Доклады Академии наук СССР
1974. Том 219, № 3

УДК 539.01+538.1

ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

Б. А. МЕНЬ, член-корреспондент АН СССР Г. И. ЧУФАРОВ

К ВЫЧИСЛЕНИЮ СИММЕТРИЙНЫХ КОЭФФИЦИЕНТОВ

Симметрийные коэффициенты, такие как коэффициенты Клебша — Гордана ([1]), коэффициенты Рака, генеалогические коэффициенты, изоскалярные факторы ([2]) и т. д., нашли широкое применение в квантовомеханических расчетах, в частности в теории ядра ([3]), в теории свободного атома ([4]), теории кристаллического поля и в молекулярной спектроскопии. Имеются многочисленные таблицы такого рода коэффициентов и формулы для их расчетов, однако общей формулы, пригодной для вычисления всех групповых коэффициентов, до сих пор не получено. В настоящей статье даются общие формулы для расчета универсальных симметрийных Σ коэффициентов ([5]) и рассматриваются свойства таких коэффициентов.

Нетрудно понять, что должна существовать формула $\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}$ зависящая только от характеров представлений, входящих в Σ. Причем, эта формула должна быть такой, чтобы выполнялись равенства

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} = \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n}; \tag{1}$$

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} = \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_i''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_i\Gamma_0'\Gamma_1',\ldots,\Gamma_i'} \cdot \Sigma^{\Gamma_i''\Gamma_{i+1}''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_i\Gamma_{i+1}\ldots\Gamma_n\Gamma_i'\Gamma_{i+1}'\ldots\Gamma_n'}. \tag{2}$$

Оказывается, что подходящим инструментом при построении такой формулы являются тройные произведения составных характеров. Определим нижний Σ коэффициент трех цепочек представлений

$$\Gamma_0,\ \Gamma_1, \ldots,\ \Gamma_n;\ \Gamma_0',\ \Gamma_1', \ldots,\ \Gamma_n';\ \Gamma_0'',\ \Gamma_1'', \ldots,\ \Gamma_n'', \tag{3}$$

входящих в Σ коэффициент, следующим образом:

$$\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} = \sum_{g\in G_0}\Bigg[\sum_{\substack{g_0\cdot g_1\cdot\ldots\cdot g_n=g\\ g_i\in G_i}} \chi_{\Gamma_0}(g_0)\cdot\chi_{\Gamma_1}(g_1)\cdot\ldots\cdot\chi_{\Gamma_n}(g_n)\Bigg]\times$$
$$\times\Bigg[\sum_{\substack{g_0'\cdot g_1'\cdot\ldots\cdot g_n'=g\\ g_i'\in G_i}} \chi_{\Gamma_0'}(g_0')\chi_{\Gamma_1'}(g_1')\cdot\ldots\cdot\chi_{\Gamma_n'}(g_n')\Bigg]\times$$
$$\times\Bigg[\sum_{\substack{g_0''\cdot g_1''\cdot\ldots\cdot g_n''=h\\ g_i''\in G_i}} \chi_{\Gamma_0''}(g_0'')\chi_{\Gamma_1''}(g_1'')\cdot\ldots\cdot\chi_{\Gamma_n''}(g_n'')\Bigg] \tag{4}$$

(где Γ_i, Γ_i', Γ_i'' представления группы G_i, причем $G_0\supset G_1\supset\ldots\supset G_n$, при разложении Γ_i, Γ_i', Γ_i'' на $G_{i+1}\Gamma_{i+1}$, Γ_{i+1}', Γ_{i+1}'' встречается ровно один раз и в разложении произведения $\Gamma_0\times\Gamma_0'$ Γ_0'' встречается также один раз). Справедливо равенство

$$\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} = \Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_i\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_i'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_i''} \times$$
$$\times \Sigma_{\Gamma_i\Gamma_{i+1}\ldots\Gamma_n'\Gamma_i'\Gamma_{i+1}'\ldots\Gamma_n'\Gamma_i''\Gamma_{i+1}''\ldots\Gamma_n''} \cdot \frac{1}{|G_i|}. \tag{5}$$

Отметим, что вывод соотношения (5) из элементарной теории характеров получить не удалось. Возможно, что это новое соотношение для характеров, не являющееся следствием из известных соотношений ортогональности. ($|G_i|$ — порядок или объем группы G_i.)

