Доклады Академии наук СССР
1974. Том 219, № 2

УДК 539.01+538.1 ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ

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

К ВОПРОСУ ОБ УНИВЕРСАЛЬНОМ ГРУППОВОМ КОЭФФИЦИЕНТЕ

Использование теоретико-группового формализма оказалось очень плодотворным в ядерной, атомной и молекулярной спектроскопии, в теории элементарных частиц, в теории излучения и квантовой электродинамике. Простой аппарат теории характеров позволил решить ряд важных вопросов, связанных с классификацией уровней, правилами отбора и расщеплением термов. Появление групповых коэффициентов (коэффициентов Клебша — Гордана) ([1–4]) дало возможность проводить конкретные расчеты в теории атомных спектров, а именно: вычислять некоторые сечения, положения уровней, строить волновые функции. Следующим шагом вперед явилась методика, предложенная Рака ([5]). Коэффициенты Рака и генеалогические коэффициенты широко использовались при изучении атомных спектров, в теории ядра, а также в теории молекул. В работе ([5г]) были определены изоскалярные факторы — еще один вид групповых коэффициентов. В дальнейшем эти коэффициенты применялись в ядерной спектроскопии теории свободного атома и теории кристаллического поля.

В настоящее время расчеты матричных элементов квантовомеханических операторов, основанные на аппарате групповых коэффициентов, развились в самостоятельную область исследования, которой посвящены такие монографии, как ([6–8]). Известен ряд групповых коэффициентов, каждый из которых имеет свою область применимости. Эти коэффициенты затабулированы и их свойства хорошо известны. Однако во многих случаях развитый аппарат оказывается недостаточным. Настоящая статья посвящена вопросу универсального группового коэффициента. Такой коэффициент включает в себя все перечисленные, но не сводится к ним, а является более общим.

Пусть G — группа, Γ — ее унитарное неприводимое представление. Известно, что выбор неприводимого подпространства в Γ-компоненте, содержащей m представлений Γ эквивалентен выбору вектора в m-мерном векторном пространстве. Эту эквивалентность проще всего получить, сопоставляя каждому неприводимому Γ-подпространству функцию, преобразующуюся по первой строке представления Γ. Так что в Γ-компоненте можно строить базисы неприводимых Γ-подпространств и определять матрицы перехода между базисами. Можно рассмотреть и скалярное произведение двух неприводимых Γ-подпространств, определяя его как скалярное произведение функций, преобразующихся по первой строке (известно, что такое скалярное произведение не зависит от строки). В связи с этим естественно возникает понятие унитарных базисов Γ-подпространств и унитарных матриц перехода между ними.

Пусть $G_0 \supset G_1 \supset \ldots \supset G_n = G$ — некоторая цепочка групп, оканчивающаяся на G. Обозначим через L_0 пространство неприводимого представления Γ_0, а через L_0' пространство неприводимого представления Γ_0' группы G_0. Исследуем Γ-компоненту неприводимого представления $\Gamma = \Gamma_n''$ группы G в пространстве $L_0 \otimes L_0'$. В ней можно построить два следующих базиса $\Gamma = \Gamma_n''$ подпространств, соответствующих приведению $L_0 \otimes L_0'$ на двух различных цепочках групп (Γ_i, Γ_i' Γ_i'' — неприводимые представления группы G_i):

$$G_0 \times G_0 \supset G_1 \times G_1 \supset \ldots \supset G \times G \supset G$$
$$\Gamma_0 \# \Gamma_0' \quad \Gamma_1 \# \Gamma_1' \quad \Gamma_n \# \Gamma_n' \Gamma_n''; \tag{1}$$

$$G_0 \times G_0 \supset G_0 \supset \ldots \supset G_{n-1} \supset G$$
$$\Gamma_0 \# \Gamma_0' \quad \Gamma_0'' \quad \Gamma_{n-1} \Gamma_n'' \tag{2}$$

(считаем, что повторяющихся представлений при приведении по обеим цепочкам не возникает). Коэффициенты, составляющие матрицу перехода между этими двумя унитарными базисами — это и есть универсальные групповые коэффициенты. Более конкретно, $\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}$ — это скалярное произведение между двумя $\Gamma=\Gamma_n''$ подпространствами, определенными редукциями (1) и (2). Нетрудно видеть, что в указанную общую схему укладываются коэффициенты Клебша — Гордана (цепочка групп $R_3 \supset R_2$), коэффициенты Рака (цепочка групп $R_3 \times R_3 \supset R_3$), генеалогические коэффициенты (цепочка групп $U_{2L+1} \supset R_3$), изоскалярные A/B факторы (цепочка групп $A \supset B$) (R_3 — группа вращений, R_2 — группа поворотов вокруг оси z, U_{2L+1} — группа унитарных матриц размерности $(2L+1)\times(2L+1)$). Справедливо следующее свойство симметрии Σ коэффициентов, обобщающие хорошо известные аналогичные свойства коэффициентов Клебша — Гордана:

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} = \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\,\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n} = \left(\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n|}{|\Gamma_0|\cdot|\Gamma_n''|}\right)^{1/2} \Sigma^{\overline{\Gamma}_0\overline{\Gamma}_1\ldots\overline{\Gamma}_n}_{\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''\ldots\overline{\Gamma}_n''\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} =$$
$$= \left(\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n|}{|\Gamma_0|\cdot|\Gamma_n''|}\right)^{1/2} \Sigma^{\overline{\Gamma}_0\overline{\Gamma}_1\ldots\overline{\Gamma}_n}_{\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\,\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''\ldots\overline{\Gamma}_n''} = \left(\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n'|}{|\Gamma_0'|\cdot|\Gamma_n''|}\right)^{1/2} \Sigma^{\overline{\Gamma}_0'\overline{\Gamma}_1'\ldots\overline{\Gamma}_n'}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\,\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''\ldots\overline{\Gamma}_n''} =$$
$$= \left(\frac{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n'|}{|\Gamma_0'|\cdot|\Gamma_n''|}\right)^{1/2} \Sigma^{\overline{\Gamma}_0'\overline{\Gamma}_1'\ldots\overline{\Gamma}_n'}_{\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''\ldots\overline{\Gamma}_n''\,\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n}, \tag{3}$$

$|\Gamma|$ — размерность Γ, $\overline{\Gamma}$ — комплексно сопряженное к Γ.

В связи с равенствами (3) появляется возможность обобщить понятие $3j$ символа классической теории углового момента. Введем определение универсального верхнего группового коэффициента

$$\Sigma^{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''} = \left(\frac{1}{|\Gamma_0''|\cdot|\Gamma_n|\cdot|\Gamma_n'|}\right)^{1/2} \Sigma^{\overline{\Gamma}_0''\overline{\Gamma}_1''\ldots\overline{\Gamma}_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} \tag{4}$$

$\Sigma^{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}$ коэффициент обладает следующими свойствами симметрии:

$$\Sigma^{\Gamma_0\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\ldots\Gamma_n''} = \Sigma^{\Gamma_0\ldots\Gamma_n\Gamma_0''\ldots\Gamma_n''\Gamma_0'\ldots\Gamma_n'} =$$
$$= \Sigma^{\Gamma_0'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\ldots\Gamma_n\Gamma_0''\ldots\Gamma_n''} = \Sigma^{\Gamma_0'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0''\ldots\Gamma_n''\Gamma_0\ldots\Gamma_n} =$$
$$= \Sigma^{\Gamma_0''\ldots\Gamma_n''\Gamma_0\ldots\Gamma_n\Gamma_0'\ldots\Gamma_n'} = \Sigma^{\Gamma_0''\ldots\Gamma_n''\Gamma_0'\ldots\Gamma_n'\Gamma_0\ldots\Gamma_n} \tag{5}$$

Это наиболее симметричная форма универсального группового коэффициента.

Отметим еще следующее свойство коэффициентов

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} \cdot \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'} =$$
$$= \Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_i''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_i\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_i'} \cdot \Sigma^{\Gamma_i''\Gamma_{i+1}''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_i\Gamma_{i+1}\ldots\Gamma_n\,\Gamma_i'\Gamma_{i+1}'\ldots\Gamma_n'}. \tag{6}$$

Равенство (6) позволяет свести проблему вычисления Σ коэффициентов цепочки групп к вычислению Σ коэффициентов пары групп.

Существуют различные методы вычисления групповых коэффициентов. Для некоторых из них имеются общие формулы [9] (коэффициенты Клебша — Гордана, коэффициенты Рака, 3 nj символы). Существует рекурентная процедура вычисления генеалогических коэффициентов, основанная на формуле Редмонда [10]. Интересный метод, использующий операторы Казимира, был предложен в книге Джадда [11] для вычисления изоскалярных факторов. Общий инфинитезимальный подход к проблеме построения коэффициентов Клебша — Гордана групп Ли был изложен в работе [12].

