Заметим, что, хотя величина $f_0^{(0)}$ инвариантна относительно вращений системы, она зависит от взаимного расположения двух частиц. Как мы сейчас покажем, функция $f_0^{(0)}$ есть полином Лежандра, зависящий от угла θ_{12} между радиус-векторами частиц. В самом деле, поскольку величина $f_0^{(0)}$ инвариантна относительно вращений, мы можем путем подходящего поворота добиться того, чтобы частица 1 находилась на оси z. В этом положении $\theta_1=0$, $\theta_2=\theta_{12}$, и на основании формулы (П4.4) выражение (П4.7) приводится к виду

$$f_0^{(0)}=C(l_1l_10,\ 000)\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)^{1/2}P_{l_1}(\cos\theta_{12}),$$

если учесть, что при $m=0$ сферические гармоники сводятся к полиномам Лежандра. Коэффициенты Клебша — Гордана в формуле (П4.7) имеют простой вид (задача 7.14): $C(l_1l_10,\ m_1-m_10)=(-1)^{l_1-m_1}/(2l_1+1)^{1/2}$. В результате выражение (П4.7) принимает вид

$$\sum_m(-1)^mY_m^{(l)}(\theta_1,\ \varphi_1)Y_{-m}^{(l)}(\theta_2,\ \varphi_2)=\left(\frac{2l+1}{4\pi}\right)P_l(\cos\theta_{12}). \tag{П4.8}$$

Эта формула известна под названием теоремы сложения для сферических гармоник и применяется, например, при анализе потенциала взаимодействия двух электронов, когда его надо представить в виде, допускающем разложение на множители, зависящие от координат отдельных электронов (приложение 5, § 1).

§ 3. ИНТЕГРИРОВАНИЕ НА ГРУППЕ

В гл. 7, § 1 мы отмечали, что сумму по группе $\sum_{a=1}^{g}$, входящую в соотношения ортогональности для неприводимых представлений конечной группы, в случае непрерывной группы следует заменить интегралом по параметрам группы $a_1,\ a_2,\ \ldots,\ a_r$, взятым с некоторой весовой функцией $\rho(a_1,\ a_2,\ \ldots,\ a_r)$. В частном случае группы $\mathcal{R}_2$ мы видели, что соотношения ортогональности выполняются при выборе весовой функции $\rho(a)=1$. Чтобы найти весовую функцию для группы $\mathcal{R}_3$, необходимо более подробно исследовать свойства, которыми должна обладать

такая функция. Мы сначала рассмотрим общий случай, а затем выведем выражение для весовой функции для группы $\mathcal{R}_3$. Это позволит нам написать соотношения ортогональности для неприводимых представлений и характеров группы $\mathcal{R}_3$.

Существенным свойством конечной суммы

$$\sum_{a=1}^{g} f(\mathsf{G}_a), \tag{П4.9}$$

где f — некоторая функция на группе, является ее инвариантность относительно замены всех a элементов группы G_a элементами $\mathsf{G}_c = \mathsf{G}_a\mathsf{G}_b$, причем G_b — некоторый фиксированный элемент группы. Этим свойством мы неоднократно пользовались в гл. 4, и его доказательство несложно (гл. 2, § 9). Из свойств групп следует, что если G_a пробегает все элементы группы, то это же верно и для G_c при фиксированном G_b. Поэтому в сумму (П4.9) входят те же, что и ранее, слагаемые, но в другом порядке. Именно этим свойством инвариантности следует воспользоваться в случае непрерывных групп. Другими словами, функцию $\rho(\mathbf{a})$ следует выбрать таким образом, чтобы для любой функции $f(\mathbf{a})$, зависящей от элементов группы $\mathsf{G}(\mathbf{a})$, выполнялось равенство

$$\int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{a})\,\rho(\mathbf{a})\,d\mathbf{a} = \int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{c})\,\rho(\mathbf{a})\,d\mathbf{a}, \tag{П4.10}$$

где $\mathbf{c}$ — параметры элемента группы

$$\mathsf{G}(\mathbf{c}) = \mathsf{G}(\mathbf{a})\,\mathsf{G}(\mathbf{b}) \tag{П4.11}$$

