Лекция 9

Правила отбора

9.1 Симметризаторы Юнга

Ограничимся тензорами над евклидовым пространством $\mathbb{R}^n$, в которых будем все индексы писать снизу. Полностью *симметричным* называется тензор $T_{i_1,i_2,\ldots,i_p}$, который не меняется при перестановке любой пары индексов. Полностью *антисимметричным* называется тензор, который меняет знак при перестановке любой пары индексов. Тензор ранга 2 можно разбить на симметричную и антисимметричную части

$$T_{ij} = S_{ij} + A_{ij}, \quad S_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij} + T_{ji}), \quad A_{ij} = \frac{1}{2}(T_{ij} - T_{ji}). \tag{9.1}$$

Для тензоров более высокого ранга кроме двух указанных могут быть и другие типы симметрии. Построим операторы, которые превращают тензоры в симметричные — *симметризаторы Юнга*. Для этого сначала определим действие подстановки на тензоре.

Определение 9.1. *Действия подстановки* $\sigma \in P_p$ *на тензоре* $T \in \mathbb{R}(p)$ определим как соответствующую перестановку индексов

$$\sigma T_{i_1\ldots i_p} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \ldots & p \\ j_1 & j_2 & \ldots & j_p \end{pmatrix} T_{i_1\ldots i_p} = T_{i_{j_1}\ldots i_{j_p}}$$

Подстановка просто переставляет индексы, а значит коммутирует с элементом группы $g \in G$, который действует в отдельном экземпляре $\mathbb{R}^n$.

Самые общие *симметризаторы* — это симметризатор и антисимметризатор

$$\hat{S} = \frac{1}{p!}\sum_{\sigma\in P_p} \sigma, \quad \hat{A} = \frac{1}{p!}\sum_{\sigma\in P_p} \det\sigma\, \sigma, \tag{9.2}$$

где $\det\sigma$ — четность подстановки, т.е. $\det\sigma = +1$, когда подстановка σ четная, и -1, когда подстановка нечетная. Иногда симметризация тензора помогает найти неприводимое представление. Это утверждение не строгое и зависит от размерности пространства, конкретной группы и ранга тензора.

В случае полностью симметричного тензора $\hat{S}T$ полилинейная форма, о которой говорилось в третьем определении тензора, становится просто однородным полиномом степени p от n переменных

$$\mathcal{P}(x_1,\ldots,x_n)=\sum_{\substack{m_1,m_2,\ldots,m_n\\ m_1+m_2+\cdots+m_n=p}} C_{m_1,m_2,\ldots,m_n}x_1^{m_1}x_2^{m_2}\cdots x_n^{m_n}. \tag{9.3}$$

Размерность пространства однородных полиномов равна размерности пространства симметричных тензоров $\mathcal{S}$. Эту размерность можно подсчитать с помощью комбинаторики, так же, как мы нашли квантовую кратность вырождения (4.6). Надо узнать число способов, которым можно распределить p шаров по n ячейкам

$$\dim\mathcal{S}=C^p_{p+n-1}=\frac{(p+n-1)!}{p!(n-1)!}. \tag{9.4}$$

У антисимметричного тензора $\hat{A}T$ ненулевые компоненты только те, у которых все индексы различны, а таких возможностей всего $C^p_n, p\leqslant n$. Размерность пространства $\mathcal{A}$ антисимметричных тензоров

$$\dim\mathcal{A}=C^p_n=\frac{n!}{p!(n-p)!}.$$

Пример 9.1. Разбить на неприводимые части тензор второго ранга в пространстве $\mathbb{R}^3$. Имеется в виду «обычный» тензор, компоненты которого преобразуется при вращении. По определению его следует называть тензором относительно группы $\mathbf{SO(3)}$.

Антисимметричная часть (9.1) сворачивается с e_{ijk} в вектор $b_i=e_{ijk}A_{jk}$, содержит 3 компоненты и преобразуется по неприводимому векторному представлению $l=1$. Судя по разложению Клебша — Гордана (8.10), симметричная часть S_{ij} , содержащая 6 различных компонент, приводима и должна разлагаться в прямую сумму представлений скалярного и тензорного представлений $l=0,2$. След тензора S_{kk} очевидно преобразуется по скалярному представлению, а бесследовая часть

$$Q_{ij}=S_{ij}-\frac{1}{3}\delta_{ij}S_{kk}$$

по неприводимому тензорному представлению $l=2$.

