

Рассматривая второй член разложения выражения (7.12) при малых углах a , убеждаемся в том, что для не-приводимого представления $T^{(m)}$ группы \mathcal{R}_2 матричный элемент инфинитезимального оператора X равен просто $-im$. Действительно, если функция ψ удовлетворяет уравнению $X\psi = -im\psi$, то она должна преобразоваться по неприводимому представлению $T^{(m)}$ группы \mathcal{R}_2 .

Относительно присоединения к группе \mathcal{R}_2 несобственных элементов (отражений и инверсий) см. гл. 9, § 6.

§ 4. ГРУППА \mathcal{R}_3

Вращение в трехмерном пространстве обычно обозначают через $R_k(a)$, где a — угол поворота ($0 \leq a \leq \pi$), а k — единичный вектор, направленный вдоль оси вращения (гл. 2, § 2, пример 9; гл. 3, § 8). Вращение зависит от трех параметров: угла поворота a и двух сферических углов вектора k . Но в некоторых отношениях проще пользоваться тремя другими параметрами: $a_x = ak_x$, $a_y = ak_y$, $a_z = ak_z$, где k_q — это три составляющие вектора k в какой-либо фиксированной системе координат. В связи с этим вместо обозначения $R_k(a)$ мы введем обозначение $R(a)$.

Элементарные геометрические рассуждения показывают, что при операции вращения произвольный вектор r преобразуется в соответствии с равенством

$$R_k(a)r = \cos ar + (1 - \cos a)(r \cdot k)k + \sin a(k \times r).$$

Отсюда сразу же получаем матрицу преобразования $R_k(a)$ в декартовом базисе. Например:

$$[R_k(a)]_{xx} = \cos a + (1 - \cos a)k_x^2,$$

$$[R_k(a)]_{yx} = (1 - \cos a)k_xk_y + k_z \sin a \text{ и т. д.}$$

Преобразование вращения сохраняет как длины, так и углы между векторами. Значит, вращение сохраняет скалярное произведение любых двух векторов r_1 и r_2 . Следовательно, если мы возьмем векторы $r'_1 = Rr_1$ и $r'_2 = Rr_2$, то (гл. 3, § 5) $(r'_1, r'_2) = (Rr_2, Rr_1) = (r_2, R^\dagger Rr_1)$, т. е. матрица R унитарна ($R^\dagger R = 1$) и модуль ее определителя равен единице.

Поскольку в обычном декартовом базисе матричные элементы матрицы R действительны, то сама матрица ортогональна и ее определитель равен ± 1 . Можно даже,

выбрав какой-либо ортонормальный базис, определить вращения как множество ортогональных 3×3 -матриц с определителем $+1$. Так как определитель тождественного преобразования равен $+1$, то в силу непрерывности группы \mathcal{R}_3 определители всех матриц вращений должны быть равны $+1$. С геометрической точки зрения матрицы с определителем -1 также играют определенную роль. Заметим, что матрица I преобразования инверсии, которое меняет знаки всех векторов, имеет вид

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

и, следовательно, ее определитель равен -1 . Таким образом, ортогональные матрицы с определителем, равным -1 , соответствуют произведениям вращений на инверсию. Иногда для обозначения группы \mathcal{R}_3 употребляется символ O_3^+ , указывающий, что речь идет о группе ортогональных преобразований трехмерного пространства, определитель которых равен $+1$. Символом же O_3 обозначают группу всех ортогональных преобразований, включая инверсии. Группа O_3 совпадает с произведением $\mathcal{R}_3 \times S_2$ группы вращений \mathcal{R}_3 на группу инверсий S_2 . Отметим, что преобразования с определителем, равным -1 , сами по себе не образуют группу.

A. Инфинитезимальные операторы

Выражение (7.18) для поворота на малый угол вокруг оси z непосредственно переносится на случай поворота $R_k(a)$ на малый угол вокруг произвольной оси k :

$$\begin{aligned} R_k(a)r &= r + a(k \times r) = \\ &= r + a \sum_{q=x, y, z} k_q (e_q \times r) = r + \sum_q a_q (e_q \times r), \end{aligned} \quad (7.22)$$

где $a_q = a k_q$. Данное выражение конкретизирует общую формулу для изменения вектора r (с сохранением членов не выше первого порядка), которая следует из равенства (7.4). Таким образом, три инфинитезимальных оператора, соответствующие параметрам a_q , геометрически представляются как

$$X_q = (e_q \times \cdot) \quad (7.23)$$

Они соответствуют бесконечно малым поворотам вокруг осей x , y и z . Значит, в базисе \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y , \mathbf{e}_z матрицы инфинитезимальных операторов имеют вид

$$\mathbf{X}_x = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{X}_z = \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.24)$$

На основании элементарных соотношений векторной алгебры можно для любого вектора \mathbf{r} показать, что

$$[\mathbf{X}_x, \mathbf{X}_y] \mathbf{r} = \mathbf{e}_x \times (\mathbf{e}_y \times \mathbf{r}) - \mathbf{e}_y \times (\mathbf{e}_x \times \mathbf{r}) = x\mathbf{e}_y - y\mathbf{e}_x = = (\mathbf{e}_z \times \mathbf{r}) = \mathbf{X}_z \mathbf{r}.$$

Отсюда получаем перестановочные соотношения для инфинитезимальных операторов группы R_3 :

$$[\mathbf{X}_x, \mathbf{X}_y] = \mathbf{X}_z, \quad [\mathbf{X}_y, \mathbf{X}_z] = \mathbf{X}_x, \quad [\mathbf{X}_z, \mathbf{X}_x] = \mathbf{X}_y. \quad (7.25)$$

В силу уравнения (7.23) три оператора \mathbf{X}_q образуют вектор, который при вращениях преобразуется как вектор \mathbf{e}_q . Инфинитезимальные операторы группы вращений связаны с операторами углового момента в квантовой механике [формула (7.22)], и, следовательно, эти перестановочные соотношения совпадают с перестановочными соотношениями для трех компонент вектора углового момента, с которыми читатель, возможно, познакомился при изучении квантовой механики. Многие алгебраические выводы данного пункта параграфа имеют соответствующие параллели в теории углового момента; в частности, это относится к анализу структуры неприводимых представлений.

