

Приложение Б

СВОДКА ФОРМУЛ

Теория возмущений

$$V_{lk} = (\psi_l, V\psi_k), \quad (5.8)$$

$$F_k = E_k + \lambda V_{kk} + \lambda^2 \sum_{l \neq k} \frac{|V_{lk}|^2}{E_k - E_l}, \quad (5.10)$$

$$\varphi_k = \psi_k + \lambda \sum_{l \neq k} \frac{V_{lk}}{E_k - E_l} \psi_l. \quad (5.11)$$

Теория групп

Символ \sum_R означает суммирование по всем элементам группы для конечных групп; для непрерывных групп он означает интеграл Гурвица

$$\sum_R J_R = \sum_R J_{SR}. \quad (7.1), (10.5)$$

Соотношения ортогональности для унитарных неприводимых представлений группы порядка h имеют вид

$$\sum_R D^{(j')}(R)_{\mu'\nu'}^* D^{(j)}(R)_{\mu\nu} = \frac{h}{l_j} \delta_{j'j} \delta_{\mu'\mu} \delta_{\nu'\nu}, \quad (9.32)$$

где l_j — размерность представления $D^{(j)}$. Для характеров $\chi^{(j)}(R) = \sum_{\mu} D^{(j)}(R)_{\mu\mu}$ имеем

$$\sum_R \chi^{(j')}(R)^* \chi^{(j)}(R) = h \delta_{j'j}. \quad (9.33)$$

Для непрерывных групп $h = \sum_R 1$ заменяется на $\int dR$ [соотношения (10.12), (10.13)].

Представления и собственные функции

Из

$$P_R f(x'_1, x'_2, \dots, x'_n) = f(x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (11.19)$$

где x_j и x'_j связаны вещественным ортогональным преобразованием R

$$x'_j = \sum_i R_{ji} x_i \quad \text{или} \quad x_i = \sum_j R_{ji} x'_j, \quad (11.18)$$

следует, что

$$P_{SR} = P_S P_R. \quad (11.20)$$

Также из

$$P_R \psi_x = \sum_x D(R)_{xx'} \psi_{x'} \quad (11.23)$$

и $P_S P_R^* = P_{SR}$ следует

$$D(SR) = D(S) D(R). \quad (11.25)$$

Наконец, из

$$P_R f_x^{(j)} = \sum_{\lambda} D^{(j)}(R)_{\lambda x} f_{\lambda}^{(j)} \quad \text{и} \quad P_R g_{x'}^{(j')} = \sum_{\lambda'} D^{(j')}(R)_{\lambda' x'} g_{\lambda'}^{(j')}$$

следует

$$(f_x^{(j)}, g_{x'}^{(j')}) = \frac{\hbar}{l_j} \delta_{jj'} \delta_{xx'} \sum_{\lambda} (f_{\lambda}^{(j)}, g_{\lambda}^{(j')}). \quad (12.8)$$

Неприводимые представления трехмерной группы вращений

$$\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{m'm} = e^{im'\alpha} d^{(j)}(\beta)_{m'm} e^{im\gamma}, \quad (15.8)$$

$$\mathfrak{D}^{(j/2)}(\{\alpha\beta\gamma\}) = \begin{pmatrix} e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & -e^{-\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \\ e^{\frac{1}{2}i\alpha} \sin \frac{1}{2}\beta e^{-\frac{1}{2}i\gamma} & e^{\frac{1}{2}i\alpha} \cos \frac{1}{2}\beta e^{\frac{1}{2}i\gamma} \end{pmatrix}, \quad (15.16)$$

$$\mathfrak{D}^{(j)}(\{\alpha\beta\gamma\})_{j\mu} = \sqrt{\binom{2j}{j-\mu}} e^{ij\alpha} \cos^{j+\mu} \frac{1}{2}\beta \sin^{j-\mu} \frac{1}{2}\beta e^{i\mu\gamma}, \quad (15.27a)$$

$$\chi^{(j)}(\varphi) = \sum_{\mu=-j}^j e^{i\mu\varphi}. \quad (15.28)$$

Представление $\mathfrak{D}^{(l)} \times \mathfrak{D}^{(\bar{l})}$ содержит один и только один раз каждое из представлений $\mathfrak{D}^{(L)}$, где

$$L = |l - \bar{l}|, |l - \bar{l}| + 1, \dots, l + \bar{l} - 1, l + \bar{l}, \quad (17.14)$$

