тельства воспользуемся тем, что системой весов определяется представление.

В случае группы SU_N свойство $\det \mathsf{U}=1$ приводит к значительно более простой эквивалентности $\mathsf{U}^{(\alpha)*} \equiv \mathsf{U}^{(\beta)}$, где схемы β и α связаны между собой так же, как и раньше. Вспоминая также эквивалентности, о которых говорилось в § 6, мы видим, что для группы SU_2 есть эквивалентность $\mathsf{U}^{[n]*} \equiv \mathsf{U}^{[n]}$, т. е. все представления группы SU_2 и, следовательно, группы $\mathcal{R}_3$ самосопряженные. Приняв для представлений группы SU_3 обозначение $(\lambda\mu)$, мы получаем общий результат

$$(\lambda\mu)^* \equiv \begin{array}{|c|}\hline \lambda+\mu \\ \hline \mu \\ \hline \end{array}^{\,*} \equiv \begin{array}{|c|}\hline \lambda+\mu \\ \hline \lambda \\ \hline \end{array} \equiv (\mu\lambda),$$

В частности, $(10)^*=(01)$, а представление (11) будет самосопряженным.

§ 10. ПРИМЕНЕНИЕ ГРУППЫ U_N К КЛАССИФИКАЦИИ МНОГОЧАСТИЧНЫХ ВОЛНОВЫХ ФУНКЦИЙ

Представления группы U_N мы вводили с помощью произведений типа Φ в формуле (18.2). Поэтому неудивительно, что группа U_N играет важную роль при построении волновых функций для системы нескольких валентных электронов в атоме. Рассмотрим n валентных электронов, которые находятся в одночастичных состояниях φ_{lm} с фиксированным индексом l. Как обычно, индекс m может принимать значения $m=l, (l-1), \ldots, -l$. В силу сказанного в § 1 построенные из произведений волновые функции, симметрия которых относительно перестановок описывается разбиением $\alpha=[n_1, n_2 \ldots]$ числа n, будут также преобразовываться по неприводимому представлению $\mathsf{U}^{(\alpha)}$ группы U_{2l+1} всех унитарных преобразований $(2l+1)$ одночастичных состояний φ_{lm}. Принцип Паули требует, чтобы волновая функция была полностью антисимметричной по отношению к перестановкам частиц. Но разбиение α относится лишь к орбитальным координатам. Поэтому разбиение α необязательно совпадает с разбиением $[11\ldots1]$, но в комбинации со спиновой частью волновой функции оно должно давать такое разбиение. Эта задача уже рассматривалась в гл. 8, § 6.

п. Г, а также в гл. 17, § 10, где было показано, что спиновая часть волновой функции должна преобразовываться по сопряженному, или ассоциированному, представлению $\tilde{\alpha}$ группы $\mathscr{S}_n$ всех перестановок спиновых координат частиц. (Напомним, что схема $\tilde{\alpha}$ получается из схемы α путем замены строк столбцами и наоборот.) Но спиновая часть волновой функции сама является произведением типа (18.2) с $N=2$, т. е. спиновая часть волновой функции преобразуется по представлению $\mathbf{U}^{(\tilde{\alpha})}$ группы U_2. Поэтому схема Юнга $\tilde{\alpha}$ имеет не более двух строк. Тогда орбитальное разбиение α имеет не более двух столбцов (и, конечно, не более $2l+1$ строк).

В § 6 и 7 мы вывели соотношение между представлениями групп U_2, SU_2 и $\mathscr{R}_3$. В силу этого соотношения разбиением $\tilde{\alpha}$ определяется спин S системы из n частиц. Если $\tilde{\alpha}=[\tilde{n}_1, \tilde{n}_2]$, то $S={}^1/_2(\tilde{n}_1-\tilde{n}_2)$. Значит, индекс α представления $\mathbf{U}^{(\alpha)}$ группы U_{2l+1} задается числами n и S. Поэтому новый индекс α является в этом смысле излишним. Следующая задача связана с определением возможных значений полного орбитального углового момента L, который совместим с заданными числами n и S. Но так как L — индекс представления группы $\mathscr{R}_3$, наша задача сводится к разложению представления $\mathbf{U}^{(\alpha)}$ группы U_{2l+1} при ограничении на его подгруппу $\mathscr{R}_3$:

$$\mathbf{U}^{(\alpha)}=\sum_{z}^{\cdot} m_L \mathbf{D}^{(L)}. \tag{18.24}$$

(Коэффициенты m_L не следует путать с индексом состояний m.) Но это хорошо знакомая нам теоретико-групповая задача, которую можно решить различными способами. В самом деле, мы в гл. 8, § 6, п. Г, совершенно не обращаясь к группе U_N, нашли метод вычисления коэффициентов m_L при помощи группы $\mathscr{S}_n$. Излагаемый ниже метод основан на системе весов представления $\mathbf{U}^{(\alpha)}$. Пронумеруем наши N одночастичных состояний числами $m=l,\ l-1,\ \ldots,\ l$ в соответствующем порядке. Тогда оператор проекции полного углового момента L_z следующим образом выражается через введенные в § 8 диагональные операторы $\mathbf{H}_i$: $\mathbf{L}_z=\sum_{m=-l}^{l} m\mathbf{H}_m$. Поэтому его зна-

чения M просто выражаются через веса представления: $M=\sum_{m=-l}^{l} mr_m$. Например, в восьмимерном представлении [21] группы U_3 система весов (18.21) дает следующее множество значений M: 2, 1, 1, 0, —1, 0, —1, —2. Зная мультиплетную структуру представления $\mathbf{D}^{(L)}$, т. е. зная, что $M=L$, $L-1$, ..., $-L$, мы заключаем отсюда, что в этом случае разложение (18.24) для группы U_3 имеет вид $\mathbf{U}^{[21]}=\mathbf{D}^{(2)}\oplus\mathbf{D}^{(1)}$. Этот метод существенным образом основан на применении характеров группы U_N, которые мы подробно обсудим в § 11 (см. другой пример разложения в задаче 18.5). Более эффективный при больших числах l третий метод вычисления коэффициентов m_l объясняется в задаче 18.6.

В качестве примера такого метода классификации состояний рассмотрим простую задачу о трех p-электронах, ($l=1$), которую мы обсуждали в гл. 8, § 6, п. Г. В первом столбце табл. 18.2 перечислены возможные разбиения α числа $n=3$, а во втором столбце—сопряженные разбиения $\tilde{\alpha}$. Заметим, что разбиение $\alpha=[3]$ должно быть исключено, так как соответствующее разбиение $\tilde{\alpha}=[111]$ имеет более двух строк. Спин S вычисляется непосредственно по формуле $S={}^1/_2(\tilde{n}_1-\tilde{n}_2)$. Угловой момент L

Таблица 18.2

Индекс α орбитальной симметрии и представления группы U_3	Индекс $\tilde{\alpha}$ спиновой симметрии и представления группы U_2	S	L
[111]	[3]	$^3/_2$	0
[21]	[21]	$^1/_2$	2, 1

для представления $\alpha=[21]$ был вычислен выше. Тем же способом можно показать, что одномерное представление [111] имеет единственный вес (111). Ему отвечает лишь $M=0$, и, следовательно, $L=0$.

О применении группы U_N для описания атомных мультиплетов уже говорилось ранее. Точно так же ее можно применять при изучении ядерных супермультиплетов,