Инфинитезимальные операторы \mathbf{X}_q антиэрмитовы (§ 2). Поэтому для удобства можно вынести множитель $i = -(-1)^{1/2}$, приняв обозначение $\mathbf{J}_q = i\mathbf{X}_q$. Под инфинитезимальным оператором мы будем понимать как оператор \mathbf{X}_q , так и оператор \mathbf{J}_q . Надеемся, что это не приведет к какому-либо недоразумению. Операторы \mathbf{J}_q эрмитовы и удовлетворяют следующим перестановочным соотношениям:

$$[\mathbf{J}_x, \mathbf{J}_y] = i\mathbf{J}_z, \quad [\mathbf{J}_y, \mathbf{J}_z] = i\mathbf{J}_x, \quad [\mathbf{J}_z, \mathbf{J}_x] = i\mathbf{J}_y. \quad (7.26)$$

Эти соотношения совпадают с перестановочными соотношениями для операторов углового момента, разделенных на число \hbar . В § 3 мы доказали, что собственные значения оператора X_z равны $-im$; поэтому собственными значениями оператора J_z будут числа m . В дальнейшем нам будет удобнее вместо самих операторов J_x и J_y рассматривать их линейные комбинации

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y. \quad (7.27)$$

Преимущество такой замены — в перестановочных соотношениях операторов J_{\pm} с оператором J_z :

$$[J_z, J_{\pm}] = iJ_y \pm J_x = \pm(J_x \pm iJ_y) = \pm J_{\pm}. \quad (7.28)$$

Из этих перестановочных соотношений следует, что если функция $\Psi(m)$ есть собственный вектор оператора J_z , принадлежащий представлению $T^{(m)}$ группы \mathcal{R}_2 , то функции $J_{\pm}\Psi(m)$ принадлежат представлениям $T^{(m\pm 1)}$ и, следовательно, операторы J_{\pm} преобразуются по представлениям $T^{(\pm 1)}$:

$$\begin{aligned} J_z \{J_{\pm}\Psi(m)\} &= (J_{\pm}J_z \pm J_{\pm})\Psi(m) = J_{\pm}(J_z \pm 1)\Psi(m) = \\ &= J_{\pm}(m \pm 1)\Psi(m) = (m \pm 1)\{J_{\pm}\Psi(m)\}. \end{aligned} \quad (7.29)$$

Оператор J_+ называется «повышающим», а оператор J_- — «понижающим», так как первый увеличивает, а второй уменьшает собственное значение оператора J_z на единицу. Заметим, что данное свойство является следствием только перестановочных соотношений, а потому оно справедливо для инфинитезимальных операторов в любом представлении группы \mathcal{R}_3 .

Б. Неприводимые представления

Для группы \mathcal{R}_2 нам легко удалось доказать, что неприводимые представления нумеруются целыми числами m и матричный элемент представления равен $\exp(-ima)$. Простота доказательства была следствием абелевости группы \mathcal{R}_2 и наличия единственного инфинитезимального оператора. В общем случае группы обладают целым набором инфинитезимальных операторов X_q , а свойства неприводимых представлений определяются перестановочными соотношениями (7.7) для операторов X_q . Для группы \mathcal{R}_3 эти соотношения даются равенствами

(7.25) или, что эквивалентно, соотношениями (7.28) и равенством

$$[J_+, J_-] = [J_x + iJ_y, J_x - iJ_y] = 2J_z. \quad (7.30)$$

В данном пункте параграфа мы постараемся вычислить размерности неприводимых представлений группы \mathcal{K}_3 и найти способ нумерации этих представлений. Мы также вычислим матричные элементы инфинитезимальных операторов в каждом неприводимом представлении. Пусть D — неприводимое представление группы \mathcal{K}_3 в векторном пространстве L . (Неприводимые представления группы \mathcal{K}_3 обычно обозначают буквой D , а не буквой T , которой обозначают представления произвольной группы.) Выберем базис, в котором инфинитезимальный оператор J_z диагонален. Векторы базиса e_m имеют индекс m , соответствующий собственному значению m оператора J_z , т. е. неприводимому представлению $T^{(m)}$ группы \mathcal{K}_2 , которому они принадлежат. (Векторы базиса пространства представления e_m , где m — целое число, не нужно путать с тремя единичными векторами e_x, e_y, e_z в обычном физическом пространстве, которые рассматривались в п. А.)