Пример 9.2. Рассмотрим тензоры ранга $p=3$ в пространстве $\mathbb{R}^3$. Согласно (9.4), пространство симметричных тензоров имеет размерность 10. Антисимметричный тензор всего один (это e_{ijk}), а всего у общего тензора имеется 27 компонент. Какую симметрию имеют другие части T_{ijk}?

Вспомним, что группа подстановок из 3 объектов изоморфна группе треугольника $P_3\approx\mathbf{D_3}$. Каждому неприводимому представлению группы P_3 отвечает от-

дельный симметризатор

$$\hat{S} = \frac{1}{6}\left(\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}\right),$$

$$\hat{A} = \frac{1}{6}\left(\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix} + \begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}1&2&3\\2&1&3\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}1&2&3\\1&3&2\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}1&2&3\\3&2&1\end{pmatrix}\right),$$

$$\hat{B} = \frac{1}{3}\left(2\begin{pmatrix}1&2&3\\1&2&3\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}1&2&3\\3&1&2\end{pmatrix} - \begin{pmatrix}1&2&3\\2&3&1\end{pmatrix}\right).$$

Третий симметризатор $\hat{B}$ получается из двумерного неприводимого представления группы треугольника и представляет собой проектор на подпространство этого неприводимого представления. В случае матричного представления проектор на подпространство неприводимого представления $\mathcal{P}^{(\alpha)}$ определяется формулой (4.11). При расчете симметризаторов Юнга вместо матриц представления $D(g)$ в формуле (4.11) записываются подстановки. Сумма проекторов на все неприводимые представления равна единичному оператору, поэтому все компоненты тензора попадают в какое-нибудь из подпространств. Вернувшись к тензору второго ранга (9.1), заметим, что в полном согласии с теорией его разбиение на симметричную и антисимметричную части происходит в соответствии с таблицей характеров группы C_2, у которой всего два одномерных неприводимых представления: четное и нечетное. $\boxed{\begin{smallmatrix}1&1\\1&-1\end{smallmatrix}}$

Итак, остальные 16 компонент тензора третьего ранга входят в тензор $B_{ijk} = \hat{B}T$, который, как легко проверить, удовлетворят соотношению симметрии, напоминающему тождество Якоби

$$B_{ijk} + B_{kij} + B_{jki} = 0.$$

Тождество дает как раз 11 условий:

$$\begin{aligned}
B_{123} + B_{312} + B_{231} &= B_{213} + B_{321} + B_{132} = 0\\
B_{112} + B_{211} + B_{121} &= B_{221} + B_{122} + B_{212} = 0\\
B_{113} + B_{311} + B_{131} &= B_{331} + B_{133} + B_{313} = 0\\
B_{223} + B_{322} + B_{232} &= B_{332} + B_{233} + B_{323} = 0\\
B_{111} &= B_{222} = B_{333} = 0.
\end{aligned}$$

Таким образом, симметризаторы Юнга можно строить с помощью таблицы неприводимых характеров группы подстановок из p объектов, где p — ранг тензора. Группа P_p всегда имеет единичное представление, которому соответствует симметризатор $\hat{S}$ в формуле (9.2). Антисимметризатор получается из одномерного неприводимого представления фактор-группы P_p/A_p, где A_p — нормальная подгруппа четных подстановок из p объектов.

Иногда симметризованный тензор сразу становится неприводимым, как антисимметричная часть тензора второго ранга в примере 9.1. Иногда представление надо дальше разлагать на неприводимые, как в случае с симметричной

частью тензора второго ранга. Чтобы разлагать симметричную часть на неприводимые представления группы вращений бывает удобно использовать изоморфизм пространства симметричных тензоров и пространства однородных полиномов. Например, для рассмотренного в примере **9.1** тензора $p = 2, n = 3$ можно утверждать, что симметричная часть преобразуется как квадратичная форма

$$S(x, y, z) = a_{11}x^2 + a_{22}y^2 + a_{33}z^2 + 2a_{12}xy + 2a_{13}xz + 2a_{23}yz.$$

Всего имеется 6 различных коэффициентов, но чтобы разбить на неприводимые представления, следует выделить скалярную часть $S_0(x, y, z) = x^2 + y^2 + z^2$, которая не преобразуется при вращении. Оставшаяся бесследовая часть содержит 5 компонент и преобразуется по неприводимому представлению с $l = 2$.