при некотором фиксированном $\mathbf{b}$. Здесь через $\mathbf{a}$ обозначен набор параметров $a_1, a_2, \ldots, a_r$, а через $d\mathbf{a}$ — элемент объема $da_1\,da_2\,\ldots\,da_r$. Равенство

$$\int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{a})\,\rho(\mathbf{a})\,d\mathbf{a} = \int_{\mathcal{G}} f(\mathbf{c})\,\rho(\mathbf{c})\,d\mathbf{c} \tag{П4.12}$$

тривиально. Но в силу условия (П4.11) с фиксированным $\mathbf{b}$ переменная $\mathbf{c}$ является функцией параметров $\mathbf{a}$ и $\mathbf{b}$, и

с помощью якобиана

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{a}} = \begin{vmatrix} \frac{\partial c_1}{\partial a_1} & \frac{\partial c_1}{\partial a_2} & \cdots & \frac{\partial c_1}{\partial a_r} \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \cdot & & & \\ \frac{\partial c_r}{\partial a_1} & \cdot\cdot & \cdot\cdot & \frac{\partial c_r}{\partial a_r} \end{vmatrix} \tag{П4.13}$$

мы можем перейти от интегрирования по переменной $\mathbf{c}$ к интегрированию по $\mathbf{a}$. Отметим, что если параметр $\mathbf{b}$ фиксирован и $\mathbf{c}$ пробегает всю группу $\mathcal{G}$, то это же верно и для $\mathbf{a}$. Поэтому тождество (П4.12) переходит в соотношение

$$\int\limits_{\mathcal{G}} f(\mathbf{a})\,\rho(\mathbf{a})\,d\mathbf{a} = \int\limits_{\mathcal{G}} f(\mathbf{c})\,\rho(\mathbf{c})\,\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{a}}\,d\mathbf{a}.$$

Сравнивая его с исходным равенством (П4.10), приходим к заключению, что весовая функция ρ должна при любых $\mathbf{a}$ удовлетворять условию

$$\rho(\mathbf{c})\,\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{a}} = \rho(\mathbf{a}). \tag{П4.14}$$

Предполагая существование такой функции ρ, мы можем выбрать любое удобное для нас значение переменной $\mathbf{a}$, чтобы определить величину $\rho(\mathbf{c})$. Полагая $\mathbf{a}=0$, имеем

$$\rho(\mathbf{c}) = \rho(0) \Big/ \left|\left(\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{a}}\right)_{\mathbf{a}=0}\right|. \tag{П4.15}$$

Величина постоянной $\rho(0)$ несущественна. Обычно выбирают значение $\rho(0)=1$. Доказать, что функция (П4.15) удовлетворяет условию (П4.14), оставляем читателю в качестве упражнения.

В случае конечных групп сумма по группе всегда возникает в виде

$$\frac{1}{g}\sum_{a=1}^{g} f(G_a), \tag{П4.16}$$

где g — число элементов группы. Множитель g^{-1} обеспечивает равенство суммы (П4.16) единице при $f(G_a)=1$. В случае непрерывной группы число g следует заменить

объемом группы, определяемым как

$$V = \int\limits_{\mathcal{G}} \rho(\mathbf{a})\, d\mathbf{a}.$$

Очевидно, что при таком определении интеграл

$$\frac{1}{V} \int\limits_{\mathcal{G}} f(\mathbf{a})\, \rho(\mathbf{a})\, d\mathbf{a} \qquad (\text{П}4.17)$$

равен единице, если $f(\mathbf{a}) = 1$. Таким образом, оба выражения (П4.16) и (П4.17) можно рассматривать как определения усреднения по группе. Теперь можно убедиться, что доказательства из гл. 4 остаются в силе при замене конечного усреднения (П4.16) непрерывным усреднением (П4.17). Естественно, при этом предполагается, что объем группы конечен. Группы, для которых это условие выполнено (к ним, в частности, относятся группы вращений и унитарные группы), называются «компактными». Хотя большинство групп, представляющих интерес с точки зрения физики, являются компактными, имеются группы, такие, как группа Лоренца, группа трансляций (гл. 15), которые не относятся к этой категории.

В случае группы $\mathcal{R}_2$ функциональное соотношение между параметрами a, b и c, входящими в формулу (П4.11), есть просто $c = a + b$, так что $\partial c/\partial a = 1$. Следовательно, объем группы равен

$$\int\limits_0^{2\pi} da = 2\pi,$$

чем обусловлены соотношения ортогональности (7.14), понимаемые как частный случай формулы (4.25).