введенных в гл. 12. При этом удобно воспользоваться приведенной в § 8 интерпретацией индексов $(PP'P'')$ представлений группы SU_4. Мы не будем на этом подробно останавливаться. Как отмечалось в гл. 12, § 1, зависимость ядерного взаимодействия от спина столь сильна, что симметрия относительно группы SU_4 сильно нарушена и приближение jj-связи дает здесь лучшее первое приближение (о jj-связи в атомах упоминается в гл. 8, § 6, п. А). В этом случае каждая частица имеет определенный полный угловой момент j, который включает как спиновую, так и орбитальную составляющие. Кроме того, она имеет обычный изоспин, равный $^1/_2$. Ясно, что при рассмотрении n валентных нуклонов группа U_{2l+1} заменяется группой U_{2j+1}. При ограничении с группы U_{2j+1} на группу $\mathcal{R}_3$ получаются такие же значения углового момента J, как и при разложении (18.24). Связь между угловым моментом J и изоспином T аналогична связи между величинами L и S в случае атома. Для заданного представления $\mathsf{U}^{(\alpha)}$ группы U_{2j+1} составляющая волновой функции, отвечающая изоспину, должна обладать симметрией, соответствующей сопряженному разбиению $\tilde{\alpha}$, причем $T = {}^1/_2(\tilde{n}_1 - \tilde{n}_2)$.

А. Применение подгрупп группы U_N

Введение групп U_{2l+1} и U_{2j+1} в такие задачи, связанные с атомной и ядерной структурой, до некоторой степени разочаровывает, так как эти группы не несут какой-либо новой физической информации. Как мы видели, индексы представления α эквивалентны значениям спина, изоспина или индексам супермультиплета системы. Но эти группы можно использовать как первый шаг для определения новой группы, которая зависит от природы взаимодействия между частицами и поэтому несет полезную физическую информацию. Рассмотрим, например, три электрона на f-оболочке ($l=3$) атома. В разложении (18.24), соответствующем представлению $\alpha = [21]$, имеются следующие ненулевые коэффициенты m_L: $m_1 = m_6 = m_7 = m_8 = 1$, $m_2 = m_3 = m_4 = m_5 = 2$. В отличие от случая, приведенного в табл. 18.2, здесь встречаются значения углового момента L, для которых $m_L > 1$, т. е. квантовых чисел S,

L, M_S и M_L теперь не хватает для определения всех возможных состояний. Физически эта задача решается в теории возмущений методом диагонализации кулоновского взаимодействия путем прямого вычисления. При $L=2$, 3, 4 и 5 получается 2×2-матрица. С теоретико-групповой точки зрения можно найти систему нумерации этих пар состояний, если удастся найти новую группу $\mathcal{G}$, которая является подгруппой группы U_{2l+1} и содержит в качестве подгруппы группу $\mathcal{R}_3$ (см. работу [3]). Тогда ограничение с группы U_7 на подгруппу $\mathcal{R}_3$ можно провести в два этапа: $U_7 \to \mathcal{G} \to \mathcal{R}_3$. Таким образом, базисные векторы (волновые функции) получат также индекс представления группы $\mathcal{G}$. В некоторых случаях (но не обязательно во всех) вышеупомянутые пары состояний получат различные индексы и, следовательно, будут различаться своими свойствами по отношению к промежуточной группе $\mathcal{G}$. Введение такой группы $\mathcal{G}$ может быть полезно по двум причинам. Во-первых, это может дать удобную, последовательную систему нумерации, включающую матрицу взаимодействия. Во-вторых, введение такой группы может быть важным с физической точки зрения в том случае, когда взаимодействие обладает приблизительной инвариантностью по отношению к группе $\mathcal{G}$. В этом случае матрица энергии в базисе, нумеруемом неприводимыми представлениями группы $\mathcal{G}$, приблизительно диагонализуется, а индексы могут быть связаны с физическими состояниями.

Для нахождения промежуточной группы $\mathcal{G}$ мы должны наложить на унитарные преобразования такие ограничения, которые не исключали бы никаких преобразований из группы $\mathcal{R}_3$. Для этого нужно сначала выписать перестановочные соотношения между инфинитезимальными операторами группы U_{2l+1}. Затем нужно найти замкнутое относительно коммутации подмножество инфинитезимальных операторов группы U_{2l+1}, которое содержит инфинитезимальные операторы группы $\mathcal{R}_3$. Это означает, что коммутатор любой пары операторов такого подмножества есть линейная комбинация операторов из подмножества. Согласно общим определениям гл. 7, § 2 и, в частности, соотношению (7.7), такое подмножество определяет группу, которая является подгруппой группы U_{2l+1} и в качестве подгруппы содержит группу $\mathcal{R}_3$. Сравнивая структурные