$$\mathfrak{D}^{(l)}(R)_{\mu, \mu'} \mathfrak{D}^{(\bar{l})}(R)_{\nu, \nu'} = \sum_{L=|l-\bar{l}|}^{l+\bar{l}} s_{L\mu, \nu'}^{(l\bar{l})} \mathfrak{D}^{(L)}(R)_{\mu'+\nu'; \mu+\nu} s_{L\mu\nu}^{(l\bar{l})}, \quad (17.166)$$

$$s_{L\mu L-\mu}^{(l\bar{l})} = \frac{(-1)^{l-\mu} \sqrt{(2L+1)! (l+\bar{l}-L)!}}{\sqrt{(L+l+\bar{l}+1)! (L+l-\bar{l})! (L-l+\bar{l})!}} \times \\ \times \sqrt{\frac{(l+\mu)! (\bar{l}+L-\mu)!}{(l-\mu)! (\bar{l}-L+\mu)!}}, \quad (17.276)$$

$$\sum_{\mu} s_{L, \mu, m-\mu}^{(l\bar{l})} s_{L', \mu, m-\mu}^{(l\bar{l})} = \delta_{LL'}, \\ \sum_L s_{L, \mu, m-\mu}^{(l\bar{l})} s_{L, \mu', m-\mu'}^{(l\bar{l})} = \delta_{\mu\mu'}. \quad (17.28)$$

Теория спина Паули

$$\mathbf{Q}_R \Phi(x_1, y_1, z_1, s_1, \dots, x_n, y_n, z_n, s_n) = \\ = \sum_{t_1=\pm 1} \dots \sum_{t_n=\pm 1} \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2} s_1, \frac{1}{2} t_1} \dots \\ \dots \mathfrak{D}^{(1/2)}(R)_{\frac{1}{2} s_n, \frac{1}{2} t_n} \Phi(x_1, y_1, z_1, t_1, \dots, x_n, y_n, z_n, t_n) \quad (21.66)$$

$$\mathbf{O}_R = \mathbf{P}_R \mathbf{Q}_R = \mathbf{Q}_R \mathbf{P}_R. \quad (21.8)$$

Неприводимые тензоры

$$\mathbf{O}_R^{-1} \mathbf{T}^{(\rho)} \mathbf{O}_R = \sum_{\sigma=-\omega}^{\omega} \mathfrak{D}^{(\omega)}(R)_{\rho\sigma} \mathbf{T}^{(\sigma)}, \quad (21.166)$$

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = (\Psi_{\mu}^{Nj}, \mathbf{T}^{(\rho)} \Psi_{\mu'}^{N'j'}), \quad (21.18)$$

$$T_{Nj\mu; N'j'\mu'}^{(\rho)} = s_{j'\mu\rho}^{(j\omega)} \delta_{\mu+\rho, \mu'} T_{Nj; N'j'}. \quad (21.19)$$

Здесь $s_{j'\mu\rho}^{(j\omega)}$ равны нулю, если

$$|j - \omega| > j' \quad \text{или} \quad j' > j + \omega.$$

Бесконечно малые вращения

Оператор бесконечно малых вращений декартовых координат имеет вид

$$\frac{1}{\hbar} \mathbf{L}_z \Psi = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{P}_{\{\alpha 00\}} \Psi \Big|_{\alpha=0}; \quad (18.7)$$

для спиновых координат

$$\frac{1}{2} (s_1 + s_2 + \dots + s_n) \Psi = \frac{1}{\hbar} \mathbf{S}_z \Psi = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} \Psi \Big|_{\alpha=0}; \quad (23.23a)$$

а для всех координат одновременно

$$\frac{1}{\hbar} (\mathbf{L}_z + \mathbf{S}_z) = -i \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{O}_{\{\alpha 00\}} \Big|_{\alpha=0}. \quad (23.30a)$$

3j-символы

1. Соотношение между 3j-символами и коэффициентами векторного сложения:

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \frac{(-1)^{J_1 - J_2 - m_3}}{\sqrt{2J_3 + 1}} S_{J_3, m_1, m_2}^{(J_1, J_2)} \delta_{m_1 + m_2 + m_3, 0}. \quad (24.9a)$$

