

А. И. Фет

## ГРУППА СИММЕТРИИ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

### ВВЕДЕНИЕ

В этой работе излагается групповая классификация химических элементов, рассматриваемых как состояния единой квантовой системы. Атомы различных элементов изображаются векторами пространства, где определено неприводимое унитарное представление некоторой группы симметрии, так что различные элементы переводятся друг в друга действием операторов этой группы. Такой подход принципиально отличается от традиционного применения теории групп в атомной физике, при котором группа симметрии переводит друг в друга различные возбужденные состояния одного и того же атома, и следует совсем другому образцу — описанию тяжелых частиц (адронов) представлениями унитарных групп, предложенному в 60-х г. в независимых работах Гелл-Манна и Неемана, а затем развитому Окубо, Гюрси и Радикати, Пайсом и другими авторами.

В 1970 г. Ю. Б. Румер и автор опубликовали книгу под названием «Теория унитарной симметрии», посвященную систематическому изложению этого круга идей. В процессе работы над книгой Ю. Б. Румер пришел к мысли применить аналогичный подход к системе химических элементов. После преодоления некоторых трудностей, связанных с таким описанием, мы изложили групповую систематику элементов в опубликованной в 1971 г. работе [11]. Уже в этой работе подчеркивалась принятая нами точка зрения, согласно которой рассматриваемая симметрия относится к атомам в целом, а не только к электронным оболочкам. В качестве группы симметрии была взята двулистная накрывающая группы  $SO(4)$ , но пространство представления оказалось связанным с известным представлением конформной группы  $SO(4, 2)$ . Соответствующее расширение группы симметрии было выполнено Б. Г. Конопельченко в 1972 г. [5]. В том же году появились независимые работы Барута [18] и Новаро и Баррондо [30], авторы которых рассматривали описываемую симметрию с точки зрения электронных оболочек.

Отчетливое отделение симметрии элементов от традиционной оболочечной модели способствовало более ясному пониманию полученной классификации и, в частности, позволило мне предложить в 1974 г. групповое описание химического сродства [14, 15], а в 1979 г. — массовую формулу для атомных весов [16, 21, 22]. В процессе уточнения классификации элементов оказалось, что она обнаруживает некоторые закономерности изменения свойств элементов, ранее, по-видимому, не замеченные. Оказалось, что каждое из известных  $p$ -,  $d$ - и  $f$ -семейств элементов отчетливо делится на два подсемейства с разными законами изменения свойств. Сравнение этих результатов с экспериментальными данными было впервые выполнено В. М. Бяковым [20], а впоследствии, на более обширном материале, Н. И. Сорокиным.

Изложение описанного метода в журнальных статьях вряд ли можно считать доступным для читателей, не имеющих достаточного опыта работы с группами Ли. Между тем, физики и химики, знакомые с квантовой механикой, обычно встречаются лишь с представлениями группы вращений трехмерного пространства, в духе работ Вигнера и Вейля, выполненных в конце 20-х гг. Я поставил себе целью написать обзор этого

материала, доступный для всех заинтересованных читателей. В связи с этим возникли значительные трудности, поскольку существующая литература о группах Ли никоим образом не облегчает знакомства с идеями симметрии, столь важными в физике последних десятилетий. Она делится на систематические трактаты, предназначенные для профессиональных математиков, и на руководства для физиков, либо имитирующие эти трактаты, либо предлагающие некоторый ассортимент приложений к разнообразным частным вопросам. Я попытался изложить основные понятия о группах и алгебрах Ли, ограничившись минимальным материалом, необходимым для изучения симметрии элементарных частиц, и исходя из того знания простейших задач квантовой механики, какое можно предполагать у физика или химика с обычным профессиональным образованием. Все, что касается теории групп — даже определение группы, — излагается с самого начала, но желательно все же, чтобы у читателя было некоторое представление о применении группы вращений к классификации энергетических спектров атомов и молекул. Групповые методы вводятся на основе конкретного физического материала. В особенности это относится к понятиям обычного и унитарного спина, физические предпосылки которых изложены достаточно подробно. Таким образом, принятое нами изложение является не систематическим и дедуктивным, а, скорее, генетическим и индуктивным, т. е. главное внимание уделяется не формальной точности построений, а зарождению и смыслу понятий. В частности, математическая строгость соблюдается лишь там, где это возможно. Приводятся постоянно применяемые теоремы, смысл их подробно объясняется, но доказательства, как правило, опускаются, так же как и громоздкие вычисления.

Первая глава содержит введение в групповые методы квантовой механики и начинается с традиционных применений группы вращений к атому водорода. Затем объясняется, каким образом можно получить наблюдаемые, описывающие систему, из ее группы симметрии. Тем самым группы симметрии занимают место, принадлежащее им в современной физике: квантовая система задается представлением группы симметрии. В частности, выясняется, что гамильтониан системы является оператором Казимира ее группы симметрии. Квантовые числа, нумерующие энергетические состояния системы, оказываются собственными значениями набора перестановочных операторов, представляющих некоторые генераторы алгебры Ли группы симметрии. В этой же главе вводятся основные понятия о группах и алгебрах Ли, к которым читатель уже подготовлен предыдущим физическим материалом. Каждое понятие иллюстрируется примерами, поясняющими его необходимость. Дальше определяется понятие представления группы и показывается, каким образом из физических соображений мотивируется особое значение неприводимых и унитарных представлений.

Во второй главе вводится понятие спина, причем мы исходим из первоначального, по существу группового подхода Паули. Квантовая механика спина отделяется затем от пространственно-временной трактовки системы и рассматривается как теория систем с конечномерными пространствами состояний, возникающих из представлений группы унитарных матриц второго порядка  $SU(2)$ . Отсюда мы переходим к изотопическому спину, описываемому тем же аппаратом. Когда идея изотопического спина была предложена Гейзенбергом в 1934 г., поддерживающие ее доводы казались неубедительными, и она встретила сопротивление некоторых физиков (особенно Л. Д. Ландау и его школы). Но именно эта идея легла в основу методов классификации частиц, на которых основывается наш подход. Мы переходим затем к унитарному спину, т. е. к симметриям групп  $SU(3)$  и  $SU(6)$ . Физическая сторона дела излагается здесь достаточно подробно, но доказательства алгебраических результатов опускаются (читатель может найти их, например, в нашей книге [12]). Особое место занимает в этой главе массовая формула Гелл-

Манна — Окубо, которая иллюстрируется примерами октета и декуплета барионов. По образцу этой формулы мы строим дальше формулу для атомных весов. В заключение в виде некоторого синтеза излагаются общие принципы классификации частиц, вытекающие из рассмотренных частных случаев. Эти принципы, как видно из дальнейшего, соблюдаются в интересующем нас случае симметрии химических элементов.

Третья глава содержит математический материал, который трудно найти в учебной литературе. Определяется конформная группа  $SO(4, 2)$ , введенная в физику Дираком в 1937 г. и ставшая с тех пор одной из фундаментальных групп симметрии, возникающей в самых различных ситуациях. Например, в 1965 г. она была применена И. А. Малкиным и В. И. Манько к описанию энергетического спектра водорода [8]. Дальше приводятся некоторые математические результаты о конформной группе и одном ее специальном представлении. Читатель, готовый принять на веру эти факты, может не вникать в подробности и возвращаться к ним, когда они понадобятся в следующих главах.

Из конформной группы строится основная группа симметрии нашей теории и цепочка ее подгрупп, служащая для классификации элементов. На этой симметрии основывается объяснение эмпирических чисел Маделунга, предложенных им еще в 20-е гг. для нумерации элементов и не имевших теоретического обоснования. Отметим, что наша симметрия не тождественна предложенной другими авторами, а квантовые числа ее представляют усовершенствование чисел Маделунга. В этой же главе содержится массовая формула для атомных весов, поддерживающая точку зрения работы [11], согласно которой конформная симметрия относится не только к электронным оболочкам, но к атомам в целом.

В четвертой главе наш подход применяется к классификации элементов по их химическим свойствам и, в частности, выясняется природа менделеевских гомологических рядов с точки зрения предлагаемой симметрии. В заключение приводятся графики, позволяющие сравнить с опытными данными некоторые выводы теории.

В работе над этими вопросами мне оказали большую помощь С. Ю. Прищепионок, весьма стимулировавший мое понимание предмета обсуждением алгебраического аппарата, и Н. И. Сорокин, проделавший сопоставление с экспериментальным материалом. В частности, Н. И. Сорокин заметил, что предлагаемая групповая классификация хорошо описывает те свойства элементов, с которыми связана их химическая активность. Эта точка зрения получила подтверждение в работе Г. В. Жувикина и Р. Хефферлина [3], где с помощью нашего группового подхода объясняются закономерности свойств двухатомных молекул, систематически изученные в ряде работ Р. Хефферлина и его сотрудников [26—28].

## Глава 1

### СИММЕТРИИ КВАНТОВОЙ СИСТЕМЫ

#### 1.1. Группа симметрии квантовой системы

Состояние частицы описывается в квантовой механике волновой функцией  $\psi$ , зависящей от координат  $x, y, z$  и времени  $t$ . Функция  $\psi$  принимает комплексные значения и предполагается не равной тождественно нулю. Поскольку в данной работе зависимость состояния от времени не рассматривается, аргумент  $t$  опускается. Кроме того, в этой главе не учитывается спин, так что волновые функции имеют единственную компоненту. Для данного состояния  $\psi$  определена лишь с точностью до множителя, т. е.  $\psi$  и  $\lambda\psi$  ( $\lambda \neq 0$ ) задают одно и то же состояние.

Согласно «вероятностному истолкованию» волновой функции, вероятность нахождения частицы в некоторой области пропорциональна интегралу от  $|\psi|^2$  по этой области. Поскольку для всего пространства такая вероятность равна единице, должен существовать конечный интеграл от  $|\psi|^2$  по всему пространству. Как можно показать, все функции с интегрируемым квадратом образуют *линейное пространство*, т. е. линейные комбинации таких функций (с комплексными коэффициентами) также интегрируемы в квадрате. По аналогии с векторами элементарной геометрии, объекты, которые можно складывать и умножать на числа, часто называются векторами; поэтому  $\psi$ -функция называется также *вектором состояния* описываемой квантовой системы. Линейность пространства волновых функций равносильна так называемому «принципу суперпозиции», согласно которому суперпозиция физически возможных состояний есть опять физически возможное состояние квантовой системы<sup>\*)</sup>.

В пространстве волновых функций вводится *скалярное произведение*

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \iiint \varphi^*(x, y, z) \psi(x, y, z) dV. \quad (1.1.1)$$

Можно доказать, что интеграл (1) конечен для функций,  $\varphi$ ,  $\psi$ , интегрируемых в квадрате. Линейное пространство со скалярным произведением называется *гильбертовым пространством*. Обозначим гильбертово пространство волновых функций через  $\mathfrak{H}$ .

Предполагается, что состояния любой квантовой системы описываются векторами некоторого гильбертова пространства. При этом векторы могут иметь разную природу: они могут быть двух- или четырехкомпонентными волновыми функциями, функциями от импульсов и т. д. Но, какова бы ни была математическая запись векторов состояния, они должны составлять гильбертово пространство, т. е. для них должны быть определены операции сложения, умножения на комплексные числа и скалярного умножения, обладающие обычными алгебраическими свойствами.

В пространстве векторов состояния системы обычно действует группа операторов, задающая *симметрию* системы. Понятие симметрии применяется в двух разных смыслах, различие которых следует подчеркнуть. В первом смысле симметриями системы называются преобразования, переводящие некоторое заданное состояние системы в **то же** состояние, как, например, определенные пространственные вращения переводят куб из данного положения в то же положение. Во втором смысле преобразования симметрии — это преобразования, переводящие любое состояние системы в *другие* физически возможные состояния, как, например, всевозможные вращения куба переводят его в разные положения, не обязательно совпадающие с исходным. Мы будем применять понятие симметрии только в этом последнем смысле. Система с большей симметрией — это система, возможные состояния которой допускают большую группу преобразований.

Напомним общее понятие группы. Множество  $G$  с элементами  $g, g_1, g_2, g_3, \dots$  образует *группу*, если на нем определено умножение  $g_1 \cdot g_2$ , обладающее следующими свойствами: (1) ассоциативность:  $(g_1 \cdot g_2) \cdot g_3 = g_1 \cdot (g_2 \cdot g_3)$ ; (2) существование единицы: в  $G$  существует один и только один такой элемент  $e$ , что  $g \cdot e = e \cdot g = g$  для всех  $g$ ; (3) существование обратных элементов: для любого  $g$  существует один и только один такой элемент  $g^{-1}$ , что  $g \cdot g^{-1} = g^{-1} \cdot g = e$ .

Чаще всего встречаются группы преобразований (или операторов, что одно и то же). *Преобразованием* пространства  $R$  называется закон, сопоставляющий каждой точке  $R$  другую точку, причем разным точкам

<sup>\*)</sup> Как мы увидим в дальнейшем, в более сложных случаях этот принцип должен быть подвергнут некоторым ограничениям.

соответствуют разные, и каждая точка соответствует некоторой точке. Если  $T$  — преобразование пространства  $R$ , то существует однозначно определенное обратное преобразование  $T^{-1}$ , сопоставляющее каждой точке  $x$  ту точку  $y$ , для которой  $Ty = x$ . Произведение преобразований определяется следующим образом. Пусть  $T_1, T_2$  — преобразования пространства  $R$ . Тогда  $T_3$  называется их *произведением* (и обозначается  $T_1T_2$ ), если  $T_3$  получается последовательным применением  $T_2, T_1$ :  $T_3x = T_1(T_2x)$ . Примерами преобразований являются вращения обычного пространства  $R(3)$  вокруг неподвижной точки; параллельные сдвиги этого пространства; движения  $R(3)$ , получаемые последовательным выполнением вращения и сдвига. Легко проверить, что для преобразований всегда выполняется ассоциативность: если  $T_3x = y, T_2y = z, T_1z = u$ , то  $(T_1T_2)T_3x = (T_1T_2)y = T_1(T_2y) = T_1z = u, T_1(T_2T_3)x = T_1(T_2(T_3x)) = u$ . Поэтому множество преобразований  $G$  является группой, если оно обладает следующими свойствами: вместе с  $T_1, T_2$  в  $G$  входит  $T_1 \cdot T_2$ ; в  $G$  входит тождественное преобразование  $1$ , переводящее каждую точку в себя; вместе с  $T$  в  $G$  входит  $T^{-1}$ .

Например, вращения  $R(3)$  образуют группу  $O(3)$  (от Orthogonal); полагая  $x^1 = x, x^2 = y, x^3 = z$ , их можно описать в декартовых координатах уравнениями

$$x'^i = \sum_{j=1}^3 o_j^i x^j \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1.1.2)$$

или  $x' = Ox$ , где  $O = (o_j^i)$  — ортогональная матрица третьего порядка. Если ограничиться преобразованиями с определителем  $+1$ , то получается подгруппа  $SO(3)$  (от Special Orthogonal).

Сдвиги в  $R(3)$  образуют группу  $D(3)$ , описываемую уравнениями

$$x'^i = x^i + a^i \quad (i = 1, 2, 3), \quad (1.1.3)$$

или  $x' = x + a$ . Движения в  $R(3)$  образуют группу  $M(3)$ , описываемую уравнениями

$$x'^i = \sum_{j=1}^3 o_j^i x^j + a^i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1.1.4)$$

или  $x' = Ox + a$ , с ортогональной матрицей  $(o_j^i)$ .

Если преобразование действует в линейном пространстве и линейно, т. е.  $T(x+y) = Tx + Ty$  для любых  $x$  и  $y$ , и  $T(\lambda x) = \lambda Tx$  для любого комплексного числа  $\lambda$ , оно называется *линейным оператором*. Оказывается, что каждое вращение  $O$  трехмерного пространства  $R(3)$  определяет линейный оператор в гильбертовом пространстве волновых функций. Представим себе, что квантовая система, находящаяся в состоянии  $\psi$ , подвергается вращению  $O$  и переходит в состояние  $\psi'$ . Пусть при этом точка  $(x, y, z)$  и малый объем  $dV$ , содержащий эту точку, переходят в точку  $(x', y', z')$  и объем  $dV' = dV$ . В силу изотропности пространства вероятность нахождения системы в объеме  $dV$  до вращения должна быть равна вероятности нахождения ее в объеме  $dV'$  после вращения, т. е., вследствие вероятностного истолкования волновой функции,  $|\psi'(x', y', z')| = |\psi(x, y, z)|$ . Простейший способ удовлетворить этому требованию состоит в том, чтобы положить

$$\psi'(x', y', z') = \psi(x, y, z). \quad (1.1.5)$$

Мы примем (5) за общий закон преобразования волновых функций при вращениях.

Мы вывели этот закон, пользуясь для описания *разных* состояний квантовой системы (до и после вращения) одной и той же системой координат  $(x, y, z)$ , от которых зависят обе волновые функции  $\psi(x, y, z)$ ,  $\psi'(x, y, z)$ . При этом  $(x', y', z')$  суть координаты другой точки в той же

системе координат. Такая точка зрения на закон преобразования называется *активной*.

Возможна иная точка зрения на формулу (5), при которой считается, что  $\psi(x, y, z)$  и  $\psi'(x', y', z')$  изображают *одно и то же* состояние квантовой системы, но в разных системах координат. Во многих вопросах физики такая точка зрения, называемая *пассивной*, эквивалентна предыдущей. Но в более сложных ситуациях, когда векторы состояния системы связаны не с пространственно-временным описанием, а с «внутренними степенями свободы», уже нельзя пользоваться соображениями, относящимися к «системам отсчета». Так как мы заинтересованы именно в таких вопросах, то будем всегда придерживаться активной точки зрения, т. е. считать, что преобразуются состояния системы.

Чтобы найти вид функции  $\psi'(x, y, z)$ , заменим в (5) точку  $x'$  на  $Ox$ , а затем подставим в уравнение  $\psi'(Ox) = \psi(x)$  вместо  $x$  ее прообраз  $O^{-1}x$ . Получаем

$$\psi'(x) = \psi(O^{-1}x), \quad (1.1.6)$$

или, подробнее,

$$\psi'(x, y, z) = \psi(o_{11}^{-1}x + o_{12}^{-1}y + o_{13}^{-1}z, \quad (1.1.7) \\ o_{21}^{-1}x + o_{22}^{-1}y + o_{23}^{-1}z, \quad o_{31}^{-1}x + o_{32}^{-1}y + o_{33}^{-1}z).$$

Преобразование волновой функции  $\psi$  в волновую функцию  $\psi'$ , заданное формулой (6) или (7), задает оператор  $T_O$  в пространстве  $\mathfrak{R}$ , зависящий от вращения  $O$ . Легко проверить, что операторы  $T_O$  линейны.

Соответствие  $O \rightarrow T_O$  обладает следующими свойствами: (1) если  $O_3 = O_1 \cdot O_2$ , то  $T_{O_3} = T_{O_1} \cdot T_{O_2}$ ; (2)  $T_e = 1$  (где 1 означает единичный оператор в  $\mathfrak{R}$ ); (3)  $T_{O^{-1}} = (T_O)^{-1}$ . Таким образом, операторы, изображающие в пространстве  $\mathfrak{R}$  вращения пространства  $R(3)$ , воспроизводят алгебраические соотношения между вращениями. Эта конструкция приводит к общему понятию *линейного представления группы*, очень важному для физики.

Пусть  $G$  — группа, элементам которой  $g$  поставлены в соответствие линейные операторы  $T_g$ , действующие в линейном пространстве  $\mathfrak{L}$ , таким образом, что  $T_{g_1 g_2} = T_{g_1} T_{g_2}$  для всех  $g_1, g_2$ ,  $T_e = 1$  и  $T_{g^{-1}} = (T_g)^{-1}$  для всех  $g$ . Тогда соответствие  $g \rightarrow T_g$  называется *представлением группы  $G$  в пространстве  $\mathfrak{L}$* . Часто встречается случай, когда разным элементам  $g$  соответствуют разные операторы  $T_g$ . Тогда представление  $\{T_g\}$  называется *точным*. В этом случае между группой  $G$  и группой представляющих ее операторов  $\{T_g\}$  имеется взаимно-однозначное соответствие, сохраняющее операцию умножения, т. е. эти группы *изоморфны*.

Аналогично представлению (6) строится представление большей группы — группы движения пространства  $M(3)$ . Для движения  $x' = Ox + a$  обратное движение есть  $x = O^{-1}(x' - a)$  и так же, как (6), получается формула представления

$$\psi'(x) = \psi(O^{-1}(x - a)). \quad (1.1.8)$$

Для подгруппы сдвигов  $D(3)$  группы движений получаем представление, в котором сдвигу  $x' = x + a$  соответствует оператор

$$\psi'(x) = \psi(x - a). \quad (1.1.9)$$

Можно показать, что представления (6), (8) точны.

Воздействия, не учитываемые в квантовой теории одной частицы, могут вызвать переход системы из состояния  $\phi$  в состояние  $\psi$ . Вероятность такого перехода принимается равной  $|\langle \phi | \psi \rangle|^2$ . При описанных выше кинематических преобразованиях эта вероятность должна сохраняться, ввиду изотропности и однородности пространства, так что для операторов преобразований  $T_O$  должно быть  $|\langle T_O \phi | T_O \psi \rangle| = |\langle \phi | \psi \rangle|$ . Простейший способ удовлетворить этому требованию состоит в том, чтобы

положить  $\langle T_0 \phi | T_0 \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle$ . Это приводит к следующему определению. Линейное представление группы  $G$  называется *унитарным*, если для любого оператора представления  $T_g$  и любых векторов гильбертова пространства представления  $\phi, \psi$  справедливо равенство

$$\langle T_g \phi | T_g \psi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle. \quad (1.1.10)$$

Легко проверить, что описанные выше представления унитарны.

## 1.2. Получение наблюдаемых из групп симметрии

До сих пор мы занимались кинематикой квантовой системы, т. е. описанием ее возможных состояний и групп симметрии, связывающих эти состояния. Построение динамики в ряде важных случаев осуществляется с помощью «принципа соответствия», примененного к системам, имеющим «классический предел». Из принципа соответствия получается набор *наблюдаемых* (или в старой терминологии, «физических величин») квантовой теории. Так, в квантовой теории одной частицы классическим наблюдаемым  $x, y, z$  ставятся в соответствие операторы умножения  $\psi$ -функций на  $x, y, z$ , а любой функции  $f(x, y, z)$  — оператор умножения на эту функцию. Классическим импульсам  $p_x, p_y, p_z$  ставятся в соответствие операторы дифференцирования по координатам  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$ , действующие на  $\psi$ -функции, а функциям от  $p_x, p_y, p_z$  — соответствующие функции от этих операторов: например, классической кинетической энергии  $\frac{1}{2m}(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)$  соответствует такая же функция от операторов импульса. Из классического выражения энергии электрона в кулоновском поле  $p^2/2m - e^2/r$  получается квантовый гамильтониан  $-(\hbar^2/2m) \times \Delta - e^2/r$ . Если гамильтониан уже известен, интегрирование уравнения Шредингера в некоторых случаях облегчается использованием соображений симметрии, или же такие соображения позволяют установить некоторые качественные свойства энергетического спектра. Например, для сферически симметричного потенциала общего вида может оказаться невозможным вычисление собственных значений и собственных функций, но, зная размерности неприводимых подпространств группы  $SO(3)$ , можно найти кратности собственных значений; при наложении магнитного поля сферическая симметрия нарушается, и происходит расщепление энергетических уровней в соответствии с размерностями неприводимых представлений группы симметрии. Таким образом, в традиционном изложении квантовой механики группы симметрии имеют *служебное* значение, как средство исследования динамических уравнений, полученных с помощью принципа соответствия.

Однако такой способ построения наблюдаемых, в том числе гамильтонианов, применим лишь к некоторым простейшим квантовым системам. Уже спин электрона не может быть рассмотрен таким образом, так как не имеет классического аналога. Тем более не поддаются трактовке с помощью принципа соответствия квантовые системы, с которыми мы сталкиваемся в теории элементарных частиц — такие, как «изотопический мультиплет» или «унитарный мультиплет» (например, «нуклон», «октет» или «декуплет»). Для построения их квантовомеханических моделей приходится прибегнуть к другому методу, в котором сначала угадывается группа симметрии системы, а затем уже из группы симметрии выводятся описывающие поведение системы наблюдаемых, т. е. некоторый набор операторов, действующих на ее векторы состояния. При таком подходе *первичным* объектом становится *группа симметрии*, а наблюдаемые появляются уже во вторую очередь, как производное понятие от группы симметрии.

В интересующих нас случаях группы симметрии представляют собой так называемые *группы Ли*, элементы которых зависят от непрерывно

меняющихся параметров. Так, например, вращения определяются тремя эйлеровыми углами, сдвиги — вектором сдвига, т. е. тремя его компонентами. Для физики особенно важны *однопараметрические подгруппы* таких групп, т. е. подгруппы, описываемые изменением одного параметра. Как мы увидим, эти подгруппы порождают наблюдаемые квантовой системы без обращения к принципу соответствия, что открывает возможность построения наблюдаемых для систем, не имеющих классического аналога. Следующие дальше примеры иллюстрируют в простейших случаях этот метод.

Как было описано в 1.1, на пространстве состояний частицы  $\mathfrak{R}$  действует группа движений  $M(3)$ . Обозначим сдвиг на  $\alpha$  вдоль оси  $x$  через  $D_\alpha$ :

$$D_\alpha(x, y, z) = (x + \alpha, y, z). \quad (1.2.1)$$

Легко видеть, что последовательное выполнение сдвигов на  $\alpha_1$  и  $\alpha_2$  приводит к сдвигу на  $\alpha_1 + \alpha_2$ , так что

$$D_{\alpha_1 + \alpha_2} = D_{\alpha_1} D_{\alpha_2}. \quad (1.2.2)$$

Сдвиги  $D_\alpha$  образуют однопараметрическую подгруппу группы движений  $M(3)$ . Аналогично строятся подгруппы сдвигов вдоль осей  $y$ ,  $z$ , или вдоль любой оси.

Рассмотрим, далее, однопараметрическую подгруппу вращений вокруг оси  $z$ . Обозначив вращение на угол  $\alpha$  через  $O_\alpha$ , имеем

$$O_\alpha(x, y, z) = (x \cos \alpha - y \sin \alpha, x \sin \alpha + y \cos \alpha, z). \quad (1.2.3)$$

В этом случае также соблюдается условие (2), имеющее теперь следующий смысл: последовательные вращения на углы  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$  приводят к вращению на угол  $\alpha_1 + \alpha_2$  (причем углы, отличающиеся на  $2\pi$ , определяют одно и то же вращение). Точно так же строятся однопараметрические подгруппы вращений вокруг осей  $x$ ,  $y$ , и вообще вокруг любой оси.