константы группы $\mathcal{G}$, которые получаются таким путем, со структурными константами всех известных групп, мы можем идентифицировать группу $\mathcal{G}$. Таким способом можно при произвольном целом числе l выбрать в качестве группы $\mathcal{G}$ группу $\mathcal{R}_{2l+1}$. В интересном с физической точки зрения случае малых чисел l других возможностей выбора очень мало. Более прямым путем группу $\mathcal{R}_{2l+1}$ вводят, налагая на унитарное преобразование U условие инвариантности двухчастичной функции

$$\Phi = \sum_i \varphi_i(1)\,\varphi_i(2) \tag{18.25}$$

(см. обозначения в § 1). Тогда

$$\Phi = \mathsf{T}(\mathsf{U})\,\Phi = \sum_{i,\,j,\,k} U_{ji} U_{ki} \varphi_j(1)\,\varphi_k(2),$$

т. е.

$$\sum_i U_{ji} U_{ki} = \delta_{jk}.$$

Иначе говоря, $U_{ki} = (\mathsf{U}^{-1})_{ik}$. Так как матрица U унитарна, отсюда следует, что U — действительная ортогональная матрица. Из таких матриц состоит группа $\mathcal{R}_{2l+1}$. Покажем, что физическая группа $\mathcal{R}_3$ содержится в этой группе $\mathcal{R}_{2l+1}$. Мы должны найти такой базис векторов φ_i для $(2l+1)$ состояний, соответствующих угловому моменту l, чтобы функция Φ, определенная равенством (18.25), была инвариантна относительно вращений. Очевидно, что обычный m-базис векторов ψ_m не годится. Но если мы введем новый базис

$$\varphi_m^+ = [\psi_m + (-1)^m \psi_{-m}]/2^{1/2},$$
$$\varphi_m^- = i\,[\psi_m - (-1)^m \psi_{-m}]/2^{1/2}, \quad \varphi_0 = \psi_0,$$

то получим

$$\Phi = \sum_{m>0} [\varphi_m^+(1)\,\varphi_m^+(2) + \varphi_m^-(1)\,\varphi_m^-(2) + \varphi_0(1)\,\varphi_0(2)\psi] =$$
$$= \sum_{m>0} (-1)^m [\psi_m(1)\,\psi_{-m}(2) + \psi_{-m}(1)\psi_m(2)] + \psi_0(1)\,\psi_0(2) =$$
$$= \sum_m (-1)^m \psi_m(1)\,\psi_{-m}(2). \tag{18.26}$$

В этом выражении легко узнать S-состояние ($L=0$) двух частиц. (В нем выбраны обычные знаковые множители;

Таблица 18.3

n	U_7	$\mathcal{R}_7$	$\mathcal{R}_3(L)$
1	[1]	(100)	3
2	[2]	(000)	0
		(200)	2, 4, 6
	[11]	(110)	1, 3, 5
3	[21]	(100)	3
		(210)	1, 2, 2, 3, 4, 4, 5, 5, 6, 7, 8
	[111]	(111)	0, 2, 3, 4, 6

см. приложение 4, § 2.) Следовательно, оно инвариантно относительно вращений.

Мы здесь не будем вдаваться в подробности относительно неприводимых представлений группы $\mathcal{R}_{2l+1}$. Отметим лишь, что представления нумеруются l целыми числами $(r_1 r_2 \ldots r_l)$. В табл. 18.3 приведены несколько примеров разложений для случая $l=3$. Нетрудно видеть, что новые индексы, соответствующие группе $\mathcal{R}_7$, позволяют различать между собой два состояния с $L=3$ при $n=3$ и $S={}^1/_2$, но они не позволяют сделать это для пар состояний с $L=2$, 4 и 5.