На данном этапе представляется возможным, что у нескольких линейно-независимых векторов базиса окажутся одинаковые индексы m . Но в дальнейшем мы убедимся, что этого не происходит и одного индекса m достаточно, чтобы различать между собой векторы базиса неприводимого представления. Обозначим через j максимальное значение индекса m для векторов базиса представления D . Пусть e_j — вектор базиса с индексом $m=j$. Он называется вектором «старшего веса». Вектор e_j должен удовлетворять условию

$$J_+ e_j = 0, \quad (7.31)$$

так как иначе новый вектор $J_+ e_j$ имел бы вес больший, чем вес вектора e_j . Последовательно действуя на вектор e_j поникающим оператором J_- , построим последовательность нормированных векторов:

$$\begin{aligned} e_{j-1} &= A_{j-1} J_- e_j, \\ e_{j-2} &= A_{j-2} J_- e_{j-1}, \\ e_{j-3} &= A_{j-3} J_- e_{j-2} \text{ и т. д.} \end{aligned} \quad (7.32)$$

Коэффициенты A_m , которые еще не вычислены, вводятся для нормировки векторов e_m , причем вектор e_j считается

нормированным. Все векторы данной последовательности имеют разные индексы t . Поэтому они линейно независимы и взаимно ортогональны. Векторное пространство L должно быть инвариантным относительно групповых преобразований, и, следовательно, все векторы последовательности должны принадлежать пространству L . Если размерность пространства L конечна, то последовательность векторов должна обрываться. Это происходит на том шаге, когда в результате применения понижающего оператора получаем нуль. Иначе говоря, при некотором целом t

$$J_- e_{j-t} = 0. \quad (7.33)$$

Множество векторов

$$e_j, e_{j-1}, \dots, e_{j-t} \quad (7.34)$$

инвариантно относительно действия операторов J_z и J_+ . Докажем, что оно также инвариантно относительно действия оператора J_- . Тогда это множество векторов будет инвариантным относительно действия любого элемента группы \mathcal{K}_3 , и, следовательно, оно образует базис некоторого представления группы \mathcal{K}_3 . Для доказательства инвариантности множества по отношению к действию оператора J_+ построим оператор

$$J^2 = J \cdot J = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2.$$

В силу перестановочных соотношений (7.25) он удовлетворяет соотношениям

$$[J^2, J_q] = 0$$

при $q=x, y$ и z . Поэтому, согласно формуле (7.10), этот оператор является инвариантом. Заметим, что оператор J^2 можно выразить через повышающий и понижающий операторы:

$$J^2 = \frac{1}{2} (J_+ J_- + J_- J_+) + J_z^2.$$

Согласно соотношению (7.30), это выражение можно переписать в виде

$$J^2 = J_- J_+ + J_z^2 + J_z, \quad (7.35a)$$

или

$$J^2 = J_+ J_- + J_z^2 - J_z. \quad (7.35b)$$

Из соотношения (7.35а) и свойства (7.31) следует, что e_j — собственный вектор оператора \mathbf{J}^2 :

$$\mathbf{J}^2 e_j = (J_- J_+ + J_z^2 + J_z) e_j = j(j+1) e_j.$$

Тогда в силу перестановочного соотношения

$$[\mathbf{J}^2, J_-] = 0$$

мы для любого вектора e_m из последовательности (7.34) получаем

$$\mathbf{J}^2 e_m = j(j+1) e_m. \quad (7.36)$$

Теперь из соотношений (7.32) и (7.35б) вытекает инвариантность множества (7.34) относительно действия оператора J_+ :

$$\begin{aligned} J_+ e_m &= A_m J_+ J_- e_{m+1} = \\ &= A_m (\mathbf{J}^2 - J_z^2 + J_z) e_{m+1} = \\ &= A_m \{j(j+1) - (m+1)^2 + (m+1)\} e_{m+1} = \\ &= A_m (j+m+1)(j-m) e_{m+1}. \end{aligned} \quad (7.37)$$

Значит, повышающий оператор не дает каких-либо векторов, отличных от векторов последовательности (7.34), которая была получена в результате действия понижающего оператора на вектор e_j . [Тот факт, что оператор J_+ является повышающим, еще не гарантирует правильности данного вывода, поскольку он может перевести вектор e_m в новый вектор e'_{m+1} , отличный от вектора e_{m+1} из множества (7.34).] Вектор e_j должен быть единственным вектором старшего веса среди векторов базиса пространства L , так как иначе представление будет приводимым. Таким образом, неприводимые представления группы \mathcal{K}_3 должны обладать базисом, аналогичным последовательности (7.34).

Отметим некоторые свойства неприводимого представления D . На основании равенств (7.35б) и (7.33) получаем

$$\begin{aligned} \mathbf{J}^2 e_{j-t} &= (J_+ J_- + J_z^2 - J_z) e_{j-t} = \{(j-t)^2 - (j-t)\} e_{j-t} = \\ &= (j-t)(j-t-1) e_{j-t}. \end{aligned}$$

Сравнивая это равенство с равенством (7.36), находим, что $(j-t)(j-t-1) = j(j+1)$, т. е. $(2j-t)(t+1) = 0$. Так как t — положительное целое число, мы имеем $2j=t$ и число j может быть только либо целым, либо полуцелым. Размер-

ность представления D равна теперь $2j+1$. Следовательно, неприводимые представления группы \mathcal{R}_3 можно обозначать символом $D^{(j)}$, где $j=0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2$ и т. д., причем размерность этого представления равна $2j+1$, а векторы базиса e_m можно выбрать так, чтобы они преобразовались по неприводимым представлениям $T^{(m)}$ подгруппы \mathcal{R}_2 , где $m=j, j-1, j-2, \dots, 1-j, -j$. При сужении группы \mathcal{R}_3 на ее подгруппу \mathcal{R}_2 разложение представления $D^{(j)}$ можно записать в виде

$$D^{(j)} = \sum_{m=-j}^{m=j} T^{(m)}. \quad (7.38)$$

Отметим, что полуцелые представления не периодичны на интервале 2π (§ 3, п. А). Они встречаются лишь при описании спина в квантовой механике (гл. 8, § 4).