Представление группы движений  $\{T_M\}$  задает, в частности, представления ее однопараметрических подгрупп. Для сдвигов по оси  $x$  имеем (ср. (1.9))

$$\psi_\alpha(x, y, z) = T_{D_\alpha} \psi(x, y, z) = \psi(x - \alpha, y, z). \quad (1.2.4)$$

Скорость изменения вектора состояния  $\psi$  вдоль однопараметрической подгруппы измеряется производной по  $\alpha$ ; «начальная скорость» изменения равна

$$\frac{d}{d\alpha} \psi_\alpha(x, y, z)|_{\alpha=0} = \frac{d}{d\alpha} \psi(x - \alpha, y, z)|_{\alpha=0} = - \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x}. \quad (1.2.5)$$

Мы пришли к оператору дифференцирования (с точностью до знака). В квантовой механике удобно работать с *эрмитовыми* операторами, поскольку они имеют действительные собственные значения; чтобы получить из оператора дифференцирования (5) эрмитов оператор, достаточно умножить его на  $i$ . Наконец, чтобы прийти к оператору импульса, надо еще обеспечить нужную размерность, что достигается умножением на  $\hbar$ . Мы пришли к оператору  $p_x$ . Аналогично получаются  $p_y$  и  $p_z$ :

$$p_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \quad p_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \quad p_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.2.6)$$

Для вращений вокруг оси  $z$  тем же способом находим (ср. (1.7)):

$$\psi_\alpha(x, y, z) = T_{O_\alpha} \psi(x, y, z) = \psi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z). \quad (1.2.7)$$

«Начальная» скорость изменения  $\psi$  вдоль однопараметрической подгруп-



пы вращений равна

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\alpha} \psi_{\alpha}(x, y, z)|_{\alpha=0} &= \frac{d}{d\alpha} \psi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z)|_{\alpha=0} = \\ &= \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial x} y - \frac{\partial \psi(x, y, z)}{\partial y} x = - \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, y, z). \end{aligned} \quad (1.2.8)$$

Умножение на  $i\hbar$  превращает (8) в эрмитов оператор с размерностью момента. Аналогично получаются моменты относительно осей  $x, y$ :

$$L_x = \frac{\hbar}{i} \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \quad L_y = \frac{\hbar}{i} \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \quad L_z = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \quad (1.2.9)$$

Итак, мы получили операторы импульса и момента из однопараметрических подгрупп группы движений  $M(3)$ . В нерелятивистской квантовой механике основными наблюдаемыми являются, кроме того, операторы координат. Для их получения надо расширить группу симметрии  $M(3)$  до группы Галилея, в которой рассматриваются равномерные и прямолинейные движения системы. Мы не будем этим заниматься, так как с группой Галилея связаны некоторые алгебраические трудности. Заметим только, что все основные наблюдаемые квантовой механики имеют групповое «происхождение», а именно, могут быть выведены из группы симметрии  $G$  по следующему предписанию. Чтобы получить наблюдаемую квантовой системы, надо взять в ее группе симметрии  $G$  некоторую однопараметрическую подгруппу  $\{g_{\alpha}\}$ , элементы которой связаны соотношением  $g_{\alpha_1+\alpha_2} = g_{\alpha_1} g_{\alpha_2}$ , а затем, пользуясь унитарным представлением  $\{T_g\}$  в пространстве состояний системы  $\mathfrak{H}$ , задающем симметрию, рассмотреть однопараметрическую подгруппу операторов  $\{T_{g_{\alpha}}\}$ , соответствующих  $\{g_{\alpha}\}$ . Тогда оператор

$$A\psi(x, y, z) = \psi'(x, y, z) = i \frac{\partial}{\partial \alpha} T_{g_{\alpha}} \psi(x, y, z)|_{\alpha=0} \quad (1.2.10)$$

эрмитов и является наблюдаемой данной системы.

Кроме основных наблюдаемых, получаемых указанным способом из группы симметрии системы, в квантовой механике рассматриваются еще полиномы от них, например, оператор кинетической энергии

$$H\psi = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \psi \quad (1.2.11)$$

или оператор «полного момента»

$$L^2\psi = (L_x^2 + L_y^2 + L_z^2) \psi. \quad (1.2.12)$$

Можно убедиться, что с помощью этого приема из группы симметрии получаются все остальные наблюдаемые квантовой системы.

Оператор (11) обладает следующим важным свойством: он перестановочен со всеми операторами  $T_M$ , представляющими движения трехмерного пространства. Такие операторы называются *операторами Казимира* группы симметрии. Итак,  $H$  является оператором Казимира группы  $M(3)$ . Аналогично, оператор  $L^2$ , перестановочный со всеми операторами  $T_O$ , является оператором Казимира группы  $SO(3)$ .

### 1.3. Группы и алгебры Ли

Как мы видели, группы Ли и их однопараметрические подгруппы играют важную роль в квантовой механике. Изучение однопараметрических подгрупп приводит к понятию алгебры Ли. Мы изложим здесь необходимые нам сведения о группах Ли, алгебрах Ли и об их представлениях операторами, действующими в линейном пространстве. При изло-

жении общих вопросов мы будем, как правило, опускать доказательства. Более подробно изложение можно найти, например, в [12].

Группы, представляющие интерес для физики, обычно могут быть заданы как *матричные группы*, т. е. группы, состоящие из матриц, с обыкновенным матричным умножением. Напомним понятие *изоморфизма* групп. Группы  $G$  и  $G'$  называются *изоморфными*, если между их элементами установлено взаимно однозначное соответствие  $g' = \varphi(g)$  такое, что из  $g_3 = g_1 g_2$  следует  $\varphi(g_3) = \varphi(g_1) \varphi(g_2)$ . Отсюда вытекает, что  $\varphi(e) = e'$ , где  $e, e'$  соответственно единицы групп  $G, G'$ , и что  $\varphi(g^{-1}) = \varphi(g)^{-1}$  для всех  $g$ .

В таких случаях, как группа вращений  $SO(3)$ , изоморфная матричная группа строится без труда: каждому вращению  $O$  ставится в соответствие его матрица в фиксированной системе координат. Не столь естественно получается матричное изображение группы движений  $M(3)$ . Условимся изображать точку трехмерного пространства  $(x_1, x_2, x_3) = (x, y, z)$  четырехмерным вектором  $(x_1, x_2, x_3, 1)$ , а движение

$$x'^i = \sum_{j=1}^3 o_i^j x^j + a^i \quad (i = 1, 2, 3) \quad (1.3.1)$$

преобразованием четырехмерных векторов

$$\left[ \begin{array}{c|c} o_i^j & a^i \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right] \left[ \begin{array}{c} x^1 \\ x^2 \\ x^3 \\ 1 \end{array} \right] = \left[ \begin{array}{c} x'^1 \\ x'^2 \\ x'^3 \\ 1 \end{array} \right]. \quad (1.3.2)$$

Легко проверить, что соотношение (1) для точек  $x, x'$  равносильно соотношению (2) для изображающих четырехмерных векторов и умножению (в смысле последовательного выполнения) преобразований (1) соответствует умножение матриц (2). Следовательно, группа  $M(3)$  изоморфна группе матриц вида (2).

Некоторая искусственность матричного изображения сдвигов, как и в других подобных случаях, искупается значительным упрощением математического описания групп Ли. Поэтому мы ограничимся матричными группами и не будем рассматривать никаких других. Отметим, что единицей в такой группе является единичная матрица, и все матрицы группы обратимы и тем самым имеют ненулевой определитель.

Пусть  $G$  — группа матриц  $N$ -го порядка. Предположим, что все матрицы группы, близкие к единичной, могут быть параметризованы с помощью  $n$  свободно меняющихся чисел  $(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ ,  $a_i < \alpha_i < b_i$  ( $i = 1, \dots, n$ ); это значит, что каждому набору чисел  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$  в указанных интервалах соответствует матрица группы  $g(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ , причем разным наборам соответствуют разные матрицы и все матрицы  $G$ , достаточно близкие к единичной, представимы в этом виде. Далее, предполагается, что элементы матрицы  $g(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$  являются непрерывно дифференцируемыми функциями параметров  $\alpha_1, \dots, \alpha_n$ . Например, в качестве параметров можно выбрать некоторые  $n$  из  $N^2$  элементов матрицы  $G$ . При указанных условиях можно параметризовать также все матрицы группы  $G$ , близкие к произвольной матрице этой группы  $g_0$ . Именно, такие матрицы можно представить в виде  $g = g' g_0$ , где матрица  $g'$  близка к единичной, а затем положить  $g(\alpha_1, \dots, \alpha_n) = g'(\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ . Группа  $G$ , имеющая параметризацию с указанными свойствами, называется *группой Ли*.

Рассмотрим в виде примера группу собственных вращений  $SO(3)$ , реализовав ее в форме группы ортогональных матриц третьего порядка с определителем  $+1$ . Поскольку ортогональность матрицы выражается шестью условиями, наложенными на девять ее элементов (например, ус-

ловиями  $\sum_{j=1}^3 o_i^j o_k^j = \delta_{ik}$ , то матрицы  $O$  можно задать как функции трех свободно меняющихся матричных элементов. Часто более удобными параметрами оказываются три эйлеровых угла.

Другим примером является группа движений  $M(3)$ , реализованная в форме группы матриц  $(m_i^j)$  указанного выше вида. Такая матрица задается ортогональной матрицей  $(o_i^j)$ , зависящей, как мы видели, от трех параметров, и еще тремя числами  $a^1, a^2, a^3$ , так что общее число параметров для  $M(3)$  равно шести.

Число параметров  $n$  называется *размерностью* группы Ли. Множество  $G_1$  называется *подгруппой* группы Ли  $G$ , если  $G_1$  является группой Ли, состоящей из части элементов  $G$ . Например, группа вращений  $SO(3)$  и группа сдвигов  $D(3)$  являются подгруппами группы движений  $M(3)$ . Размерность подгруппы не больше размерности всей группы и может быть равна ей лишь в том случае, когда подгруппа содержит все элементы группы, близкие к единице. Так, группа собственных вращений  $SO(3)$  является подгруппой группы всех вращений  $O(3)$  (с определителем  $+1$  или  $-1$ ) и обе группы имеют одинаковую размерность 3.

Если все элементы всех матриц группы  $G$  ограничены по модулю одним и тем же числом, то  $G$  называется *компактной* группой Ли. Можно доказать, что в этом случае из любой последовательности матриц группы можно выбрать подпоследовательность, сходящуюся к матрице той же группы. Группа  $O(3)$  компактна, так как для ортогональных матриц  $\sum_{j=1}^3 (o_i^j)^2 = 1$  ( $i = 1, 2, 3$ ); группа  $M(3)$  не компактна, поскольку элементы  $a^i$  матриц  $(m_i^j)$  не ограничены.

Подгруппа  $\{g_\alpha\}$  группы Ли  $G$  называется *однопараметрической*, если ее элементы параметризованы с помощью одного параметра  $\alpha$ , причем сложению значений  $\alpha$  соответствует умножение элементов:

$$g_{\alpha_1 + \alpha_2} = g_{\alpha_1} g_{\alpha_2}. \quad (1.3.3)$$

Параметризация может быть в этом случае либо взаимно однозначной, как в случае сдвигов (2.1), либо периодической, как в случае вращений (2.3); в последнем случае значениями параметра, различающимися на период, соответствует один и тот же элемент. Ясно, что однопараметрические подгруппы коммутативны, так как в силу (3)  $g_{\alpha_1} g_{\alpha_2} = g_{\alpha_2} g_{\alpha_1}$ . Единицей однопараметрической подгруппы является  $g_0$ , совпадающая с единицей всей группы 1. Обратным элементов к  $g_\alpha$ , опять вследствие (3), является  $g_{-\alpha}$ .

Можно доказать, что для любой однопараметрической подгруппы существует производная

$$\left. \frac{dg_\alpha}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = K \quad (1.3.4)$$

(уже не являющаяся, как правило, матрицей группы  $G$ ). Поскольку

$$g_{\alpha + \Delta\alpha} = g_{\Delta\alpha} g_\alpha, \\ \frac{g_{\alpha + \Delta\alpha} - g_\alpha}{\Delta\alpha} = \frac{g_{\Delta\alpha} - 1}{\Delta\alpha} g_\alpha = \frac{g_{\Delta\alpha} - g_0}{\Delta\alpha} g_\alpha,$$

имеем при всех  $\alpha$   $g'_\alpha = K g_\alpha$ , откуда ввиду  $g_0 = 1$

$$g_\alpha = e^{\alpha K}. \quad (1.3.5)$$

Как мы увидим, для физических применений удобнее рассматривать вместо  $K$  матрицу  $A = iK$ ; тогда (5) принимает вид

$$g_\alpha = e^{-i\alpha A}. \quad (1.3.6)$$

Матрица  $A$  называется *генератором* (или *образующей*) однопараметрической подгруппы  $\{g_\alpha\}$ .

Для однопараметрической подгруппы вращений вокруг оси  $z$  с матрицами

$$g_\alpha = \begin{bmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (1.3.7)$$

(см. (2.3)) генератором является матрица

$$A = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.3.8)$$

Для подгруппы сдвигов вдоль оси  $x$  с матрицами

$$g_\alpha = \left[ \begin{array}{ccc|c} 1 & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 1 \end{array} \right] \quad (1.3.9)$$

(см. (2.1)) генератором является

$$A = \left[ \begin{array}{ccc|c} 0 & 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & 0 & 0 & 0 \end{array} \right]. \quad (1.3.10)$$

Рассмотрим множество  $\mathfrak{G}$  генераторов всевозможных однопараметрических подгрупп группы Ли  $G$ . Тогда, как можно доказать, сумма двух таких генераторов  $A_1 + A_2$  есть снова генератор некоторой однопараметрической подгруппы группы  $G$ . Например, если  $G$  есть группа вращений  $SO(3)$  и если брать в качестве параметра вращений вокруг оси произвольное кратное угла поворота, то для генераторов  $A_1, A_2$  вращений вокруг осей  $l_1, l_2$  сумма  $A_1 + A_2$  есть также генератор вращений вокруг некоторой оси  $l$ . Генераторы группы  $SO(3)$  представляют собой, наподобие (8), антисимметрические матрицы с чисто мнимыми элементами. Как нетрудно убедиться, каждый такой генератор задает вектор угловой скорости вращения вокруг соответствующей оси, а сложение генераторов выражает обычное кинематическое правило сложения вращений.

Если  $A$  — генератор однопараметрической подгруппы группы Ли  $G$  и  $\lambda$  — действительное число, то, как можно доказать,  $\lambda A$  есть снова генератор некоторой однопараметрической подгруппы  $G$ . Для группы  $SO(3)$  умножению на  $\lambda$  соответствует, в указанной кинематической модели, умножение на  $\lambda$  вектора угловой скорости.

Далее, для двух генераторов  $A_1, A_2$  группы Ли  $G$  коммутатор, разделенный на  $i$ , оказывается снова генератором той же группы, что можно записать в виде

$$[A_1, A_2] = iA_3. \quad (1.3.11)$$

Опуская опять общее доказательство, ограничимся примером. Если  $A_1, A_2$  — генераторы  $SO(3)$ , то в указанной выше кинематической интерпретации вектор угловой скорости, изображающий  $A_3$ , является векторным произведением векторов угловой скорости, соответствующих  $A_1, A_2$ . Нетрудно также проверить, что для группы  $M(3)$  сложение, умножение на действительные числа и коммутирование (с делением на  $i$ ) генераторов группы приводит опять к генераторам той же группы.

Таким образом, множество всех генераторов однопараметрических подгрупп группы Ли  $G$  оказывается алгебраической системой с тремя операциями: сложением, умножением на действительные числа и коммутированием с делением на  $i^*$ ). Эта алгебраическая система называется *алгеброй Ли* группы Ли  $G$  и обозначается через  $\mathfrak{G}$ . Как можно доказать, операции в алгебре Ли обладают следующими свойствами: сложение коммутативно:

$$A_1 + A_2 = A_2 + A_1; \quad (1.3.12)$$

коммутирование дистрибутивно:

$$[\lambda A_1 + \mu A_2, A_3] = \lambda [A_1, A_3] + \mu [A_2, A_3]; \quad (1.3.13)$$

коммутирование антикоммутативно:

$$[A_1, A_2] = -[A_2, A_1]; \quad (1.3.14)$$

кроме того, для коммутаторов выполняется тождество Якоби:

$$[A_1, [A_2, A_3]] + [A_2, [A_3, A_1]] + [A_3, [A_1, A_2]] = 0. \quad (1.3.15)$$

В случае группы  $SO(3)$  эти свойства можно иллюстрировать с помощью указанной выше кинематической интерпретации генераторов; при этом (12) — (15) превращаются в известные свойства операций над векторами трехмерного пространства — сложения, умножения на числа и векторного произведения.

Можно доказать, что алгебра Ли  $n$ -мерной группы Ли имеет базис из  $n$  матриц  $A_i$ , через которые все матрицы выражаются в виде линейных комбинаций с действительными коэффициентами:

$$A = \sum_{i=1}^n \lambda_i A_i. \quad (1.3.16)$$

Поэтому для вычисления любых коммутаторов достаточно знать коммутаторы базисных матриц  $[A_1, A_2]$ ; в самом деле, если  $A, B$  — матрицы алгебры Ли с разложениями  $A = \sum_{i=1}^n \lambda_i A_i, B = \sum_{j=1}^n \mu_j A_j$ , то  $[A, B] =$

$= \sum_{i,j=1}^n \lambda_i \mu_j [A_i, A_j]$ . Поскольку коммутаторы  $[A_i, A_j]$  переходят после деления на  $i$  в матрицы алгебры Ли, разлагающиеся по базису  $\{A_k\}$ , то имеют *перестановочные соотношения*

$$[A_i, A_j] = \sum_{k=1}^n c_{ij}^k A_k \quad (1.3.17)$$

с чисто мнимыми коэффициентами  $c_{ij}^k$ , именуемыми *структурными постоянными* алгебры Ли. Эти постоянные зависят от выбора базиса  $\{A_k\}$ , который производится обычно таким образом, чтобы перестановочные соотношения были возможно проще. Например, в алгебре Ли группы вращений  $SO(3)$  можно выбрать в качестве базиса генераторы вращений вокруг осей  $x, y, z$ , получаемые так же, как (8):

$$A_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad A_3 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (1.3.18)$$

Тогда перестановочные соотношения принимают вид

$$[A_1, A_2] = iA_3, \quad [A_2, A_3] = iA_1, \quad [A_3, A_1] = iA_2. \quad (1.3.19)$$

\*) В математической литературе в качестве генераторов берутся матрицы  $K$ , для которых  $[K_1, K_2]$  есть опять генератор в том же смысле. Мотивировка умножения на  $i$  приводится ниже.

Все матрицы группы  $G$  могут быть записаны в виде

$$g = e^{iA}, \quad (1.3.20)$$

где  $A$  — матрица алгебры Ли  $\mathfrak{G}$ . В частности, для однопараметрических подгрупп (20) сводится к (6) с заменой  $A$  на  $-iA$ .

Часто рассматривают наряду с алгеброй Ли  $\mathfrak{G}$  ее комплексную оболочку  $\tilde{\mathfrak{G}}$ , состоящую из всевозможных линейных комбинаций матриц алгебры  $\mathfrak{G}$  с комплексными коэффициентами. Например, для группы  $SO(3)$  в алгебру  $\tilde{\mathfrak{G}}$  входят матрицы  $A_+ = A_1 + iA_2$ ,  $A_- = A_1 - iA_2$ . Заметим, что если подставить в формулу (20) вместо  $A$  матрицу из  $\tilde{\mathfrak{G}}$ , то полученная матрица  $g$  уже не обязательно входит в группу  $G$ .

Перейдем теперь к представлениям групп Ли. Говорят, что задан гомоморфизм группы  $G$  в группу  $G'$ , если каждому элементу  $g$  группы  $G$  поставлен в соответствие элемент  $g' = \varphi(g)$  группы  $G'$  таким образом, что для любых двух элементов  $g_1, g_2$  группы  $G$  будет  $\varphi(g_1 g_2) = \varphi(g_1) \varphi(g_2)$  и  $\varphi(e) = e'$ , где  $e$  — единица  $G$  и  $e'$  — единица  $G'$ . Поскольку единица переходит при гомоморфизме в единицу, то обратный элемент переходит в обратный, т. е.  $\varphi(g^{-1}) = \varphi(g)^{-1}$  для любого элемента  $g$  группы  $G$ . Простейший пример гомоморфизма — это соответствие  $\varphi$ , сопоставляющее матрицам некоторой группы  $G$  их определители. Поскольку  $\det |g_1 g_2| = \det |g_1| \det |g_2|$ , то  $\varphi$  есть гомоморфизм группы  $G$  в группу комплексных чисел, не равных нулю, с обычным умножением. Если  $\varphi$  взаимно однозначно отображает  $G$  на всю группу  $G'$ , то гомоморфизм является изоморфизмом.

Пусть теперь  $\mathfrak{E}$  — комплексное линейное пространство, т. е. множество с операциями сложения и умножения на комплексные числа, с обычными алгебраическими свойствами. Пусть  $G$  — группа,  $G'$  — группа всех обратимых линейных операторов, действующих на  $\mathfrak{E}$  (т. е. операторов, имеющих обратный). Тогда любой гомоморфизм  $\varphi$  группы  $G$  в группу  $G'$  называется линейным представлением  $G$  в пространстве  $\mathfrak{E}$ . По этому определению каждому элементу  $g$  группы  $G$  соответствует линейный оператор  $T_g = \varphi(g)$ , действующий в пространстве  $\mathfrak{E}$ , причем для любого произведения  $g_3 = g_1 g_2$  должно быть  $\varphi(g_3) = \varphi(g_1) \varphi(g_2)$ , т. е.

$$T_{g_3} = T_{g_1} T_{g_2}. \quad (1.3.21)$$

Напомним, что произведение операторов означает результат их последовательного выполнения, причем вначале действует правый множитель  $T_2$ , а затем левый  $T_1$ . Так как при гомоморфизме единица группы  $G$  переходит в единичный оператор группы  $G'$ , то  $T_e = 1$ , и аналогично  $T_{g^{-1}} = (T_g)^{-1}$ , т. е. обратный элемент переходит в обратный оператор. Если  $\varphi$  — взаимно однозначное отображение, представление называется точным. Примерами представлений являются представления групп  $SO(3)$  и  $M(3)$ , построенные в 1.1.

Представление  $\{T_g\}$  группы  $G$  называется унитарным, если пространство представления  $\mathfrak{H}$  гильбертово и все операторы  $T_g$  — унитарные операторы в  $\mathfrak{H}$ , т. е. операторы, сохраняющие скалярные произведения:

$$\langle T_g \varphi | T_g \psi \rangle = \langle \varphi | \psi \rangle. \quad (1.3.22)$$

Физический смысл условия (22) состоит в том, что преобразования векторов состояния, осуществляемые операторами представления, не изменяют вероятностей перехода  $\varphi \rightarrow \psi$ . Нетрудно показать, что представления  $\{T_m\}$  и, тем более, представления  $\{T_o\}$ ,  $\{T_b\}$  унитарны.

Представление группы Ли  $G$  в линейном пространстве  $\mathfrak{E}$  сопоставляет однопараметрическим подгруппам этой группы  $\{g_\alpha\}$  семейства операторов  $\{T_{g_\alpha}\}$ , зависящих от того же параметра  $\alpha$ . При этом в силу (3), (21)

$$T_{g_{\alpha_1 + \alpha_2}} = T_{g_{\alpha_1}} T_{g_{\alpha_2}}, \quad (1.3.23)$$

так что операторы  $\{T_{g\alpha}\}$  образуют однопараметрическую подгруппу группы  $\{T_g\}$ , состоящей из всех представляющих операторов. Будем писать для краткости  $T_\alpha$  вместо  $T_{g\alpha}$ . Тогда из (23) получается оператор, аналогичный (4):

$$\left. \frac{dT_\alpha}{d\alpha} \right|_{\alpha=0} = T_K, \quad (1.3.24)$$

а также соотношение, аналогичное (6):

$$T_\alpha = e^{-i\alpha T_A}, \quad (1.3.25)$$

где  $T_A = iT_K$  — линейный оператор в  $\mathfrak{E}$ , именуемый генератором однопараметрической подгруппы операторов  $\{T_\alpha\}$ . Поставим в соответствие генераторам  $A$  однопараметрических подгрупп группы Ли  $G$  генераторы  $T_A$  однопараметрических подгрупп операторов в пространстве  $\mathfrak{E}$ , построенные указанным образом. Это соответствие  $\Phi(A) = T_A$  называется *представлением алгебры Ли  $\mathfrak{G}$  в пространстве  $\mathfrak{E}$* . Можно доказать, что представление алгебры Ли сохраняет ее операции, т. е.

$$\begin{aligned} \text{если } A_3 &= A_1 + A_2, \text{ то } T_{A_3} = T_{A_1} + T_{A_2}; \\ \text{если } A_2 &= \lambda A_1, \text{ то } T_{A_2} = \lambda T_{A_1}; \\ \text{если } [A_1, A_2] &= iA_3, \text{ то } [T_{A_1}, T_{A_2}] = iT_{A_3}. \end{aligned} \quad (1.3.26)$$

Отсюда следует, что для представляющих операторов справедливы те же перестановочные соотношения, что и для матриц алгебры Ли (т. е. в (17) надо заменить  $A_i$  на  $T_{A_i}$ ):

$$[T_{A_i}, T_{A_j}] = \sum_{k=1}^n c_{ij}^k T_{A_k}. \quad (1.3.27)$$

Перестановочные соотношения лежат в основе важного метода построения представлений групп Ли. Пусть  $G$  — группа Ли,  $\mathfrak{G}$  — ее алгебра Ли,  $\{A_k\}$  — некоторый базис  $\mathfrak{G}$  с перестановочными соотношениями (17). Чтобы построить представление группы  $G$  в линейном пространстве  $\mathfrak{E}$ , надо найти в  $\mathfrak{E}$  линейные операторы  $T_{A_i}$  с теми же перестановочными соотношениями, т. е. такие, что  $[T_{A_i}, T_{A_j}] = \sum_{k=1}^n c_{ij}^k T_{A_k}$ , с теми же коэффициентами, какие входят в (17); тогда соответствие

$$\Phi\left(\sum_{i=1}^n \lambda_i A_i\right) = \sum_{i=1}^n \lambda_i T_{A_i} \quad (1.3.28)$$

задает представление алгебры Ли  $\mathfrak{G}$  в пространстве  $\mathfrak{E}$ , т. е. удовлетворяет условиям (26). Далее, для каждой матрицы  $g$  группы  $G$  можно построить такую матрицу  $A$  из алгебры Ли  $\mathfrak{G}$ , чтобы  $g$  и  $A$  были связаны соотношением (20). Если ограничиться матрицами  $g$ , близкими к единичной, и матрицами  $A$ , близкими к нулевой, то соответствие (20) взаимно однозначно. Тогда можно поставить в соответствие матрицам  $g$ , близким к единичной, операторы

$$T_g = e^{iT_A}. \quad (1.3.29)$$

Формула (29) задает «*локальное представление*» группы Ли  $G$  в пространстве  $\mathfrak{E}$ , т. е. полученные операторы  $T_g$  удовлетворяют условию (24), если матрицы  $g_1, g_2, g_3$  достаточно близки к единичной. Для большинства физических приложений локальные представления уже достаточны, но для важнейших групп Ли описанный метод доставляет даже представление «в целом», для всех матриц  $g$ .

Преимущество этого метода состоит в том, что по определению представления требуется указать операторы  $T_g$  для бесконечного множества *всех* матриц  $g$  и проверить соотношения (21) для всевозможных троек  $g_1, g_2, g_3$ , между тем как описанный метод требует лишь построения  $n$  операторов  $T_{A_i}$  (где  $n$  — размерность группы  $G$ ) и проверки для них перестановочных соотношений (27). В этом и заключается главная ценность алгебр Ли.

Как правило, в физике надо знать лишь операторы  $T_{A_i}$ , играющие роль основных наблюдаемых квантовой системы, и лишь в более редких случаях требуются явные формулы для представляющих операторов группы  $G$ . Поэтому в ряде случаев ограничиваются заданием операторов  $T_{A_i}$  и проверкой перестановочных соотношений, чем определяется представление алгебры Ли, а в отношении представления группы Ли довольствуются констатацией, что оно существует и единственно.

Если  $\mathfrak{H}$  есть гильбертово пространство и представление  $\{T_g\}$  унитарно, то операторы  $T_a$  в (25) унитарны, откуда легко следует, что операторы  $T_A$  эрмитовы. Это и составляет мотивировку перехода от  $K$  к  $A = iK$  и от  $T_K$  к  $T_A = iT_K$ : операторы  $T_K$  оказываются антиэрмитовыми, т. е. имеют чисто мнимые собственные значения, а поскольку мы хотим получить из групп симметрии наблюдаемые, с действительными собственными значениями, то заменяем  $T_K$  на эрмитовы операторы  $T_A$ . В 1.2 мы применили только что описанную процедуру к однопараметрическим подгруппам сдвигов и вращений, что привело, после умножения на  $\hbar$ , к операторам импульсов и моментов. Заметим, что в обоих случаях множитель  $-i$  включен уже в оператор  $T_A$ .