В задаче о jj-связи, где фигурирует группа U_{2j+1}, таким же образом находится группа $\mathcal{G}$, которая содержит группу $\mathcal{R}_3$ и содержится в группе U_{2j+1}. В результате приходим к так называемой «симплектической группе» Sp_{2j+1}. Можно было бы ожидать, что те же самые рассуждения, что и раньше, приведут нас к группе $\mathcal{R}_{2j+1}$, но это не верно. При выводе равенства (18.26) на последнем этапе предполагалось, что $(-1)^m=(-1)^{-m}$. Это верно лишь при целых числах m и, значит, при целых числах l. Как отмечалось ранее, группа Sp_{2j+1} определяется своими инфинитезимальными операторами. Эту группу можно задать более непосредственно, если заметить, что при jj-связи существует только одно инвариантное двухчастичное состояние, а именно состояние с $J=0$. Оно определяется аналогично выражению (18.26):

$$\Phi=\sum_{m=-j}^{j}(-1)^{j-m}\psi_m(1)\psi_{-m}(2)=$$
$$=\sum_{m>0}(-1)^{j-m}[\psi_m(1)\psi_{-m}(2)-\psi_{-m}(1)\psi_m(2)]. \qquad (18.27)$$

Заметим, что это выражение для Ф антисимметрично по отношению к перестановке частиц. Значит, ни при каком выборе базиса его нельзя представить в виде (18.25). Теперь симплектическую группу, действующую в $(2j+1)$-мерном пространстве, определяют как множество матриц, оставляющих это состояние Ф инвариантным. Подобно представлениям группы $\mathcal{R}_{2l+1}$ ее неприводимые представления нумеруются набором из $(j+{}^1/_2)$ целых чисел. Мы опять не приводим подробности. В табл. 18.4 показано несколько примеров для случая $j={}^5/_2$.

Для описания представлений групп $\mathcal{R}_{2l+1}$ или Sp_{2j+1} иногда вводится понятие «старшинства». Состояние обладает старшинством v, если наименьшее число частиц, на

Таблица 18.4

n	U_6	Sp_6	$\mathcal{R}_3(J)$
1	[1]	(100)	${}^5/_2$
2	[2]	(200)	1, 3, 5
	[11]	(000)	0
		(110)	2, 4
3	[21]	(100)	${}^5/_2$
		(210)	${}^1/_2$, ${}^3/_2$, ${}^5/_2$, $({}^7/_2)^2$, ${}^9/_2$, ${}^{11}/_2$, ${}^{13}/_2$
	[111]	(100)	${}^5/_2$
		(111)	${}^3/_2$, ${}^9/_2$

которых реализуется представление, равно $n=v$. Так, например, показанные в табл. 18.3 два состояния трех частиц с $L=3$ и $S={}^1/_2$ (т. е. состояния из представления [21]) будут иметь старшинство $v=1$ для представлений (100) и $v=3$ для представлений (210) группы $\mathcal{R}_7$. Из табл. 18.4 видно также, что при нечетных n и при любом типе симметрии U_6 существует состояние с $v=1$, которое обязательно имеет тот же угловой момент $J={}^5/_2$, что и одна частица. При четных n всегда существует состояние со старшинством $v=0$ и, значит, с $J=0$.

С физической точки зрения группа $\mathcal{R}_{2l+1}$ важна для описания уровней конфигурации l^n при условии, что возмущение взаимодействия между парами валентных электронов имеет соответствующее группе вырождение. Иначе говоря, в случае $l=3$, приведенном в табл. 18.3, энергия

состояний с $L=2$, 4 и 6 при $n=2$ должна быть одинаковой, а состояния с $L=1$, 3 и 5 должны группироваться вместе на каком-то другом энергетическом уровне. В действительности с кулоновскими силами этого не происходит, так как состояния с большими угловыми моментами L подавлены (гл. 8, § 6, п. Д). Поэтому для атомов группа $\mathcal{R}_{2l+1}$ используется лишь как способ систематического описания диагонализации возмущения.

