Доклады Академии Наук СССР
1947. Том LVIII, № 9

ФИЗИКА

И. ГОДНЕВ и В. СОРОКИН

О КЛАССИФИКАЦИИ ФУНКЦИЙ СИСТЕМЫ ОДИНАКОВЫХ ЧАСТИЦ ПО ХАРАКТЕРУ СИММЕТРИИ И МОМЕНТУ ИМПУЛЬСА

(Представлено академиком В. А. Фоком 29 VIII 1947)

В квантовой механике приходится часто рассматривать системы, содержащие несколько одинаковых частиц, каждая из которых имеет один и тот же (орбитальный или спиновый) момент импульса. Представляет интерес классификация возможных состояний таких систем по характеру их симметрии относительно группы перестановок орбитальных или спиновых координат одинаковых частиц и по значениям полного орбитального или спинового момента*. Такая классификация оказывается очень простой в случае спиновых функций электронов, когда каждому типу симметрии по отношению к группе перестановок координат соответствует определенный результирующий спин. Нам пришлось столкнуться с одним более сложным случаем и, так как решение общей задачи может найти ряд применений (например при исследовании сверхтонкой структуры молекулярных спектров), мы даем здесь ее полное решение.

Пусть (спиновое или орбитальное) состояние каждой из n частиц описывается моментом j и его проекцией на какую-либо ось, так что для каждой частицы имеется $\alpha=2j+1$ линейно независимых функций, порождающих пространство R_α. Волновые функции системы представляют собой линейные агрегаты из произведений n функций отдельных частиц и образуют пространство $(R_\alpha)^n$.

Для построения классификации состояний по отношению к группе перестановок координат одинаковых частиц рассмотрим группу u_α унитарных преобразований в R_α, которая индуцирует в $(R_\alpha)^n$ представление $(u_\alpha)^n$. Это представление вполне приводимо [1]:

$$(u_\alpha)^n=\sum_{(f)} a_f A(f_1, f_2, \ldots, f_\alpha). \tag{1}$$

Здесь $A(f_1, \ldots, f_\alpha)$ обозначает неприводимое представление унитарной группы u_α с сигнатурой (partitio numerorum)

$$(f)\equiv(f_1, f_2, \ldots, f_\alpha), \tag{2}$$

которая определяет симметрию функций, образующих пространство представления $A(f_1, \ldots, f_\alpha)$, по отношению к группе перестановок ко-

* Классификация только по моменту импульса может быть найдена последовательным применением формулы Гордана — Клебша (4).

ординат одинаковых частиц, причем

$$f_1+f_2+\ldots+f_\alpha=n, \quad f_1\geqslant f_2\geqslant\ldots\geqslant f_\alpha\geqslant 0$$

и f_k — целые.

Координаты a_f равны:

$$a_f=\frac{n!\,D(h_1, h_2, \ldots h_\alpha)}{h_1!\,h_2!\ldots h_\alpha!}, \tag{3}$$

где

$$h_k=f_k+\alpha-k \tag{4}$$

и $D(h_1, h_2, \ldots, h_\alpha)$ — определитель Вандермонда:

$$D(h_1, h_2, \ldots, h_\alpha)=\prod_{0\leqslant k\leqslant k'\leqslant\alpha}(h_k-h_{k'}). \tag{5}$$

При ортогональных преобразованиях пространственных координат в пространстве R_α индуцируется представление D_j группы вращений, а в $(R_\alpha)^n$ — $(D_j)^n$.

По отношению к u_α группа преобразований D является подгруппой, и представление $(D_j)^n$ приводится вместе с $(u_\alpha)^n$:

$$(D_j)^n=\sum_{(f)} a_f\,A'(f_1, \ldots, f_\alpha), \tag{6}$$

причем $A'(f_1, \ldots, f_\alpha)$ может быть приведено далее, так что

$$A'(f_1, \ldots, f_\alpha)=\sum_J N_{(f)\,J}\,D_J. \tag{7}$$

Функции пространства представления D_J имеют полный момент J и, следовательно, можно выбрать линейно независимые функции системы так, что они будут иметь определенный тип симметрии и определенный момент.