Теперь нужно сделать всего один шаг, чтобы вывести матрицы инфинитезимальных операторов J_q в представлении $D^{(j)}$. Начнем с того, что оператор J_z в базисе векторов e_m диагонален и его матричные элементы даются равенством

$$J_z e_m = m e_m. \quad (7.39)$$

Матричные элементы операторов J_+ и J_- определяются по формулам (7.32) и (7.37), стоит лишь найти нормировочные множители A_m . Для вычисления этих множителей мы воспользуемся тем, что операторы J_q эрмитовы и поэтому $J_-^\dagger = J_+$. Отсюда

$$(e_m, J_- e_{m+1}) = (J_+ e_m, e_{m+1}) = (e_{m+1}, J_+ e_m)^*.$$

Тогда из равенств (7.32) и (7.37) получаем $|A_m|^{-2} = (j+m+1)(j-m)$. Отношения фазовых множителей векторов базиса не определяются ни условием ортогональности, ни нормировкой, и в множители A_m можно ввести любое комплексное число, равное по модулю единице. Обычно множители A_m считают действительными и положительными, так что матричные элементы операторов J_\pm даются равенствами

$$\begin{aligned} J_- e_{m+1} &= [(j+m+1)(j-m)]^{1/2} e_m, \\ J_+ e_m &= [(j+m+1)(j-m)]^{1/2} e_{m+1}. \end{aligned} \quad (7.40)$$

Такой выбор фазовых множителей называется «условием Кондона — Шортли», и отношения фазовых множителей всех $2j+1$ векторов базиса определяются этим условием однозначно.

Можно показать, что множество представлений $D^{(j)}$ полно, причем в случае однозначной функции можно обойтись лишь целыми числами j :

$$\Psi = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \Psi_{jm}, \quad (7.41)$$

где j — целое число, а каждый член Ψ_{jm} разложения преобразуется, как m -я строка представления $D^{(j)}$.

Построение матриц $D_{m'm}^{(j)}(a_x, a_y, a_z)$ конечных вращений с параметрами a_x, a_y, a_z — это сложная алгебраическая процедура. Мы ее отложим до т. 2, гл. 20, § 5. Матричный элемент $D_{m'm}^{(j)}$ обычно представляется в виде функции трех углов Эйлера, а не параметров a_x, a_y и a_z . Считаем долгом предупредить читателя о том, что разные авторы пользуются разными обозначениями для матриц представлений $D^{(j)}$. Наши обозначения согласуются с обозначениями книги Брикса и Сэтчлера (см. литературу). В основном они определяются формулами (4.2), (4.8) и (7.40).

B. Характеры

Независимо от направлений осей вращения все повороты на один и тот же угол лежат в одном классе сопряженных элементов группы \mathcal{R}_3 . Следовательно, характер вращения зависит лишь от угла поворота. Поэтому для вычисления характера неприводимого представления $D^{(j)}$ мы можем выбрать любую ось вращения. Вращения $R_z(a)$ вокруг оси z наиболее удобны, так как мы ранее пользовались базисом векторов e_m , которые преобразуются по одномерным неприводимым представлениям $T^{(m)}$ подгруппы \mathcal{R}_2 вращений вокруг оси z . Тогда на основании разложения (7.38) представления $D^{(j)}$ на неприводимые представления подгруппы \mathcal{R}_2 и в силу формулы (7.12) для характеров группы \mathcal{R}_2 мы можем вычислить характер

представления $D^{(j)}$ для поворота на угол a :

$$\begin{aligned}
 \chi_a^{(j)} &= \sum_{m=-j}^j \exp(-ima) = \exp(-ija)[1 + \exp(ia) + \\
 &\quad + \exp(2ia) + \dots + \exp(2jia)] = \\
 &= \exp(-ija)\{\exp[(2j+1)ia] - 1\}/[\exp(ia) - 1] = \\
 &= \left\{ \exp\left[\left(j+\frac{1}{2}\right)ia\right] - \exp\left[-\left(j+\frac{1}{2}\right)ia\right] \right\} \times \\
 &\quad \times \left\{ \exp\left(\frac{1}{2}ia\right) - \exp\left(-\frac{1}{2}ia\right) \right\}^{-1} = \\
 &= \frac{\sin\left(j+\frac{1}{2}\right)a}{\sin\frac{1}{2}a}. \tag{7.42}
 \end{aligned}$$

В частности, характер представления с $j=1$, т. е. векторного представления, равен

$$\begin{aligned}
 \chi_a^{(1)} &= \sin\frac{3}{2}a/\sin\frac{1}{2}a = \cos a + \left(\cos\frac{1}{2}a \sin a/\sin\frac{1}{2}a\right) = \\
 &= \cos a + 2\cos^2\frac{1}{2}a = 2\cos a + 1,
 \end{aligned}$$

что согласуется с равенством (4.6). Единичному элементу соответствует угол вращения $a=0$, при котором характер (7.42) равен $2j+1$, что совпадает с размерностью представления $D^{(j)}$.