Указанные закономерности имеют общий характер и могут быть формулированы в виде общего принципа: для каждой квантовой системы, имеющей группу симметрии  $G$ , унитарное представление этой группы в пространстве состояний системы, задающей симметрию, определяет наблюдаемые системы: а именно, наблюдаемыми являются операторы, представляющие алгебру Ли  $\mathfrak{G}$  группы симметрии.

Как показывают примеры операторов кинетической энергии  $H$  и полного момента  $L^2$ , полученные таким способом операторы не исчерпывают всех наблюдаемых, участвующих в описании квантовых систем. Но оказывается, что и все другие наблюдаемые могут быть выражены через «основные», представляющие генераторы алгебры Ли. Для этого применяется следующая процедура.

Составляются всевозможные полиномы (с комплексными коэффициентами) от матриц алгебры Ли. Выражая такой полином через базисные матрицы, имеем

$$M = \sum a_{ij\dots k} A_i A_j \dots A_k. \quad (1.3.30)$$

Такие полиномы могут быть записаны различным образом в силу перестановочных соотношений (17); например, для группы  $SO(3)$  полином  $A_1 A_2$  в силу (19) равен  $A_2 A_1 + iA_3$ . Полиномы (30) можно складывать, умножать на комплексные числа и умножать друг на друга, с соблюдением обычных алгебраических законов дистрибутивности и ассоциативности, но не коммутативности, поскольку уже полиномы первой степени  $A_k$  не коммутируют между собой. Полученная таким образом ассоциативная алгебра полиномов называется универсальной обертывающей алгеброй алгебры Ли  $\mathfrak{G}$ ; будем обозначать ее через  $\mathfrak{G}^u$ . Отметим, что в алгебре Ли вместо операции умножения вводится операция коммутирования (с последующим делением на  $i$ ), приводящая к матрицам алгебры Ли, в то время как обычная операция матричного умножения выводит за пределы алгебры Ли. Это видно на примере  $SO(3)$ , поскольку произведение матриц с чисто мнимыми элементами, входящими в алгебру Ли этой группы, имеет действительные элементы. Алгебраические свойства коммутирования совершенно отличны от свойств матричного умножения:



ассоциативность заменяется тождеством Якоби (15). Между тем в универсальной обертывающей алгебре операция умножения есть обычное матричное умножение, которое, естественно, ассоциативно.

В каждом представлении группы Ли  $G$  базисным матрицам  $A_i$  алгебры Ли  $\mathfrak{G}$  соответствуют операторы  $T_{A_i}$ . Можно поставить в соответствие полиномам (30) полиномы

$$T_M = \sum a_{ij\dots k} T_{A_i} T_{A_j} \dots T_{A_k} \quad (1.3.31)$$

с теми же коэффициентами, причем это соответствие не зависит от способа их записи, поскольку преобразованию полинома (30) с помощью перестановочных соотношений (17) соответствует такое же преобразование полинома (31) с помощью перестановочных соотношений (27). Тем самым задается представление универсальной обертывающей алгебры  $\mathfrak{G}^e$  в том же пространстве, где определено представление группы  $G$ .

Некоторые из операторов, представляющих  $\mathfrak{G}^e$ , оказываются эрмитовыми; тогда они считаются наблюдаемыми рассматриваемой квантовой системы. Например, из представления группы движений  $M(3)$  в пространстве волновых функций  $\mathfrak{H}$  получаются операторы кинетической энергии

$$H = \frac{1}{2m} (p_x^2 + p_y^2 + p_z^2) \quad (1.3.32)$$

и полного момента

$$L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2. \quad (1.3.33)$$

Особенно важны полиномы из  $\mathfrak{G}^e$ , перестановочные со всеми элементами группы Ли  $G$ ; они называются *элементами Казимира* этой группы. Можно доказать, что полином  $M$  перестановочен со всеми элементами  $G$  в том и только том случае, когда он перестановочен со всеми элементами ее алгебры Ли  $\mathfrak{G}$ , т. е. когда  $[M, A_i] = 0$  ( $i = 1, 2, \dots, n$ ). Проверка этих соотношений сводится к повторному применению перестановочных соотношений (17) в силу правила

$$[AB, C] = [A, C]B + A[B, C]. \quad (1.3.34)$$

Если  $M$  — элемент Казимира группы  $G$ , то из сравнения (27) с (17) видно, что представляющий его оператор  $T_M$  перестановочен со всеми операторами  $T_A$ , представляющими алгебру Ли  $\mathfrak{G}$ . Тогда, как можно доказать,  $T_M$  перестановочен и со всеми операторами  $T_g$ , представляющими группу Ли  $G$ . В таком случае  $T_M$  называется *оператором Казимира* представления  $\{T_g\}$ . Оператор  $H$  в (32) является оператором Казимира представления группы движений  $M(3)$  в пространстве волновых функций  $\mathfrak{H}$ . Оператор  $L^2$  в (33) является оператором Казимира подгруппы вращений  $SO(3)$  в том же представлении, но не всей группы  $M(3)$ , так как  $L^2$  не перестановочен с операторами сдвига  $T_D$ .

#### 1.4. Квантовые числа, базисы и неприводимые представления

Классификация состояний квантовой системы основывается, прежде всего, на спектре оператора энергии, который является обычно одним из операторов Казимира группы симметрии системы. Так, для свободной частицы без учета спина оператор энергии (3.32), являющийся оператором Казимира группы движений  $M(3)$ , имеет непрерывный спектр, но не имеет собственных значений (т. е. не имеет принадлежащих гильбертову пространству собственных функций). Непрерывный спектр связан с вопросами квантовой механики, не относящимися к интересующему нас предмету. Для построения нужных нам аналогий ограничимся связанными состояниями частицы, соответствующими отрицательным зна-

чениям энергии, образующим дискретный спектр. В дальнейшем будем понимать под гильбертовым пространством  $\mathfrak{H}$  пространство *связанных* состояний, порожденное векторами состояния с отрицательными значениями энергии. Поэтому оператор кинетической энергии (3.32) и группа движений, послужившая нам для получения операторов импульса, не будут теперь играть роли в нашем изложении. Сосредоточим внимание на группе вращений  $SO(3)$ , и рассмотрим оператор энергии электрона в кулоновском поле ядра

$$H_0\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi - \frac{Ze^2}{r}\psi, \quad (1.4.1)$$

где  $m$  — масса электрона,  $e$  — заряд электрона,  $Z|e|$  — заряд ядра,  $r$  — расстояние от ядра до электрона. Поскольку оператор  $\Delta$  и оператор умножения на  $1/r$  коммутируют с вращениями вокруг ядра, (1) является оператором Казимира группы  $SO(3)$ .\*

В гильбертовом пространстве состояний электрона  $\mathfrak{H}$  выделяется базис, состоящий из собственных векторов оператора энергии (1). Собственные значения этого оператора вырождены, а именно, каждому собственному значению

$$E_n = -\frac{Z^2 me^4}{2\hbar^2} \frac{1}{n^2} \quad (n = 1, 2, \dots) \quad (1.4.2)$$

принадлежит собственное подпространство размерности  $n^2$ , которое мы обозначим  $\mathfrak{H}_n$ . Выбор базиса в этом подпространстве целесообразно производить таким образом, чтобы собственные векторы  $H_0$  были одновременно собственными векторами некоторого набора наблюдаемых, перестановочных с  $H_0$  и друг с другом. Обычно в качестве таких наблюдаемых берут оператор полного момента  $L^2$  (3.33), также являющийся оператором Казимира группы  $SO(3)$ , и один из операторов момента, например  $L_z$ . Тогда собственные функции одновременно трех операторов  $H_0$ ,  $L^2$ ,  $L_z$ , с собственными значениями соответственно  $E_n$ ,  $l(l+1)$ ,  $m$ , могут быть записаны в виде

$$\psi_{nlm}(x, y, z) = f_n(r) Y_l^{(m)}(\vartheta, \varphi), \quad (1.4.3)$$

где  $f_n(r)$  зависят лишь от радиуса  $r$ , а  $Y_l^{(m)}(\vartheta, \varphi)$  — сферические функции, зависящие от сферических координат. Числа  $n, l, m$ , служащие для нумерации векторов базиса, называются *квантовыми числами* системы (в данном случае — электрона в кулоновом поле). Число  $n$ , называемое «главным квантовым числом», принимает целые значения  $n = 1, 2, \dots$ ; число  $l$  («азимутальное квантовое число») принимает при заданном  $n$  значения  $0, 1, \dots, n-1$ ; число  $m$  («магнитное квантовое число») принимает при заданных  $n, l$  значения  $-l, -l+1, \dots, l-1, l$ . Как мы видим, эти квантовые числа возникают из группы симметрии  $SO(3)$ .

Вся система собственных функций (3), образующих базис пространства  $\mathfrak{H}$ , наглядно изображается клетками табл. 1, занумерованными теми же параметрами  $n, l, m$ . Любая волновая функция однозначно разлагается в ряд по собственным функциям оператора энергии (1):

$$\psi = \sum_{n,l,m} c_{nlm} \psi_{nlm}. \quad (1.4.4)$$

Заметим, что функции  $\psi_{nlm}$  ортогональны друг другу как собственные функции одного из операторов  $H_0$ ,  $L^2$ ,  $L_z$ , принадлежащие разным собственным значениям; при надлежащей нормировке сомножителей в (3) они, кроме того, нормированы.

Введем теперь понятие инвариантного подпространства. Пусть задано представление группы  $G$  в линейном пространстве  $\mathfrak{L}$ , содержащем под-

\*) Строго говоря, для его построения нужна группа Галилея, так как оператор координат и тем самым оператор умножения на  $1/r$  не получается из  $SO(3)$ .

Таблица 1

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	
$l = 0$	<div></div>	<div></div>	<div></div>	<div></div>	$m = 0$
$l = 1$		<div></div>	<div></div>	<div><math>\psi_{4,1,-1}</math></div>	$m = -1$
		<div></div>	<div></div>	<div></div>	$m = 0$
		<div></div>	<div></div>	<div></div>	$m = 1$
$l = 2$			<div></div>	<div></div>	$m = -2$
			<div></div>	<div></div>	$m = -1$
			<div><math>\psi_{3,2,0}</math></div>	<div></div>	$m = 0$
			<div></div>	<div></div>	$m = 1$
			<div></div>	<div></div>	$m = 2$
$l = 3$				<div></div>	$m = -3$
				<div></div>	$m = -2$
				<div></div>	$m = -1$
				<div></div>	$m = 0$
				<div></div>	$m = 1$
				<div></div>	$m = 2$
				<div></div>	$m = 3$

пространство  $\mathfrak{L}_1$ . Если применение операторов представления  $\{T_s\}$  к векторам подпространства  $\mathfrak{L}_1$  переводит их опять в векторы того же подпространства, то  $\mathfrak{L}_1$  называется *инвариантным подпространством* представления. Примером могут служить собственные подпространства  $\mathfrak{R}_n$  оператора энергии  $H_0$ . Поскольку операторы вращений  $T_0$  перестановочны с  $H_0$ , имеем:

$$\text{если } H_0\psi = E_n\psi, \text{ то } H_0(T_0\psi) = T_0(H_0\psi) = T_0(E_n\psi) = E_nT_0\psi, \quad (1.4.5)$$

так что  $T_0$  переводит собственный вектор  $H_0$  в собственный вектор с тем же собственным значением  $E_n$ . Каждое инвариантное подпространство  $\mathfrak{R}_n$  изображается вертикальным столбцом табл. 1. Базис  $\mathfrak{R}_n$  составляют векторы  $\psi_{nlm}$  с данным  $n$ . Поскольку собственные векторы с разными  $E_n$  ортогональны друг другу, подпространства  $\mathfrak{R}_n$  ортогональны.

Введем следующее определение. Пространство  $\mathfrak{S}$  называется *ортогональной суммой* подпространств  $\mathfrak{S}_k$ , если каждый вектор  $\varphi$  пространства  $\mathfrak{S}$  однозначно разлагается в сумму  $\varphi = \sum_{k=1}^{\infty} \varphi_k$  ортогональных слагаемых, причем  $\varphi_k$  принадлежит  $\mathfrak{S}_k$ . Будем записывать такое разложение в виде

$$\mathfrak{S} = \bigoplus_{k=1}^{\infty} \mathfrak{S}_k. \quad (1.4.6)$$

В этих обозначениях имеем

$$\mathfrak{R} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} \mathfrak{R}_n. \quad (1.4.7)$$

В табл. 1 подпространства  $\mathfrak{R}_n$  изображаются вертикальными столбцами. Инвариантность  $\mathfrak{R}_n$  означает, что операторы  $T_o$ , примененные к одному из базисных векторов такого столбца, не выводят его за пределы того же столбца, т. е. переводят в линейную комбинацию векторов с тем же  $n$ .

Обозначим теперь через  $\mathfrak{R}_{nl}$  подпространство всех собственных функций операторов  $H_0$ ,  $L^2$ , принадлежащих соответственно собственным значениям  $E_n$ ,  $l(l+1)$ . Поскольку  $H_0$  и  $L^2$  перестановочны с операторами вращения  $T_o$ , рассуждение, аналогичное (5), показывает, что каждое  $\mathfrak{R}_{nl}$  есть инвариантное подпространство группы  $SO(3)$ . Подобно (7) имеется ортогональное разложение

$$\mathfrak{R} = \bigoplus_{n,l} \mathfrak{R}_{nl}. \quad (1.4.8)$$

Базис  $\mathfrak{R}_{nl}$  составляют функции  $\psi_{nlm}$  с данными  $n, l$ . В табл. 1 подпространства  $\mathfrak{R}_{nl}$  изображаются вертикальными прямоугольниками. Инвариантность  $\mathfrak{R}_{nl}$  означает, что операторы  $T_o$ , примененные к одному из базисных векторов такого прямоугольника, не выводят его за пределы того же прямоугольника, т. е. переводят в линейную комбинацию векторов с теми же  $n, l$ . Тем самым при  $n > 1$  каждое инвариантное подпространство  $\mathfrak{R}_n$  содержит меньшие инвариантные подпространства  $\mathfrak{R}_{nl}$ , что наглядно изображается разбиением столбцов табл. 1 на вертикальные прямоугольники. Для каждого  $n$  имеем, таким образом, ортогональное разложение

$$\mathfrak{R}_n = \bigoplus_{l=0}^{n-1} \mathfrak{R}_{nl}. \quad (1.4.9)$$

С другой стороны, пусть  $\mathfrak{S}$  — инвариантное подпространство группы  $SO(3)$ , лежащее в подпространстве  $\mathfrak{R}_{nl}$ . Покажем, что  $\mathfrak{S}$  исчерпывает все  $\mathfrak{R}_{nl}$ , так что в  $\mathfrak{R}_{nl}$  уже не содержится меньших инвариантных подпространств. Начнем с того, что найдем в пространстве  $\mathfrak{S}$  общий собственный вектор коммутирующих эрмитовых операторов  $H_0$ ,  $L^2$ ,  $L_z$ ; так как этот вектор лежит в  $\mathfrak{R}_{nl}$ , то соответствующие собственные значения  $H_0$ ,  $L^2$  равны  $E_n$  и  $l(l+1)$ , а собственное значение  $L_z$  — некоторому  $m_0$ , где  $-l \leq m_0 \leq l$ . Следовательно, подпространство  $\mathfrak{S}$  содержит вектор  $\psi_{nlm_0}$ . Будем применять к  $\psi_{nlm_0}$  операторы  $L_+ = L_1 + iL_2$ ,  $L_- = L_1 - iL_2$ , представляющие матрицы  $\hbar(A_1 + iA_2)$ ,  $\hbar(A_1 - iA_2)$  комплексной оболочки алгебры Ли группы  $SO(3)$ . Поскольку операторы  $L_x$ ,  $L_y$  получаются предельным переходом из операторов  $T_o$  (см. (3.24)), а подпространство  $\mathfrak{S}$  инвариантно, операторы  $L_x$ ,  $L_y$  не выводят за пределы  $\mathfrak{S}$ . То же верно и для их комплексных линейных комбинаций, поскольку  $\mathfrak{S}$  — комплексное линейное пространство. Но, как известно,  $L_+ \psi_{nlm} = \sigma \psi_{nl(m+1)}$  ( $\sigma \neq 0$ ) при  $m < l$  и  $L_- \psi_{nlm} = \tau \psi_{nl(m-1)}$  ( $\tau \neq 0$ ) при  $m > -l$  (откуда и происходит название «повышающий» и «понижающий» операторы для  $L_+$ ,  $L_-$ ). Поэтому последовательное применение  $L_+$ ,  $L_-$  к вектору  $\psi_{nlm_0}$  приводит ко всем  $\psi_{nlm}$ , и все они, по указанному выше свойству операторов  $L_+$ ,  $L_-$ , принадлежат  $\mathfrak{S}$ . Линейные комбинации этих векторов исчерпывают все подпространство  $\mathfrak{R}_{nl}$ , что и требовалось доказать. Итак, подпространство

$\mathfrak{R}_n$  не содержит меньшего инвариантного подпространства. В табл. 1 вертикальные прямоугольники изображают инвариантные подпространства, уже не разложимые на меньшие.

Это приводит к следующему определению. Пусть дано представление  $\{T_g\}$  группы Ли  $G$  в линейном пространстве  $L$ , и  $L_1$  — инвариантное подпространство этого представления. Если  $L_1$  не содержит меньшего инвариантного подпространства того же представления, то  $L_1$  называется *неприводимым подпространством* представления  $\{T_g\}$ . Например, все  $\mathfrak{R}_n$  — неприводимые подпространства представления  $\{T_g\}$  группы  $SO(3)$ . Подпространства  $\mathfrak{R}_n$  при  $n > 1$  приводимы, но  $\mathfrak{R}_1 = \mathfrak{R}_{10}$  неприводимо (ср. табл. 1).

Операторы Казимира позволяют различать неприводимые подпространства, в чем и состоит их главное значение. Можно доказать, что если  $M$  — оператор Казимира представления  $\{T_g\}$  и  $L_1$  — неприводимое подпространство этого представления, то  $L_1$  — собственное подпространство для  $M$ , т. е. для всех векторов  $\psi$ , принадлежащих  $L_1$ , будет  $M\psi = \lambda\psi$ , где  $\lambda$  не зависит от  $\psi$ . Если же  $L_1$  приводимо, то при некоторых предположениях, обычно выполненных в интересующих нас приложениях, существует такой оператор Казимира  $M$ , что  $L_1$  распадается в сумму подпространства с разными собственными значениями  $M$ . Например, каждое  $\mathfrak{R}_n$  есть собственное подпространство оператора Казимира  $H_0$  группы  $SO(3)$  с собственным значением  $E_n$ , но другой оператор Казимира  $L^2$  той же группы имеет собственные подпространства  $\mathfrak{R}_n$  с разными собственными значениями  $l(l+1)$  и тем самым различает неприводимые подпространства внутри приводимых.

Для электрона в кулоновом поле энергетические уровни «вырождены», что связано с группой симметрии системы (состоящей из электрона и заданного кулонова поля ядра). В самом деле, как видно из (5), применение операторов вращения к данному собственному вектору оператора  $H_0$  приводит к другим собственным векторам  $H_0$  с тем же собственным значением, так что получаются собственные подпространства оператора энергии, размерность которых зависит от группы симметрии: неприводимые подпространства группы  $SO(3)$ , т. е. все  $\mathfrak{R}_n$ , должны быть собственными подпространствами  $H_0$ . Но в действительности есть еще так называемое «случайное» вырождение, необъяснимое с помощью группы  $SO(3)$ : собственные значения  $H_0$  совпадают для всех подпространств  $\mathfrak{R}_n$  с одним и тем же  $n$ . Как мы увидим, это явление связано с тем, что группа  $SO(3)$  не исчерпывает всей симметрии гамильтониана  $H_0$ . Но сначала проследим, как может *уменьшиться* его симметрия.

Рассмотрим возмущение гамильтониана  $H_0$ , связанное с учетом «экранирующего» действия других электронов атома на выделенный электрон при  $Z > 1^*$ . Это приводит к возникновению добавочного сферически симметричного потенциала  $H_1$ , который можно считать малым по сравнению с  $H_0$ . Оператор  $H_0 + H_1$  остается инвариантным относительно группы  $SO(3)$ , но теряет ту большую симметрию, о которой только что была речь (и которая связана со специфическим видом кулонова поля). Подпространства  $\mathfrak{R}_n$  остаются неприводимыми подпространствами группы  $SO(3)$ , но принадлежат теперь различным собственным значениям  $H_0 + H_1$ , зависящим не только от  $n$ , но и от  $l$ . Тем самым вырожденность энергетических уровней уменьшается.

Дальнейшее уменьшение симметрии происходит при наложении слабого магнитного поля, что приводит к появлению в выражении энергии еще одного слагаемого  $H_2$ , малого по сравнению с  $H_1$ . Гамильтониан принимает вид

$$H = H_0 + H_1 + H_2. \quad (1.4.10)$$

Этот оператор уже перестановочен не со всеми вращениями, а только

\* В такой приближенной трактовке не принимается во внимание неразличимость электронов.

с операторами вращений вокруг оси, по которой направлено магнитное поле и которую мы примем за ось  $z$ . Такие вращения можно отождествить с вращениями плоскости  $xy$ . Они образуют подгруппу группы  $SO(3)$ , обозначаемую через  $SO(2)$ . Произведем редукцию представления  $\{T_o\}$  группы  $SO(3)$  на подгруппу  $SO(2)$ , т. е. будем рассматривать только операторы  $T_o$ , соответствующие вращениям этой подгруппы. Тогда, как мы сейчас увидим, неприводимые подпространства  $\mathfrak{H}_{nl}$  группы  $SO(3)$  при  $n > 1$  становятся *приводимыми* по отношению к подгруппе  $SO(2)$ . В самом деле, любой вектор  $\psi_{nlm}$  является собственным вектором для  $L_z$  и, следовательно,  $L_z$  переводит все кратные  $\psi_{nlm}$  в кратные того же вектора. Но  $L_z$  — генератор вращений вокруг оси  $z$ . Поэтому *одномерное* подпространство кратных вектора  $\psi_{nlm}$  инвариантно относительно группы  $SO(2)$ , состоящей из этих вращений. Итак, при редукции на подгруппу  $SO(2)$  пространство  $\mathfrak{H}_{nl}$  распадается в сумму одномерных инвариантных подпространств этой подгруппы. Ввиду одномерности подпространств такая симметрия уже не вызывает вырождения энергетических уровней, так что оператор энергии (10) имеет простые собственные значения.

Теперь посмотрим, что происходит при *увеличении* симметрии. В 1935 г. В. А. Фок показал в пионерской работе [17], намного опередившей развитие физики симметрии, что в пространстве волновых функций  $\psi(x, y, z)$  можно определить представление группы вращений четырехмерного евклидова пространства  $SO(4)^*$ , операторы которого перестановочны с кулоновым гамильтонианом  $H_0$ . Это представление будет построено в гл. 3. Группа  $SO(4)$  и является полной группой симметрии кулонова гамильтониана  $H_0$ . Подпространства  $\mathfrak{H}_n$  оказываются неприводимыми для группы  $SO(4)$ . В табл. 1 операторы  $SO(4)$  соединяют между собой разные прямоугольники одного и того же столбца. Если ограничиться вращениями четырехмерного пространства  $R(4)$ , сохраняющими координату  $x^4$ , т. е. такими, что  $x'^4 = x^4$ , то получается подгруппа, осуществляющая вращения в трехмерной плоскости  $x^4 = 0$ , которую можно отождествить с  $SO(3)$ . Редукция представления Фока на эту подгруппу оказывается представлением  $SO(3)$ , введенным в 1.1. При такой редукции симметрия системы уменьшается и сводится к симметрии гамильтониана  $H_0 + H_1$ .

Наконец, в 1965 г. И. А. Малкин и В. И. Манько [8] показали, что представление Фока можно расширить до представления так называемой конформной группы  $SO(4, 2)$ , содержащей группу  $SO(4)$ . При этом неприводимым оказывается уже все пространство  $\mathfrak{H}$ . В табл. 1 операторы такого представления соединяют все клетки  $(nlm)$ . Описание этого представления, служащего в нашей работе для других целей, содержится также в гл. 3. По отношению к группе  $SO(4, 2)$  уже кулонов гамильтониан  $H_0$  имеет нарушенную симметрию. Последовательное *нарушение симметрии* при уменьшении группы описывается следующей цепочкой подгрупп:

$$SO(4, 2) \supset SO(4) \supset SO(3) \supset SO(2). \quad (1.4.11)$$

## Глава 2

### ПРИНЦИПЫ КЛАССИФИКАЦИИ ЧАСТИЦ

#### 2.1. Понятие спина

При возникновении новых физических теорий важную роль играют аналогии с известными понятиями. Для симметрии адронов и связанной с нею теории симметрии атомов, излагаемой в этой работе, основное значение имеет аналогия с понятием *спина*.

\*) Это пространство  $R(4)$  с метрической формой  $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2$ , не следует смешивать с *псевдоевклидовым* пространством Минковского, метрика которого знакпеременна. Оно не имеет отношения к теории относительности.

Спин является «внутренней степенью свободы», не имеющей классического аналога. Для описания собственного магнитного момента электрона Паули предложил в 1926 г. изображать состояния электрона *двухкомпонентными* волновыми функциями

$$\psi = \begin{bmatrix} \psi_1(x, y, z) \\ \psi_2(x, y, z) \end{bmatrix}. \quad (2.1.1)$$

Векторы состояния  $\psi$  складываются и умножаются на комплексные числа по компонентам, т. е.

$$\varphi + \psi = \begin{bmatrix} \varphi_1(x, y, z) + \psi_1(x, y, z) \\ \varphi_2(x, y, z) + \psi_2(x, y, z) \end{bmatrix}, \quad \lambda\psi = \begin{bmatrix} \lambda\psi_1(x, y, z) \\ \lambda\psi_2(x, y, z) \end{bmatrix}, \quad (2.1.2)$$

и для них вводится скалярное произведение

$$\langle \varphi | \psi \rangle = \int (\varphi_1^* \psi_1 + \varphi_2^* \psi_2) dV. \quad (2.1.3)$$

Вектор  $\psi$  называется *нормированным*, если  $\langle \psi | \psi \rangle = 1$ . Для нормированных векторов  $\varphi, \psi$  вероятность перехода из состояния  $\varphi$  в состояние  $\psi$  выражается формулой  $|\langle \varphi | \psi \rangle|^2$ . Если состояние электрона задано двухкомпонентной волновой функцией  $\psi$ , то вероятность нахождения электрона в области  $D$  выражается в виде

$$\int_D (|\psi_1|^2 + |\psi_2|^2) dV. \quad (2.1.4)$$

Таким образом, состояние электрона с учетом спина описывается (в нерелятивистской теории) двухкомпонентными волновыми функциями, образующими гильбертово пространство. Обозначим это пространство через  $\mathfrak{H}^2$ .

Как мы видели, в квантовой модели Шредингера (без учета спина) важную роль играет группа вращений  $SO(3)$ . Естественно предположить, что эта группа действует и в пространстве волновых функций со спином (1). Чтобы найти соответствующее представление, будем руководствоваться аналогией между двухкомпонентными функциями (1) и векторными полями, такими как поле скоростей  $\mathbf{v}(x, y, z)$  или силовое поле  $\mathbf{F}(x, y, z)$ .