Задача сводится к отысканию чисел $N_{(f)\,J}$. Для решения ее мы воспользуемся свойством ортогональности характеров неприводимых представлений. Характер $A(f_1, \ldots, f_\alpha)$ дается формулой (2):

$$\chi_{(f)}=\frac{\begin{vmatrix} \varepsilon_1^{h_1}, & \varepsilon_1^{h_2}, & \ldots, & \varepsilon_1^{h_\alpha} \\ \varepsilon_2^{h_1}, & \varepsilon_2^{h_2}, & \ldots, & \varepsilon_2^{h_\alpha} \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varepsilon_\alpha^{h_1}, & \varepsilon_\alpha^{h_2}, & \ldots, & \varepsilon_\alpha^{h_\alpha} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} \varepsilon_1^{\alpha-1}, & \varepsilon_1^{\alpha-2}, & \ldots, & 1 \\ \varepsilon_2^{\alpha-1}, & \varepsilon_2^{\alpha-2}, & \ldots, & 1 \\ \ldots & \ldots & \ldots & \ldots \\ \varepsilon_\alpha^{\alpha-1}, & \varepsilon_\alpha^{\alpha-2}, & \ldots, & 1 \end{vmatrix}}, \tag{8}$$

где

$$\varepsilon_k=e^{i\varphi_k}, \quad k=1,2, \ldots, \alpha \tag{9}$$

и φ_k — параметры унитарного преобразования группы u_α. Матрица этого преобразования в пространстве R_α, если ее привести к диагональной форме, будет иметь диагональными элементами как раз величины ε_k.

Среди этих матриц матрицы представления D_j имеют диагональные элементы

$$\varepsilon^{j}, \varepsilon^{j-1}, \ldots, \varepsilon^{-j},$$

где $\varepsilon = e^{i\varphi}$, и характер

$$\chi_j = \varepsilon^{j} + \varepsilon^{j-1} + \ldots + \varepsilon^{-j} = \frac{\varepsilon^{\alpha} - 1}{\varepsilon - 1} \varepsilon^{-j}. \tag{10}$$

Для группы вращений, следовательно,

$$\varepsilon_k = \varepsilon^{j-k+1} \tag{11}$$

и характер представления $A'(f_1, \ldots, f_\alpha)$ группы вращений получается подстановкой в (8) значений (11), т. е.

$$\chi_f' = \varepsilon^{-jn} \frac{D(\varepsilon^{h_1}, \varepsilon^{h_2}, \ldots, \varepsilon^{h_\alpha})}{D(\varepsilon^{\alpha-1}, \varepsilon^{\alpha-2}, \ldots, 1)}. \tag{12}$$

При интегрировании по классам группы вращений элемент объема будет [1, 2]:

$$\Delta \bar{\Delta}\, d\varphi = -\frac{(\varepsilon-1)^2}{4\pi\varepsilon} d\varphi, \tag{13}$$

и теорема ортогональности дает

$$N(f)_j = \int_0^{2\pi} \chi_{(f)}' \bar{\chi}_j \, \Delta \bar{\Delta}\, d\varphi.$$

После подстановки сюда выражений (12), (10) при $j=J$ и (13) мы получим под интегралом полином по положительным и отрицательным степеням ε, все члены которого после интегрирования дают нули, за исключением свободного члена, интеграл от которого равен его произведению на 2π.

Таким образом, $N(f)_j$ равняется свободному члену в разложении по степеням ε выражения

$$-\frac{(\varepsilon^{2j+1} - 1)(\varepsilon - 1)}{2\varepsilon^{j+nj+1}} \frac{D(\varepsilon^{h_1}, \varepsilon^{h_2}, \ldots, \varepsilon^{h_\alpha})}{D(\varepsilon^{\alpha-1}, \varepsilon^{\alpha-2}, \ldots, 1)}. \tag{14}$$

Так например, при $n=4$, $j={}^3/_2$ получается следующая классификация возможных состояний:

$$\begin{array}{ll}
A\,(4000) = D_0 + D_2 + D_3 + D_4 + D_6, & a_f = 1 \\
A\,(3100) = 2D_1 + D_2 + 2D_3 + D_4 + D_5, & a_f = 3 \\
A\,(2200) = D_0 + 2D_2 + D_4, & a_f = 2 \\
A\,(2110) = D_1 + D_2 + D_3, & a_f = 3 \\
A\,(1111) = D_0, & a_f = 1
\end{array}$$

Поступило
29 VIII 1947

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] H. Weyl, Gruppentheorie und Quantenmechanik, 2 Aufl., Leipzig, 1931.
[2] H. Weyl, The Classical Groups, Princeton, 1939.