Можно показать (т. 2, приложение 4, §. 3), что соотношение ортогональности характеров группы \mathcal{R}_2 содержит в левой части интеграл

$$\frac{1}{2\pi} \int_{a=0}^{2\pi} \chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} (1 - \cos a) da = \delta_{j_1 j_2}.$$

Согласно сказанному в § 4, полная ортогональная группа O_3 — это прямое произведение группы \mathcal{R}_3 на группу инверсий S_2 . Ее неприводимые представления обозначаются символами $D^{(j)\pm}$ и $D^{(j)-}$. Тогда, согласно изложенному в гл. 4, § 21, получаем, что характеры группы O_3 определяются соотношениями

$$\chi^{(j)\pm}(R(a)) = \chi^{(j)}(R(a)),$$

$$\chi^{(j)\pm}(S(a)) = \chi^{(j)\pm}(R(a + \pi)I) = \pm \chi^{(j)}(R(a + \pi)),$$

где $R(a)$ — собственное вращение, $S(a)$ — зеркальное вращение (гл. 9, § 1), а $\chi^{(j)}(R(a))$ — характер, даваемый выражением (7.42).

Г. Произведение представлений

Прямое произведение двух представлений (гл. 4, § 17) будет представлением, которое, вообще говоря, разлагается в сумму неприводимых представлений:

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_J c_J D^{(J)}.$$

Нашей целью в данном пункте параграфа будет вычисление коэффициентов c_J . Так же как для конечных групп, мы рассмотрим соответствующее соотношение для характеров

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \sum_J c_J \chi_a^{(J)}. \quad (7.43)$$

Для определенности будем считать, что $j_1 \geq j_2$. В силу равенства (7.42) левую часть этого уравнения можно записать в виде

$$\begin{aligned} & \frac{\sin\left(j_1 + \frac{1}{2}\right)a \sin\left(j_2 + \frac{1}{2}\right)a}{\sin^2 \frac{1}{2}a} = \frac{-\cos(j_1 + j_2 + 1)a + \cos(j_1 - j_2)a}{2 \sin^2 \frac{1}{2}a} = \\ & = \frac{2 \sin\left(j_1 + j_2 + \frac{1}{2}\right)a \sin \frac{1}{2}a - \cos(j_1 + j_2)a + \cos(j_1 - j_2)a}{2 \sin^2 \frac{1}{2}a} = \\ & = \frac{\sin\left(j_1 + j_2 + \frac{1}{2}\right)a}{\sin \frac{1}{2}a} + \frac{\sin(j_1)a \sin(j_2)a}{\sin^2 \frac{1}{2}a}, \end{aligned}$$

или

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \chi_a^{(j_1 + j_2)} + \chi_a^{(j_1 - 1/2)} \chi_a^{(j_2 - 1/2)}.$$

Повторяя наши рассуждения, получаем

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \chi_a^{(j_1 + j_2)} + \chi_a^{(j_1 + j_2 - 1)} + \chi_a^{(j_1 - 1)} \chi_a^{(j_2 - 1)}$$

и т. д. Вспоминая, что характер тривиального представления $D^{(0)}$ равен $\chi_a^{(0)} = 1$, мы после еще $2j_2 - 2$ таких шагов

приходим к равенству

$$\chi_a^{(j_1)} \chi_a^{(j_2)} = \chi_a^{(j_1+j_2)} + \chi_a^{(j_1+j_2-1)} + \dots + \chi_a^{(j_1-j_2)}.$$

Сравнивая этот результат с соотношением (7.43), находим, что при $(j_1-j_2) \leq J \leq (j_1+j_2)$ коэффициенты $c_J=1$, а при других значениях J коэффициенты $c_J=0$. Ясно, что условие $j_1 \geq j_2$ не ограничивает общности рассмотрения. Поэтому мы окончательно получаем

$$D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)} = \sum_{J=|j_1-j_2|}^{J=(j_1+j_2)} D^{(J)}. \quad (7.44)$$

Эту формулу можно также вывести путем подсчета числа векторов базиса произведения представлений, которые преобразуются по каждому из представлений $T^{(M)}$ группы \mathcal{R}_2 . При этом нужно также воспользоваться тем, что представление $D^{(J)}$ группы \mathcal{R}_3 содержит $2J+1$ векторов, каждому из которых соответствует одно из чисел $M=J, J-1, \dots, -J$. Ограничение $|j_1-j_2| \leq J \leq (j_1+j_2)$ иногда называется условием треугольника из-за его сходства с соотношением между длинами j_1, j_2 и J трех сторон треугольника.

Пользуясь терминологией гл. 4, § 17, группу \mathcal{R}_3 можно считать «просто приводимой», так как в разложении (7.44) каждое представление $D^{(J)}$ встречается не более одного раза. Исходя только из формул (7.40) для матричных элементов инфинитезимальных операторов, можно вывести явное выражение для коэффициентов Клебша — Гордана, введенных в гл. 4, § 17. Но ввиду его сложности мы не приводим его здесь. Выбор фазовых множителей, принятый в соотношениях (7.40), обеспечивает действительность этих коэффициентов. Подробные таблицы значений коэффициентов приведены в книге Ротенберга и др. (см. литературу). Простой способ вычисления этих коэффициентов приводится в задаче 7.8. Подробное описание коэффициентов Клебша — Гордана и связанных с ними коэффициентов можно найти в книге Бринка и Сэтчлера.