Очевидно также, что

$$\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} = \Sigma_{\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} =$$
$$= \Sigma_{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n}. \tag{6}$$

Таким образом, действительно, функция $\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}$ обладает всем необходимым, чтобы быть важной составной частью формулы для $\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}$. Такую формулу удается получить. ($\overline{\Gamma}$ — комплексно сопряженное к Г.)

$$|\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}| = \tag{7}$$
$$= \left\{\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_1|\cdot|\Gamma_1'|\cdot|\Gamma_1''|\cdot\ldots\cdot|\Gamma_n|\cdot|\Gamma_n'|}{|G_0|\cdot|G_1|^3\cdot\ldots\cdot|G_n|^3}\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''\ldots\overline{\Gamma}_n''}\right\}^{1/2}$$

(где $|\Gamma_i|$ — размерность представления Γ_i, а $|G_i|$ — объем или порядок группы G_i). Из формулы (7) легко вытекает соотношение симметрии для $\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}$:

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} = \left(\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n'|}{|\Gamma_0'|\cdot|\Gamma_n''|}\right)^{1/2}\Sigma^{\overline{\Gamma}_0'\overline{\Gamma}_1'\ldots\overline{\Gamma}_n'}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''\ldots\overline{\Gamma}_n''}. \tag{8}$$

Формула (7) является общей формулой для расчета симметрийных коэффициентов. Она особенно полезна, если все группы, входящие в цепочку $G_0 \supset G_1 \supset \ldots \supset G_n$, конечны. В случае, когда эти группы являются компактными группами Ли, формула (7) приводит к многократному интегрированию по группам цепочки. В случае, когда цепочка состоит всего из двух групп $G_0 \supset G_1$ (наиболее важный случай), формула (7) приобретает следующий вид:

Таблица 1

g	e	(12)	(13)	(23)	(123)	(132)
$B_1(g)$	2	2	−1	−1	−1	−1
$B_2(g)$	2	−2	1	1	−1	−1

$$|\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''}_{\Gamma_0\Gamma_1\Gamma_0'\Gamma_1'}| = \left\{\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_1|\cdot|\Gamma_1'|}{|G_0|\cdot|G_1|^3}\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\Gamma_0'\Gamma_1'\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''}\right\}^{1/2}. \tag{9}$$

Отсюда видно, что изоскалярные факторы пар групп можно вычислять через четырехкратные интегралы по этим группам вида:

$$\int_{G_0} dg \left[\int_{G_1}\chi_{\Gamma_0}(gh^{-1})\chi_{\Gamma_1}(h)\,dh\right]\cdot\left[\int_{G_1}\chi_{\Gamma_0'}(gh^{-1})\chi_{\Gamma_1'}(h)\,dh\right]\times$$
$$\times\left[\int_{G_1}\chi_{\Gamma_0''}(gh^{-1})\chi_{\Gamma_1''}(h)\,dh\right]. \tag{10}$$

Рассмотрим пример. Цепочка групп $\pi_3 \supset \pi_2$ (π_k — симметрическая группа на k символах). Вычислим $\Sigma^{[21][1^2]}_{[21][2][21][1^2]}$, используя формулу (9).

Составим таблицу для значения выражений

$$B_1(g)=\sum_{h\in\pi_2}\chi_{[21]}(gh^{-1})\chi_{[2]}(h),\quad B_2(g)=\sum_{h\in\pi_2}\chi_{[21]}(gh^{-1})\chi_{[1^2]}(h) \tag{11}$$

на элементах группы $g\in\pi_3$. Эти выражения являются составной частью коэффициента $\Sigma_{[21][2][21][1^2][21][1^2]}$ (см. табл. 1).

Согласно (4),

$$\Sigma_{[21][2][21][1^2][21][1^2]}=\sum_{g\in\pi_3}B_1(g)B_2(g)B_2(g)=12, \tag{12}$$

$$|\Sigma_{[21][2][21][1^2]}^{[21][1^2]}|=\left\{\frac{|[21]|\cdot|[2]|\cdot|[1^2]|}{|\pi_3|\cdot|\pi_2|^3}\Sigma_{[21][2][21][1^2][21][1^2]}\right\}^{1/2}=\frac{1}{\sqrt{2}}. \tag{13}$$

Остановимся на вопросе выбора знака перед коэффициентом $\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}$. Нетрудно понять, что каждый такой коэффициент определен с точностью до фазового множителя в связи с тем, что функции неприводимого Γ_n'' подпространства, входящего в унитарный базис Γ_n'' подпространств, могут быть умножены на $e^{i\varphi}$ без изменения условий редукции по цепочке групп и с сохранением унитарности. Это значит, что в матрице перехода, состоящей из Σ коэффициентов, любая строка и любой столбец могут быть умножены на некоторый фазовый множитель. Если условиться, что Σ коэффициенты действительны (возможность выбора всех Σ коэффициентов действительными — открытая проблема), то у любой строки и любого столбца матрицы Σ коэффициентов можно сменить знак. Таким образом, знаки перед Σ коэффициентами следует выбирать так, чтобы матрица перехода была унитарной, но при этом остается произвол, связанный с умножением любой строки и любого столбца матрицы Σ коэффициентов на -1.