В случае группы $\mathcal{R}_3$ соотношения между параметрами $\mathbf{a}$, $\mathbf{b}$ и $\mathbf{c}$ не столь просты. Воспользуемся векторным представлением для вращений, соответствующих этим параметрам. Направим ось z вдоль оси вращения $\mathsf{R}(\mathbf{b})$. В этом случае матрица $\mathsf{R}(\mathbf{b})$ имеет простой вид

$$\mathsf{R}(\mathbf{b}) = \begin{pmatrix} \cos & -\sin b & 0 \\ \sin b & \cos b & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Ось вращения $\mathsf{R}(\mathbf{a})$ может иметь любое направление, но поскольку нас интересует значение якобиана при $\mathbf{a}=0$, мы можем считать угол вращения малым и представить матрицу $\mathsf{R}(\mathbf{a})$ в виде суммы единичной матрицы и матрицы инфинитезимального оператора (7.24):

$$\mathsf{R}(\mathbf{a}) \approx \begin{pmatrix} 1 & -a_z & a_y \\ a_z & 1 & -a_x \\ -a_y & a_x & 1 \end{pmatrix}.$$

Следовательно, произведение $\mathsf{R}(\mathbf{a})\mathsf{R}(\mathbf{b})$ равно

$$\mathsf{R}(\mathbf{c}) = \mathsf{R}(\mathbf{a})\mathsf{R}(\mathbf{b}) = \\ = \begin{pmatrix} \cos b - a_z \sin b & -\sin b - a_z \cos b & a_y \\ a_z \cos b + \sin b & -a_z \sin b + \cos b & -a_x \\ -a_y \cos b + a_x \sin b & a_y \sin b + a_x \cos b & 1 \end{pmatrix}. \tag{П4.18}$$

Нам остается, исходя из этой матрицы, найти параметры $\mathbf{c}$. Угол c можно найти, приравняв след матрицы $\mathsf{R}(\mathbf{c})$ следу матрицы поворота на угол c, т. е. величине $(1+2\cos c)$. Отсюда получаем $\cos c = \cos b - a_z \sin b$. Поэтому с учетом малости a_z имеем $c = b + a_z$. Чтобы найти направление вектора $\mathbf{c}$, воспользуемся тем, что он инвариантен относительно вращения $\mathsf{R}(\mathbf{c})$:

$$\mathsf{R}(\mathbf{c})\,\mathbf{c} = \mathbf{c}. \tag{П4.19}$$

Используя равенство (П4.19), нужно соблюдать известную осторожность и помнить о том, что приближение (П4.18) для матрицы $\mathsf{R}(\mathbf{c})$ справедливо лишь с точностью до членов первого порядка по $\mathbf{a}$. Однако из (П4.19) и унитарности преобразований вращения следует, что и $\mathsf{R}^{\dagger}(\mathbf{c})\,\mathbf{c} = \mathbf{c}$, так что $\{\mathsf{R}(\mathbf{c}) - \mathsf{R}^{\dagger}(\mathbf{c})\}\,\mathbf{c} = 0$. Это условие выражается тремя уравнениями

$$-2(\sin b + a_z \cos b)\,c_y + [a_y(1+\cos b) - a_x \sin b]\,c_z = 0,$$
$$2(\sin b + a_z \cos b)\,c_x - [a_x(1+\cos b) + a_y \sin b]\,c_z = 0,$$
$$[-a_y(1+\cos b) + a_x \sin b]\,c_x + [a_y \sin b + a_x(1+\cos b)]\,c_y = 0.$$

Следовательно, отношение компонент c_x, c_y и c_z вектора $\mathbf{c}$ равно

$$\{a_y \sin b + a_x(1+\cos b)\} : \{-a_x \sin b + a_y(1+\cos b)\} :$$

$2\{\sin b + a_z \cos b\}$ или, с точностью до членов первого порядка по a,

$$\frac{1}{2}\{a_y + a_x(1+\cos b)/\sin b\} : \frac{1}{2}\{-a_x + a_y(1-\cos b)/\sin b\} : 1.$$