Замечание **9.1.** Тензорное представление — это прямое произведение представлений $D(g)$, взятых такое количество раз, каков ранг p у тензора. Поэтому характер тензорного представления равен $\chi_i(g) = \chi^p(g)$, где $\chi(g)$ — характер представления $D(g)$. Если тензор обладает некоторой симметрией по перестановкам индексов, то характер тензорного представления вычисляется по более сложной формуле, которая выводится с помощью процедуры симметризации базиса, описанной в [3]. Ниже эти формулы приведены для тензоров 2-го и 3-го ранга:

$$\chi_s(g) = \frac{1}{2}\left[\chi^2(g) + \chi(g^2)\right], \qquad \chi_a(g) = \tfrac{1}{2}\left[\chi^2(g) - \chi(g^2)\right];$$

$$\chi_s(g) = \frac{1}{6}\left[\chi^3(g) + 3\chi(g)\chi(g^2) + 2\chi(g^3)\right], \quad \chi_a(g) = \tfrac{1}{6}\left[\chi^3(g) - 3\chi(g)\chi(g^2) + 2\chi(g^3)\right],$$

$$\chi_b(g) = \frac{2}{3}\left[\chi^3(g) - \chi(g^3)\right].$$

9.2 Инвариантные тензоры

Определение 9.2. Тензор называется *инвариантным* относительно группы G, если его компоненты не меняются под действием преобразований группы.

Чтобы удобнее записать действие элемента группы на тензор, выстроим его компоненты в один столбец длины n^p. Тогда условие инвариантности запишется как

$$\mathcal{D}(g)T = T, \quad T = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{9.5}$$

Исходное представление $\mathcal{D}$ можно разложить на неприводимые представления $D^{(\alpha)}$ группы G (среди которых могут быть и одинаковые)

$$\mathcal{D}(g) = \bigoplus_{\alpha=1}^{K} D^{(\alpha)}(g).$$

Разложение можно найти с помощью усреднения по группе характера тензорного представления $\chi(g) = [\chi^{(1)}(g)]^p$, где $\chi^{(1)}(g)$ — характер векторного представления. Тогда (9.5) запишется в правильном базисе как

$$\mathcal{D}(g)T = \begin{pmatrix} \boxed{D^{(1)}(g)} & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \boxed{D^{(K)}(g)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} t_1 \\ t_2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \tag{9.6}$$

Просуммируем теперь (9.6) по группе. В матрицах неприводимого представления в силу ортогональности на всех местах суммарной матрицы будет нуль, кроме подпространства единичного представления, где получится порядок группы $|G|$. Значит в таком базисе все компоненты тензора обращаются в нуль, кроме отвечающих единичному представлению. Сформулируем правило подсчета количества независимых компонент инвариантного тензора.

Теорема 9.1. *У инвариантного тензора столько независимых компонент, сколько раз входит единичное представление в разложение тензорного представления на неприводимые.*

Группу мы для простоты считали дискретной, но и для непрерывных групп можно вывести аналогичное утверждение, интегрируя по группе.

Пример 9.3. Сколько независимых компонент у инвариантного тензора, если $p = 2, n = 3, G = \mathbf{SO(3)}$?

Из разложения Клебша — Гордана (8.10) видно, что скалярное представление $D^{(0)}$ входит один раз, значит у инвариантного тензора второго ранга в трехмерном пространстве всего одна независимая компонента. Это известный факт, потому что инвариантный тензор всегда записывается через символ Кронекера $T_{ij} = T\delta_{ij}$. По существу это не тензор, а скаляр. Диагональная матрица с равными элементами так и называется скалярной.

Пример 9.4. То же самое, но для $G = \mathbf{D_3}$. Характер 9-мерного тензорного представления $D^{(1)} \otimes D^{(1)}$ дается квадратами значения характера $D^{(1)}$, которые в свою очередь находятся по формуле (8.3):

$$\chi_i = \begin{pmatrix} 9 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

С помощью таблицы характеров группы треугольника найдем, $\boxed{\begin{smallmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 \\ 2 & -1 & 0 \end{smallmatrix}}$

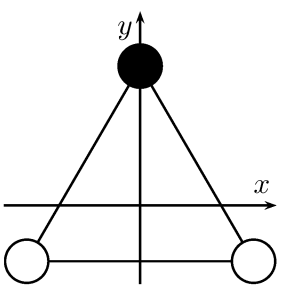
$$D^{(1)} \otimes D^{(1)} = 2D_1 \oplus D_2 \oplus 3D_3.$$

Отсюда видно, что единичное представление вошло дважды, а следовательно тензор имеет 2 независимые компоненты.