Приведенные соображения не исчерпывают полностью вопрос согласованного выбора знака перед Σ коэффициентами. Более подробное рассмотрение будет проведено в специальной статье. Дадим сводку формул, связанных с универсальными групповыми коэффициентами.

$$(\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n g)=\sum_{\substack{g_0\cdot g_1\cdot\ldots\cdot g_n=g\\ g_i\in G_i}}\chi_{\Gamma_0}(g_0)\cdot\chi_{\Gamma_1}(g_1)\cdot\ldots\cdot\chi_{\Gamma_n}(g_n); \tag{A$_1$}$$

$$\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}=$$
$$=\sum_{g\in G_0}(\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n g)(\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n' g)(\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n'' g); \tag{A$_2$}$$

$$\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n''\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}=\Sigma_{\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}=$$
$$=\Sigma_{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n}; \tag{A$_3$}$$

$$\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}=$$
$$=\frac{1}{|G_i|}\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_i\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_i'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_i''}\cdot\Sigma_{\Gamma_i\Gamma_{i+1}\ldots\Gamma_n\Gamma_i'\Gamma_{i+1}'\ldots\Gamma_n'\Gamma_i''\Gamma_{i+1}''\ldots\Gamma_n''}; \tag{A$_4$}$$

$$|\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}|= \tag{A$_5$}$$
$$=\left\{\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_1|\cdot|\Gamma_1'|\cdot|\Gamma_1''|\cdot\ldots\cdot|\Gamma_n|\cdot|\Gamma_n'|}{|G_0|\cdot|G_1|^3\cdot\ldots\cdot|G_n|^3}\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\bar\Gamma_0''\bar\Gamma_1''\ldots\bar\Gamma_n''}\right\}^{1/2};$$

$$|\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''}_{\Gamma_0\Gamma_1\Gamma_0'\Gamma_1'}| = \left\{\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_1|\cdot|\Gamma_1'|}{|G_0|\cdot|G_1|^3}\,\Sigma_{\Gamma_0\Gamma_1\Gamma_0'\Gamma_1'\bar{\Gamma}_0''\bar{\Gamma}_1''}\right\}^{1/2}; \tag{A$_6$}$$

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} =$$

$$= \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n} = \left(\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n|}{|\Gamma_n''|\cdot|\Gamma_0|}\right)^{1/2}\Sigma^{\bar{\Gamma}_0\bar{\Gamma}_1\ldots\bar{\Gamma}_n}_{\bar{\Gamma}_0''\bar{\Gamma}_1''\ldots\bar{\Gamma}_n''\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}; \tag{A$_7$}$$

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''}_{\Gamma_0\Gamma_1\Gamma_0'\Gamma_1'} = \left(\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_1|}{|\Gamma_0|\cdot|\Gamma_1''|}\right)^{1/2}\Sigma^{\bar{\Gamma}_0\bar{\Gamma}_1}_{\bar{\Gamma}_0''\bar{\Gamma}_1''\Gamma_0'\Gamma_1'}; \tag{A$_8$}$$

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} = \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_i''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_i\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_i'}\cdot\Sigma^{\Gamma_i''\Gamma_{i+1}''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_i\Gamma_{i+1}\ldots\Gamma_n\Gamma_i'\Gamma_{i+1}'\ldots\Gamma_n'}; \tag{A$_9$}$$

$$\Sigma^{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} = \left(\frac{1}{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n|\cdot\Gamma_n'|}\right)^{1/2}\Sigma^{\bar{\Gamma}_0''\bar{\Gamma}_1''\ldots\bar{\Gamma}_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}; \tag{A$_{10}$}$$

$$\Sigma^{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} = \Sigma^{\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} =$$

$$= \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n}. \tag{A$_{11}$}$$

Институт металлургии
Уральского научного центра
Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
24 VII 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *Е. Вигнер*, Теория групп, ИЛ, 1961. [2] *G. Racah*, Phys. Rev., v. 61, 537 (1942); v. 62, 438 (1942); v. 63, 367 (1943); v. 76, 1352 (1949). [3] *В. В. Ванагас*, Алгебраические методы в теории ядра, Вильнюс, 1971. [4] *Б. Джадд, Б. Вайборн*, Теория сложных атомных спектров, М., 1973. [5] *Б. А. Мень, Г. И. Чуфаров*, ДАН, т. 219, № 2 (1974).