20

ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ СВЕДЕНИЯ (ОТДЕЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ)

В предыдущих главах мы последовательно изложили теорию симметрии и ее приложения к широкому кругу физических систем. Но остался ряд вопросов, которые, хотя они имеют прямое отношение к изложенным темам, мы в свое время опустили, чтобы не отвлекать читателей от основной линии изложения. Теперь мы остановимся на некоторых из них. Большинство этих тем никак не связано между собой; поэтому все параграфы данной главы вполне самостоятельны, а порядок следования тем произволен. Материал первых двух параграфов имеет прямое отношение к физике, а в остальных речь идет о математических проблемах.

§ 1. НЕИНВАРИАНТНЫЕ ГРУППЫ

До сих пор мы говорили исключительно о группах симметрии $\mathcal{G}$, которые по определению не изменяют гамильтониана. Теперь рассмотрим некоторые группы, не обладающие таким свойством, но представляющие известный интерес. Это группы, которые называются неинвариантными или динамическими. Их значение состоит в том, что они сводят в одно представление собственные функции, соответствующие разным энергиям, так что спектр и вероятности перехода могут быть выражены через операторы группы. Поэтому такие динамические величины могут быть вычислены на основе теории групп. Приложения подобного рода пока что ограничиваются простыми системами.

В качестве иллюстрации рассмотрим одномерный гармонический осциллятор. Используя обозначения гл. 19, § 1, его гамильтониан можно записать в виде

$$\mathsf{H}=\frac{1}{2}\left(x^2-d^2/dx^2\right)=\mathsf{a}^\dagger\mathsf{a}+\frac{1}{2}\,, \qquad (20.1)$$

а уровни энергии, как хорошо известно, даются значениями $n+{}^1/_2$ (в единицах $\hbar\omega$), где $n=0, 1, 2, \ldots$. Построим теперь три эрмитовых оператора

$$\mathsf{K}_1=\frac{1}{4}(\mathsf{a}^2+\mathsf{a}^{\dagger 2}),\quad \mathsf{K}_2=\frac{1}{4}\,i\,(\mathsf{a}^2-\mathsf{a}^{\dagger 2}),\quad \mathsf{K}_3=\frac{1}{2}\mathsf{H}. \tag{20.2}$$

С помощью перестановочных соотношений (19.3) находим

$$[\mathsf{K}_1, \mathsf{K}_2]=-i\mathsf{K}_3,\ [\mathsf{K}_3, \mathsf{K}_1]=i\mathsf{K}_2,\ [\mathsf{K}_3, \mathsf{K}_2]=-i\mathsf{K}_1. \tag{20.3}$$

Нетрудно видеть, что соотношения (20.3) в точности совпадают с перестановочными соотношениями группы Лоренца $\mathscr{L}_3$ в трех измерениях. Такая группа может быть построена исключением одной пространственной переменной (z) из обычной группы Лоренца (гл. 15, § 2). Инфинитезимальными операторами для новой группы являются X_z, Y_x и Y_y, причем перестановочные соотношения для них даются формулами (15.32):

$$[\mathsf{Y}_x, \mathsf{Y}_y]=-\mathsf{X}_z,\ [\mathsf{X}_z, \mathsf{Y}_x]=\mathsf{Y}_y,\ [\mathsf{X}_z, \mathsf{Y}_y]=-\mathsf{Y}_x. \tag{20 4}$$

Соотношения (20.4) совпадают с (20.3), если взять вместо K_1, K_2 и K_3 операторы $i\mathsf{Y}_x$, $i\mathsf{Y}_y$ и $i\mathsf{X}_z$. Множители i необходимы здесь, как обычно (гл. 7, § 2) для инфинитезимальных операторов унитарных преобразований, порождаемых эрмитовыми операторами. Поэтому перестановочные соотношения для неинвариантной группы, определенной операторами (20.2), точно такие же, как и для группы $\mathscr{L}_3$, и, следовательно, она локально изоморфна последней. Мы не будем заниматься здесь вопросом глобальных преобразований, т. е. вопросом о полном диапазоне значений параметров группы. Инфинитезимальные свойства достаточны для нахождения представлений, если только не ставить вопроса об однозначности.