Разложение (7.44) приводит к соотношениям между произведениями матричных элементов представлений $D^{(j)}$. Коэффициенты Клебша — Гордана преобразуют параметризуемые числами m_1, m_2 векторы базиса произведения

представлений в левой части равенства (7.44) в параметризуемые числами JM векторы базиса суммы представлений в правой части равенства (7.44). Значит,

$$\sum_{m_1 m'_1 (m_2 m'_2)} C(j_1 j_2 J, m_1 m_2 M) C(j_1 j_2 J', m'_1 m'_2 M') D_{m_1 m_1}^{(j_1)} D_{m'_2 m'_2}^{(j_2)} = \delta_{JJ'} D_{M' M}^{(J)},$$

где все матричные элементы матриц D соответствуют одному и тому же вращению. (Числа m_2 , m'_2 , стоящие в скобках, связаны с числами m_1 , m'_1 соотношениями $m_1 + m_2 = M$, $m'_1 + m'_2 = M'$.) В силу свойства ортогональности коэффициентов данное соотношение можно обратить:

$$D_{m' m}^{(j_1)} D_{m'_2 m_2}^{(j_2)} = \sum_J C(j_1 j_2 J, m_1 m_2 M) C(j_1 j_2 J, m'_1 m'_2 M') D_{M' M}^{(J)}.$$

Эти соотношения не нужно путать с определением представления [формула (4.3)]

$$D_{m' m}^{(j)} (\mathbf{R}(\mathbf{c})) = \sum_n D_{m' n}^{(j)} (\mathbf{R}(\mathbf{a})) D_{nm}^{(j)} (\mathbf{R}(\mathbf{b})),$$

где $\mathbf{R}(\mathbf{c}) = \mathbf{R}(\mathbf{a})\mathbf{R}(\mathbf{b})$.

Д. Примеры базисных векторов

В качестве первого примера базиса неприводимого представления $D^{(j)}$ группы \mathcal{R}_3 рассмотрим три единичных вектора \mathbf{e}_x , \mathbf{e}_y и \mathbf{e}_z в обычном трехмерном пространстве. Они задают базис представления с $j=1$. Очевидно, что трехмерное пространство, порождаемое этими тремя векторами, неприводимо. Таким представлением может быть лишь представление $D^{(1)}$. Подобное отождествление можно также провести на основании характера $2 \cos a + 1$. Чтобы записать матрицы операторов в обычной форме, введенной в предыдущем пункте параграфа, выберем в качестве векторов базиса \mathbf{e}_m следующие линейные комбинации векторов:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= -(\mathbf{e}_x + i\mathbf{e}_y)/2^{1/2}, \\ \mathbf{e}_0 &= \mathbf{e}_z, \\ \mathbf{e}_{-1} &= (\mathbf{e}_x - i\mathbf{e}_y)/2^{1/2}. \end{aligned} \tag{7.45}$$

Нетрудно показать, что векторы \mathbf{e}_m преобразуются по представлениям $T^{(m)}$ группы \mathcal{R}_2 вращений вокруг оси z

[формула (7.13)]. Если отношения фазовых множителей выбрать в соответствии с условиями Кондона — Шортли [формула (7.40)], то, как мы убедимся ниже, три вектора \mathbf{e}_m будут ортонормальны относительно скалярного произведения (3.7). Из равенств (7.23) непосредственно следуют соотношения

$$\begin{aligned} X_x \mathbf{e}_x &= 0, & X_x \mathbf{e}_y &= \mathbf{e}_z, & X_x \mathbf{e}_z &= -\mathbf{e}_y, \\ X_y \mathbf{e}_x &= -\mathbf{e}_z, & X_y \mathbf{e}_y &= 0, & X_y \mathbf{e}_z &= \mathbf{e}_x, \\ X_z \mathbf{e}_x &= \mathbf{e}_y, & X_z \mathbf{e}_y &= -\mathbf{e}_x, & X_z \mathbf{e}_z &= 0. \end{aligned}$$

Путем замены $J_q = iX_q$ получаем

$$\begin{aligned} J_z \mathbf{e}_1 &= \mathbf{e}_1, & J_z \mathbf{e}_0 &= 0, & J_z \mathbf{e}_{-1} &= -\mathbf{e}_{-1}, \\ J_+ \mathbf{e}_1 &= 0, & J_+ \mathbf{e}_0 &= 2^{1/2} \mathbf{e}_1, & J_+ \mathbf{e}_{-1} &= 2^{1/2} \mathbf{e}_{-1}, \\ J_- \mathbf{e}_1 &= 2^{1/2} \mathbf{e}_0, & J_- \mathbf{e}_0 &= 2^{1/2} \mathbf{e}_{-1}, & J_- \mathbf{e}_{-1} &= 0. \end{aligned}$$

Поэтому в базисе векторов \mathbf{e}_m матрицы операторов J_q имеют следующий вид:

$$J_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad J_+ = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2} & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.46)$$

Это согласуется с соотношениями (7.40) при $j=1$.

В качестве второго примера рассмотрим шестимерное пространство всех однородных квадратичных функций, введенное в гл. 3, § 2, п. Г. Оно инвариантно относительно любых поворотов, так как при вращении степень однородного полинома не меняется. Функция $x^2 + y^2 + z^2$ инвариантна. Значит, она порождает представление $D^{(0)}$. Оставшиеся пять функций образуют базис представления $D^{(2)}$. Это можно показать, вычислив характер представления или прямо построив эти функции, как это делается ниже.

