε, второй индекс указывает, какое представление группы K соответствует самому собственному значению H^ε. Индекс i можно применять только тогда, когда ε достаточно мало, так что для любых различных отщепленных собственных значений можно проследить, из каких первоначальных значений они возникли.

Если K коммутативна и $l(k,i)$ принимает значения только 0 и 1, то для заданных k, i и данного собственного значения будет существовать не более чем одномерное собственное подпространство и стационарное состояние системы будет полностью описываться заданием энергии и двух индексов k, i.

3.4 Сферическая симметрия и спин

Рассмотрим каноническое квантование классической системы, состоящей из одной частицы, движущейся в „поле центральных сил“. Гамильтониан такой системы равен

$$\frac{1}{2m}(p_x^2+p_y^2+p_z^2)+\mathcal{V}(\sqrt{x^2+y^2+z^2}),$$

где $\mathcal{V}$ — действительная функция, задающая потенциальную энергию как функцию расстояния от „центра сил“, m — масса частицы. Если m — масса электрона и $\mathcal{V}(r) = -e^2/r$, где e — заряд электрона, то мы получаем модель Резерфорда для атома водорода (без учета движения значительно более тяжелого ядра). Соответствующий динамический оператор является некоторым самосопряженным расширением формального дифференциального оператора

$$\psi \to -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\psi}{\partial z^2}\right)+\mathcal{V}(\sqrt{x^2+y^2+z^2})\psi,$$

действующего в гильбертовом пространстве $\mathcal{L}^2(E^3)$. Пусть G — группа всех вращений около точки $(0,0,0)$ в E^3. Для каждого вращения $\alpha \in G$ оператор

$$(U_\alpha f)(x,y,z) = f(\alpha^{-1}(x,y,z))$$

будет унитарным оператором в $\mathcal{L}^2(E^3)$, который коммутирует с H, и $\alpha \to U_\alpha$ будет представлением группы G в $\mathcal{L}^2(E^3)$. Таким образом, мы можем применить теорию, развитую в предыдущем разделе, и получить естественное разложение $\mathcal{L}^2(E^3)$ в прямую сумму $\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2 \oplus \ldots$, где каждое $\mathcal{H}_j$ инвариантно относительно H и U_α и представление U, ограниченное на $\mathcal{H}_j$, примарно.

Мы можем выбрать обозначения так, чтобы ограничение U на $\mathcal{H}_j$, было прямой суммой представлений D_j размерности $2i+1$, описанных в разд. 3.2. Можно показать, что каждое D_j входит в разложение U с кратностью ∞. Действительно, мы можем рассматривать E^3 как $S^2 \times \mathbb{R}^+$, где S^2 — единичная сфера в E^3, а $\mathbb{R}^+$ — положительная часть действительной оси. Таким образом, $\mathcal{L}^2(E^3)$ естественным образом изоморфно $\mathcal{L}^2(S^2)\otimes\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$, а U_α имеет вид $U'_\alpha \otimes I_\alpha$, где $\alpha \to I_\alpha$ — единичное представление $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$ и $\alpha \to U'_\alpha$ — представление в $\mathcal{L}^2(S^2)$, индуцированное действием в S^2 группы вращений. Далее, группа вращений действует на S^2 транзитивно, и подгруппа, оставляющая на месте одну точку $(0,0,1)$, является группой K_z всех вращений относительно оси z.

Из общей теоремы теории представлений следует, что U' содержит каждое D_j ровно столько раз, сколько раз ограничение D_j на K_z содержит единичное представление, т. е. один раз. Таким образом, $U' = D_1 \oplus D_2 \oplus D_3 \oplus \ldots$. Пусть $\mathcal{H}'_j$ — однозначно определенное подпространство $\mathcal{L}^2(S^2)$, на котором U' сводится к D_j; тогда $\mathcal{H}_j = \mathcal{H}'_j \otimes \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$ и U содержит D_j бесконечно того раз.

Рассмотрим ограничение H на $\mathcal{H}_j$. Поскольку это ограничение H_j коммутирует со всеми U_α, нетрудно доказать, что оно должно иметь вид $I \otimes H'_j$, где H'_j — некоторый самосопряженный оператор в $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^+)$. Непосредственные вычисления показывают, что H'_j