При вращении  $O$  векторного поля  $\mathbf{v}$  вокруг начала координат точка  $x = (x, y, z)$  переходит в  $x' = (x', y', z')$ , а вектор поля  $\mathbf{v}(x, y, z)$  в точке  $(x, y, z)$  — в вектор  $\mathbf{v}'(x', y', z')$ , компоненты которого получаются из компонент  $v_i(x, y, z)$  ( $i = 1, 2, 3$ ) по формулам

$$v'_i(x', y', z') = \sum_{j=1}^3 o_{ij} v_j(x, y, z). \quad (2.1.5)$$

Если рассматривать двухкомпонентную волновую функцию (1) как аналог векторного поля, то естественно искать закон ее преобразования при вращении  $O$  в виде, аналогичном (5):

$$\psi'_\sigma(x', y', z') = \sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau} \psi_\tau(x, y, z), \quad (2.1.6)$$

где  $u = (u_{\sigma\tau})$  — матрица второго порядка, соответствующая  $O$ . Заменяя для краткости  $(x, y, z)$  через  $x$  и  $(x', y', z')$  через  $x'$ , имеем

$$\psi'_\sigma(x') = \sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau} \psi_\tau(x). \quad (2.1.7)$$

Подставив вместо  $x$  точку  $O^{-1}x$ , получаем вид волновой функции  $\psi'$ :

$$\psi'_\sigma(x) = \sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau} \psi_\tau(O^{-1}x). \quad (2.1.8)$$

Предположим, что каждому вращению  $O$  поставлено в соответствие преобразование вида (8) и тем самым матрица второго порядка  $u = u_o$ . Тогда при последовательном выполнении вращений  $O_2, O_1$  получаем по правилу (8)

$$\psi'_\tau(x) = \sum_{\rho=1}^2 u_{\tau\rho}^{(2)} \psi_\rho(O_2^{-1}x), \quad \psi''_\sigma(x) = \sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau}^{(1)} \psi'_\tau(O_1^{-1}x). \quad (2.1.9)$$

Заменяя в первом равенстве (9)  $x$  на  $O_1^{-1}x$  и подставив  $\psi'_\tau(O_1^{-1}x)$  во второе, имеем

$$\psi''_\sigma(x) = \sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau}^{(1)} \sum_{\rho=1}^2 u_{\tau\rho}^{(2)} \psi_\rho(O_2^{-1}O_1^{-1}x) = \sum_{\rho=1}^2 (u^{(1)}u^{(2)})_{\sigma\rho} \psi_\rho((O_1O_2)^{-1}x). \quad (2.1.10)$$

С другой стороны, вращению  $O_1O_2$  должно соответствовать преобразование вида (8) с матрицей  $u$ , сопоставленной  $O_1O_2$ . Естественно считать это преобразование совпадающим с (10), что приводит к следующему условию для двумерных матриц  $u_o$ :  $u_{O_1O_2} = u_{O_1}u_{O_2}$ . Далее, естественно считать, что тождественному вращению  $e$  соответствует тождественное преобразование волновых функций, что осуществляется при  $u_e = 1$ . Все эти соображения можно выразить следующим образом: если соответствие  $O \rightarrow u_o$  задает представление группы  $SO(3)$  двумерными матрицами, то формула (8) с  $u = u_o$  определяет представление той же группы в пространстве  $\mathbb{R}^2$ .

Если, кроме того, потребовать, чтобы представление в пространстве  $\mathbb{R}^2$  было унитарным, т. е. сохраняло вероятности переходов, то надо взять в качестве  $u_o$  унитарные матрицы, т. е. матрицы, удовлетворяющие условию  $\sum_{\sigma=1}^2 u_{\sigma\tau}^* u_{\sigma\rho} = \delta_{\tau\rho}$ . Тогда, поскольку объем  $dV$  сохраняется при вращении, имеем

$$\begin{aligned} \langle \varphi' | \psi' \rangle &= \int \sum_{\sigma=1}^2 \varphi'^*_{\sigma}(x) \psi'_{\sigma}(x) dV = \\ &= \int \sum_{\sigma=1}^2 \left( \sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau} \varphi_{\tau}(O^{-1}x) \right)^* \left( \sum_{\rho=1}^2 u_{\sigma\rho} \psi_{\rho}(O^{-1}x) \right) dV = \\ &= \int \sum_{\tau,\rho=1}^2 \left( \sum_{\sigma=1}^2 u_{\sigma\tau}^* u_{\sigma\rho} \right) \varphi_{\tau}^*(O^{-1}x) \psi_{\rho}(O^{-1}x) dV = \\ &= \int \sum_{\tau=1}^2 \varphi_{\tau}^*(x) \psi_{\tau}(x) dV = \langle \varphi | \psi \rangle. \end{aligned} \quad (2.1.11)$$

Таким образом, чтобы найти закон преобразования двухкомпонентных волновых функций, надо построить унитарное представление группы  $SO(3)$  матрицами второго порядка. Матрицы второго порядка задают линейные операторы в двумерном комплексном пространстве  $C(2)$ , состоящем из векторов  $z = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \end{pmatrix}$ :

$$z'_{\sigma} = \sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau} z_{\tau} \quad (\sigma = 1, 2). \quad (2.1.12)$$

Введем в  $C(2)$  скалярное произведение по формуле

$$\langle z^{(1)} | z^{(2)} \rangle = \sum_{\tau=1}^2 z_{\tau}^{(1)} z_{\tau}^{(2)*}. \quad (2.1.13)$$

Тогда унитарность матрицы  $u$  эквивалентна унитарности соответствующего линейного оператора, т. е. сохранению скалярного произведения (13).



Для построения двумерного унитарного представления группы  $SO(3)$  воспользуемся методом, изложенным в 1.3. Алгебра Ли этой группы имеет базис (1.3.18) с перестановочными соотношениями (1.3.19). Сопоставим каждой из матриц (18) линейный оператор в  $C(2)$ , или, что то же, матрицу второго порядка, с теми же перестановочными соотношениями. В качестве таких матриц можно взять  $\tau_k = \frac{1}{2} \sigma_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ), где  $\sigma_k$  — матрицы Паули:

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.1.14)$$

Как легко проверить,

$$[\tau_1, \tau_2] = i\tau_3, \quad [\tau_2, \tau_3] = i\tau_1, \quad [\tau_3, \tau_1] = i\tau_2. \quad (2.1.15)$$

Алгебру Ли группы  $SO(3)$  при этом представляют линейные комбинации матриц  $\tau_k$  с вещественными коэффициентами, т. е. эрмитовы матрицы с нулевым следом, а группу  $SO(3)$  согласно (1.3.20) — унитарные матрицы с определителем 1 (напомним, что для любой матрицы  $K$  имеем  $\det e^K = e^{\text{Sp} K}$ ). Далее будет показано, что построенное представление  $\{u_\alpha\}$  неприводимо. Согласно (1.3.25) однопараметрической подгруппе вращений вокруг оси  $z$  соответствует подгруппа матриц

$$u_\alpha = e^{-i\alpha\tau_3} = e^{-i\alpha\sigma_3/2}, \quad (2.1.16)$$

и аналогично строятся представления вращений вокруг осей  $x, y$ .

Вернемся теперь к закону преобразования двухкомпонентных волновых функций (8). Обозначим через  $\{T_\alpha^2\}$  представление  $SO(3)$  с только что построенными матрицами  $u_\alpha$ . Тогда для подгруппы вращений  $\{O_\alpha\}$  вокруг оси  $z$  получаем однопараметрическую подгруппу операторов  $\{T_{O_\alpha}^2\}$ , переводящих вектор  $\psi$  пространства  $\mathbb{R}^2$  в вектор  $\psi'_\alpha$  с компонентами

$$\begin{aligned} (\psi'_\alpha)_1 &= e^{-i\alpha/2} \psi_1 (x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z), \\ (\psi'_\alpha)_2 &= e^{i\alpha/2} \psi_2 (x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z). \end{aligned} \quad (2.1.17)$$

Найдем наблюдаемую нашей системы (электрона с учетом спина), соответствующую этой подгруппе (ср. (1.3.25)):

$$i \frac{d}{d\alpha} (T_\alpha^2 \psi) |_{\alpha=0} = -i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix} + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \end{bmatrix}. \quad (2.1.18)$$

Умножая обе части на  $\hbar$ , получаем эрмитов оператор на пространстве состояний системы

$$J_z \psi = \frac{\hbar}{i} \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi + \frac{\hbar}{2} \sigma_3 \psi. \quad (2.1.19)$$

Первое слагаемое в (19) есть оператор орбитального момента  $L_z$ , такой же, как в однокомпонентной теории Шредингера; он применяется отдельно к каждой компоненте. Второе слагаемое есть оператор спинового момента электрона, обозначаемый через  $S_z$ . Это матричный оператор, преобразующий компоненты  $\psi$ -функции, но не действующий на их переменные. Аналогично получаются формулы для  $J_x, J_y$ , содержащие операторы спинового момента  $S_x, S_y$ . Операторы  $J_x, J_y, J_z$  называются операторами *полного момента* электрона. Наблюдаемые на опыте значения проекций момента электрона являются собственными значениями этих операторов. Если можно пренебречь спином,  $J_k$  сводятся к проекциям орбитального момента  $L_k$ , как в теории Шредингера. Приведенный вывод операторов полного момента, подчеркивающий их групповое происхождение, близок к выводу Паули в [9].

Оператор проекции спинного момента  $S_z$  имеет собственные значения  $-\hbar/2, \hbar/2$ , соответствующие собственным значениям  $-1, 1$  матрицы  $\sigma_z$ ; принадлежащие им собственные функции имеют вид

$$\begin{bmatrix} 0 \\ \psi \end{bmatrix}, \quad \begin{bmatrix} \psi \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (2.1.20)$$

Такие же собственные значения имеют операторы  $S_x, S_y$ ; нетрудно найти принадлежащие им собственные функции. Матрицы  $\sigma_k$  выбраны таким образом, чтобы матрица  $\sigma_z$ , соответствующая вращениям вокруг оси  $z$ , имела диагональный вид. Это упрощает решение задач с внешним полем, направление которого принимается за ось  $z$ , как, например, при рассмотрении эффектов Зеемана и Штарка.

Легко проверить, что оператор  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$  перестановочен с операторами спинного момента  $S_x, S_y, S_z$ , представляющими алгебру Ли группы  $SO(3)$  в пространстве  $C(2)$ , и, следовательно, является оператором Казимира этого представления.  $C(2)$  является собственным пространством оператора  $S^2$  с собственным значением  $(1/2)(1/2 + 1)\hbar^2 = (3/4)\hbar^2$ . Отметим, что это выражение имеет вид  $l(l+1)$ , напоминающий собственные значения оператора орбитального момента  $L^2$ , но с полуцелым  $l = 1/2$ . Наибольшее значение проекций спинного момента, деленное на  $\hbar$ , называется *спином* электрона; спин электрона равен  $1/2$ .

Паули распространил свою теорию электрона на частицы с любым спином. Если вместо двухкомпонентных волновых функций взять функции с  $d$  компонентами, где  $d$  — любое неотрицательное число, то можно повторить предыдущие построения, заменив матрицы  $\tau_k$  матрицами  $s_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) порядка  $d$  с теми же перестановочными соотношениями. При этом получается представление группы  $SO(3)$  в пространстве  $d$ -компонентных волновых функций, аналогичное (8). Пользуясь повышающим и понижающим операторами  $s_+ = s_1 + is_2, s_- = s_1 - is_2$ , можно доказать неприводимость представления  $SO(3)$  в пространстве  $C(d)$  точно так же, как это было сделано в 1.4 для пространства  $\mathcal{R}_n$ . При этом собственные значения операторов спина  $S_z$ , в единицах  $\hbar$ , равны  $-s, -s+1, \dots, s-1, s$ , где  $s$  связано с  $d$  соотношением  $d = 2s + 1$ ; тем самым  $s$  — целое или полуцелое число, т. е.  $s = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ . Число  $s$  называется *спином* частицы, описываемой  $d$ -компонентной волновой функцией. Значение оператора Казимира  $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$  на пространстве  $C(d)$  равно  $s(s+1)\hbar^2$ .

Заметим, что способ построения представлений, использующий алгебру Ли, обеспечивает их существование лишь локально, т. е. в окрестности единиц группы  $SO(3)$  (ср. 1.3). Можно доказать, что в пространствах нечетной размерности, соответствующим целым  $s$ , представление существует на всей группе, а в пространствах четной размерности представление существует лишь локально. В последнем случае можно построить «двузначное» представление, сопоставляющее каждому вращению пару матриц порядка  $d$ , различающихся только знаком.

## 2.2. Изотопический спин

В 1934 г. Гейзенберг применил понятие спина к другой ситуации — к описанию протона и нейтрона. В теории электрона Паули различные спинные состояния электрона приписываются одной и той же частице, поскольку электрон во всех спинных состояниях имеет одну и ту же массу, один и тот же заряд, и все эти состояния подчиняются одному уравнению движения. Протон и нейтрон имеют очень близкие, но неравные массы (соответственно 938,3 и 939,5 Мэв) и разные заряды (+1 и 0). По аналогии со спинными состояниями электрона, Гейзенберг предложил считать эти две частицы различными состояниями одной и той же квантовой системы. При этом «расщепление» масс объясняется

по аналогии с расщеплением энергетических уровней электрона в магнитном поле, а заряд играет роль, аналогичную спиновому моменту. Для квантовой системы, рассматриваемой в этом построении, вводится наименование «нуклон».

В отличие от электрона, нуклон не имеет в этой теории динамического описания в классическом смысле, т. е. у него нет уравнения движения. Предметом ее являются только *спиновые состояния* системы, а не ее пространственно-временное поведение. Поэтому «волновые функции» не будут теперь зависеть от координат и времени. Такая точка зрения в некотором смысле противоположна принятой нами в 1.1, где мы как раз пренебрегли спином. Теперь мы хотим построить *квантовую механику спина*. Применение такого термина будет оправдано, когда мы обнаружим в этом случае все характерные признаки квантовомеханического описания: гильбертово пространство векторов состояния, представление группы симметрии в этом пространстве, построение наблюдаемых из алгебры Ли этой группы и ее универсальной обертывающей алгебры. Групповая точка зрения на квантовую механику, изложенная в разд. 1, не предполагает, что квантовая теория описывает движение системы в пространстве и времени. Поскольку в основе такой теории лежит группа симметрии, то разные группы порождают разные квантовые теории, так что нет смысла говорить о квантовой теории вообще, без указания ее группы симметрии. «Нерелятивистская» квантовая теория соответствует группе Галилея, «релятивистская» — группе Лоренца, и как раз эти группы связаны с пространственно-временным описанием. Другие же группы симметрии, к которым нас привело рассмотрение спина, не обязательно связаны с временем и пространством, а могут, например, описывать возможные внутренние степени свободы системы. Именно такие группы симметрии нас интересуют. Заметим, что соответствующие им квантовые теории не являются ни релятивистскими, ни нерелятивистскими: их можно было бы назвать «арелятивистскими», поскольку они не связаны ни с группой Лоренца, ни с группой Галилея.

Простейшая из квантовых теорий — это теория двухкомпонентного спина. Ее векторы состояний суть векторы двумерного комплексного линейного пространства с двумя комплексными компонентами  $z_1, z_2$ , которые мы будем записывать в виде столбцов

$$z = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \end{bmatrix}. \quad (2.2.1)$$

Такие векторы называются *спинорами*. Следует заметить, что понятие «вектора» трактуется иногда в узком смысле: в этом смысле векторами называют лишь векторы трехмерного евклидова пространства и четырехмерного пространства Минковского. Эти пространства вещественны, и векторы в них имеют вещественные компоненты. В широком смысле говорят о векторах действительного или комплексного пространства любой (даже бесконечной) размерности. В этом широком смысле спиноры суть векторы двумерного комплексного пространства  $C(2)$ , введенного в 2.1. Так как в  $C(2)$  имеется скалярное произведение (1.13),  $C(2)$  является гильбертовым пространством. Подчеркнем, что гильбертовым пространством называется любое комплексное пространство со скалярным произведением, конечной или бесконечной размерности. Пространство  $\mathfrak{H}$  из 1.1, состоящее из волновых функций, бесконечномерно, так как его векторы имеют бесконечный базис (например,  $\psi_{nlm}$ ). Пространство  $C(2)$  двумерно: его базис составляют, например, нормированные ортогональные векторы

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad e_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}. \quad (2.2.2)$$

Итак, мы построили для интересующей нас квантовой системы — «двухкомпонентного спина» — пространство состояний  $C(2)$ . В качестве группы симметрии возьмем (в отличие от группы  $SO(3)$ , игравшей глав-

ную роль в гл. 1) группу унитарных матриц второго порядка с определителем 1, обозначаемую  $SU(2)$ . Напомним, что матрица  $u = (u_{\sigma\tau})$  называется *унитарной*, если ее комплексные элементы удовлетворяют одному из равносильных условий

$$\sum_{\tau=1}^2 u_{\sigma\tau}^* u_{\rho\tau} = \delta_{\sigma\rho}, \quad \sum_{\tau=1}^2 u_{\tau\sigma}^* u_{\tau\rho} = \delta_{\sigma\rho}, \quad (2.2.3)$$

означающих, что преобразование спиноров (1.12) сохраняет скалярное произведение (1.13). Определитель такой матрицы по модулю равен 1, и требование, чтобы он был равен 1, устраняет несущественные в данном случае фазовые множители.

Поскольку каждая матрица группы  $SU(2)$  задает оператор, преобразующий векторы пространства  $C(2)$  по правилу (1.12), тем самым определено представление группы  $SU(2)$  в пространстве  $C(2)$ , которое (в физической литературе) иногда называется «фундаментальным». Легко проверить, что это представление неприводимо, т. е. в  $C(2)$  не существует меньшего (одномерного) инвариантного подпространства. В силу (1.13), фундаментальное представление унитарно.

Согласно общей концепции, описанной в 1.2, из группы симметрии  $SU(2)$  должны получиться основные наблюдаемые нашей квантовой системы — операторы, представляющие матрицы алгебры Ли группы  $SU(2)$ . Рассмотрим в этой группе однопараметрическую подгруппу

$$u_{\alpha} = e^{-i\alpha\tau_3} = e^{-i\alpha\sigma_3/2}. \quad (2.2.4)$$

Заметим, что в 2.1 эта подгруппа была представлением подгруппы вращений вокруг оси  $z$ , теперь же, когда основной группой симметрии является  $SU(2)$ , (4) изображает подгруппу группы Ли и, в то же время, по свойству фундаментального представления, подгруппу ее представляющих операторов в пространстве  $C(2)$ . Соответствующий оператор алгебры Ли (ср. (1.3.25)) задается матрицей  $\tau_3$ . Аналогично строятся однопараметрические подгруппы с генераторами  $\tau_1$ ,  $\tau_2$ . Перестановочные соотношения для  $\tau_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) нам уже известны (см. (1.15)). Остается доказать, что линейно независимые матрицы  $\tau_1$ ,  $\tau_2$ ,  $\tau_3$  составляют базис алгебры Ли. Для этого надо лишь проверить, что размерность группы  $SU(2)$  равна 3, т. е., что унитарные матрицы с определителем 1 зависят от трех свободно меняющихся параметров.

Итак, основные наблюдаемые нашей квантовой системы —  $\tau_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ). Собственные значения  $\tau_3$  легко найти, так как векторы (2) являются собственными для  $\tau_3$ ; эти значения равны  $1/2$ ,  $-1/2$ . Такие же собственные значения имеют  $\tau_1$ ,  $\tau_2$ ; в то время как матрица  $\sigma_3$  выбрана в особенно простом виде, для  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$  собственные векторы находятся после некоторых вычислений.

Роль гамильтониана играет для «двухкомпонентного спина» оператор Казимира фундаментального представления  $SU(2)$ , равный  $\tau^2 = \tau_1^2 + \tau_2^2 + \tau_3^2$ .  $C(2)$  является собственным пространством этого оператора, с собственным значением  $(1/2)(1 + 1/2) = 3/4$ . Этот оператор, перестановочный с группой симметрии системы, в случае «вполне симметричной» системы можно считать, после умножения на некоторую постоянную, оператором энергии. Такой вполне симметричной системой и является электронный спин. Так как масса пропорциональна энергии, для такой системы можно отождествить гамильтониан с оператором массы. Надо иметь в виду, что в нерелятивистской квантовой механике под энергией понимается лишь небольшая добавка к «энергии покоя», связанная с движением частицы; если не учитывается пространственно-временной аспект частицы, эта добавка несущественна и энергию надо считать энергией покоя  $mc^2$ . Таким образом, мы приходим к понятию оператора массы и к отождествлению гамильтониана с этим оператором. В случае электронного спина оператор массы следует считать кратным

оператору Казимира  $\tau^2$ , вследствие чего всем спиновым состоянием электрона приписывается, в согласии с опытом, одна и та же масса.

Применим теперь тот же математический аппарат к описанию состояний «нуклона», рассматривая два «выделенных» состояния этой системы — «протонное» и «нейтронное» — как аналоги состояний электрона с определенным значением проекции спина ( $S_z = \pm \hbar/2$ ). Чтобы отличить этот новый вид спина от электронного, его называют *изотопическим спином* \*) или, короче, *изоспином*. Во избежание смещения матрицы  $\tau_k$  в случае изоспина обозначаются  $T_k$ . Наблюдаемые изоспина не перестановочны, и только одна из них может иметь определенное значение; выберем из этих равноправных наблюдаемых  $T_3$ . Собственные значения  $T_3$  равны  $1/2$  и  $-1/2$ , с принадлежащими им собственными векторами  $e_1$ ,  $e_2$  (2). Будем считать  $e_1$  вектором протонного состояния, а  $e_2$  — вектором нейтронного состояния нуклона (это условное соглашение, так как оба вектора равноправны). Тогда заряд частицы  $Q$  можно выразить через значение  $T_3$ :

$$Q = T_3 + 1/2. \quad (2.2.5)$$

При всей простоте этой связи такой подход к электрическому заряду был необычен для традиционной квантовой механики, где заряд всегда выступал в качестве постоянной числовой характеристики частицы (так же, как и масса), но не рассматривался как наблюдаемая, т. е. как эрмитов оператор, действующий на векторы состояния системы. Выражение (5) связывает заряд с оператором  $T_3$ , входящим в алгебру Ли с перестановочными соотношениями, характерными для моментов. Таким образом, заряд оказывается наблюдаемой, аналогичной проекциям момента. Такая точка зрения весьма плодотворна и, как мы увидим, ведет к далеко идущим обобщениям.

В отличие от электронного спина, изотопический спин связан с расщеплением массы и, следовательно, с *нарушением симметрии*. Поскольку набор коммутирующих основных наблюдаемых в нашем случае сводится к одному из операторов  $T_k$ , например  $T_3$ , то для построения возмущенного гамильтониана в нашем распоряжении имеется только  $T_3$ . По аналогии с энергией электрона, возникающей при наложении магнитного поля (ср. оператор  $H_2$  в 1.4), можно предположить, что возмущающий член оператора массы кратен  $T_3$ . Ввиду соотношения (5) можно взять оператор массы в виде

$$M = \alpha T^2 + \beta Q, \quad (2.2.6)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$  — числовые множители; свободный член здесь отбрасывается, поскольку «нерасщепленная» масса нуклона  $\alpha T^2$  неизвестна и, следовательно, неизвестно, от чего отсчитывать возмущение массы. Поскольку  $T^2$  есть оператор Казимира группы  $SU(2)$ , принадлежащий универсальной обертывающей алгебре ее алгебры Ли, а  $T_3$  — оператор алгебры Ли той же группы, выражение (6) построено в соответствии с общей схемой из 1.3 и тем самым масса частицы, как и ее заряд, становится наблюдаемой квантовой теории. Нейтрон и протон изображаются векторами состояния нуклона, собственными для оператора  $M$ , т. е. рассматриваются как состояния нуклона с определенным значением массы. Так как расхождение между массами протона и нейтрона невелико, то второе слагаемое формулы (6) можно считать малым по сравнению с первым, как это предполагается в концепции «нарушенной симметрии».

Наряду с семейством двух нуклонов, рассмотренным Гейзенбергом, существуют и другие семейства частиц с очень близкими массами, т. е. с разностями масс, малыми по сравнению с массой: три  $\Sigma$ -частицы  $\Sigma^-$ ,  $\Sigma^0$ ,  $\Sigma^+$ , с зарядами  $-1$ ,  $0$ ,  $1$ , четыре  $\Delta$ -частицы  $\Delta^-$ ,  $\Delta^0$ ,  $\Delta^+$ ,  $\Delta^{++}$ , с зарядами  $-1$ ,  $0$ ,  $1$ ,  $2$  и т. д. Эти семейства называются изотопическими мульт-

\*) Термин не имеет ничего общего с изотопами элементов.

типлетами (дублет из двух частиц, триплет из трех, квадруплет из четырех и т. д.); они весьма важны для классификации частиц. Естественно описать их с помощью представлений группы  $SU(2)$  различных размерностей, подобно спиновым состояниям частиц любого спина, о которых говорилось в конце 2.1. Так, три  $\Sigma$ -частицы считаются состояниями квантовой системы « $\Sigma$ » с трехмерным пространством состояний  $C(3)$ , где определено неприводимое представление группы  $SU(2)$ , и т. п. Во всех таких пространствах действуют операторы, представляющие алгебру Ли этой группы, которые мы будем, для простоты, обозначать так же, как матрицы алгебры Ли, т. е.  $T_1, T_2, T_3$ . Как и в случае обычного спина, проекция изоспина  $T_3$  принимает (целые и полуцелые) значения  $-T, -T+1, \dots, T-1, T$ , равноудаленные друг от друга; поскольку заряды частиц изотопического мультиплета также равноудалены, естественно искать связь между  $T_3$  и  $Q$ . Оказывается, что

$$Q = T_3 + n/2, \quad (2.2.7)$$

где  $n$  — целое число (положительное или отрицательное), зависящее от мультиплета. Число частиц мультиплета равно  $2T+1$ ;  $T$  называется изоспином всех этих частиц. Выражая собственное значение оператора Казимира  $T^2 = T_1^2 + T_2^2 + T_3^2$  на неприводимом пространстве  $C(2T+1)$  через  $T$ , получаем  $T(T+1)$ , точно так же, как для оператора полного момента получается  $l(l+1)$ . Подразумевая замену оператора его собственным значением, часто пишут  $T(T+1)$  вместо  $T^2$ . Оказывается, что расщепление масс в пределах изотопического мультиплета можно приблизительно описать оператором

$$M = \alpha T(T+1) + \beta + \gamma Q + \delta Q^2, \quad (2.2.8)$$

где коэффициенты  $\alpha, \beta, \gamma, \delta$  зависят от мультиплета.

По аналогии с обычной квантовой механикой, расщепление масс в изотопических мультиплетах можно рассматривать как результат некоторого «взаимодействия». Без «возмущающего» члена мы имели бы одинаковые массы во всех состояниях, подобно вырожденному уровню энергии электрона в сферически симметричном поле. При включении магнитного поля, создаваемого внешними источниками, происходит взаимодействие между этим полем и электроном, причем внешнее поле практически не меняется, а энергетические уровни атомного электрона расщепляются. Точно так же, введение возмущающего члена в массовую формулу можно рассматривать как включение некоторого взаимодействия, нарушающего симметрию «нуклона». Различие состоит в том, что «нуклон» в состоянии ненарушенной симметрии в природе не существует. Верно, что и электрон в строго кулоновском поле также является идеализацией, так как даже протон в качестве ядра оказывается более сложным объектом, чем точечный источник поля. Но существует достаточное приближение к кулоновской симметрии, чтобы описание нарушения этой симметрии выглядело как возмущение реального состояния системы. В случае симметрии «нуклона» о реальности точной  $SU(2)$ -симметрии говорить не приходится. Далее, здесь нет взаимодействия с внешней системой: надо себе представить, что «нуклон» взаимодействует сам с собой, через создаваемое им же поле, наподобие того, как электрон в вакууме «обрастает массой» в результате «самодействия». Такое обобщение понятий симметричного состояния системы и взаимодействия характерно для современной квантовой физики.