В классической механике известно, что когда мы вычисляем тензор инерции невесомого треугольника с расстоянием от центра до каждой вершины R,

Таблица 9.1: Количество линейно независимых компонент инвариантных тензоров ранга $p = 1, 2, 3, 4$ при $n = 3$.

Ранг p	SO(3)	T	D_3	SO(2)
1	0	0	0	1
2	1	1	2	3
3	1	2	4	7
4	3	7	15	19



у которого в верхней вершине расположена масса m_1, а при основании массы m, получится

$$I_{zz} = (m_1 + 2m)R^2,$$
$$I_{xx} = m_1 R^2 + 2m\left(\frac{R}{2}\right)^2 = (2m_1 + m)\frac{R^2}{2},$$
$$I_{yy} = 2m\left(R\frac{\sqrt{3}}{2}\right)^2 = 3m\frac{R^2}{2}.$$

Если имеется симметрия правильного треугольника, то $m_1 = m$, и волчок становится симметричным: $I_{xx} = I_{yy} \neq I_{zz}$. У тензора, приведенного к главным осям, остается только две различные компоненты.

Чем ниже симметрия, тем больше независимых компонент у инвариантного тензора, как видно из таблицы 9.1, если двигаться вдоль строки слева направо. Для групп $\mathbf{SO(3)}, \mathbf{SO(2)}$ приведем также разложения по инвариантным тензорам при $p \leq 3$

$$P_i = 0, \quad Q_{ij} = A\delta_{ij}, \quad R_{ijk} = Be_{ijk};$$
$$P_i = An_i, \quad Q_{ij} = A\delta_{ij} + Bn_in_j + Ce_{ijk}n_k,$$
$$R_{ijk} = A_1\delta_{ij}n_k + A_2\delta_{ik}n_j + A_3\delta_{jk}n_i$$
$$+B_1e_{ijl}n_ln_k + B_2e_{kil}n_jn_l + B_3e_{kjl}n_in_l + Cn_in_jn_k, \qquad (9.7)$$

где n_i единичный вектор вдоль оси вращения в группе $\mathbf{SO(2)}$, буквы A, B, C обозначают произвольные независимые константы.

Для тензора, инвариантного относительно группы $\mathbf{SO(2)} < \mathbf{SO(3)}$ можно было рассуждать и иначе. Инвариантный тензор, для примера второго ранга, определен на таких сферических функциях, которые не преобразуются при вращении вокруг оси z, т.е. имеют угловую зависимость $e^{im\varphi}$ с $m = 0$. Тензор второго ранга преобразуется как произведение двух векторов, значит задача сводится к вопросу, сколькими способами мы можем получить зависимость с $m = 0$, возво-

дя в квадрат характер неприводимого векторного представления $\mathbf{SO(3)}$

$$\left(\chi^{(1)}(\varphi)\right)^2 = \left(e^{-i\varphi} + 1 + e^{i\varphi}\right)^2.$$

В данном случае имеется три таких слагаемых, поэтому число независимых компонент 3.

Упражнение 9.1. Объясните, почему в выражении (9.7) тензора третьего ранга R_{ijk}, инвариантного относительно группы $\mathbf{SO(2)}$, нет слагаемого, пропорционального e_{ijk}.

Упражнение 9.2. В таблице 9.1 в колонке $\mathbf{D_3}$ содержится "опечатка". Найдите ее.

9.3 Правила отбора

В квантовой механике приходится вычислять многочисленные матричные элементы операторов. Чтобы сократить работу, хочется заранее знать, какие из них равны нулю. Такие переходы называют запрещенными, а закономерность, по которой их находят, называется *правилом отбора*. Если известна группа симметрии системы, то такие правила можно найти с помощью теоретико-групповых соображений. Для этого надо знать, как преобразуются оператор, начальное и конечное состояние.

Пример 9.5. Если начальное состояния атома вырождено по проекции M углового момента J, тогда волновая функция представляет собой столбец из $2J+1$ компонент. Если конечное состояние имеет момент J', а нас интересует правило отбора для дипольного момента (3 компоненты), то всего имеется $\nu(J,J') = 3(2J+1)(2J'+1)$ матричных элементов для каждого набора J, J'. Если бы не симметрия относительно вращений, надо было бы вычислять $\nu(J,J')$ интегралов для каждой пары J, J'. К счастью, квантовая механика [3] дает правило отбора $J' = J, J \pm 1$, которое резко уменьшает объем вычислений.