Взяв выражение (7.21) для оператора X_z и проделав в нем циклическую перестановку индексов для двух других операторов, мы получим явные дифференциальные

выражения для инфинитезимальных операторов

$$\begin{aligned} J_z &= i \left(y \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial y} \right) = -i \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\ J_y &= i \left(x \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial x} \right), \\ J_x &= i \left(z \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial z} \right). \end{aligned}$$

Затем построим повышающий и понижающий операторы

$$\begin{aligned} J_+ &= J_x + iJ_y = z \left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) - (x + iy) \frac{\partial}{\partial z}, \\ J_- &= J_x - iJ_y = -z \left(\frac{\partial}{\partial x} - i \frac{\partial}{\partial y} \right) + (x - iy) \frac{\partial}{\partial z}. \end{aligned}$$

Из тождества

$$\left(\frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right) (x + iy) = 0 \quad (7.47)$$

следует, что функция

$$\psi_2 = (x + iy)^2 = (x^2 - y^2) + 2ixy = r^2 \exp(2i\varphi)$$

отвечает старшему весу $m=2$, так как $J_+ \psi_2 = 0$ и $J_z \psi_2 = -2\psi_2$. Последовательно применяя понижающий оператор, построим функции

$$\begin{aligned} \psi_1 &= \frac{1}{2} J_- \psi_2 = -2z(x + iy), \\ \psi_0 &= \left(\frac{1}{6} \right)^{1/2} J_- \psi_1 = -\left(\frac{2}{3} \right)^{1/2} (x^2 + y^2 - 2z^2), \\ \psi_{-1} &= 2z(x - iy), \\ \psi_{-2} &= (x - iy)^2. \end{aligned}$$

Нормировочные множители мы взяли из равенств (7.40). Пять этих функций линейно-независимы. Вместе с инвариантной функцией $x^2 + y^2 + z^2$ они порождают шестимерное пространство квадратичных функций. Каждая функция ψ_m пропорциональна сферической функции $Y_m^{(l)}(\theta, \varphi)$ с $l=2$:

$$\psi_m = (32\pi/15)^{1/2} r^2 Y_m^{(2)}(\theta, \varphi).$$

Сферические функции удобнее всего определять именно таким способом. При других значениях l обычно начинают с функции $(x + iy)^l$, которая, согласно формуле (7.47), отвечает старшему весу. Затем последовательно приме-

няют понижающий оператор. Тогда при правильном выборе нормировочных и фазовых множителей получаются функции

$$Y_m^{(l)} = (-1)^m \left\{ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right\}^{1/2} \exp(im\varphi) \sin^m \theta \left(\frac{d}{d \cos \theta} \right)^{l+m} \times \\ \times (\cos^2 \theta - 1)^l / 2^l l! \quad (7.48)$$

для положительных чисел m , а также соотношение $Y_{-m}^{(l)} = -(-1)^m Y_m^{(l)*}$. В частности, $Y_0^{(l)} = [(2l+1)/4\pi]^{1/2} P_l(\cos \theta)$, где P_l — полином Лежандра. Как мы покажем в § 5, сферические функции обладают тем свойством, что произведения $\Psi(\mathbf{r}) = r^l Y_m^{(l)}(\theta, \varphi)$ являются решениями уравнения Лапласа $\nabla^2 \Psi = 0$ при любом целом числе l . Это свойство часто рассматривают как определение сферических функций.

Преобразование сферических функций при вращении полезно записать в явном виде. Если θ, φ — угловые координаты вектора \mathbf{r} , а θ', φ' — угловые координаты вектора $R^{-1}\mathbf{r}$, то на основании общих определений (4.2) и (4.8) для преобразования функций получаем

$$D(R) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) = Y_m^{(l)}(\theta', \varphi') = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(R) Y_{m'}^{(l)}(\theta, \varphi).$$

Таким образом, сферическая функция, аргументами которой являются преобразованные координаты θ', φ' , представляется в виде суммы сферических функций первоначальных координат. Обратное преобразование вращения дается в виде

$$Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)}(R^{-1}) Y_{m'}^{(l)}(\theta', \varphi') = \\ = \sum_{m'} D_{m'm}^{(l)*}(R) Y_{m'}^{(l)}(\theta', \varphi'),$$

так как матрица представления унитарна. Координаты θ', φ' можно считать координатами точки \mathbf{r} в новой системе координат, которая получается из первоначальной действием оператора вращения R .

В качестве примера разложения (7.41) функции на ее неприводимые компоненты укажем разложение однозначной функции, зависящей от положения одной частицы,

$$f(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l f_{lm}(r) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi). \quad (7.49)$$

Ортогональность сферических функций вытекает из общей формулы (4.38), поскольку индекс l соответствует неприводимому представлению группы \mathcal{R}_3 , а индекс m — неприводимому представлению группы \mathcal{R}_2 , т. е.

$$\int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\theta=0}^{\pi} Y_m^{(l)*}(\theta, \varphi) Y_m^{(l)}(\theta, \varphi) \sin \theta d\theta d\varphi = \delta_{ll} \delta_{mm}. \quad (7.50)$$

Нормировочный множитель в определении функции $Y_m^{(l)}$ подобран в соответствии с этим равенством. Изложенный выше способ построения функций $Y_m^{(l)}$ гарантирует нам, что отношения фазовых множителей функций $Y_m^{(l)}$ при фиксированном числе l и различных индексах m согласованы с условиями (7.40).