Исследуем теперь так же, как в гл. 7, § 4, п. Б в случае группы $\mathscr{R}_3$, унитарные неприводимые представления группы $\mathscr{L}_3$. Прежде всего выберем базис, в котором оператор K_3, а следовательно, и энергия диагональны. Напишем $\mathsf{K}_3\varphi_n={}^1/_2(n+{}^1/_2)\,\varphi_n$, выразив для удобства собственные значения в знакомой форме энергий осциллятора. Это можно сделать без потери общности, поскольку при столь общем анализе представлений группы $\mathscr{L}_3$ числа n пока еще не обязаны быть целыми числами и могут быть произвольными. Тогда два других оператора

группы K_1 и K_2 связывают между собой собственные функции с разными энергиями. Очевидно, что если ввести операторы $\mathsf{K}_\pm = \mathsf{K}_1 \pm \mathsf{K}_2$, то для них будут выполняться соотношения

$$[\mathsf{K}_3, \mathsf{K}_\pm] = \pm \mathsf{K}_\pm, \quad [\mathsf{K}_+, \mathsf{K}_-] = -2\mathsf{K}_3, \tag{20.5}$$

откуда видно, что K_+ и K_- — это повышающий и понижающий операторы для энергии. Точнее, если $\mathsf{H}\varphi_n = (n + {}^1/_2)\,\varphi_n$, то

$$\mathsf{H}(\mathsf{K}_\pm\varphi_n) = 2\mathsf{K}_3\mathsf{K}_\pm\varphi_n = 2\mathsf{K}_\pm(\mathsf{K}_3 \pm 1)\,\varphi_n = \left(n + \frac{1}{2} \pm 2\right)(\mathsf{K}_\pm\varphi_n), \tag{20.6}$$

т. е. операторы $\mathsf{K}_\pm$ повышают и понижают энергию на две единицы $\hbar\omega$. Оператор Казимира C для группы $\mathscr{L}_3$, соответствующий оператору J^2 для группы $\mathscr{R}_3$, дается теперь выражением

$$\mathsf{C} = \mathsf{K}_1^2 + \mathsf{K}_2^2 - \mathsf{K}_3^2 = \frac{1}{2}(\mathsf{K}_+\mathsf{K}_- + \mathsf{K}_-\mathsf{K}_+) - \mathsf{K}_3^2, \tag{20.7}$$

где существенно изменение знака перед 3-й компонентой.

Если повторить теперь все шаги, сделанные в гл. 7, § 4, п. Б при построении конечномерных унитарных неприводимых представлений группы $\mathscr{R}_3$, то мы придем к противоречию, так как для нормировочного множителя A_n, определяемого соотношением

$$\varphi_{n+2} = A_n\mathsf{K}_+\varphi_n, \tag{20.8}$$

получается условие $|A_n|^2 < 0$. Отсюда следует, что для группы $\mathscr{L}_3$ нет конечных унитарных неприводимых представлений (если не считать тривиального единичного представления). (Такой же вывод был сделан в гл. 15, § 2, п. Г в случае группы $\mathscr{L}$.) Поэтому мы исследуем возможность бесконечномерных представлений. Это означает, что отсутствует ограничение чисел n сверху или снизу.

Посмотрим сначала, к чему приводит отсутствие ограничений сверху. Предположим, что существует наименьшее значение $n = n_0$, при котором

$$\mathsf{K}_-\varphi_{n_0} = 0. \tag{20.9}$$

Собственные значения оператора Казимира в этом представлении можно найти, написав выражение (20.7) в виде

$\mathsf{C}=\mathsf{K}_+\mathsf{K}_-+\mathsf{K}_3-\mathsf{K}_3^2$ и подействовав оператором C на функцию φ_{n_0}, получим

$$C=\frac{1}{16}(1+2n_0)(3-2n_0). \tag{20.10}$$

Это выражение остается тем же для всех базисных векторов φ_n в данном представлении. Взяв в качестве исходного состояния φ_{n_0}, используем далее повышающий оператор K_+ для построения набора всех φ_n, где $n=n_0+2t$ (t — целое число). [Напомним, что, согласно формуле (20.5), оператор K_+ увеличивает собственное значение оператора K_3 на 1 и, следовательно, увеличивает число n на 2.] Чтобы обеспечивалась унитарность представления, матрицы инфинитезимальных операторов K_1, K_2 и K_3 должны быть эрмитовыми. Отсюда следует, что числа n и n_0 должны быть действительными. Условие эрмитовости означает также, что $\mathsf{K}_+^\dagger=\mathsf{K}_-$. Поэтому из соотношения (20.8) находим

$$\begin{aligned}|A_n|^{-2}&=(\varphi_n,\ \mathsf{K}_-\mathsf{K}_+\varphi_n)=(\varphi_n,\ (\mathsf{C}+\mathsf{K}_3^2-\mathsf{K}_3)\varphi_n)=\\&=\frac{1}{16}\{(1+2n_0)(3-2n_0)+(1+2n)(5+\ n)\}=\\&=\frac{1}{4}(n+n_0+1)(n-n_0+2).\end{aligned} \tag{20.11}$$