Ниже мы выведем общее правило отбора для системы с симметрией относительно преобразований произвольной группы. Квантовомеханические правила отбора для группы вращений тоже будут получаться из общего правила. Пусть оператор $\hat{O}$ преобразуется по представлению D_o группы G, а начальное и конечное состояния — по представлениям D_i, D_f. Тогда матричный элемент

$$O_{fi} = \langle f|\hat{O}|i\rangle$$

можно представить себе в виде столбца, который преобразуется по прямому произведению представлений

$$\mathcal{D} = D_f^* \otimes D_o \otimes D_i. \tag{9.8}$$

Здесь $*$ означает сопряженное представление, которое получается комплексным сопряжением. Представление $\mathcal{D}$ можно разложить на неприводимые представления $D^{(\alpha)}$ группы G:

$$\mathcal{D} = \bigoplus_{\alpha=1}^{K} D^{(\alpha)}. \tag{9.9}$$

В прямой сумме могут встретиться и одинаковые представления, поэтому мы не пишем коэффициенты k_α. Такое разложение можно найти, перемножая характеры представлений D_f^*, D_o, D_i.

Перейдем в подпространство какого-либо неприводимого представления и усредним по группе. Для простоты группу считаем конечной. Столбец матричного элемента не должен зависеть от элемента группы, тогда

$$O_{fi} = \frac{1}{|G|}\left(\sum_{g\in G} D^{(\alpha)}(g)\right) O_{fi}.$$

Сумма обращается в нуль в силу ортогональности неприводимого представления $D^{(\alpha)}$ единичному представлению. Исключение составляет случай, когда $D^{(\alpha)}$ само является единичным представлением. Тогда сумма, деленная на порядок группы, даст единицу. Теперь мы можем формулировать общее правило отбора относительно произвольной группы.

Теорема 9.2. *Матричный элемент O_{fi} равен нулю, если в разложении (9.9) представления (9.8) не входит единичное представление.*

Пример 9.6. Найти правило отбора оператора дипольного моменту в группе $SU(2)$ на переходе $J - J'$.

Дипольный момент $\boldsymbol{\mu} = e\mathbf{r}$ преобразуется по векторному представлению $D^{(1)}$. Волновые функции начального и конечного состояний

$$\langle f'| = \langle f|D^{(J')}, \quad |i'\rangle \sim D^{(J)}|i\rangle,$$

Отсюда

$$\mathcal{D} = \left[D^{(J')}\right]^* \otimes D^{(1)} \otimes D^{(J)} = \left[D^{(J')}\right]^* \otimes \left(D^{(J-1)} \oplus D^{(J)} \oplus D^{(J+1)}\right), \tag{9.10}$$

Если $J \geqslant 1$. Видим, что единичное представление войдет в разложение, если $J' = J - 1, J' = J$ либо $J' = J - 1$. Получилось правило отбора

$$J' = J, J \pm 1.$$

Случаи $J < 1$ рассмотрим отдельно, их всего два. При $J = 1/2$ скобка в формуле (9.10) согласно правилу (8.4) равна

$$D^{(1/2)} \otimes D^{(1)} = D^{(1/2)} \oplus D^{(3/2)},$$

значит $J' = 1/2, 3/2$. При $J = 0$ та же скобка равна $D^{(1)}$, откуда $J' = 1$.

Таблица 9.2: Правила отбора для векторного оператора в системе с группой симметрии $\mathbf{D_3}$. Номер строки означает номер начального представления, а столбца — номер конечного.

i\ f	D_1	D_2	D_3
D_1	◯	★	★
D_2	★	◯	★
D_3	★	★	★

Пример 9.7. То же самое, но в группе треугольника $\mathbf{D_3}$.

Характер представления $D^{(1)}$ равен

$$\chi^{(1)} = \begin{pmatrix} 3 & 0 & -1 \end{pmatrix},$$

откуда найдем разложения прямого произведения этого представления на каждое неприводимое представление группы треугольника $D_i = D_1, D_2, D_3$

$$\begin{aligned} D_1 \otimes D^{(1)} &= D_2 \oplus D_3, \\ D_2 \otimes D^{(1)} &= D_1 \oplus D_3, \\ D_3 \otimes D^{(1)} &= D_1 \oplus D_2 \oplus D_3. \end{aligned}$$

Переход разрешен, если представление D_f^*, по которому преобразуется конечное состояние, входит в прямую сумму правой части. Запишем правило отбора в виде таблицы 9.2, в которой звездочкой обозначим, что переход разрешен, а кружочком — запрещенные переходы. Полученное правило отбора можно сформулировать одной фразой: переход запрещен между двумя одинаковыми одномерными неприводимыми представлениями.