му на функцию потенциальной энергии V:

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathsf{G}_a\mathbf{r}). \tag{5.11}$$

Выше мы дали достаточно строгое определение индуцированного преобразования, но можно представить себе и более абстрактный набор преобразований $\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)$ в функциональном пространстве, которые не связаны с преобразованиями координат, но тем не менее удовлетворяют групповым аксиомам и, следовательно, определяют некоторую группу симметрии.

§ 3. ВЫРОЖДЕНИЕ И КЛАССИФИКАЦИЯ ПО СИММЕТРИИ СОБСТВЕННЫХ ЗНАЧЕНИЙ И СОБСТВЕННЫХ ФУНКЦИЙ

Первые два следствия существования группы симметрии $\mathcal{G}$ гамильтониана тесно взаимосвязаны, и мы рассмотрим их вместе. Сначала мы их сформулируем, а затем покажем, как их можно вывести.

1. Собственные функции ψ и собственные значения E гамильтониана H можно классифицировать по неприводимым представлениям $\mathsf{T}^{(\alpha)}$ группы симметрии $\mathcal{G}$ и обозначать через $\psi^{(\alpha)}$ и $E^{(\alpha)}$.
2. Энергетический уровень $E^{(\alpha)}$ должен быть по меньшей мере s_α-кратно вырожден, если s_α — размерность соответствующего представления $\mathsf{T}^{(\alpha)}$.

Для вывода этих следствий вначале отметим, что набор всех вырожденных собственных функций, соответствующих некоторому данному собственному значению E, образует векторное пространство V. (Если функции φ и ψ обе соответствуют энергии E, то любая их линейная комбинация тоже соответствует энергии E.) Далее докажем, что пространство V должно быть инвариантным по отношению к преобразованиям $\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)$, индуцированным группой $\mathcal{G}$. Чтобы продемонстрировать инвариантность, достаточно определить обычным образом трансформированную функцию $\psi' = \mathsf{T}(\mathsf{G}_a)\psi$, и тогда получим, что если ψ есть собственная функция оператора H с энергией E, то ψ' — тоже собственная функция оператора H с энергией E, так как

$$\mathsf{H}\psi' = \mathsf{H}\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)\psi = \mathsf{T}(\mathsf{G}_a)\mathsf{H}\psi = E\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)\psi = E\psi'. \tag{5.12}$$

[Здесь мы использовали формулу (5.10).] Таким образом, представление группы симметрии осуществляется в векторном пространстве V через преобразования $\mathsf{T}(\mathsf{G}_a)$.

Это представление либо является неприводимым, либо может быть приведено к своим неприводимым компонентам, так что в любом случае можно выбрать в V базис, векторы которого $\psi_i^{(\alpha)}$ обозначены индексом α неприводимого представления группы $\mathcal{G}$ и индексом строки представления i. Степень вырождения определяется размерностью пространства V: она по меньшей мере равна s_α и превышает s_α, если пространство V приводимо.

Всем изложенным доказываются следствия, сформулированные в начале параграфа, но остается пояснить один важный момент. Если представление, соответствующее пространству V, не является неприводимым, то для обозначения энергии требуется не один, а несколько индексов α всех неприводимых представлений, входящих в его разложение. В действительности, если используется полная группа симметрии, подобная ситуация встречается крайне редко — настолько редко, насколько редко встречаются равные собственные значения для произвольной матрицы. Поэтому употребляют выражения «нормальное вырождение» для неприводимого представления и «случайное вырождение» для ситуации, когда два или более неприводимых представлений отвечают одинаковой энергии. Случайное вырождение возможно при изменении некоторых параметров гамильтониана H (таких, например, как напряженность магнитного или электрического поля), если при определенных значениях этих параметров два обычно невырожденных уровня пересекаются. Если для некоторого вида гамильтониана в группе симметрии $\mathcal{G}$ систематически обнаруживается случайное вырождение, то это обычно объясняется наличием более высокой симметрии. Как мы видели в гл. 4, § 18, неприводимое представление группы $\mathcal{K}$ в общем случае сводится к сумме нескольких неприводимых представлений одной из подгрупп. Таким образом, в группе более высокой симметрии случайно вырожденные уровни превращаются в компоненты одного-единственного неприводимого представления. Некоторые хорошо известные примеры этого можно найти в т. 2, гл. 19. Примеры гораздо более важного случая обычного вырождения приведены в § 6.