2. Симметрия 3j-символов:

$$\begin{aligned} (-1)^{J_1 + J_2 + J_3} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} J_1 & J_3 & J_2 \\ m_1 & m_3 & m_2 \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} J_3 & J_2 & J_1 \\ m_3 & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_2 & J_1 & J_3 \\ m_2 & m_1 & m_3 \end{pmatrix}, \quad (24.10) \end{aligned}$$

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_2 & J_3 & J_1 \\ m_2 & m_3 & m_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_3 & J_1 & J_2 \\ m_3 & m_1 & m_2 \end{pmatrix}, \quad (24.10a)$$

$$\begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{J_1 + J_2 + J_3} \begin{pmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \quad (24.10b)$$

6j-символы

1. Связь с 3j-символами:

$$(J_1 l_2 l') (l_1 j_2 l) = (-1)^{2l_1} \sum_j (2j + 1) \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J \\ l_1 & l_2 & l \end{Bmatrix} (J_1 J_2 j') (l_1 l_2 j), \quad (24.24a)$$

$$(J_1 l_2, l'_3) (l'_1 j_2 l_3) (l_1, l_2 j_3) = \begin{Bmatrix} J_1 & J_2 & J_3 \\ l_1 & l_2 & l_3 \end{Bmatrix} (J_1 J_2 J_3) \quad (24.24b)$$

(относительно использованных здесь ковариантных обозначений см. гл. 24).

2. Рассмотрим σ -ю компоненту \mathbf{T}^σ неприводимого тензора ранга p по отношению к декартовым координатам и ранга 0 (скаляр) по отношению к спиновым координатам. Оператор \mathbf{T}^σ является тогда неприводимым тензором ранга $\omega = p$ по отношению к вращениям всех координат. Для такого оператора другой возможной формой соотношения (21.19) является

$$(\Psi_\mu^{NJ}, \mathbf{T}^\sigma \Psi_{\mu'}^{N'J'}) = (J^\mu, p^\sigma, J_{\mu'}^{J'}) T_{NJ; N'J'}. \quad (24.27a)$$

Величина $T_{NJ; N'J'}$ в соотношении (24.27a) есть произведение $(-1)^{J-p-J'} \sqrt{2J'+1}$ на $T_{NJ; N'J'}$ из (21.19). Если для обоих состояний Ψ_μ^{NJ} и $\Psi_{\mu'}^{N'J'}$ справедлива LS -связь, то

$$\begin{aligned} & T_{NJ; N'J'} = \\ & = (-1)^{2J-L+S+J'+p} \begin{Bmatrix} J & p & J' \\ L' & S & L \end{Bmatrix} \sqrt{2J+1} \sqrt{2J'+1} T_{NSL; N'S'L'}. \end{aligned} \quad (24.30)$$

Антиунитарные операторы

Оператор θ является антиунитарным, если для любых двух состояний Ψ и Φ

$$(\theta\Phi, \theta\Psi) = (\Phi, \Psi)^* = (\Psi, \Phi) \quad (26.8)$$

и

$$\theta(\alpha\Phi + \beta\Psi) = \alpha^*\theta\Phi + \beta^*\theta\Psi. \quad (26.5)$$

Антиунитарный оператор обращения времени имеет вид

$$\theta = s_{1y} s_{2y} \dots s_{ny} \mathbf{K}, \quad (26.15a)$$

$$\theta = (-i)^n \mathbf{Q}_{\{0, \pi, 0\}} \mathbf{K}, \quad (26.15b)$$

где \mathbf{K} — оператор, заменяющий некоторую величину ее комплексно-сопряженной.

Законы умножения матриц, соответствующих антиунитарным операторам \mathbf{a} и унитарным операторам \mathbf{u} , записываются в виде

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(\mathbf{u}_1) \mathbf{D}(\mathbf{u}_2) &= \mathbf{D}(\mathbf{u}_1 \mathbf{u}_2), \\ \mathbf{D}(\mathbf{a}) \mathbf{D}(\mathbf{u}^*) &= \mathbf{D}(\mathbf{a} \mathbf{u}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{u}) \mathbf{D}(\mathbf{a}) &= \mathbf{D}(\mathbf{u} \mathbf{a}), \\ \mathbf{D}(\mathbf{a}_1) \mathbf{D}(\mathbf{a}_2)^* &= \mathbf{D}(\mathbf{a}_1 \mathbf{a}_2). \end{aligned} \quad (26.21)$$