E. Неприводимые семейства операторов и теорема Вигнера — Эккарта

В силу общего определения гл. 4, § 20 неприводимое относительно группы \mathcal{R}_3 семейство операторов — это множество операторов $S_p^{(k)}$ с фиксированными индексами $k=0, \frac{1}{2}, 1, \dots$ и индексами $p=k, k-1, \dots, -k$, причем эти операторы преобразуются по неприводимому представлению $D^{(k)}$. Число k называется степенью или рангом семейства. Мы убедились в § 2, что операторы из такого семейства должны удовлетворять следующим перестановочным соотношениям с инфинитезимальными операторами J_q группы \mathcal{R}_3 :

$$[J_q, S_p^{(k)}] = \sum_r (J_q)_{rp}^{(k)} S_r^{(k)}, \quad (7.51)$$

где $(J_q)_{rp}^{(k)}$ — матричные элементы оператора J_q в представлении $D^{(k)}$. Если матричные элементы из равенств (7.39) и (7.40) подставить в эти соотношения, определяющие неприводимое семейство операторов, то получим

$$\begin{aligned} [J_z, S_p^{(k)}] &= p S_p^{(k)}, \\ [J_{\pm}, S_p^{(k)}] &= \{(k \pm p + 1)(k \mp p)\}^{1/2} S_{p \pm 1}^{(k)}. \end{aligned} \quad (7.52)$$

Иногда для неприводимого семейства операторов пользуются введенным Рака термином «тензор-оператор». Неприводимые семейства операторов можно перемножать и затем разлагать вновь на неприводимые семейства с помощью коэффициентов Клебша — Гордана (п. Г).

Мы уже отмечали в гл. 3, § 8, п. В, что умножение на функцию можно рассматривать как оператор на пространстве функций. В этом смысле сферические функции $Y_p^{(k)}$ образуют неприводимое семейство при $p=k, k-1, \dots, -k$.

Сравнивая перестановочные соотношения (7.28) и (7.30) с соотношениями (7.52), мы видим, что сами инфинитезимальные операторы образуют неприводимое семейство с $k=1$. Оно называется «вектор-оператором». В самом деле, как нетрудно убедиться, неприводимое семейство

$$J_1^{(1)} = -J_+/2^{1/2}, \quad J_0^{(1)} = J_z, \quad J_{-1}^{(1)} = J_-/2^{1/2},$$

удовлетворяет обычным соотношениям (7.52), в которые включено условие Кондона — Шортли для фазовых множителей. Соотношения (7.52) не определяют операторы абсолютно. Поэтому мы произвольно положили $J_0^{(1)} = J_z$. После этого знаки и величины операторов $J_{\pm 1}^{(1)}$ определяются равенствами (7.52). Операторы $J_m^{(1)}$ иногда называют «сферическими» компонентами оператора J . Они аналогичны векторам базиса e_m , введенным в п. Д.

Согласно теореме Вигнера — Эккарта [формула (4.62)], матричные элементы операторов из неприводимого семейства связаны между собой. Группа \mathcal{R}_3 просто приводима. Поэтому индекс t в формуле (4.62) не нужен. Так как обычные коэффициенты Клебша — Гордана группы \mathcal{R}_3 действительны, теорему принято записывать в виде

$$\langle jm | S_q^{(k)} | j'm' \rangle = C(j'kj, m'qm) (-1)^{2k} \langle j \| S^{(k)} \| j' \rangle. \quad (7.53)$$

[Данное соотношение отличается от соотношения (4.62) тем, что в нем изменен порядок некоторых индексов коэффициента C , а также введен множитель $(-1)^{2k}$. Эти изменения незначительны и равносильны другому определению приведенного матричного элемента, которое лишь немного отличается от исходного. Мы пользовались обозначениями книги Бринка и Сэтчлера (см. литературу). Они отличаются от обозначений, первоначально введенных Рака.]

Ж. Эквивалентные операторы

Чтобы пользоваться теоремой [Вигнера — Эккарта [формула (7.53)]] при решении практических задач, нужно знать коэффициенты векторного сложения (коэффициенты

Клебша — Гордана). Для этих коэффициентов имеются аналитические выражения, таблицы и вычислительные программы. Но в некоторых простых случаях так называемый метод эквивалентного оператора позволяет обойтись без этих коэффициентов. Сущность метода заключается в двукратном применении теоремы Вигнера — Эккарта. Одни раз теорема применяется к интересующему нас оператору, а второй — к эквивалентному оператору, который так же преобразуется при вращениях, но который легко вычислить. В отношении матричных элементов двух операторов коэффициент векторного сложения сокращается. При другом подходе эквивалентным оператором пользуются для вычисления коэффициента векторного сложения.

В качестве примера рассмотрим вектор-оператор V_q , т. е. семейство из трех операторов, которые преобразуются по неприводимому представлению $D^{(1)}$. Вектор углового момента J_q тоже является вектор-оператором. Тогда, согласно теореме Вигнера — Эккарта [формула (7.53)], получаем

$$\begin{aligned}\langle JM | V_q | JM' \rangle &= C(J1J, M'qM) \langle J \| \mathbf{V} \| J \rangle, \\ \langle JM | J_q | JM' \rangle &= C(J1J, M'qM) \langle J \| \mathbf{J} \| J \rangle.\end{aligned}$$

Значит,

$$\langle JM | V_q | JM' \rangle = \langle JM | J_q | JM' \rangle \frac{\langle J \| \mathbf{V} \| J \rangle}{\langle J \| \mathbf{J} \| J \rangle}, \quad (7.54)$$

т. е. матричный элемент оператора V_q зависит от чисел M , M' и q так же, как матричный элемент оператора J_q , который определяется равенствами (7.39) и (7.40). От конкретного вида оператора V_q зависит лишь коэффициент пропорциональности. Такой способ применим к любой группе. Как и в разобранном примере, эквивалентный оператор обычно строится из инфинитезимальных операторов группы.

Метод эквивалентного оператора, как правило, непригоден для вычисления матричных элементов между функциями из разных представлений. В примере (7.54) матричные элементы эквивалентного оператора между векторами из представлений с числами J и $J' \neq J$ должны быть равны нулю, хотя для произвольного вектор-оператора, такого, как вектор положения \mathbf{r} , эти матричные элементы, вообще говоря, отличны от нуля.