Для обычных систем, для которых представляет интерес пространственно-временное поведение, пространство состояний состоит из  $\psi$ -функций и, следовательно, бесконечномерно. В случае изотопических мультиплетов, когда интересуются внутренними степенями свободы частиц, пространство состояний оказывается конечномерным гильбертовым пространством. В остальном, как уже было сказано, здесь присутствуют все

основные черты квантовой теории: представление группы симметрии в пространстве векторов состояния, построение наблюдаемых из алгебры Ли этой группы и гамильтониана из ее операторов Казимира.

Некоторые осложнения связаны с «принципом суперпозиции». В обычной формулировке он гласит: если  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  являются векторами состояния квантовой системы, то все их ненулевые линейные комбинации  $\alpha\psi_1 + \beta\psi_2$  также являются векторами, изображающими возможные состояния той же системы. Как уже отмечено, в простых случаях, когда все векторы гильбертова пространства изображают возможные состояния, это попросту означает линейность пространства. Бывают, однако, случаи, когда желательно сохранить гильбертово пространство в качестве средства описания системы, но уже не все векторы этого пространства можно считать изображающими физически возможные состояния системы. Впервые такая ситуация встретилась в квантовой электродинамике, где приходится рассматривать системы из некоторого (переменного) числа электронов и позитронов. Аппарат квантовой теории требует, чтобы состояние такой системы задавалось вектором соответствующего гильбертова пространства (так называемого пространства Фока). Но если, например,  $\psi_-$  — состояние с единственным электроном, а  $\psi_+$  — состояние с единственным позитроном, то суперпозиция  $\alpha\psi_+ + \beta\psi_-$  по общим принципам квантовой теории должна истолковываться как состояние, в котором частица с вероятностью  $|\alpha|^2$  является электроном и с вероятностью  $|\beta|^2$  — позитроном. Такому состоянию нельзя приписать реальное существование. Это приводит к необходимости ограничить применение «принципа суперпозиции»: сохраняя гильбертово пространство в качестве математического аппарата, придают физический смысл лишь тем его векторам, которые принадлежат некоторым его подпространствам, например, подпространствам с определенным значением заряда. В этом заключается высказанный Вигнером «принцип суперотбора». В вопросах классификации частиц указанный принцип действует особенно сильно: если, например,  $e_1$  изображает протонное состояние нуклона, а  $e_2$  — нейтронное, то при ненулевых  $\alpha$ ,  $\beta$  линейные комбинации  $\alpha e_1 + \beta e_2$  не изображают реальных физических состояний нуклона, так как частица существует лишь в виде протона или нейтрона. Но такие векторы неизбежны при описании нуклона, так как представление его группы симметрии строится в линейном пространстве. Физически реальны лишь состояния нуклона, изображаемые векторами  $e_1$ ,  $e_2$ . Выраженная здесь точка зрения на «принцип суперпозиции» существенна для понимания дальнейшего.

### 2.3. Группа $SU(3)$

В 1961 г. Гелл-Манн [23] и Неэман [29] (в независимых работах) предложили классификацию адронов, объединяющую изотопические мультиплеты в более крупные семейства. Мы изложим здесь идею этого построения в самых общих чертах, в виде подготовки к следующей классификации атомов. (Подробное изложение теории унитарной симметрии, предполагающее лишь знакомство с элементами квантовой механики, см., например, в [12]).

Расщепление масс в пределах изотопических мультиплетов, как мы видели, рассматривается по аналогии с расщеплением энергетических уровней при нарушении симметрии гамильтониана, т. е. при «включении» некоторого взаимодействия. Можно представить себе, что такие «симметричные» системы, как «нуклон», « $\Sigma$ » и т. д., в свою очередь, являются результатом нарушения более высокой симметрии некоторой гипотетической системы вследствие ее внутреннего «взаимодействия». Так как средние массы изотопических мультиплетов весьма далеки друг от друга, это взаимодействие должно быть значительно сильнее того, которое вызывает расщепление масс в пределах изотопических мульти-

плетов. Можно представить себе, что до «включения» такого «более сильного» взаимодействия система обладала большей группой симметрии, которая при нарушении симметрии сужается до своей подгруппы  $SU(2)$ . При включении следующего, «более слабого» взаимодействия происходит окончательное расщепление масс изотопических мультиплетов на массы отдельных, реально существующих частиц. Все семейство частиц, описываемое с помощью «большой» группы симметрии, объединяется тем самым некоторым «родством»: эти частицы рассматриваются как состояния одной квантовой системы. При этом частицы, принадлежащие различным изотопическим мультиплетам, должны считаться не столь близко родственными, как частицы одного и того же изотопического мультиплета, поскольку для расщепления исходной системы на изотопические мультиплеты требуется более сильное взаимодействие. Таким образом получается «иерархическая» классификация частиц.

В качестве большей группы симметрии была предложена группа  $SU(3)$ , состоящая из унитарных унимодулярных матриц третьего порядка, т. е. из матриц  $u = (u_{\sigma\tau})$  с комплексными элементами  $u_{\sigma\tau}$ , удовлетворяющими условию  $\sum_{\rho=1}^3 u_{\sigma\rho}^* u_{\rho\tau} = \delta_{\sigma\tau}$  ( $\sigma, \tau = 1, 2, 3$ ) (или равносильному условию  $\sum_{\rho=1}^3 u_{\rho\sigma}^* u_{\rho\tau} = \delta_{\sigma\tau}$  ( $\sigma, \tau = 1, 2, 3$ )) и имеющих определитель 1. Каждая такая матрица задает преобразование трехмерного комплексного пространства  $C(3)$  по формуле

$$z'_\sigma = \sum_{\tau=1}^3 u_{\sigma\tau} z_\tau \quad (\sigma = 1, 2, 3), \quad (2.3.1)$$

сохраняющее скалярное произведение

$$\langle z | w \rangle = \sum_{\sigma=1}^3 z_\sigma^* w_\sigma \quad (2.3.2)$$

(ср. (1.12), (1.13)).

Найдем алгебру Ли группы  $SU(3)$ . Согласно (1.3.29) матрицы  $u$  должны быть связаны с матрицами алгебры Ли  $A$  соотношением  $u = e^{iA}$ . Чтобы  $u$  были унитарны,  $A$  должны быть эрмитовыми; чтобы  $u$  были унимодулярны, т. е. имели определитель 1,  $A$  должны иметь нулевой след. Оказывается, что матрицы  $A$  такого рода выражаются в виде линейных комбинаций с действительными коэффициентами восьми матриц, образующих базис алгебры Ли. Тем самым группа  $SU(3)$  имеет размерность 8. В качестве базиса обычно берут матрицы Гелл-Манна  $\lambda_k$ , которые можно построить следующим образом. Определим сначала девять матриц Окубо  $A_i^j$ , связанных одной линейной зависимостью  $A_1^1 + A_2^2 + A_3^3 = 0$ :

$$\begin{aligned} A_1^1 &= \begin{bmatrix} 2/3 & 0 & 0 \\ 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 0 & -1/3 \end{bmatrix}, & A_1^2 &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & A_1^3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ A_2^1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & A_2^2 &= \begin{bmatrix} -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 2/3 & 0 \\ 0 & 0 & -1/3 \end{bmatrix}, & A_2^3 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \\ A_3^1 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & A_3^2 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, & A_3^3 &= \begin{bmatrix} -1/3 & 0 & 0 \\ 0 & -1/3 & 0 \\ 0 & 0 & 2/3 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.3.3)$$

Все эти матрицы имеют нулевой след, но лишь три из них эрмитовы:



$A_1^1, A_2^2, A_3^3$ . Для получения эрмитовых матриц применяется известный прием: если  $A$  — любая матрица (или оператор), то  $A + A^+$  и  $(1/i)(A - A^+)$  — эрмитовы. Таким образом из матриц Окубо получаются матрицы Гелл-Манна  $\lambda_k$ :

$$\lambda_1 = A_1^2 + A_2^1, \lambda_2 = \frac{1}{i}(A_1^2 - A_2^1), \lambda_3 = A_1^1 - A_2^2, \lambda_4 = A_1^3 + A_3^1, \quad (2.3.4)$$

$$\lambda_5 = \frac{1}{i}(A_1^3 - A_3^1), \lambda_6 = A_2^3 + A_3^2, \lambda_7 = \frac{1}{i}(A_2^3 - A_3^2), \lambda_8 = -\frac{1}{\sqrt{3}}A_3^3. \quad (2.3.5)$$

Можно проверить, что  $\lambda_k$  линейно независимы и все эрмитовы матрицы с нулевым следом выражаются как линейные комбинации  $\lambda_k$  с вещественными коэффициентами (коэффициент в  $\lambda_8$  выбран для упрощения перестановочных соотношений матриц  $\lambda_k$ , которые мы не выписываем). Перестановочные соотношения для матриц Окубо проще, чем для матриц Гелл-Манна. Как легко проверить,

$$[A_i^j, A_k^l] = \delta_k^j A_i^l - \delta_i^l A_k^j \quad (i, j, k, l = 1, 2, 3). \quad (2.3.6)$$

Из (6) получаются перестановочные соотношения для  $\lambda_k$ . Обратно, с помощью (5) и условия  $A_1^1 + A_2^2 + A_3^3 = 0$  можно выразить  $A_i^j$  через  $\lambda_k$  с комплексными коэффициентами, откуда видно, что  $A_i^j$  принадлежат комплексной линейной оболочке алгебры Ли.

Для построения представлений группы  $SU(3)$  можно поступать следующим образом. В пространстве, где строится представление, вводится скалярное произведение; затем в нем находят 9 эрмитовых операторов  $T_{A_i^j}$  с перестановочными соотношениями (6), удовлетворяющих условию  $T_{A_1^1} + T_{A_2^2} + T_{A_3^3} = 0$ . Составляя из  $T_{A_i^j}$  линейные комбинации с теми же коэффициентами, как в (5), получаем операторы, имеющие, очевидно, те же перестановочные соотношения, что и матрицы Гелл-Манна  $\lambda_k$ . Согласно методу, описанному в 1.3, этим задается представление группы  $SU(3)$ .

Выделим теперь в группе  $SU(3)$  подгруппу матриц, для которых преобразования (1) сохраняют координату  $z_3$ . Такие матрицы имеют вид

$$\begin{bmatrix} u_{11} & u_{12} & 0 \\ u_{21} & u_{22} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (2.3.7)$$

и, как легко видеть, перемножаются как соответствующие унитарные матрицы второго порядка. Тем самым они образуют подгруппу, изоморфную  $SU(2)$ , которую мы будем обозначать просто  $SU(2)$ . Итак, имеем цепочку групп

$$SU(3) \supset SU(2). \quad (2.3.8)$$

В отличие от группы  $SU(2)$ , у которой максимальная система коммутирующих основных наблюдаемых сводится к единственной матрице (например,  $T_3$ ), группа  $SU(3)$  имеет две таких наблюдаемых, в качестве которых можно взять, например,  $A_1^1$  и  $A_3^3$ . Они перестановочны друг с другом (и с их линейной комбинацией  $A_2^2 = -A_1^1 - A_3^3$ ), но не с остальными  $A_i^j$ . В универсальной обертывающей алгебре можно искать другие наблюдаемые группы симметрии, например, оператор Казимира  $SU(3)$ ; но для описания представлений нас будет интересовать оператор Казимира подгруппы  $SU(2)$ . Эта подгруппа должна играть роль в построении наблюдаемых, поскольку при редукции представления на  $SU(2)$  мы рассчитываем получить описание изоспина. Подалгебра Ли, соответствующая

подгруппе  $SU(2)$ , порождается матрицами  $\frac{1}{2}(A_1^2 + A_2^2)$ ,  $\frac{1}{2i}(A_1^2 - A_2^2)$ ,  $A_1^1 + \frac{1}{2}A_3^3$ , которые по их виду естественно обозначить  $T_1$ ,  $T_2$ ,  $T_3$ . Их перестановочные соотношения совпадают с (2.1.15). Оператор Казимира подгруппы  $SU(2)$  имеет вид  $T^2 = T_1^2 + T_2^2 + T_3^2$ .

Пусть задано неприводимое унитарное представление группы  $SU(3)$  в гильбертовом пространстве  $\mathfrak{H}$ . Тогда эрмитовым матрицам  $A_1^1, A_3^3$  ее алгебры Ли соответствуют представляющие их эрмитовы операторы в  $\mathfrak{H}$ , а именно  $T_{A_1^1}^1$  и  $T_{A_3^3}^3$ , которые мы будем обозначать, для простоты, теми же буквами  $A_1^1, A_3^3$ . Легко проверить, что матрица  $T^2$  перестановочна с  $A_1^1, A_3^3$ , следовательно, представляющий ее оператор в  $\mathfrak{H}$  также перестановочен с операторами, представляющими  $A_1^1, A_3^3$  (ср. (1.3.34)). Будем обозначать этот оператор также через  $T^2$ . Можно доказать, что собственные значения трех коммутирующих операторов  $(A_1^1, A_3^3, T^2)$  составляют взаимно однозначную нумерацию некоторого ортонормированного базиса в пространстве  $\mathfrak{H}$ . Как мы увидим, этот базис имеет важное физическое значение. Собственные значения  $T^2$  равны  $(T+1)T$ ; в качестве квантовых чисел берутся  $(A_1^1, A_3^3, T)$ , где  $A_1^1, A_3^3$  означают собственные значения соответствующих операторов, а  $T$  указывает собственное значение оператора  $T^2$ .

В отличие от обычных квантовых чисел, таких как  $(H, L^2, L_z)$ , набор  $(A_1^1, A_3^3, T)$  не содержит собственного значения оператора энергии (в нашем случае — массы). Этот факт имеет двойное значение. Во-первых, можно попытаться классифицировать состояния системы, описываемой некоторым представлением  $SU(3)$ , по квантовым числам этих состояний, без привлечения массы, придав квантовым числам физический смысл; во-вторых, если оператор массы  $M$  перестановочен с  $A_1^1, A_3^3$  и  $T^2$ , то собственные векторы этих трех операторов будут также собственными векторами  $M$  и тем самым собственные значения  $M$  должны выражаться через квантовые числа  $A_1^1, A_3^3, T$ . Если же  $M$  лишь приближенно перестановочен с указанными тремя операторами, то выделенные квантовыми числами состояния можно считать приближениями к состояниям с определенной массой. Заметим, что в случае атома водорода можно увидеть ту же закономерность, если расширить группу симметрии  $SO(3)$  до группы Фока  $SO(4)$ ; тогда «главное квантовое число»  $n$  становится одним из квантовых чисел группы  $SO(4)$ , связанным с ее оператором Казимира, а энергия выражается через него по формуле (1.4.2).

Проиллюстрируем описанный подход на примере двух семейств элементарных частиц.

## 2.4. Октет и декуплет барионов

Элементарные частицы делятся по их массе на легкие частицы — лептоны (электрон, мюон, различные типы нейтрино и их античастицы) и тяжелые — адроны; особняком стоит фотон, не причисляемый ни к тем, ни к другим. Кроме различий в массе, между этими группами частиц имеются и другие различия — по характеру взаимодействий, в которые они вступают. Подчеркнем, что «более сильные» и «более слабые» взаимодействия, о которых была речь выше, означают «самостоятельные» в гипотетической симметричной системе, приводящие к образованию частиц, и не имеют ничего общего с тем, что называют сильными и слабыми взаимодействиями при описании реакций между частицами. Адроны делятся на частицы с целым спином — мезоны и частицы с полуделым спином — барионы.

Группа  $SU(3)$  описывает свойства симметрии адронов и не имеет отношения к лептонам и фотону. Каждое семейство адронов, описываемое некоторым неприводимым унитарным представлением этой группы, состоит только из барионов или только из мезонов. Естественно предполагать, что частицы такого семейства, связанные между собой некоторым родством в силу объединяющего их представления, должны обладать и другими общими чертами. Во время создания теории унитарной симметрии особенно выделялось восемь наиболее изученных барионов, которые все имели одинаковый (обычный) спин  $1/2$  и одинаковую внутреннюю четность  $+$ . В их число входили протон  $P$  и нейтрон  $N$ , с очень близкими массами, составляющими изотопический дублет; две  $\Xi$ -частицы  $\Xi^-$  и  $\Xi^0$  (индекс сверху указывает заряд, измеряемый абсолютной величиной заряда электрона), также с очень близкими массами и тоже рассматриваемые как изотопический дублет; три  $\Sigma$ -частицы  $\Sigma^-$ ,  $\Sigma^0$  и  $\Sigma^+$ , составляющие изотопический триплет; и наконец,  $\Lambda$ -частица с нулевым зарядом и не близкая по массе ни к какой другой частице (такую частицу связывают с одномерным представлением группы  $SU(2)$  и называют «изотопическим синглетом»).

Следуя приведенным выше эвристическим соображениям, можно было попытаться описать эти восемь барионов как состояния с определенным значением массы некоторой квантовой системы («октета»), пространство состояний которой должно быть пространством восьмимерного неприводимого представления группы  $SU(3)$ . Далее, при уменьшении симметрии, т. е. при редукции представления по подгруппе  $SU(2)$ , это пространство должно было распадаться в сумму неприводимых пространств группы  $SU(2)$ , размерности которых должны были соответствовать числу частиц в изотопических мультиплетах, т. е. 2, 2, 3 и 1. Такое представление действительно обнаружилось, причем получили естественное описание заряды и, в некотором смысле, массы частиц. От восьмерки частиц происходит аллегорическое название «восьмеричный путь», данное  $SU(3)$ -симметрии ее первооткрывателями \*).

Как было отмечено, для построения представления девять матриц Окубо  $A_i^j$  представляются операторами в восьмимерном пространстве, обозначаемыми так же, как матрицы, с тем же перестановочными соотношениями (3.6) и с тем же соотношением  $A_1^1 + A_2^2 + A_3^3 = 0$ . Мы не можем останавливаться здесь на алгебраических методах, позволяющих найти такие операторы, и приводим лишь интересующие нас свойства представления. При любом выборе базиса в восьмимерном представлении  $C(8)$  операторы  $A_i^j$  изображаются матрицами. Естественно выделить базис из собственных векторов одновременно трех коммутирующих операторов  $A_1^1, A_3^3, T^2$ . Оказывается, что при этом базисные векторы определяются наборами квантовых чисел  $(A_1^1, A_3^3, T)$  с точностью до фазовых множителей и образуют (поскольку принадлежат разным собственным значениям хотя бы одного из трех операторов) ортонормированную систему. В табл. 2 наборы квантовых чисел, встречающиеся в рассматриваемом восьмимерном представлении, расположены в некотором порядке, который сейчас будет объяснен.

Если соединить векторы с одинаковыми значениями  $A_3^3, T$ , то получается четыре части базиса; на табл. 2 они отграничены горизонтальными линиями. В первой части собственные значения  $A_1^1$  равны зарядам частиц  $\Xi^-, \Xi^0$ ; во второй — зарядам  $\Sigma^-, \Sigma^0, \Sigma^+$ ; в третьей — заряду  $\Lambda$ ; в четвертой — зарядам  $N, P$ . Обозначим собственные векторы, соответствующие выписанным в табл. 2 наборам квантовых чисел, по порядку сверху вниз через  $e_1, e_2, e_3, e_4, e_5, e_6, e_7, e_8$ . Тогда можно предположить,

\*) Это название заимствовано из индийской философии, где означает «правильный путь» в совсем другом смысле.

Таблица 2

Частица	Масса, в МэВ	$A_1^1$	$A_3^3$	$T$
$\Xi^-$	1320,8	-1	1	1/2
$\Xi^0$	1314,3	0	1	1/2
$\Sigma^-$	1197,1	-1	0	1
$\Sigma^0$	1192,4	0	0	1
$\Sigma^+$	1189,4	1	0	1
$\Lambda$	1115,4	0	0	0
$N$	939,5	0	-1	1/2
$P$	938,3	1	-1	1/2

что векторы  $e_1, e_2$  порождают двумерное неприводимое пространство подгруппы  $SU(2)$  при редукции на эту подгруппу представления  $SU(3)$ . Это подтверждается, и значение изоспина для двумерного представления равно  $1/2$ , что и указано в правом столбце таблицы. Точно так же, векторы  $e_3, e_4, e_5$  порождают трехмерное неприводимое пространство,  $e_6$  — одномерное и  $e_7, e_8$  — еще одно двумерное неприводимое пространство группы  $SU(2)$ . Таким образом, при редукции на подгруппу  $SU(2)$  представление группы  $SU(3)$  распадается на неприводимые представления в подпространствах, которые мы обозначим  $C(2), C(3), C(1), C(2)'$ , и  $C(8)$  разлагается в ортогональную сумму этих подпространств:

$$C(8) = C(2) \oplus C(3) \oplus C(1) \oplus C(2)'. \quad (2.4.1)$$

Теперь можно дать физическое истолкование квантовым числам  $(A_1^1, A_3^3, T)$  в рассматриваемом восьмимерном представлении. Разложение по подгруппе  $SU(2)$  в точности соответствует изотопическим мультиплетам, входящим в октет барионов: два двумерных подпространства соответствуют дублетам  $\Xi$  и  $N$ , трехмерное — триплету  $\Sigma$ , одномерное — синглету  $\Lambda$ . Квантовое число  $T$  задает размерность подпространства  $2T+1$  и тем самым число частиц соответствующего мультиплета. Изоспин частицы  $T$  является «коллективной» характеристикой: чтобы найти его экспериментально, недостаточно наблюдать данную частицу, а надо знать число частиц с близкими массами, составляющих вместе с нею изотопический мультиплет. Изоспин  $T$  различает лишь мультиплеты с разным числом частиц. Для различения мультиплетов с одинаковым числом частиц служит квантовое число  $A_3^3$ . Матрица  $A_3^3$  перестановочна с матрицами изоспина  $T_k$  (см. 2.3), а потому является наряду с  $T^2$  оператором Казимира подгруппы  $SU(2)$ . Как видно из табл. 2, —  $A_3^3$  равно удвоенному среднему арифметическому зарядов частиц, входящих в изотопический мультиплет. Из опыта известно, что это число, называемое гиперзарядом всех частиц мультиплета, всегда целое. Подобно изоспину, оно также является «коллективной» характеристикой частицы.

Итак, заряд оказывается основной наблюдаемой группы  $SU(3)$ , гиперзаряд — основной наблюдаемой  $SU(3)$ , а изоспин — определяется оператором Казимира  $T^2$  подгруппы  $SU(2)$ . Для заряда обычно вводится обозначение  $Q$ , для гиперзаряда —  $Y$ . В этих обозначениях табл. 3 изображает связь частиц октета барионов с квантовыми числами группы  $SU(3)$ . Заметим еще, что в табл. 2 частицы расположены в порядке убывания массы. Описание масс с точки зрения группы  $SU(3)$  излагается дальше.

Таблица 3

Частица	$Q$	$Y$	$T$	$T_3$
$\Xi$	-1	-1	1/2	-1/2
$\Xi^0$	0	-1	1/2	1/2
$\Sigma^-$	-1	0	1	-1
$\Sigma^0$	0	0	1	0
$\Sigma^+$	1	0	1	1
$\Lambda$	0	0	0	0
$N$	0	1	1/2	-1/2
$P$	1	1	1/2	1/2

Таблица 4

Частица	Масса, МЭВ	$A_1^1$	$A_3^3$	$T$
$\Omega^-$	1679	-1	2	0
$\Xi_\delta^-$	1532	-1	1	1/2
$\Xi_\delta^0$	1532	0	1	1/2
$\Sigma_\delta^-$	1385	-1	0	1
$\Sigma_\delta^0$	1385	0	0	1
$\Sigma_\delta^+$	1385	1	0	1
$\Delta_\delta^-$	1238	-1	-1	3/2
$\Delta_\delta^0$	1238	0	-1	3/2
$\Delta_\delta^+$	1238	1	-1	3/2
$\Delta_\delta^{++}$	1238	2	-1	3/2

Для физики важно также десятимерное представление группы  $SU(3)$ , которое может быть построено с помощью той же алгебраической техники. Матрицам  $A_i^j$  ставятся в соответствие операторы в десятимерном пространстве  $C(10)$  с теми же перестановочными соотношениями, удовлетворяющие тому же соотношению  $A_1^1 + A_2^2 + A_3^3 = 0$ . Этим задается представление  $SU(3)$ , которое оказывается унитарным и неприводимым. При редукции этого представления по подгруппе  $SU(2)$  получается разложение  $C(10)$  в ортогональную сумму одно-, дву-, трех- и четырехмерного пространств:

$$C(10) = C(1) \oplus C(2) \oplus C(3) \oplus C(4). \quad (2.4.2)$$

В качестве базисных векторов берутся собственные векторы наблюдаемых  $A_1^1, A_3^3$ ; эти векторы  $e_1, \dots, e_{10}$  нумеруются в порядке, указанном в табл. 4. Поскольку изотопические мультиплеты содержат теперь разное число частиц, базис нумеруется уже парами собственных значений  $A_1^1, A_3^3$ .

Физическое истолкование десятимерного представления получается при сопоставлении с известными частицами. В 1961 г., когда была предложена  $SU(3)$ -симметрия, было известно девять барионов с одним и тем же (обычным) спином  $3/2$  и одинаковой четностью  $+$ , составляющих следующие изотопические мультиплеты: дублет  $\Xi_\delta$  из частиц  $\Xi_\delta^-, \Xi_\delta^0$ , триплет  $\Sigma_\delta$  из частиц  $\Sigma_\delta^-, \Sigma_\delta^0, \Sigma_\delta^+$  и квадруплет  $\Delta_\delta$  из частиц  $\Delta_\delta^-, \Delta_\delta^0, \Delta_\delta^+, \Delta_\delta^{++}$  (справа сверху, как и прежде, указывается заряд). При сопоставлении этих мультиплетов с табл. 4 видно, что они в точности соответствуют подпространствам  $C(2), C(3), C(4)$ , причем векторы  $e_2, e_3$  должны изображать, по величине заряда, частицы  $\Xi_\delta^-, \Xi_\delta^0$ , векторы  $e_4, e_5, e_6$  — частицы  $\Sigma_\delta^-, \Sigma_\delta^0, \Sigma_\delta^+$  и векторы  $e_7, e_8, e_9, e_{10}$  — частицы  $\Delta_\delta^-, \Delta_\delta^0, \Delta_\delta^+, \Delta_\delta^{++}$ . Тем самым снова подтверждается истолкование  $Q = A_1^1$  как оператора заряда. Собственные значения  $Y = -A_3^3$  опять равны удвоенному среднему заряду частиц изотопического мультиплета, чем подтверждается истолкование  $Y$  как оператора гиперзаряда.

Однако в табл. 4 оставалось (в 1961 г.) свободное место: вектору базиса  $e_1$  десятимерного представления группы  $SU(3)$  не соответствова-

Частица	$Q$	$Y$	$T$	$T_3$
$\Omega^-$	-1	-2	0	0
$\Xi_\delta^-$	-1	-1	1/2	-1/2
$\Xi_\delta^0$	0	-1	1/2	1/2
$\Sigma_\delta^-$	-1	0	1	-1
$\Sigma_\delta^0$	0	0	1	0
$\Sigma_\delta^+$	1	0	1	1
$\Delta_\delta^-$	-1	+1	3/2	-3/2
$\Delta_\delta^0$	0	+1	3/2	-1/2
$\Delta_\delta^+$	1	+1	3/2	1/2
$\Delta_\delta^{++}$	2	+1	3/2	3/2

ла никакая известная в то время частица. Девять барпонов не могли описываться неприводимым представлением  $SU(3)$ , поскольку  $SU(3)$  вообще не имеет девятимерных неприводимых представлений. Правильность описания изотопических мультиплетов и зарядов девяти частиц свидетельствовала о том, что эти частицы связаны с десятимерным представлением. Отсюда можно было предсказать недостававшую десятую частицу: из табл. 4 видно, что она должна быть синглетом, т. е. не иметь «изотопически родственных» частиц, и что ее заряд должен быть равен -1. Поскольку все остальные частицы, уже занявшие места в таблице представления, имели (обычный) спин 3/2, можно было предвидеть, что недостающая частица тоже имеет спин 3/2. Более того, можно было предсказать ее массу: как вытекает из массовой формулы (см. 2.5), массы частиц декуплета эквидистантны, т. е. отстоят друг от друга на одну и ту же величину, что подтверждается экспериментом. Зная разности масс для девяти частиц, можно было предсказать массу десятой.