Ранее мы видели, что $c = b + a_z$. Поэтому окончательно с точностью до членов первого порядка по **a** имеем

$$c_x = \frac{1}{2} b\{a_y + a_x(1+\cos b)/\sin b\},$$
$$c_y = \frac{1}{2} b\{-a_x + a_y(1+\cos b)/\sin b\},$$
$$c_z = b + a_z.$$

Теперь вычисляем искомый якобиан

$$\frac{\partial \mathbf{c}}{\partial \mathbf{a}} = \begin{vmatrix} {}^1/_2\, b(1+\cos b)/\sin b & {}^1/_2\, b & 0 \\ -{}^1/_2\, b & {}^1/_2\, b(1+\cos b)/\sin b & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{vmatrix} = \frac{1}{2} b^2 (1+\cos b)/\sin^2 b.$$

В пределе при $\mathbf{a} \to 0$ можно положить $b = c$, и мы получим выражение для весовой функции

$$\rho(\mathbf{c}) = \frac{2\sin^2 c}{c^2(1+\cos c)} = \frac{2(1-\cos c)}{c^2}. \qquad (\text{П}4.20)$$

Объем группы, определенный выше, равен

$$V = \int\limits_{\mathcal{G}} \frac{2(1-\cos a)}{a^2}\, da_x\, da_y\, da_z.$$

Переходя к сферическим координатам для вектора **a**, получаем

$$V = \int\limits_{a=0}^{\pi} \frac{2(1-\cos a)}{a^2} a^2\, da \iint d\Omega = 8\pi^2.$$

Тогда среднее по группе (П4.17) принимает вид

$$\frac{1}{4\pi^2} \int\limits_{\mathbf{a}} f(\mathbf{a})(1-\cos a)\, da\, d\Omega. \qquad (\text{П}4.21)$$

В случае функции $f(\mathbf{a})$, не зависящей от направления вектора **a** (этому условию удовлетворяет любая функция

классов сопряженности, например характер представления), среднее принимает вид

$$\frac{1}{\pi}\int_{a=0}^{\pi} f(a)(1-\cos a)\,da. \qquad (\text{П}4.22)$$

Заменив конечную сумму в формуле (4.25а) средним (П4.22), получим соотношение ортогональности для характеров представлений группы $\mathcal{R}_3$

$$\frac{1}{\pi}\int_{0}^{\pi} \chi_a^{(j_1)}\chi_a^{(j_2)}(1-\cos a)\,da=\delta_{j_1j_2} \qquad (\text{П}4.23)$$

В правильности этого соотношения можно убедиться воспользовавшись формулой (7.42) для характеров. Следует, однако, отметить, что соотношение ортогональности не выполняется для двузначных представлений, т. е. при полуцелых значениях параметра j. Ортогональность характеров этих представлений можно восстановить, расширив область изменения угла до 2π. В этой области представления с полуцелыми j однозначны. Далее о таком расширении группы $\mathcal{R}_3$ см. гл. 7, § 6 и гл. 18, § 13, п. В.

Если вместо a_1, a_2 и a_3 взять в качестве параметров вращения углы Эйлера α, β и γ, то можно показать (гл. 20, § 5), что весовая функция равна $\rho(\alpha, \beta, \gamma)=\sin\beta$, так что среднее по группе принимает вид

$$\frac{1}{8\pi^2}\int_{\gamma=0}^{2\pi}\int_{\beta=0}^{\pi}\int_{\alpha=0}^{2\pi} f(\alpha, \beta, \gamma)\sin\beta\,d\alpha\,d\beta\,d\gamma. \qquad (\text{П}4.24)$$

Соотношение ортогональности для матричных элементов неприводимых представлений принимает с учетом формулы (4.23) вид

$$\frac{1}{8\pi^2}\int_0^{2\pi}\int_0^{\pi}\int_0^{2\pi} D^{(j_1)*}_{m_1'm_1}(\alpha, \beta, \gamma)\,D^{(j_2)}_{m_2'm_2}(\alpha, \beta, \gamma)\sin\beta\,d\alpha\,d\beta\,d\gamma=$$
$$=\delta_{j_1j_2}\delta_{m_1'm_2'}\delta_{m_1m_2}(2j_1+1)^{-1}. \qquad (\text{П}4.25)$$

При полуцелых значениях j нужно опять удвоить область изменения параметров. Этого можно добиться разными способами, например увеличив область изменения угла α до 4π.