Чтобы не было противоречия, это выражение должно быть неотрицательным при $n\geqslant n_0$, что приводит к условию $n_0\geqslant -{}^1/_2$, причем значению $n_0=-{}^1/_2$ соответствует единичное представление. При $n_0=-{}^1/_2$ и $n>n_0$ величина (20.10) не равна нулю, а поэтому при каждом n_0 существует бесконечномерное унитарное неприводимое представление $\mathsf{T}^{(n_0)}$. Правда, не все такие представления могут быть реализованы в задаче об осцилляторе, ибо при учете явного вида (20.2) операторов группы и перестановочных соотношений (19.3) оператор Казимира (20.7) сведется к константе $C={}^3/_{16}$. Подстановка этого значения в выражение (20.10) приводит к двум возможностям: $n_0=0$ или $n_0=1$. Тогда собственные функции должны принадлежать представлению $\mathsf{T}^{(0)}$ с $n=0, 2, 4, \ldots$ или представлению $\mathsf{T}^{(1)}$ с $n=1, 3, 5, \ldots$. Таким путем мы перебираем весь спектр одномерного осциллятора в рамках двух неприводимых представлений неинвариантной группы $\mathscr{L}_3$. Каким образом собственными значениями

оператора Казимира ограничиваются возможные представления, мы уже видели в гл. 19, § 4, п. Б.

Найденные выше представления $T^{(n_0)}$ — не единственные унитарные неприводимые представления группы $\mathscr{L}_3$. Можно было бы сохранить верхний предел возможных значений K_3 в этих представлениях. Это привело бы к своего рода «зеркальному отражению» представлений $T^{(n_0)}$ с собственными значениями оператора K_3, идущими до $-\infty$. Можно также построить представления, в которых отсутствуют как верхний, так и нижний пределы для K_3. Но эти представления не имеют отношения к задаче об осцилляторе, поскольку содержат состояния с неограниченной (и отрицательной) энергией.

Использованный здесь метод построения неинвариантной группы $\mathscr{L}_3$ одномерного осциллятора может быть применен в более сложных трехмерных задачах для осцилляторного и кулоновского потенциалов. В последнем случае все собственные функции относятся к единственному представлению группы $\mathscr{L}_5$, которая аналогична пятимерной группе вращений, но отличается от нее знаком одной из компонент метрики. Группа симметрии $\mathscr{R}_4$ содержится в качестве подгруппы в инвариантной (динамической) группе $\mathscr{L}_5$.

Выбор динамической группы для данной системы не является, однако, единственным. Подобная группа должна включать в себя группу симметрии и, следовательно, описывать имеющееся вырождение, а также содержать операторы, связывающие собственные функции. Спектр энергий должен был бы возникнуть как допустимые собственные значения одного из операторов группы. С этой точки зрения понятие динамической группы представляет интерес в теории элементарных частиц. Здесь массы разных частиц составляют спектр, значения которого на первый взгляд не связаны друг с другом. Представляет интерес найти динамическую группу, объединяющую эти значения в рамках одного представления и, стало быть, соотносящую массу с некоторыми операторами группы.

На уровне, более близком к практике, неинвариантные группы могут быть использованы для вывода простых формул для матричных элементов перехода между собственными функциями. Например, в случае простого одно-

мерного осциллятора, согласно определениям операторов H и K_1, имеем тождество вида $x^2 \equiv \mathsf{H} + 2\mathsf{K}_1$. Матричные элементы оператора x^2 могут быть вычислены по матричным элементам операторов группы H и K_1, которые даются формулами (20.8) и (20.11) для неприводимых представлений. Заметим, что x^2 — это один из операторов, определяющих электромагнитные переходы квадрупольного типа.

§ 2. ЭФФЕКТ ЯНА — ТЕЛЛЕРА И СПОНТАННОЕ НАРУШЕНИЕ СИММЕТРИИ

Эффект Яна — Теллера связан с симметриями, рассматриваемыми при приближенном разбиении гамильтониана. Поскольку разбиение является лишь приближенным, имеются члены, нарушающие симметрию. Чтобы отличить этот эффект от нарушения симметрии, связанного с добавлением внешнего возмущения (гл. 5, § 8), иногда пользуются термином «спонтанное нарушение». Хотя это понятие носит весьма общий характер, впервые эффект Яна — Теллера был рассмотрен в теории строения молекул, где он проявляется наиболее четко. Позже он нашел приложение в теории элементарных частиц. Для большей наглядности мы, рассматривая эффект Яна — Теллера, будем говорить о строении молекул, но общность выводов будет очевидна. В конце параграфа мы кратко коснемся приложения к элементарным частицам.

А. Адиабатическое приближение

Молекула состоит из ядер и электронов, взаимодействующих за счет обычных электрических сил; обозначим координаты ядер через $\mathbf{R}$, а электронов — через $\mathbf{r}$. Поскольку масса ядра более чем в 1000 раз превышает массу электрона, а силы взаимодействия одни и те же, ядра должны двигаться значительно медленнее электронов. Основное приближение состоит в том, чтобы сначала рассчитать орбитальное движение электронов, считая ядра неподвижными, а затем вычислить равновесные положения, рассчитать вращательное и колебательное движения ядер и оценить их влияние на энергии электронов. Такое приближение называется адиабатическим, но в случае