В 1964 г. была открыта частица со всеми предсказанными свойствами, получившая название  $\Omega^-$ . Это было триумфом теоретической физики, сравнимым с предсказанием Менделеевым недостававших элементов или предсказанием недостававшей планеты Адамсом и Леверье. Связь декуплета барионов с десятимерным представлением изображается табл. 5.

Неприводимые представления  $SU(3)$  существуют в размерностях  $N = (1/2)(p+1)(q+1)(p+q+2)$ , где  $p, q$  — неотрицательные целые числа (см. [12, гл. 5]). Операторы, соответствующие в этих представлениях матрицам алгебры Ли  $Q = A_1^1$  и  $Y = -A_3^3$ , имеют собственные значения, зависящие от представления, которые, как это видно из примеров октета и декуплета, должны истолковываться как значения заряда и гиперзаряда частиц. Из опыта известно (хотя и не следует из теории), что значения  $Q$  и  $Y$  всегда целочисленны. Отсюда вытекает эмпирический способ «браковки» представлений: разрешаются только те из них, для которых  $Q$  и  $Y$  имеют целые собственные значения. Тогда, как можно доказать,  $p - q$  должно делиться на три, т. е. остаются представления размерностей  $N = 1, 8, 10, 27, 35, 55, \dots$ . В настоящее время известно много октетов и декуплетов, состоящих из адронов (либо мезонов, либо барионов); есть и « $SU(3)$ -синглеты», соответствующие одномерно-

му представлению  $SU(3)$  и тем самым не имеющие «родственных» частиц в смысле этой группы симметрии. Другие размерности «допустимых» представлений, начиная с 27, пока не обнаружены.

## 2.5. Массовая формула в $SU(3)$ -симметрии

В обычной квантовой механике, где роль группы симметрии играет группа пространственно-временных преобразований или ее подгруппа, оператор энергии является функцией от операторов алгебры Ли группы симметрии. Если не учитывать спин, то гамильтониан выражается через импульсы, координаты, проекции момента. Но уже при учете обычного спина в рассмотрение входят «внутренние степени свободы», а в случае группы  $SU(3)$  мы имеем симметрию, не связанную с пространственно-временным поведением частиц. «Взаимодействие», ведущее к расщеплению «октета» или «декуплета» на «изотопические мультиплеты», а затем этих мультиплетов на отдельные частицы, связано с внутренними степенями свободы, аналогичными спину. В некотором смысле здесь речь идет об энергетических эффектах, связанных со взаимодействием «спиновых» переменных, и в этом духе набор наблюдаемых, возникающих из группы  $SU(3)$ , иногда называют «унитарным спином». При этом сохраняется формальный способ построения гамильтониана: массовый оператор строится в виде полинома от наблюдаемых квантовой теории, т. е., в данном случае, от операторов алгебры Ли группы  $SU(3)$ . Этот оператор действует в пространстве представления  $SU(3)$ , задающем рассматриваемую квантовую систему, например, в восьмимерном пространстве октета или десятимерном пространстве декуплета.

Элементарные частицы рассматриваются как состояния системы с определенным значением массы, т. е. как собственные векторы оператора массы, а массы частиц — как соответствующие собственные значения. Так, частицы  $\Xi^-$ , ...,  $P$  должны изображаться векторами  $C(8)$ , собственными для оператора массы. Но мы уже нашли в  $C(8)$  векторы, собственные для операторов  $T^2$ ,  $Y$  и  $Q$ , т. е. с определенными значениями изоспина, гиперзаряда и заряда, и однозначно описываемые этими значениями (как всегда, с точностью до множителя). Если реально существующим частицам приписываются определенные значения этих наблюдаемых, мы должны считать, что векторы базиса изображают те же состояния октета, что и собственные векторы оператора массы, т. е. что оператор массы перестановочен с  $T^2$ ,  $Y$ ,  $Q$ , а собственные значения его выражаются через квантовые числа, используемые выше для выделения векторов базиса. В самом деле, если заданы значения  $T$ ,  $Y$ ,  $Q$ , то известен их общий собственный вектор, а тем самым и значение массы  $M$ .

В действительности ситуация несколько сложнее: реальные частицы имеют, конечно, вполне определенные массы и заряды, но их «изотопическое родство» не столь определено. Дело обстоит так, как будто частица в основном связана с определенным изотопическим мультиплетом (например,  $\Sigma^0$  с триплетом, а  $\Lambda$  с синглетом), но в некоторой степени она связана и с другим изотопическим мультиплетом, содержащим частицу того же заряда (например,  $\Lambda$  с триплетом, а  $\Sigma^0$  с синглетом). Это явление называется «смешением» частиц (mixing) и математически выражается в том, что векторы состояния с определенными значениями массы, т. е. подлинными векторы состояния частиц, лишь приближенно совпадают с векторами, выделенными с помощью квантовых чисел  $T$ ,  $Y$ ,  $Q$ .

Но тогда в выражение оператора массы  $M$  могут войти и другие наблюдаемые группы  $SU(3)$ . Можно получить хорошее описание масс, предполагая, что наряду с подгруппой  $SU(2)$ , состоящей из матриц (3.7), преобразующих только  $z_1$ ,  $z_2$  и сохраняющих неизменной координату  $z_3$ , некоторую роль играет другая подгруппа того же типа, состоящая из матриц, сохраняющих  $z_1$ . Обозначая эту подгруппу через  $SU(2)'$ , можно

рассмотреть, наряду с основной цепочкой группы (3.8), также другую цепочку, играющую роль в симметрии частиц октета:

$$SU(3) \supset SU(2)'. \quad (2.5.1)$$

Новый вид изоспина, связанный с этой подгруппой, называется « $U$ -спином», в отличие от « $T$ -спина», т. е. обычного изоспина, описанного выше цепочкой группы (2.8). Подробное изложение этого вопроса см. в [12, гл. 9, 14, 15, 18].

Так как расщепление масс октета имеет явно «иерархический» характер, с большим расхождением масс между изотопическими мультиплетам и с малым расхождением внутри них, можно предположить, что массовый оператор  $M$  имеет «ступенчатый» вид, наподобие классического гамильтониана (1.4.10):

$$M = M_0 + M_1 + M_2, \quad (2.5.2)$$

где  $M_0$  — оператор Казимира группы  $SU(3)$ ,  $M_1$  — оператор Казимира подгруппы  $SU(2)$  и  $M_2$  — оператор, построенный из наблюдаемых группы  $SU(3)$ , но не связанный с подгруппой  $SU(2)$ . Формула (2) описывает, таким образом, последовательное нарушение симметрии, приводящее к расщеплению масс октета (или декуплета).

Гелл-Манн [24] и Окубо [30] вывели массовую формулу такого строения. В ней оператор  $M_0$  постоянен для данного представления  $SU(3)$ . «Первое возмущение»

$$M_1 = \alpha + \beta Y + \gamma [T(T+1) - (1/4)Y^2], \quad (2.5.3)$$

где  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  — постоянные, зависящие от представления (и не выводимые из теории), а  $Y$  и  $T^2$  — операторы Казимира подгруппы  $SU(2)$ , причем  $T^2$  заменен его значением на изотопическом мультиплете  $T(T+1)$ . Возмущение  $M_1$  нарушает  $SU(3)$ -симметрию, но сохраняет симметрию  $SU(2)$ . Наконец, «второе возмущение»

$$M_2 = \alpha' + \beta' Q + \gamma' [U(U+1) - (1/4)Q^2] \quad (2.5.4)$$

имеет тот же вид, но связано с подгруппой  $U$ -спина, поскольку содержит операторы Казимира этой подгруппы  $Q$  и  $U^2 = U_1^2 + U_2^2 + U_3^2$ . По отношению к основной цепочке симметрии (3.8) член  $M_2$  представляет нарушение  $SU(2)$ -симметрии.

Наиболее важно слагаемое (3). Для октета из (3) получаются «средние массы» изотопических мультиплетов: подставляя значения  $T$ ,  $Y$  из табл. 3 и полагая значение оператора  $M_0$  равным  $m_0$ , имеем

$$\begin{aligned} m_{\Sigma} &= m_0 + \alpha - \beta + (1/2)\gamma, & m_{\Sigma} &= m_0 + \alpha + 2\gamma, \\ m_{\Lambda} &= m_0 + \alpha, & m_N &= m_0 + \alpha + \beta + (1/2)\gamma. \end{aligned}$$

Постоянные  $m_0$ ,  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$  неизвестны. Поскольку  $m_0 + \alpha$  входит во все выражения масс, здесь имеется три неизвестных постоянных  $m_0 + \alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ , входящих в четыре соотношения. Исключая эти постоянные, легко получить соотношение между массами изотопических мультиплетов:  $m_{\Sigma} + m_N = (1/2)(3m_{\Lambda} + m_{\Sigma})$ . Хотя отдельные массы мультиплетов и нельзя найти из теории, последнее равенство можно проверить, подставив в него экспериментальные данные (массы в Мэв):  $m_{\Sigma} = 1318$ ,  $m_{\Sigma} = 1192$ ,  $m_{\Lambda} = 1115$ ,  $m_N = 939$ . Выразив  $m_{\Sigma}$  через остальные массы, получаем  $m_{\Sigma} = 1330$ , что отличается от экспериментального значения менее чем на 1 %.

Массовая формула Гелл-Манна — Окубо применима к любому мультиплету группы  $SU(3)$ , например, к декуплету барионов, описанному в 2.4. Ограничиваясь и в этом случае средними массами изотопических мультиплетов, т. е. слагаемым  $M_1$ , находим из табл. 5, что для всех изо-



гопических мультиплетов десятимерного представления число  $\delta = T - (1/2)Y$  одно и то же и равно 1. Выражая  $M$  через  $Y$  и  $\delta$ , получаем  $T(T+1) - (1/4)Y^2 = (1/2)Y(2\delta+1) + \delta(\delta+1)$ ,  $M_1 = (\beta + 3/2)Y + (\alpha + 2)$ .

Отсюда видно, что при увеличении  $Y$  на единицу масса возрастает на одно и то же число. Но из табл. 5 следует, что  $Y = -A_3^3$  возрастает на единицу при увеличении на единицу числа частиц изотопического мультиплета; таким образом, массы синглета, дублета, триплета и квадруплета, составляющих декуплет, должны быть эквидистантны:

$$m_{\Delta\delta} - m_{\Sigma\delta} = m_{\Sigma\delta} - m_{\Xi\delta} = m_{\Xi\delta} - m_{\Omega}.$$

Экспериментальные значения масс, известные в 1961 г., были  $m_{\Xi\delta} = 1532$ ,  $m_{\Sigma\delta} = 1385$ ,  $m_{\Delta\delta} = 1238$ , так что первые две разности были равны  $-147$ . Отсюда можно было предсказать массу недостававшей частицы  $m_{\Omega} = m_{\Xi\delta} + 147 = 1679$ , что совпало с полученным из опыта значением массы  $\Omega$ -частицы.

## 2.6. Группа $SU(6)$

В 1964 г. была предложена группа симметрии  $SU(6)$ , содержащая  $SU(3)$  в качестве подгруппы. Эта группа состоит из унитарных матриц шестого порядка с определителем 1 (Гюрси и Радикати [25], Пайс [32]). Мы ограничимся лишь теми фактами об этой симметрии, которые понадобятся нам при описании гомологических рядов элементов.

Группа  $SU(6)$  предназначена для совместного описания «унитарного спина» и «обычного» спина. Поэтому она должна содержать подгруппы, изоморфные  $SU(3)$  и  $SU(2)$ . Первая из них (обозначаемая просто  $SU(3)$ ) состоит из матриц вида

$$U_F = \left[ \begin{array}{c|c} u(3) & 0 \\ \hline 0 & u(3) \end{array} \right], \quad (2.6.1)$$

где  $u(3)$  — матрица группы  $SU(3)$ . Ясно, что матрицы  $U_F$  умножаются так же, как соответствующие матрицы третьего порядка  $u(3)$ , так что (1) действительно задает подгруппу, изоморфную  $SU(3)$ . Вторая подгруппа (обозначаемая просто  $SU(2)$ ) состоит из матриц вида

$$U_J = \left[ \begin{array}{c|c} u_{\sigma\sigma}\varepsilon(3) & u_{12}\varepsilon(3) \\ \hline u_{21}\varepsilon(3) & u_{22}\varepsilon(3) \end{array} \right], \quad (2.6.2)$$

где  $\varepsilon(3)$  — единичная матрица третьего порядка, а  $(u_{\sigma\tau})$  ( $\sigma, \tau = 1, 2$ ) образуют матрицу  $u$  группы  $SU(2)$ . Легко проверить, что матрицы  $U_J$  умножаются так же, как соответствующие им матрицы второго порядка  $u$ , т. е. из  $u_3 = u_1 u_2$  следует  $U_{3J} = U_{1J} U_{2J}$ ; поэтому подгруппа матриц  $U_J$  изоморфна  $SU(2)$ .

В алгебру Ли группы  $SU(6)$  входят, с одной стороны, операторы алгебры Ли подгруппы  $SU(3)$ , такие как  $A_1^1, A_3^3$  и т. д., изображаемые матрицами вида

$$\left[ \begin{array}{c|c} A(3) & 0 \\ \hline 0 & A(3) \end{array} \right], \quad (2.6.3)$$

где  $A(3)$  — эрмитова матрица третьего порядка с нулевым следом, например  $A_1^1, A_3^3$  и т. д., а с другой стороны, операторы алгебры Ли подгруппы  $SU(2)$ , изображаемые матрицами вида

$$\left[ \begin{array}{c|c} a_{11}\varepsilon(3) & a_{12}\varepsilon(3) \\ \hline a_{21}\varepsilon(3) & a_{22}\varepsilon(3) \end{array} \right], \quad (2.6.4)$$

где  $(a_{\sigma\tau})$  — эрмитова матрица с нулевым следом второго порядка, напри-

мер,  $\tau_k$ . В любом представлении группы  $SU(6)$  операторы, представляющие матрицы (3), играют роль операторов унитарного спина (изоспина, заряда, гиперзаряда), в то время как операторы, представляющие матрицы (4), играют роль операторов обычного спина. Легко видеть, что подгруппы  $SU(3)$  и  $SU(2)$  перестановочны; вследствие этого наблюдаемые унитарного спина (3) перестановочны с наблюдаемыми обычного спина (4). Тем самым  $T_k, Y, Q, \dots$  являются операторами Казимира подгруппы  $SU(2)$ , а  $\tau_1, \tau_2, \tau_3$  — операторами Казимира подгруппы  $SU(3)$ . Учитывая подгруппу изоспина  $SU(2)_\tau$ , содержащуюся в  $SU(3)$  (которую не следует смешивать с только что описанной подгруппой обычного спина!), имеем цепочку групп, задающую  $SU(6)$ -симметрию элементарных частиц:

$$SU(6) \supset SU(3) \supset SU(2)_\tau. \quad (2.6.5)$$

Неприводимые представления группы  $SU(6)$  существуют не во всех размерностях; если потребовать, чтобы в представлении собственные значения заряда и гиперзаряда были целыми числами, то остаются представления размерностей 1, 20, 35, 56, 70, 189, 405, .... Наиболее важны два семейства частиц, соответствующие этим представлениям — 35-плет мезонов и 56-плет барионов, из которых мы рассмотрим лишь последний (подробное изложение см. в [12, гл. 13]).

Можно доказать, что существует 56-мерное неприводимое унитарное представление группы  $SU(6)$ . На подгруппе  $SU(3)$  это представление разлагается в сумму четырех десятимерных и двух восьмимерных представлений. Оператор Казимира  $\tau^2$  подгруппы  $SU(3)$  принимает на десятимерных подпространствах значение  $(3/2)(3/2 + 1)$ , на восьмимерных — значение  $(1/2)(1/2 + 1)$ . Другой оператор Казимира той же подгруппы  $\tau_3$  принимает на десятимерных подпространствах соответственно значения  $-3/2, -1/2, 1/2, 3/2$ , на восьмимерных  $-1/2, 1/2$ . Обозначая подпространства надлежащими индексами, имеем разложение

$$C(56) = C_{-3/2}(10) \oplus C_{-1/2}(10) \oplus C_{1/2}(10) \oplus C_{3/2}(10) \oplus C_{-1/2}(8) \oplus C_{1/2}(8). \quad (2.6.6)$$

На неприводимых подпространствах  $C(10)$  представления подгруппы  $SU(3)$  эквивалентны описанному выше для декуплета барионов, а на  $C(8)$  — описанному выше для октета барионов. Это значит, что в надлежащих базисах эти представления задаются теми же матрицами. Можно выделить во всех указанных подпространствах собственные векторы одновременно трех наблюдаемых  $T^2, Y, Q$ , как это было сделано выше. Полученный ортонормированный базис пространства  $C(56)$  истолковывается следующим образом: каждый собственный вектор с данными значениями  $T, Y, Q, \tau, \tau_3$  изображает состояние 56-плета, соответствующее частице декуплета ( $\Omega, \Xi_b, \Sigma_b, \Delta_b$ ) или октета ( $\Xi, \Sigma, \Lambda, N$ ) с теми же значениями  $T, Y, Q$  и с проекцией *обычного* спина  $\tau_3$ . Например, вектор  $T = 1/2, Y = 1, Q = 1, \tau = 1/2, \tau_3 = -1/2$  изображает протон с проекцией спина  $-1/2$ . Таким образом, «состояния 56-плета» имеют физический смысл, сочетающий унитарный и обычный спин: выделенное состояние означает не только определенную элементарную частицу в смысле определенной массы, заряда и т. д., но и определенное спиновое состояние этой частицы. Такая точка зрения естественна в групповой классификации частиц, хотя и расходится с принятой в экспериментальной физике. Дело в том, что само понятие элементарной частицы зависит от положенной в основу описания частиц группы симметрии. Обычное употребление этого термина, как показал Вигнер, связано с группой Пуанкаре (неоднородной группой Лоренца). Если описывать семейство частиц неприводимым представлением некоторой группы  $G$ , классифицируя его частицы в соответствии с цепочкой подгрупп  $G$ , характеризующей данную симметрию, то естественно считать, что векторам базиса, выделен-

$\tau = \frac{1}{2}$		$\tau = \frac{3}{2}$				
$\tau_3 = -\frac{1}{2} \quad \tau_3 = \frac{1}{2}$		$\tau_3 = -\frac{3}{2} \quad \tau_3 = -\frac{1}{2} \quad \tau_3 = \frac{1}{2} \quad \tau_3 = \frac{3}{2}$				
$Y=0$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Lambda^0 \\ \frac{1}{2} \Lambda^0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{3}{2} \Omega^- \\ -\frac{1}{2} \Omega^- \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Omega^- \\ \frac{1}{2} \Omega^- \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \Omega^- \\ \frac{3}{2} \Omega^- \end{bmatrix}$	$Y = -2 \left\{ T = 0 \right.$	
$Y = -1$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Xi^- \\ -\frac{1}{2} \Xi^0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \Xi^- \\ -\frac{1}{2} \Xi^- \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{3}{2} \Xi_\delta^- \\ -\frac{3}{2} \Xi_\delta^0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Xi_\delta^- \\ -\frac{1}{2} \Xi_\delta^0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \Xi_\delta^- \\ \frac{1}{2} \Xi_\delta^0 \end{bmatrix}$	$Y = -1 \left\{ T = \frac{1}{2} \right.$
$Y = 1$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} N^0 \\ -\frac{1}{2} N^+ \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} N^0 \\ \frac{1}{2} N^+ \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{3}{2} \Sigma_\delta^- \\ -\frac{3}{2} \Sigma_\delta^0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Sigma_\delta^- \\ -\frac{1}{2} \Sigma_\delta^0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \Sigma_\delta^- \\ \frac{1}{2} \Sigma_\delta^0 \end{bmatrix}$	$Y = 0 \left\{ T = 1 \right.$
			$\begin{bmatrix} -\frac{3}{2} \Sigma_\delta^+ \\ -\frac{3}{2} \Sigma_\delta^+ \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Sigma_\delta^+ \\ -\frac{1}{2} \Sigma_\delta^+ \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \Sigma_\delta^+ \\ \frac{1}{2} \Sigma_\delta^+ \end{bmatrix}$	
$Y = 0$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Sigma^- \\ -\frac{1}{2} \Sigma^0 \\ -\frac{1}{2} \Sigma^+ \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \Sigma^- \\ \frac{1}{2} \Sigma^0 \\ \frac{1}{2} \Sigma^+ \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{3}{2} \Delta_\delta^- \\ -\frac{3}{2} \Delta_\delta^0 \\ -\frac{3}{2} \Delta_\delta^+ \\ -\frac{3}{2} \Delta_\delta^{++} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -\frac{1}{2} \Delta_\delta^- \\ -\frac{1}{2} \Delta_\delta^0 \\ -\frac{1}{2} \Delta_\delta^+ \\ -\frac{1}{2} \Delta_\delta^{++} \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} \frac{1}{2} \Delta_\delta^- \\ \frac{1}{2} \Delta_\delta^0 \\ \frac{1}{2} \Delta_\delta^+ \\ \frac{1}{2} \Delta_\delta^{++} \end{bmatrix}$	$Y = 1 \left\{ T = \frac{3}{2} \right.$

ным определенными значениями квантовых чисел группы  $G$ , соответствующим частицам этой группы. При таком подходе может случиться, что собственные значения оператора массы оказываются вырожденными, так что частицы, различные в указанном выше смысле, имеют одну и ту же массу. Например, при описании обычного электронного спина с помощью группы  $SU(2)$  состояния электрона с  $\tau_3 = -1/2$  и  $\tau_3 = 1/2$  следует считать различными частицами одной массы. Еще раз подчеркнем, что не существует понятия «элементарности» частицы, независимого от способа ее теоретического описания, а поскольку такое описание определяется некоторой группой симметрии, то не следует удивляться неоднозначности в употреблении этого термина. Запимаясь групповой классификацией частиц, следует придерживаться не традиции, а выбранной группы симметрии.

Табл. 6 изображает классификацию 56-плета в  $SU(6)$ -симметрии. Значения заряда  $Q$  указываются правым верхним индексом у символа частицы, значения проекции спина  $\tau_3$  — левым верхним индексом. Протон  $P$  обозначен через  $N^+$ , нейтрон  $N$  — через  $N^0$ .

Вертикальные столбцы табл. 6 изображают мультиплеты наибольшей подгруппы симметрии  $SU(3)$  (ср. (5)) — два октета и четыре декуплета частиц. Мы считаем здесь, что каждому вектору выделенного базиса соответствует отдельная частица, как и в случае  $SU(3)$ -симметрии.

При разложении по следующей подгруппе  $SU(2)_T$  цепочки (5) каждый мультиплет  $SU(3)$  распадается на мультиплеты подгруппы  $SU(2)_T$ ,

изображаемые прямоугольниками табл. 6. Каждый из таких «малых» мультиплетов характеризуется значениями операторов Казимира этой подгруппы  $T^2$ ,  $Y$  (причем вместо собственных значений первого из них  $T(T+1)$  проставлены задающие их значения  $T$ ). Наконец, отдельные частицы выделяются наборами квантовых чисел ( $\tau$ ,  $\tau_3$ ,  $T$ ,  $Y$ ,  $Q$ ) группы  $SU(6)$ , указывающими «адрес» частицы в табл. 6.

Классификация, содержащаяся в табл. 6, соответствует физическим свойствам частиц. В самом деле, мультиплеты наименьшей подгруппы  $SU(2)_\tau$  — это в точности изотопические мультиплеты, содержащие близко родственные частицы, с одинаковым значением проекции спина  $\tau_3$ . Мультиплеты большей подгруппы  $SU(3)$  содержат частицы, связанные более отдаленным родством, обнаруживающимися в  $SU(3)$ -симметрии. По сравнению с группой  $SU(3)$ , из  $SU(6)$ -симметрии получается добавочное квантовое число  $\tau$ , описывающее спин  $1/2$  частиц октетов и спин  $3/2$  частиц декуплетов.

Симметрии  $SU(6)$  соответствует массовая формула [19], которую мы здесь не приводим (см. [12, гл. 17]). Как уже говорилось, собственные значения массы в этом случае вырождены вследствие обычного спина. Аналогично производится классификация 35-плета мезонов.

Если в соответствии с групповой точкой зрения считать, что 56-плет описывает 56 «элементарных частиц группы  $SU(6)$ », то наряду с их классификацией на «большие» и «малые» мультиплеты выделяются еще «ближайшие аналоги», различающиеся только проекцией спина и стоящие в табл. 6 на одной горизонтали, например  $-1/2\Xi^0$ ,  $1/2\Xi^0$  или  $-3/2\Omega^-$ ,  $-1/2\Omega^-$ ,  $1/2\Omega^-$ ,  $3/2\Omega^-$ . Можно указать способ установления этих аналогов: в алгебре Ли группы  $SU(6)$  есть операторы  $\tau_+ = \tau_1 + i\tau_2$ ,  $\tau_- = \tau_1 - i\tau_2$ , переводящие друг в друга эти аналогичные частицы, причем операторы  $\tau_+$ ,  $\tau_-$  перестановочны с операторами унитарного спина, действующими в пределах «больших» мультиплетов (см. [12, с. 326]). Так же обстоит дело в 35-плете мезонов. В 2.8 мы приведем общие соображения, позволяющие выделить ряды аналогичных частиц при групповой классификации. В дальнейшем мы увидим, что применение этого подхода к классификации химических элементов приводит к естественному алгебраическому описанию менделеевских гомологических рядов, таких как щелочные металлы, щелочноземельные металлы, а также к открытой Сиборгом аналогии между лантаноидами и актиноидами.

## 2.7. Принципы классификации в квантовой теории

Примеры, рассмотренные в гл. 1, 2, приводят к общей концепции классификации состояний квантовой системы, которую мы сейчас изложим. Этот подход равным образом относится к системам в классическом смысле, таким как атом, молекула или отдельная элементарная частица, и к системам в более широком смысле, таким как «изотопический мультиплет», «октет» «декуплет» и т. д. Во всех случаях наибольший интерес представляют стационарные состояния системы, т. е. состояния с определенным значением энергии. В классических задачах нерелятивистской квантовой механики, где под энергией понимается небольшая добавка к энергии покоя, стационарные состояния — это возбужденные состояния атома, молекулы и т. д., например  $s$ -,  $p$ -,  $d$ -,  $f$ -состояния атома водорода. В теории адронных мультиплетов, где под энергией понимается энергия покоя, стационарные состояния — это состояния системы с определенными значениями массы, соответствующие частицам мультиплета. Принципы классификации во всех случаях одинаковы; вначале мы будем говорить о классификации состояний вообще, а затем, в соответствии с нашими целями, о классификации частиц.

Любое изменение состояния квантовой системы называется квантовым переходом. Простейшие переходы имеют геометрический или кинематический характер: они состоят в том, что система в целом меняет

свое положение в пространстве или приводится в равномерное и прямолинейное движение. Переходы такого рода можно считать идеализированным изображением воздействий на систему внешними силами, например, управления пучком электронов или ионов с помощью электромагнитного поля. Поскольку поле при этом можно считать неизменным, оно не включается в рассматриваемую квантовую систему, а учитывается в виде потенциалов.