В ядрах сильное спин-орбитальное взаимодействие приводит к jj-связи и к силам притяжения между валентными нуклонами. Теперь подавляются состояния с низкими значениями углового момента J. Эта ситуация обратна ситуации в атоме, где между электронами действуют силы отталкивания. Короткодействующие ядерные силы притяжения не только подавляют состояние с $J=0$, но и оставляют на близких энергетических уровнях состояния с $J=2$ и 4, которые в табл. 18.4 имеют индексы [11] (10). Поэтому в случае ядер группа Sp_{2j+1} имеет реальный физический смысл. Таким образом, низшие состояния ядер должны описываться неприводимыми представлениями группы Sp_{2j+1}. Так как для двухчастичной системы инвариантное состояние (000) лежит на низшем энергетическом уровне, низшее состояние общей n-частичной системы должно содержать максимально допустимое принципом Паули число пар. Это можно проверить на более сложной модели, где при нечетном n низшее состояние имеет старшинство $v=1$ и отвечает представлению (1 0 0), а при четном числе нейтронов и четном числе протонов низшее состояние имеет старшинство $v=0$ и отвечает представлению (0 0 0). Эти выводы согласуются с простой одночастичной оболочечной моделью ядра, где все пары нейтронов и протонов считаются связанными при $J=0$, причем спин ядра равен спину последнего нечетного нуклона (см. также гл. 19, § 2).

Группы U_{2l+1} и U_{2j+1} не являются группами симметрии гамильтониана, какой была группа $\mathcal{R}_3$ в гл. 7. Преобразования из группы U_{2l+1} определены лишь на пространстве конфигураций l^n. Даже в этом пространстве преобразования из группы U_{2l+1} не коммутируют с остаточным взаимодействием между электронами. Правда, в очень грубом приближении можно считать, что они коммутируют. Если принять это, то в случае состояний

двухчастичной конфигурации l^2 все симметричные состояния (т. е. состояния с четным угловым моментом L и с $S=0$) обладают одинаковой энергией, а все антисимметричные состояния (т. е. состояния с нечетным угловым моментом L и с $S=1$) имеют одно и то же, но не совпадающее с предыдущим значение энергии. Отсюда следует, что гамильтониан должен быть инвариантным относительно группы U_{2l+1}. С физической точки зрения этим оправдывается применение группы, хотя на практике энергетическое расстояние между уровнями, соответствующими разным угловым моментам L, довольно велико. То же самое относится и к упомянутым выше (см. также гл. 12, § 1) задачам о ядерной структуре.

§ 11. ХАРАКТЕРЫ

В двух следующих параграфах данной главы мы опять рассмотрим математические свойства группы U_N. Мы вычислим характеры неприводимых представлений и изложим процедуру интегрирования по объему группы. Нам эти результаты практически не нужны, но они существенны в некоторых доказательствах, которые мы опустили, и, кроме того, они дают еще одну связь со сказанным о группе $\mathscr{R}_3$ в гл. 7.

Для отыскания характеров определим сначала классы сопряженных элементов группы U_N, так как характер неприводимого представления связан с классами сопряженных элементов (гл. 4, § 9). Любую заданную унитарную матрицу U можно привести к диагональной форме W путем унитарного преобразования V: $\mathsf{VUV}^{-1}=\mathsf{W}$. Значит, матрица U лежит в том же классе сопряженных элементов, что и диагональная матрица W, и требуется лишь рассмотреть характеры диагональных матриц. Поскольку матрица U унитарна, диагональные матричные элементы имеют вид $\exp(-i\theta)$, т. е. для определения диагональной унитарной матрицы требуется лишь N действительных параметров $\theta_1, \theta_2, \ldots, \theta_N$, которые меняются в интервале от 0 до 2π. (В случае SU_N есть дополнительное условие $\theta_1+\theta_2+\ldots+\theta_N=0$.) Следовательно, хотя группа U_N имеет N^2 параметров, ее характер зависит лишь от N параметров. Этим свойством обладает и рассмотренная в гл. 7 группа $\mathscr{R}_3$, характер которой является функцией