Предложим здесь следующие соображения, помогающие вычислять универсальные Σ коэффициенты. В некоторых случаях значение соответствующего Σ коэффициента удается получить, используя унитарность матрицы Σ коэффициентов, равенство (3) и следующее элементарное условие:

$$\Sigma^{\Gamma_0''\Gamma_1''\ldots\Gamma_n''}_{\Gamma_0\Gamma_1\ldots\Gamma_n\,\Gamma_0'\Gamma_1'\ldots\Gamma_n'}=1 \tag{7}$$

если Γ_0 или Γ_0' одномерные представления. Рассмотрим пример, имеющий отношение к исследованию конфигураций эквивалентных электронов p^n. Цепочка групп $U_3\subset R_3$. $\Gamma_0=\{2\}$, $\Gamma_0'=\{22\}$ — неприводимые представления группы U_3. $\Gamma_0=(0)$ — единичное представление группы вращений. Поскольку $\{2\}\times\{22\}$ при разложении на R_3 дает $2(0)+\ldots$ матрица Σ коэффициентов имеет размерность 2×2. При редукции по цепочке $U_3\times U_3\supset\supset R_3\times R_3\supset R_3$ имеем унитарный базис, характеризующийся представлениями $(2)\#(2)$ * и $(0)\#(0)$ группы R_3. При редукции по цепочке $U_3\times U_3\supset\supset U_3\supset R_3$ унитарный базис характеризуется представлениями $\{0\}$, $\{42\}$ группы R_3. Матрица перехода имеет вид

$$\begin{array}{cc} & \begin{array}{cc}\{0\} \qquad\qquad & \qquad\qquad \{42\}\end{array} \\ (0)\#(0) & \begin{pmatrix} \Sigma^{\{0\}(0)}_{\{2\}(0)\{22\}(0)} & \Sigma^{\{42\}(0)}_{\{2\}(0)\{22\}(0)} \\ \Sigma^{\{0\}(0)}_{\{2\}(2)\{22\}(2)} & \Sigma^{\{42\}(0)}_{\{2\}(2)\{22\}(2)} \end{pmatrix} \end{array}, \tag{8}$$

$$\Sigma^{\{0\}(0)}_{\{2\}(0)\{22\}(0)}=\left(\frac{|\{0\}|\cdot|(0)|}{|\{22\}|\cdot|(0)|}\right)^{1/2}\Sigma^{\{2\}(0)}_{\{2\}(0)\{0\}(0)}=\frac{1}{\sqrt{6}}. \tag{9}$$

Остальные Σ находятся из соображений унитарности матрицы (8)

$$\Sigma^{\{0\}(0)}_{\{2\}(2)\{22\}(2)}=\Sigma^{\{42\}(0)}_{\{2\}(0)\{22\}(0)}=\frac{\sqrt{5}}{\sqrt{6}},\qquad \Sigma^{\{42\}\{0\}}_{\{2\}(2)\{22\}(2)}=-\frac{1}{\sqrt{6}} \tag{10}$$

Заметим, что можно развить рекуррентный метод для вычисления Σ коэффициентов.

Институт металлургии
Уральского научного центра
Академии наук СССР
Свердловск

Поступило
24 VII 1974

* (2) — пятимерное неприводимое представление группы вращений.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *Э. Картан,* Теория спиноров, ИЛ, 1947. [2] *Б. Л. Ван-дер-Варден,* Метод теории групп в квантовой механике, Харьков, 1938. [3] *Е. Вигнер,* Теория групп, ИЛ, 1961. [4] *Е. Кондон, Г. Шортли,* Теория атомных спектров, ИЛ, 1949. [5] *G. Racah,* Phys. Rev., а) v. 61, 537 (1942); б) v. 62, 438 (1942); в) v. 63, 367 (1943); г) v. 76, 1352 (1949). [6] *А. П. Юцис, А. А. Бандзайтис,* Теория момента количества движения в квантовой механике, Вильнюс, 1965. [7] *А. П. Юцис, А. Ю. Савукинас,* Математические основы теории атома, Вильнюс, 1972. [8] *И. Г. Каплан,* Симметрия многоэлектронных систем, «Наука», М., 1969. [9] *А. П. Юцис, И. Б. Левинсон, В. В. Ванагас,* Математический аппарат теории момента количества движения, Вильнюс, 1960. [10] *P. I. Redmond,* Proc. Roy. Soc., v. A222, 84 (1954). [11] *Б. Р. Джадд, Б. Г. Вайборн,* Теория сложных атомных спектров, М., 1973. [12] *Л. А. Шелепин,* Исчисление коэффициентов Клебша – Гордана и его физические приложения, «Наука», 1973; Тр. Физич. инст. им. П. Н. Лебедева АН СССР, т. 70, 3 (1973).