В реакциях между частицами происходит взаимодействие: полное описание реакции включает все участвующие в ней частицы, так что исходный набор частиц с их параметрами движения и конечный набор (тех же или других) частиц с их параметрами движения рассматриваются как состояния одной и той же квантовой системы. Система включает при этом несколько частиц и со временем меняет свой состав. Но в ряде случаев можно сосредоточить внимание на некоторых частицах и пренебречь другими, не включая их в систему. Если, например, сосредоточить внимание на барионах и пренебречь лептонами и мезонами, то реакция  $N \rightarrow Pe^- \nu$ , в которой нейтрон распадается на протон, электрон и нейтрино, может рассматриваться как переход системы  $N \rightarrow P$ ; реакция  $\Sigma^- \rightarrow N \pi^-$  — как переход  $\Sigma^- \rightarrow N$ , и т. п. Конечно, при таком формальном описании переходов не сохраняется энергия, в отличие, например, от перехода из состояния с проекцией спина  $t_3 = -1/2$  в состояние с проекцией спина  $t_3 = 1/2$ . С точки зрения, изложенной выше в этой главе, переходы  $N \rightarrow P$ ,  $\Sigma^- \rightarrow N$  и т. д. можно считать квантовыми переходами «октета», симметрия которого нарушена некоторым «внутренним взаимодействием». При «включении» этого взаимодействия кинематика октета, т. е. описание его возможных состояний и переходов, не меняется, что вообще характерно для квантовомеханического описания взаимодействий.

Кинематика системы должна содержать описание всех ее возможных состояний и переходов. Набор состояний задается векторами некоторого гильбертова пространства  $\mathfrak{H}$ , переходы же задаются с помощью группы операторов, действующей в  $\mathfrak{H}$  и называемой группой симметрии системы. Тем самым считается, что в пространстве  $\mathfrak{H}$  задано представление некоторой группы  $G$ ; обозначим это представление через  $\{T_g\}$ . В интересующих нас случаях  $G$  является группой Ли. Предполагается, что операторы  $T_A + iT_B$ , представляющие комплексную оболочку алгебры Ли группы  $G$ , осуществляют все возможные квантовые переходы системы. Если, например,  $G$  содержит в качестве подгруппы группу вращений  $SO(3)$ , то операторы  $A_{\pm} = A_1 \pm iA_2$  переводят вектор состояния с квантовым числом  $m$  в вектор с квантовым числом  $m+1$  или  $m-1$ ; если  $G = SU(3)$ , то операторы Окубо  $A_i^2$  переводят друг в друга состояния октета.

Если представление  $\{T_g\}$  приводимо и  $\mathfrak{H}'$  — инвариантное подпространство  $\mathfrak{H}$ , то операторы алгебры Ли не выводят за пределы  $\mathfrak{H}'$  и, следовательно, при всевозможных квантовых переходах состояния из  $\mathfrak{H}'$  превращаются снова в состояния из  $\mathfrak{H}'$ . Но тогда состояния системы, не принадлежащие  $\mathfrak{H}'$ , оказываются недостижимыми из  $\mathfrak{H}'$ , и нет причин считать, что все состояния пространства  $\mathfrak{H}$  относятся к одной и той же квантовой системе. Поэтому естественно предположить, что представление  $\{T_g\}$  неприводимо. Итак, пространство векторов состояния  $\mathfrak{H}$  является пространством неприводимого представления группы симметрии  $G$ . Таким образом задается кинематика квантовой системы.

Динамика системы в простейшем случае полной симметрии также содержится в группе  $G$ . Операторы  $T_A$ , представляющие алгебру Ли группы  $G$ , задают наблюдаемые системы. Чтобы наблюдаемые имели действительные собственные значения, надо предположить, что операторы  $T_A$  эрмитовы, а для этого, в свою очередь, предполагается, что операторы  $T_g$  унитарны. Итак, следует выбирать в качестве  $\{T_g\}$  унитарное представление. В случае полной симметрии системы к наблюдаемым систе-

мы принадлежит также ее гамильтониан, перестановочный со всеми операторами  $T_s$ , т. е. некоторый оператор Казимира группы  $G$ . Если  $G$  имеет более одного оператора Казимира, то выбор гамильтониана требует дополнительных физических соображений.

Конечно, выбор группы симметрии системы зависит от состояния наших знаний; до открытия  $SU(3)$ -симметрии изотопические мультиплеты считались отдельными квантовыми системами, описываемыми группой  $SU(2)$ , но оказалось, что они входят в более широкую систему, с большей группой симметрии.

В ряде случаев одна и та же группа симметрии описывает множество систем; например, для любой свободной частицы такую роль играет группа Галилея (в нерелятивистской теории) или группа Пуанкаре (в релятивистской теории); группа  $SU(3)$  описывает множество октетов и декуплетов барионов и мезонов, и т. д. Ввиду этого полезно не отождествлять группу симметрии с группой операторов некоторого гильбертова пространства состояний, а задавать ее как отдельный математический объект (например, как матричную группу), и в каждом случае, когда эта группа описывает переходы состояний некоторой системы, строить для элементов группы  $G$  соответствующие им операторы в пространстве состояний этой системы. Таким образом выясняется роль *представлений групп* в квантовой механике.

Вполне симметричный гамильтониан, т. е. оператор Казимира группы, правильно описывающий кинематику системы, может быть неприемлем для описания ее динамики. Для электрона в кулоновом поле это оператор Казимира группы  $SO(4, 2)$  (см. 1.4). Поскольку все пространство состояний электрона  $\mathfrak{R}$  неприводимо для этой группы, для такого гамильтониана все состояния имеют одну и ту же энергию, т. е. имеется единственное бесконечно вырожденное собственное значение гамильтониана. Атомный электрон никогда не наблюдается в таком состоянии «полной симметрии», которое является теоретической конструкцией. Точно так же, «вполне симметричный» оператор массы октета является оператором Казимира группы  $SU(3)$ , принимающим одно и то же значение  $m_0$  на всех векторах восьмимерного пространства состояний; но это восьмикратно вырожденное значение не наблюдается на опыте, и «вполне симметричное» состояние октета — теоретическая конструкция.

Нарушение симметрии можно представить себе как «включение» добавочного взаимодействия, значительно более слабого, чем описанное симметричным гамильтонианом и соответственно способного вызвать меньшее число переходов. Предполагается, что переходы, возможные под действием более слабого взаимодействия, тем более возможны под действием более сильного, так что не возникает новых переходов, а остается часть старых. Это значит, что вновь включенное взаимодействие описывается *подгруппой* группы  $G$ , которую мы обозначим  $G_1$ . Предположение, что это новое взаимодействие значительно слабее прежнего, математически выражается тем, что к прежнему, «вполне симметричному» гамильтониану (перестановочному со всеми операторами группы  $G$ ) прибавляется «возмущающий» член значительно меньшей величины, перестановочный лишь с подгруппой  $G_1$ , так что возмущенный гамильтониан системы также перестановочен лишь с  $G_1$ . В случае электрона возмущение приводит к обычному кулоновскому гамильтониану, уже не перестановочному с группой  $SO(4, 2)$ , но перестановочному с ее подгруппой  $SO(4)$ . Собственные значения энергии имеют теперь конечную кратность и наблюдаются на опыте. В случае октета возмущенный оператор массы уже не перестановочен со всей группой  $SU(3)$ , но перестановочен с подгруппой изоспина  $SU(2)$ . Собственные значения возмущенного оператора массы (см. 2.5) имеют кратности 2, 3, 1, 2, но соответствующие им состояния («изотопические мультиплеты») не наблюдаются в виде вырожденных состояний, а также являются теоретическими конструкциями. При включении еще более слабого взаимодействия кратные энергетиче-

ские уровни электрона расщепляются на простые, причем в этом случае новое взаимодействие и в самом деле можно включить (в виде магнитного поля). В случае октета «включение» остается теоретической конструкцией, но значения окончательного оператора массы (лишенного симметрии) наблюдаются в виде масс восьми отдельных частиц.

Естественно считать, что операторы группы симметрии или ее подгруппы соединяют между собой родственные состояния или частицы; если это полная группа симметрии, то родство может проявиться в самой возможности перехода из одного состояния в другое; если же это подгруппа, то возможность перевести одно состояние в другое с помощью *более слабого* взаимодействия можно истолковать как *более близкое* родство, так что неприводимое представление подгруппы объединяет более близко родственные состояния или частицы. Цепочка вложенных подгрупп приводит, таким образом, к иерархической классификации состояний, по степени их родства. Конечно, эта классификация зависит от принятой цепочки подгрупп, задающей симметрию системы. Если симметрия найдена правильно, то родство проявляется в физических свойствах состояний или частиц: в близости энергетических уровней или масс, общих значениях наблюдаемых, закономерном изменении свойств в пределах семейства родственных частиц или состояний.

Теперь можно описать общую схему классификации состояний квантовой системы. Для определенности мы будем дальше говорить о классификации частиц, а вместо энергии будем говорить о массе, но это не ограничивает общности предлагаемой схемы.

*Симметрия* задается цепочкой вложенных друг в друга групп Ли:

$$G = G_0 \supset G_1 \supset G_2 \supset \dots \supset G_k. \quad (2.7.1)$$

*Система* с данной симметрией задается неприводимым унитарным представлением группы  $G$  в некотором гильбертовом пространстве  $\mathfrak{H}$ . Основные наблюдаемые системы получаются как операторы представления алгебры Ли группы  $G$ , действующие в  $\mathfrak{H}$ . Другие наблюдаемые системы получаются как операторы, представляющие элементы универсальной обертывающей алгебры группы  $G$ . Редукция представления группы  $G$  по подгруппе  $G_1$  приводит к разложению  $\mathfrak{H}$  в ортогональную сумму неприводимых подпространств  $\mathfrak{H}_i^{(1)}$  этой подгруппы:

$$\mathfrak{H} = \mathfrak{H}_1^{(1)} \oplus \mathfrak{H}_2^{(1)} \oplus \dots \oplus \mathfrak{H}_i^{(1)} \oplus \dots \quad (2.7.2)$$

Редукция представления  $G_1$  по подгруппе  $G_2$  приводит к разложению подпространств  $\mathfrak{H}_i^{(1)}$  на неприводимые подпространства  $\mathfrak{H}_{ij}^{(2)}$  группы  $G_2$ :

$$\mathfrak{H}_i^{(1)} = \mathfrak{H}_{i1}^{(2)} \oplus \mathfrak{H}_{i2}^{(2)} \oplus \dots \oplus \mathfrak{H}_{ij}^{(2)} \oplus \dots, \quad (2.7.3)$$

и т. д.

Выбирается максимальная система перестановочных наблюдаемых группы  $G$ . Их собственные значения называются квантовыми числами системы. Пусть квантовые числа занумерованы в определенном порядке:  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_i$ ; предположим, что набор этих чисел полностью определяет (с точностью до множителя) вектор состояния системы  $|\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_i\rangle$ , собственный для всех выбранных наблюдаемых с указанными собственными значениями, и что такие векторы при всевозможных наборах  $(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_i)$  составляют базис пространства  $\mathfrak{H}$ . Назовем этот базис выделенным базисом. Предположим, далее, что несколько начальных квантовых чисел  $\lambda_1, \dots, \lambda_{r_1}$  представляют собой значения операторов Казимира подгруппы  $G_1$ , так что все векторы выделенного базиса с этими квантовыми числами принадлежат одному из подпространств  $\mathfrak{H}_i^{(1)}$ ; что следующие квантовые числа  $\lambda_{r_1+1}, \dots, \lambda_{r_2}$  являются значениями операторов Казимира подгруппы  $G_2$  и тем самым векторы со значениями  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{r_2}$  принадлежат одному из подпространств  $\mathfrak{H}_{ij}^{(2)}$ , и т. д.; что,

наконец, последняя часть квантовых чисел, в выбранной нумерации, задает положение вектора выделенного базиса в неприводимом подпространстве подгруппы  $G_k$ .

Оператор массы системы строится в виде

$$M = M_0 + M_1 + \dots + M_k + M_{k+1}, \quad (2.7.4)$$

где  $M_j$  — некоторый оператор Казимира группы  $G_j$  ( $j = 0, 1, \dots, k$ ), выражающийся через основные наблюдаемые этой группы, а  $M_{k+1}$  выражается как полином от основных наблюдаемых группы  $G$ . Предполагается, что каждый оператор  $M_{j+1}$  мал по сравнению с  $M_j$  ( $j = 0, 1, \dots, k$ ), т. е. матричные элементы  $M_{j+1}$  малы по сравнению с матричными элементами  $M_j$ .

Элементарными частицами системы называются состояния системы с определенным значением массы, т. е. состояния, векторы которых являются собственными векторами оператора массы. Для наших дальнейших целей сделаем предположение, что собственные значения массы не вырождены, т. е. что различные частицы имеют неравные массы.\*)

Обычно можно выбрать выделенный базис таким образом, чтобы собственные векторы массы были близки к векторам этого базиса. Предположим (в некотором приближении), что состояния с определенным значением массы задаются векторами выделенного базиса. Тогда, заменяя в выражении оператора  $M$  основные наблюдаемые соответствующими собственными значениями, можно представить массу элементарной частицы в виде полинома от ее квантовых чисел  $\lambda_j$ ; это выражение называется *массовой формулой*. Таким образом *масса частиц системы является функцией от их квантовых чисел*. Если симметрия системы, описываемая цепочкой групп (1), найдена правильно, то можно предполагать, что не только масса, но и любое количественно измеримое свойство частиц  $P$  определяется квантовыми числами, т. е. имеется достаточно регулярная зависимость

$$P = P(\lambda_1, \dots, \lambda_k). \quad (2.7.5)$$

Все частицы системы, по определению, составляют *мультиплет* группы  $G$ . Частицы, векторы состояния которых входят в неприводимое подпространство  $\mathfrak{N}_i^{(1)}$  подгруппы  $G_1$ , составляют мультиплет этой подгруппы, и т. д. Правильность полученной таким образом «иерархической» классификации частиц подтверждается *закономерностью изменения свойств частиц в пределах мультиплета*, нарушающейся при выходе из него. Так, в пределах изотопических мультиплетов наблюдается не только близость масс, но и равномерное изменение заряда. Ряд дальнейших примеров обнаружится в классификации химических элементов.

Может случиться, что некоторые частицы системы имеют весьма близкие свойства, хотя групповая классификация помещает их в разные мультиплеты цепочки групп (1). Близость эта связана не с «легкостью переходов» в пределах «малых» мультиплетов, а с одинаковым положением этих частиц в мультиплетах. Такие частицы мы назовем *гомологами* системы. В случае  $SU(6)$ -симметрии гомологами являются состояния 56-плета (или 35-плета), различающиеся лишь проекцией обычного спина (см. 2.6). Можно сформулировать простой принцип выделения гомологических рядов системы (см. [12, с. 326]). Пусть мы хотим найти гомологичные частицы в мультиплетах подгруппы  $G_1$ . Допустим, что в алгебре Ли группы  $G$  существует оператор  $\Gamma$ , переводящий друг в друга гомологичные векторы состояния, например, пусть  $v_2 = \Gamma v_1$ , где  $v_j$  принадлежит  $j$ -му мультиплету ( $j = 1, 2$ ). Если  $A$  — оператор алгебры

\*) Это предположение часто не выполняется для энергетических уровней атомов и молекул, а также, например, в  $SU(2)$ -симметрии обычного спина или в  $SU(6)$ -симметрии. Нетрудно было бы сделать в излагаемой схеме классификации изменения, необходимые для вырожденного случая.



Ли подгруппы  $G_i$ , то можно ожидать, что векторы  $v'_1 = Av_1$  и  $v'_2 = Av_2$ , ввиду их одинаковой алгебраической связи с  $v_1, v_2$  в соответствующих мультиплеттах, также гомологичны между собой. Но тогда должно быть  $v_2 = \Gamma v'_1$ , т. е.  $\Gamma \Gamma v_1 = \Gamma A v_1$ . Если каждая частица входит в некоторый гомологический ряд, то в качестве  $v_1$  можно взять здесь любой базисный вектор, а это значит, что  $\Gamma \Gamma = \Gamma A$ , т. е. *оператор  $\Gamma$  перестановочен со всеми операторами подгруппы  $G_i$* . Назовем операторы такого рода *операторами средства*.

Применение «принципа суперпозиции» к интересующим нас системам можно понимать лишь в том смысле, что пространства векторов состояния *линейны*; но обычная формулировка, согласно которой суперпозиция физически возможных состояний приводит опять к физически возможному состоянию, теряет силу. Например, линейная комбинация векторов состояния протона и нейтрона не изображает физически реального состояния октета. Реальность приписывается лишь *отдельным* состояниям, соответствующим отдельным значениям массы; в этом смысле системы, рассматриваемые при классификации частиц, представляют собой крайний случай вигнера «принципа суперотбора».

### Глава 3

## ГРУППА СИММЕТРИИ ХИМИЧЕСКИХ ЭЛЕМЕНТОВ

### 3.1. Описание системы элементов

Представление о том, что атомы химических элементов образуют единую систему, в которой свойства элемента закономерно зависят от его положения в системе, было впервые высказано Д. И. Менделеевым. Расположив элементы в порядке возрастания их атомных весов, Менделеев обнаружил, что их химические свойства меняются периодически, и выделил гомологические ряды элементов со сходными свойствами. Таким образом, первая классификация частиц возникла задолго до появления атомной физики, когда оспаривались еще самые понятия атома и молекулы и не могло быть речи о физическом объяснении найденных закономерностей.

Такое объяснение было предложено Бором в 1921 г. Бор исходил из теории атома, начатой им в 1911 г., а затем развитой рядом авторов, в особенности Зоммерфельдом, известной в настоящее время под названием «старой квантовой механики». После создания современной квантовой механики (1925—26 гг.) предложенное Бором упорядочение элементов получило истолкование с точки зрения многоэлектронного уравнения Шредингера, что привело к построению так называемой модели электронных оболочек. Таким образом, возникло общепринятое в настоящее время описание элементов, которое мы будем называть *моделью Бора*.

Для понимания излагаемого дальше группового описания элементов надо отчетливо объяснить отношение этого описания к модели Бора, а для этого, в свою очередь, необходимо уяснить себе положение модели Бора в квантовой механике.

Как известно, многоэлектронное уравнение Шредингера не поддается точному решению, и все выводимые из него следствия получаются с помощью приближенных методов, основанных на тех или иных упрощающих допущениях. В модели Бора предполагается, что каждый электрон находится в центральном поле, состоящем из кулоновского поля ядра и поля фиктивной сферически симметричной заряженной оболочки, заменяющей действие всех остальных электронов. Такая замена

оправдывается интуитивным представлением, что электроны, движущиеся в пределах атома достаточно быстро и достаточно независимо друг от друга, образуют нечто вроде непрерывно распределенного заряда, «экранирующего» ядро, и что «выделенный» электрон движется в поле этого заряда. Поскольку считается, что положения отдельных электронов мало связаны между собой, в распределении такого фиктивного заряда не должно быть привилегированных направлений, так что плотность его можно предполагать сферически симметричной. Разделение электронов на «выделенный» и «остальные» представляет собой чисто теоретическую операцию, противоречащую принципиальной неразличимости электронов и потому нуждающуюся в поправке, что и делается с помощью принципа запрета Паули. Приняв указанные допущения, можно представить себе электрон многоэлектронного атома наподобие электрона в атоме водорода, для которого есть точное решение уравнения Шредингера. Стационарные состояния «водородного» электрона описываются квантовыми числами  $n, l, m$ , к которым Паули прибавил в 1925 г. «проекцию спина»  $s = \pm 1/2$ .

Затем к системе электронов данного атома применяется принцип Паули, по которому два различных электрона не могут находиться в одном и том же состоянии. Принцип Паули рассматривается как общий закон природы, но применение этого закона требует в каждом случае правильного описания возможных состояний, т. е. кинематики квантовой системы. Предполагается, что несмотря на различие ситуации электрона в многоэлектронном и одноэлектронном атоме употребление тех же квантовых чисел  $n, l, m, s$  остается законным и что задание набора этих чисел для всех электронов правильно описывает состояние системы электронов. Применяя к такому описанию принцип Паули, приступают к последовательному заполнению электронных оболочек.

Такой образ действий, классическое изложение которого можно найти в книге Зоммерфельда [4, т. I, гл. III], приводит к успешному описанию спектров и химических свойств элементов, что и служит оправданием модели Бора. Надо отметить, однако, что эта модель не является логическим следствием общих принципов квантовой механики и представления о составе атома из ядра и электронов. Это было ясно основоположникам квантовой механики; в частности, Зоммерфельд отмечает «несколько кабалистический» характер описанной процедуры [4, т. I, с. 122, 140]. С точки зрения современной квантовой механики модель Бора следует рассматривать как *приближенный метод* исследования решений многоэлектронного уравнения Шредингера. Эти замечания, конечно, никоим образом не умаляющие значение построения Бора, имеют целью напомнить, что модель Бора не является единственным логически возможным описанием системы элементов, совместимым с принципами квантовой механики.

Ясно, что модель Бора не описывает атомы различных элементов как *единую* квантовую систему. В самом деле, понятие квантовой системы предполагает, что имеется гильбертово пространство, векторы которого изображают все возможные состояния системы, и что в этом пространстве задан гамильтониан, собственные векторы которого изображают стационарные состояния системы, — в данном случае такие состояния должны соответствовать атомам всех элементов. Такого описания нет в модели Бора (да и не могло быть до возникновения всего круга идей, связанных с изоспином и унитарной симметрией); тем более нет в модели Бора группы симметрии, операторы которой переводили бы друг в друга векторы состояния, соответствующие разным элементам. Квантовой системой, рассматриваемой в модели Бора, является атом *отдельного*, фиксированного элемента, с заданным атомным номером  $Z$ ; стационарные состояния такой системы представляют собой различные энергетические состояния одного и того же атома. Атомный номер  $Z$  не является квантовым числом теории, а входит в качестве *параметра*

в многоэлектронное уравнение Шредингера, приближенное решение которого и является задачей модели Бора. Устойчивое состояние атома описывается как состояние системы с наименьшей энергией, а затем такие состояния различных квантовых систем с разными значениями  $Z$  располагаются в последовательность в порядке возрастания этой энергии, зависящей от  $Z$ .

Числа  $n, l, m, s$  не являются в модели Бора квантовыми числами в смысле, описанном в гл. 2; эти числа задают состояния отдельного атомного электрона, причем числа  $n, l$  могут служить для обозначения электронных оболочек. Атомный номер  $Z$  различает отдельные квантовые системы, а не объединяет их в одну. Важно отметить, что в модели Бора числа  $n, l, m, s$  не могут служить для нумерации элементов и не используются в этом качестве (ср. [4]).

Первая попытка применить «водородные» квантовые числа  $n, l, m$  для нумерации элементов принадлежит Маделунгу, заметившему в 20-х гг., что таким образом получается удобная классификация элементов по их свойствам. Поскольку эта нумерация не имела теоретического обоснования, Маделунг назвал ее «эмпирической»; в частности, он не связывал ее с моделью Бора. Возможно, именно из-за отсутствия обоснования он опубликовал ее необычным образом — в своем справочнике по математическим методам физики, выдержавшем много изданий (см. [7, 584, 586])<sup>\*</sup>. Однако таблица в [7] ничего не говорит о природе чисел Маделунга.

Сопоставим нумерацию Маделунга с таблицей элементов (см. табл. 7), заимствованной из совместной работы Ю. Б. Румера и автора 1971 г. [11]. Числа  $n, l, m, s$  в табл. 7 не совпадают с первоначальными числами из [7], но отличаются от них несущественной заменой переменных. Пределы их изменения следующие:

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots; \\ \text{при данном } n: \quad l &= 0, 1, \dots, n-1; \\ \text{при данных } n, l: \quad m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l; \\ \text{при данных } n, l, m: \quad s &= -1/2, 1/2. \end{aligned} \tag{3.1.1}$$

Столбец таблицы, в котором находится элемент, задается значением  $n$ , строка — значениями  $l$  и  $m$ ; например, Mn соответствует  $n=3, l=2, m=0$ . Каждой тройке  $n, l, m$  соответствует пара элементов, нумеруемых числом  $s=\pm 1/2$ ; так, Mn нумеруется набором чисел  $(3, 2, 0, -1/2)$ , Fe — набором  $(3, 2, 0, 1/2)$ .

Сравним теперь табл. 7 с табл. 1, изображающей базис некоторого неприводимого представления конформной группы, описываемого ниже. Легко заметить, что пределы изменения чисел  $n, l, m$  в обеих таблицах одинаковы. Это наводит на мысль, что система элементов связана с указанным представлением конформной группы, уже упомянутым в гл. 1 при описании энергетических уровней водорода. Оказывается, что менделеевские гомологические ряды занимают в табл. 7 вполне определенное положение, а именно совпадают с ее горизонтальными рядами, т. е. получаются при фиксированных значениях  $l, m, s$  и переменном  $n$ . Отсюда уже видно, что конформная группа имеет близкое отношение к химическим свойствам элементов.

<sup>\*</sup> Автор узнал о нумерации Маделунга на позднем этапе своей работы, после опубликования [15]. Нумерация в [15], по существу совпадающая с нумерацией Маделунга, была предложена Ю. И. Кулаковым, также не знавшим о ней (ср. [21]). Мы не придерживаемся здесь первоначального хода мыслей, а прямо начинаем с чисел Маделунга, что позволяет лучше понять излагаемый дальше метод.

	$n = 1$	$n = 2$	$n = 3$	$n = 4$	$n = 5$	$n = 6$	$n = 7$	
$l = 0$	<div>H He</div>	<div>Li Be</div>	<div>Na Mg</div>	<div>K Ca</div>	<div>Rb Sr</div>	<div>Cs Ba</div>	<div>Fr Ra</div>	$m = 0$
$l = 1$		<div>B C</div>	<div>Al Si</div>	<div>Ga Ge</div>	<div>In Sn</div>	<div>Tl Pb</div>		$m = -1$
		<div>N O</div>	<div>P S</div>	<div>As Se</div>	<div>Sb Te</div>	<div>Bi Po</div>		$m = 0$
		<div>F Ne</div>	<div>Cl Ar</div>	<div>Br Kr</div>	<div>J Xe</div>	<div>At Rn</div>		$m = 1$
$l = 2$	$s = -\frac{1}{2}$ $s = \frac{1}{2}$		<div>Sc Ti</div>	<div>Y Zr</div>	<div>Lu Hf</div>	<div>Lr Ku</div>		$m = -2$
			<div>V Cr</div>	<div>Nb Mo</div>	<div>Ta W</div>			$m = -1$
			<div>Mn Fe</div>	<div>Tc Ru</div>	<div>Re Os</div>			$m = 0$
			<div>Co Ni</div>	<div>Rh Pd</div>	<div>Ir Pt</div>			$m = 1$
			<div>Cu Zn</div>	<div>Ag Cd</div>	<div>Au Hg</div>			$m = 2$
$l = 3$			<div>La Ce</div>	<div>Ac Th</div>				$m = -3$
			<div>Pr Nd</div>	<div>Pa U</div>				$m = -2$
			<div>Pm Sm</div>	<div>Np Pu</div>				$m = -1$
			<div>Eu Gd</div>	<div>Am Cm</div>				$m = 0$
			<div>Tb Dy</div>	<div>Bk Cf</div>				$m = 1$
			<div>Ho Er</div>	<div>Es Fm</div>				$m = 2$
			<div>Tm Yb</div>	<div>Md No</div>				$m = 3$

Проведение этого замысла наталкивается, однако, на два препятствия. Прежде всего, число Маделунга  $s$  не имеет отношения к конформной группе и нуждается в объяснении. В табл. 7 (совпадающей с первоначальной таблицей, предложенной Ю. Б. Румером в 1970 г.) каждому базисному вектору представления соответствует не один, а два элемента. Далее, свойства элементов зависят, как мы увидим, не прямо от чисел Маделунга  $n$ ,  $l$ , а от их комбинации  $n + l$ . Но прежде чем перейти к построению группы симметрии и представления, объясним принципиальный смысл этого построения.

Предполагается, что атомы всевозможных элементов образуют мультиплет некоторой группы симметрии  $G$  в смысле 2.7, т. е. соответству-

ют собственным векторам некоторого оператора массы, определенного в пространстве неприводимого унитарного представления группы  $G$ . Далее, задается цепочка вложенных подгрупп типа (2.7.1), определяющая симметрию соответствующей квантовой системы. Редукция представления группы  $G$  по этим подгруппам приводит к последовательному распадению мультимплета всех элементов на меньшие мультимплеты, которые оказываются естественными семействами элементов и задают их классификацию. Таким образом, атомы всех элементов описываются как *единая квантовая система*, наподобие мультимплетов унитарной симметрии (и в отличие от модели Бора).

Такое описание было впервые предложено в 1971 г. в [11], где было уже построено соответствующее табл. 7 пространство представления, но в качестве группы симметрии бралась  $SU(2) \times SO(4)$ . В 1972 г. Б. Г. Конопельченко [5] ввел в качестве группы симметрии системы элементов  $SO(4, 2)$ , расширив представление Фока группы  $SO(4)$  на конформную группу; с алгебраической стороны такое расширение было известно еще из работы [8]. В том же 1972 г. конформная группа была независимо предложена для описания элементов Барутом [19] и Новаро и Баррондо [18]; однако точка зрения, принятая этими авторами, была отлична от нашей: они рассматривали построенную симметрию лишь как симметрию электронных оболочек, не отделяя ее от модели Бора. Между тем, уже в [11] была отчетливо высказана другая точка зрения, согласно которой речь идет о симметрии системы *атомов в целом*. Эта точка зрения, развитая в работах автора [14, 15, 22], подтверждается массовой формулой, описывающей атомные веса элементов [16, 21, 22]. Далее, цепочка групп симметрии, построенная в этих работах, обладает преимуществами и при описании химических свойств, обнаруживая не замеченные ранее закономерности в экспериментальных данных.

Представление группы симметрии, описывающее систему элементов, оказывается бесконечномерным; это значит, что предлагаемая теория допускает неограниченное число элементов. В этом нет никакого противоречия, поскольку элементы с большими квантовыми числами неустойчивы и не встречаются в природе. Для сравнения напомним, что в  $SU(3)$ -симметрии из теоретически допустимых размерностей мультимплетов 8, 10, 27, 35, ... встречаются, по-видимому, лишь 8 и 10. Устойчивость частиц не является предметом подобных теорий. Заметим еще, что наша система элементов не различает изотопы, так как не имеет для них квантовых чисел.

Своеобразной чертой предлагаемого описания является «игнорирование» *структуры* атомов, лежащей в основе модели Бора. Разумеется, при этом теряется информация, зависящая от атомной структуры, но может быть получена и некоторая новая информация, не усматриваемая из сложной картины электронных оболочек. Сверх того, массовая формула и некоторые другие результаты вообще не имеют отношения к модели Бора, а касаются атомных ядер. Применение к атомам того же группового подхода, что и к «элементарным» частицам, вряд ли может вызвать возражения: теперь мы знаем, что и адроны имеют сложную структуру. Как мы уже видели в гл. 2, само понятие элементарности частицы зависит от положенной в основу описания группы симметрии.

На обычном языке структурной теории можно сказать, что одна и та же симметрия описывает у нас и ядра, и электронные оболочки; это может вызвать недоумение, поскольку ядерные силы имеют иной характер и другую величину, чем кулоновские. Следует, однако, иметь в виду, что предлагается не симметрия нуклонного или кулонова поля как таковых, но (на языке структурной теории) симметрия определенных *конфигураций* нуклонов и электронов. Естественно, симметрия ядерных конфигураций должна вызвать аналогичную симметрию электронных: как подчеркивает Зоммерфельд, «*строение атома от внутренней*

части до периферии однозначно определяется величиной заряда ядра» [4, т. 1, с. 134].

Использование одной и той же (конформной) группы для описания атома водорода и системы элементов вовсе не означает, что речь идет об одной и той же теории. Конформная группа встречается в современной физике в самых различных ситуациях и обещает стать столь же универсальной, как группа Лоренца. В конформной группе есть «повышающие» и «понижающие» операторы алгебры Ли, аналогичные  $L_+$ ,  $L_-$ , но в случае атома водорода они переводят друг в друга различные возбужденные состояния электрона, а в нашем случае — переводят друг в друга атомы разных элементов.

Подчеркнем еще раз важнейшее отличие предлагаемой теории от модели Бора: в то время как модель Бора рассматривает в качестве отдельной квантовой системы атом одного элемента (причем атомный номер входит в теорию в виде параметра, так что имеется столько квантовых систем, сколько элементов), в нашей модели атомы всевозможных элементов рассматриваются как состояния единой квантовой системы, соединяемые друг с другом действием группы симметрии.

### 3.2. Конформная группа

Рассмотрим шестимерное пространство  $R(6)$  с шестью действительными координатами  $\xi_1, \dots, \xi_6$ . Все линейные однородные преобразования

$$\xi'_\alpha = \sum_{\beta=1}^6 c_{\alpha\beta} \xi_\beta, \quad (3.2.1)$$

сохраняющие квадратичную форму

$$Q(\xi_1, \dots, \xi_6) = \xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 + \xi_4^2 - \xi_5^2 - \xi_6^2, \quad (3.2.2)$$

т. е. обладающие свойством  $Q(\xi'_1, \dots, \xi'_6) = Q(\xi_1, \dots, \xi_6)$ , образуют группу, обозначаемую  $O(4, 2)$ . Подгруппа этой группы состоящая из преобразований с определителем 1, называется конформной группой и обозначается  $SO(4, 2)$ . Занишем форму (2) в виде

$$Q(\xi) = \sum_{\alpha, \beta=1}^6 g_{\alpha\beta} \xi_\alpha \xi_\beta, \quad (3.2.3)$$

где  $g_{11} = g_{22} = g_{33} = g_{44} = 1$ ,  $g_{55} = g_{66} = -1$ . Тогда из условия сохранения формы следует матричное равенство

$$G = {}^tCGC, \text{ где } {}^tC_{\alpha\beta} = C_{\beta\alpha}, \quad (3.2.4)$$

и обратно. Для однопараметрической подгруппы конформной группы

$$C_\alpha = e^{-i\alpha A}, \quad (3.2.5)$$

где  $A$  принадлежит алгебре Ли этой группы, из (4) следует  ${}^tC_\alpha^{-1} = e^{i\alpha {}^tA} = Ge^{-i\alpha A}G^{-1}$ , т. е.  $1 + i\alpha {}^tA + \dots = 1 - i\alpha GAG^{-1} + \dots$ , где многоточия означают члены высшего порядка по  $\alpha$ , откуда

$${}^tA = -GAG^{-1}. \quad (3.2.6)$$

Это условие, аналогичное антисимметричности в случае ортогональной группы, полностью определяет алгебру Ли конформной группы. Ввиду специального вида матрицы  $G$  это равносильно равенству

$$a_{\beta\omega} = -g_{\alpha\alpha} a_{\alpha\beta} g_{\beta\beta}. \quad (3.2.7)$$

Отсюда ясно, что  $a_{\alpha\alpha} = 0$  и что элементы матрицы  $A$ , расположенные выше главной диагонали, полностью ее задают. Так как матрицы  $A$  зависят тем самым от 15 параметров, то и матрицы группы  $C = e^{iA}$  зави-

сят от того же числа параметров, а следовательно, размерность группы  $SO(4, 2)$  равна 15.

Нетрудно указать простую систему генераторов алгебры Ли, соответствующих 15 однопараметрическим подгруппам. Подгруппам вращений в плоскостях  $(\xi_\alpha \xi_\beta)$ , где  $1 \leq \alpha < \beta \leq 4$ , соответствуют, как и в случае ортогональной группы, генераторы  $L_{\alpha\beta}$  с двумя ненулевыми элементами:

$$(L_{\alpha\beta})_{\alpha\beta} = -i, \quad (L_{\alpha\beta})_{\beta\alpha} = i \quad (3.2.8)$$

Подгруппам гиперболических вращений в плоскостях  $(\xi_\gamma \xi_\delta)$ , где  $1 \leq \gamma \leq 4$ ,  $\delta = 5, 6$ , т. е. преобразований, сохраняющих форму  $\xi_\gamma^2 - \xi_\delta^2$ , соответствуют генераторы  $L_{\gamma\delta}$  с двумя ненулевыми элементами:

$$(L_{\gamma\delta})_{\gamma\delta} = i, \quad (L_{\gamma\delta})_{\delta\gamma} = -i. \quad (3.2.9)$$

Наконец, подгруппе вращений в плоскости  $(\xi_5 \xi_6)$ , которую мы для упрощения дальнейших формул зададим в виде

$$\xi'_5 = \xi_5 \cos \alpha + \xi_6 \sin \alpha, \quad \xi'_6 = -\xi_5 \sin \alpha + \xi_6 \cos \alpha$$

(с изменением знака параметра  $\alpha$  по сравнению с обычным), соответствует генератор  $L_{56}$  с двумя ненулевыми элементами:

$$(L_{56})_{56} = i, \quad (L_{56})_{65} = -i. \quad (3.2.10)$$

Легко видеть, что общее число операторов (8)–(10) равно 15 и они линейно независимы. Поскольку размерность алгебры Ли также равна 15, они составляют полную систему генераторов группы  $SO(4, 2)$ . Определим еще матрицы  $L_{\alpha\beta}$  с  $\alpha \geq \beta$  формулой

$$L_{\alpha\beta} = -L_{\beta\alpha} \quad (1 \leq \beta < \alpha \leq 6), \quad L_{\alpha\alpha} = 0. \quad (3.2.11)$$

Тогда можно проверить следующие перестановочные соотношения:

$$[L_{\alpha\beta}, L_{\gamma\delta}] = i(g_{\alpha\gamma}L_{\beta\delta} + g_{\beta\delta}L_{\alpha\gamma} - g_{\alpha\delta}L_{\beta\gamma} - g_{\beta\gamma}L_{\alpha\delta}) \quad (3.2.12)$$

$$(\alpha, \beta, \gamma, \delta = 1, \dots, 6, \alpha \neq \beta, \gamma \neq \delta).$$

Для построения представлений удобнее перейти к системе *зависимых* генераторов, предложенной Яо [33]. Введем 18 матриц

$$\begin{aligned} J_1 &= \frac{1}{2}(L_{23} - L_{14}), & J_2 &= \frac{1}{2}(L_{31} - L_{24}), & J_3 &= \frac{1}{2}(L_{12} - L_{34}), \\ K_1 &= \frac{1}{2}(L_{23} + L_{14}), & K_2 &= \frac{1}{2}(L_{31} + L_{24}), & K_3 &= \frac{1}{2}(L_{12} + L_{34}), \\ P_1 &= \frac{1}{2}(-L_{35} - L_{46}), & P_2 &= \frac{1}{2}(L_{45} - L_{36}), & P_0 &= \frac{1}{2}(-L_{34} - L_{56}), \\ Q_1 &= \frac{1}{2}(L_{35} - L_{46}), & Q_2 &= \frac{1}{2}(L_{45} + L_{36}), & Q_0 &= \frac{1}{2}(L_{34} - L_{56}), \\ S_1 &= \frac{1}{2}(-L_{15} + L_{26}), & S_2 &= \frac{1}{2}(-L_{25} - L_{16}), & S_0 &= \frac{1}{2}(L_{12} - L_{56}), \\ T_1 &= \frac{1}{2}(-L_{15} - L_{26}), & T_2 &= \frac{1}{2}(L_{25} - L_{16}), & T_0 &= \frac{1}{2}(-L_{12} - L_{56}), \end{aligned} \quad (3.2.13)$$

связанных тремя соотношениями

$$J_3 - K_3 = P_0 - Q_0, \quad J_3 + K_3 = S_0 - T_0, \quad P_0 + Q_0 = S_0 + T_0. \quad (3.2.14)$$

Перестановочные отношения для генераторов (13) получаются из (12) с помощью очевидных, хотя и несколько утомительных вычислений. Они удобнее записываются для операторов комплексной оболочки алгебры Ли: если положить

$$\begin{aligned} J_\pm &= J_1 \pm iJ_2, & P_\pm &= P_1 \pm iP_2, & S_\pm &= S_1 \pm iS_2, \\ K_\pm &= K_1 \pm iK_2, & Q_\pm &= Q_1 \pm iQ_2, & T_\pm &= T_1 \pm iT_2, \end{aligned} \quad (3.2.15)$$

то получаем перестановочные соотношения Яо (для понимания дальнейшего достаточно знать, что эти соотношения существуют):

$$\begin{array}{lll}
 [J_3, J_+] = J_+ & [J_3, J_-] = -J_- & [J_+, J_-] = 2J_3 \\
 [K_3, K_+] = K_+ & [K_3, K_-] = -K_- & [K_+, K_-] = 2K_3 \\
 [P_0, P_+] = P_+ & [P_0, P_-] = -P_- & [P_+, P_-] = -2P_0 \\
 [Q_0, Q_+] = Q_+ & [Q_0, Q_-] = -Q_- & [Q_+, Q_-] = -2Q_0 \\
 [S_0, S_+] = S_+ & [S_0, S_-] = -S_- & [S_+, S_-] = -2S_0 \\
 [T_0, T_+] = T_+ & [T_0, T_-] = -T_- & [T_+, T_-] = -2T_0
 \end{array}$$

$$[J_i, K_j] = 0 \quad (i, j = +, -, 3)$$

$$\begin{array}{lll}
 [J_+, P_+] = 0 & [J_+, P_-] = -T_- & [J_+, P_0] = -(1/2)J_+ \\
 [J_-, P_+] = T_+ & [J_-, P_-] = 0 & [J_-, P_0] = (1/2)J_- \\
 [J_3, P_+] = (1/2)P_+ & [J_3, P_-] = -(1/2)P_- & [J_3, P_0] = 0 \\
 [J_+, Q_+] = S_+ & [J_+, Q_-] = 0 & [J_+, Q_0] = (1/2)J_+ \\
 [J_-, Q_+] = 0 & [J_-, Q_-] = -S_- & [J_-, Q_0] = -(1/2)J_- \\
 [J_3, Q_+] = -(1/2)Q_+ & [J_3, Q_-] = (1/2)Q_- & [J_3, Q_0] = 0 \\
 [J_+, S_+] = 0 & [J_+, S_-] = -Q_- & [J_+, S_0] = -(1/2)J_+ \\
 [J_-, S_+] = Q_+ & [J_-, S_-] = 0 & [J_-, S_0] = (1/2)J_- \\
 [J_3, S_+] = (1/2)S_+ & [J_3, S_-] = -(1/2)S_- & [J_3, S_0] = 0 \\
 [J_+, T_+] = P_+ & [J_+, T_-] = 0 & [J_+, T_0] = (1/2)J_+ \\
 [J_-, T_+] = 0 & [J_-, T_-] = -P_- & [J_-, T_0] = -(1/2)J_- \\
 [J_3, T_+] = -(1/2)T_+ & [J_3, T_-] = (1/2)T_- & [J_3, T_0] = 0 \\
 [K_+, P_+] = -S_+ & [K_+, P_-] = 0 & [K_+, P_0] = (1/2)K_+ \\
 [K_-, P_+] = 0 & [K_-, P_-] = S_- & [K_-, P_0] = -(1/2)K_- \\
 [K_3, P_+] = -(1/2)P_+ & [K_3, P_-] = (1/2)P_- & [K_3, P_0] = 0 \\
 [K_+, Q_+] = 0 & [K_+, Q_-] = T_- & [K_+, Q_0] = -(1/2)K_+ \\
 [K_-, Q_+] = -T_+ & [K_-, Q_-] = 0 & [K_-, Q_0] = (1/2)K_- \\
 [K_3, Q_+] = (1/2)Q_+ & [K_3, Q_-] = -(1/2)Q_- & [K_3, Q_0] = 0 \\
 [K_+, S_+] = 0 & [K_+, S_-] = P_- & [K_+, S_0] = -(1/2)K_+ \\
 [K_-, S_+] = -P_+ & [K_-, S_-] = 0 & [K_-, S_0] = (1/2)K_- \\
 [K_3, S_+] = (1/2)S_+ & [K_3, S_-] = -(1/2)S_- & [K_3, S_0] = 0 \\
 [K_+, T_+] = -Q_+ & [K_+, T_-] = 0 & [K_+, T_0] = (1/2)K_+ \\
 [K_-, T_+] = 0 & [K_-, T_-] = Q_- & [K_-, T_0] = -(1/2)K_- \\
 [K_3, T_+] = -(1/2)T_+ & [K_3, T_-] = (1/2)T_- & [K_3, T_0] = 0
 \end{array}$$

$$[P_i, Q_j] = 0 \quad (i, j = +, -, 0).$$

$$\begin{array}{lll}
 [P_+, S_+] = 0 & [P_+, S_-] = K_- & [P_+, S_0] = -(1/2)P_+ \\
 [P_-, S_+] = -K_+ & [P_-, S_-] = 0 & [P_-, S_0] = (1/2)P_- \\
 [P_0, S_+] = (1/2)S_+ & [P_0, S_-] = -(1/2)S_- & [P_0, S_0] = 0 \\
 [P_+, T_+] = 0 & [P_+, T_-] = -J_+ & [P_+, T_0] = -(1/2)P_+ \\
 [P_-, T_+] = J_- & [P_-, T_-] = 0 & [P_-, T_0] = (1/2)P_- \\
 [P_0, T_+] = (1/2)T_+ & [P_0, T_-] = -(1/2)T_- & [P_0, T_0] = 0 \\
 [Q_+, S_+] = 0 & [Q_+, S_-] = -J_- & [Q_+, S_0] = -(1/2)Q_+ \\
 [Q_-, S_+] = J_+ & [Q_-, S_-] = 0 & [Q_-, S_0] = (1/2)Q_-
 \end{array}$$



$$\begin{aligned}
[Q_0, S_+] &= (1/2)S_+ & [Q_0, S_-] &= -(1/2)S_- & [Q_0, S_0] &= 0 \\
[Q_+, T_+] &= 0 & [Q_+, T_-] &= K_+ & [Q_+, T_0] &= -(1/2)Q_+ \\
[Q_-, T_+] &= -K_- & [Q_-, T_-] &= 0 & [Q_-, T_0] &= (1/2)Q_- \\
[Q_0, T_+] &= (1/2)T_+ & [Q_0, T_-] &= -(1/2)T_- & [Q_0, T_0] &= 0 \\
[S_i, T_j] &= 0 & (i, j) &= +, -, 0 & & (3.2.16)
\end{aligned}$$

Найдем преобразования (1), сохраняющие  $\xi_5, \xi_6$ , т. е. такие, что  $\xi'_5 = \xi_5, \xi'_6 = \xi_6$ . В таком случае должно быть  $c_{56} = c_{65} = 0, c_{55} = c_{66} = 1, c_{5\beta} = c_{6\beta} = 0$  ( $1 \leq \beta \leq 4$ ) и из (4) следует, что матрица  $C$  имеет вид

$$C = \left[ \begin{array}{c|cc} c_{\alpha\beta} & 0 & \\ \hline & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{array} \right], \quad (3.2.17)$$

причем из сохранения формы (2) вытекает, что преобразование с помощью матрицы четвертого порядка  $(c_{\alpha\beta})$  ( $1 \leq \alpha, \beta \leq 4$ ) сохраняет форму  $\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 + \xi_4^2$ . Поэтому подгруппа преобразований (1), сохраняющих  $\xi_5, \xi_6$ , находится во взаимно однозначном соответствии с группой  $SO(4)$ , причем умножению матриц (17) соответствует умножение в  $SO(4)$ ; это значит, что матрицы (17) образуют подгруппу  $SO(4)'$  группы  $SO(4, 2)$ , изоморфную  $SO(4)$ . Генераторы алгебры Ли подгруппы  $SO(4)'$  соответствуют однопараметрическим подгруппам  $SO(4)$ , т. е.  $SO(4)'$  имеет генераторы  $L_{\alpha\beta}$  с  $1 \leq \alpha < \beta \leq 4$ . В силу (13), можно взять их линейно независимые комбинации  $J_k, K_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ).

Преобразования подгруппы  $SO(4)'$ , сохраняющие также  $\xi_4$ , образуют подгруппу, состоящую из матриц вида

$$C = \left[ \begin{array}{c|c} o_{\alpha\beta} & 0 \\ \hline 0 & 1 \end{array} \right], \quad (3.2.18)$$

где  $(o_{\alpha\beta})$  ( $1 \leq \alpha, \beta \leq 3$ ) — ортогональная матрица третьего порядка с определителем 1, а в правом нижнем углу стоит единичная матрица третьего порядка. Эта подгруппа изоморфна  $SO(3)$ . Генераторами ее алгебры Ли являются  $L_{\alpha\beta}$  с  $1 \leq \alpha < \beta \leq 3$  или их независимые линейные комбинации  $J_k + K_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ). Будем обозначать подгруппы  $SO(4, 2)$ , изоморфные  $SO(4)$  и  $SO(3)$ , просто через  $SO(4)$  и  $SO(3)$ . Наконец, в  $SO(3)$  можно выделить подгруппу  $SO(2)$  преобразований, сохраняющих  $\xi_3$ . Таким образом, мы подробно описали построение цепочки групп (1.4.11).

### 3.3. Специальное представление конформной группы

Начнем с представления группы  $SO(4)$ , рассмотренного В. А. Фоком в [17]. Обозначим через  $R(4)$  четырехмерное евклидово пространство с декартовыми координатами  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ . Подчеркнем, что  $R(4)$  не следует смешивать с пространством Минковского специальной теории относительности; координаты  $\xi_k$  ( $k = 1, 2, 3, 4$ ) не имеют прямого физического смысла, и их не следует смешивать с пространственно-временными координатами. Группа  $SO(4)$  действует в  $R(4)$  как группа ортогональных преобразований с определителем 1. Можно было бы задать представление этой группы в пространстве функций четырех переменных  $\xi_k$ , как было задано представление  $SO(3)$  в пространстве функций  $\psi(x, y, z)$ , но такое построение не имеет значения для физики. Вместо этого представление строится, следуя Фоку, в пространстве  $\mathfrak{F}$  функций, определенных на сфере единичного радиуса в  $R(4)$ , интегрируемых в квадрате по этой сфере.

Сфера  $S^3$  в пространстве  $R(4)$  задается уравнением  $\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 + \xi_4^2 = 1$ . В математике такая сфера называется трехмерной, поскольку

ку ее точки описываются тремя независимыми параметрами (откуда индекс 3 в ее обозначении). В качестве параметров можно взять четырехмерные сферические координаты  $\alpha, \vartheta, \varphi$ , связанные с декартовыми координатами следующим образом:

$$\begin{aligned}\xi_1 &= \sin \alpha \sin \vartheta \cos \varphi, \\ \xi_2 &= \sin \alpha \sin \vartheta \sin \varphi, \\ \xi_3 &= \sin \alpha \cos \vartheta, \\ \xi_4 &= \cos \alpha,\end{aligned}\tag{3.3.1}$$

где  $0 \leq \alpha \leq \pi$ ,  $0 \leq \vartheta \leq \pi$ ,  $0 \leq \varphi \leq 2\pi$ . Легко видеть, что координаты, полученные из (1), удовлетворяют уравнению сферы  $S^3$ . Элемент площади на  $S^3$ , соответствующий изменению сферических координат в пределах  $(\alpha, \alpha + d\alpha)$ ,  $(\vartheta, \vartheta + d\vartheta)$ ,  $(\varphi, \varphi + d\varphi)$ , находится точно так же, как в трехмерном пространстве, и имеет вид  $d\Omega = \sin^2 \alpha \sin \vartheta d\alpha d\vartheta d\varphi$ . Для функций, определенных на  $S^3$ , вводится скалярное произведение

$$\langle \Phi | X \rangle = \frac{1}{2\pi^2} \int_{S^3} \Phi^*(\alpha, \vartheta, \varphi) X(\alpha, \vartheta, \varphi) d\Omega.\tag{3.3.2}$$

Это произведение конечно для функций с интегрируемым квадратом, т. е. таких, что интеграл  $\langle \Phi | \Phi \rangle$  конечен. Гильбертово пространство таких функций обозначим  $\mathfrak{H}$ . Функции на сфере  $S^3$  будем записывать для краткости в виде  $\Phi(p)$ , обозначая через  $p$  точку  $(\alpha, \vartheta, \varphi)$ ;  $2\pi^2$  — площадь трехмерной сферы.

Для каждого четырехмерного вращения  $O$  из группы  $SO(4)$  формула

$$T_O \Phi = \Phi', \quad \Phi'(p) = \Phi(O^{-1}p)\tag{3.3.3}$$

задает линейный оператор в пространстве  $\mathfrak{H}$ . Так же как в случае представления  $SO(3)$  в пространстве волновых функций, доказывается, что этим задается линейное представление  $SO(4)$  в пространстве  $\mathfrak{H}$ . Заметим, что если точка  $p$  принадлежит  $S^3$ , то  $O^{-1}p$  также принадлежит  $S^3$ , так что определение (3) использует лишь значения функции  $\Phi(p)$  на сфере, вне которой  $\Phi$  не рассматривается.

Однопараметрические подгруппы вращений в плоскостях  $(\xi_\alpha, \xi_\beta)$  порождают операторы в  $\mathfrak{H}$ , представляющие алгебру Ли группы  $SO(4)$  и имеющие тот же вид, что обычные операторы момента (за исключением множителя  $\hbar$ , который здесь отбрасывается); обозначая эти операторы так же, как матрицы алгебры Ли, можно записать их следующим образом:

$$L_{\alpha\beta} \Phi = \frac{1}{i} \left( \xi_\alpha \frac{\partial}{\partial \xi_\beta} - \xi_\beta \frac{\partial}{\partial \xi_\alpha} \right) \Phi\tag{3.3.4}$$

( $\alpha, \beta = 1, 2, 3, 4$ ),

где производные по  $\xi_\alpha$  понимаются в определенном ниже смысле. Можно выразить операторы  $L_{\alpha\beta}$  через производные по сферическим координатам  $\alpha, \vartheta, \varphi$ , так же как это делается в трехмерном пространстве, а затем применить их к функциям  $\Phi(\alpha, \vartheta, \varphi)$ . Можно поступить иначе: продолжить функции  $\Phi$  на слой четырехмерного пространства  $R(4)$ , примыкающий к  $S^3$ , так, чтобы полученные функции были непрерывно дифференцируемы, и затем применить к ним операторы (4), рассматривая найденную таким образом функцию только на  $S^3$ . Оказывается, что результат не зависит от способа продолжения и совпадает с полученным первым путем. Легко проверить, что операторы (4) имеют те же перестановочные соотношения, как матрицы  $L_{\alpha\beta}$  группы  $SO(4)$ , в соответствии с общей теорией представлений, описанной в 1.3. В данном случае представление  $\{T_O\}$  было построено непосредственно для всех вращений  $O$  по формуле (3), а затем из него были получены представляющие опе-

раторы алгебры Ли. Исходя из определения (3), легко показать, что представление  $\{T_o\}$  унитарно. Однако оно оказывается приводимым.

Разложение пространства  $\mathfrak{F}$  на неприводимые подпространства производится следующим образом. Из операторов (4) строится оператор

$$\Lambda^2 = \sum_{\alpha, \beta=1}^4 L_{\alpha\beta}^2, \quad (3.3.5)$$

аналогичный оператору полного момента  $L^2$ . Пользуясь перестановочными соотношениями для  $L_{\alpha\beta}$  (см. (2.12) с индексами от 1 до 4), нетрудно убедиться, что  $\Lambda^2$  перестановочен со всеми  $L_{\alpha\beta}$  ( $1 \leq \alpha, \beta \leq 4$ ) и тем самым является оператором Казимира группы  $SO(4)$ . По основному свойству операторов Казимира, неприводимые подпространства  $\mathfrak{F}$  должны быть собственными пространствами  $\Lambda^2$ . Чтобы найти такие подпространства, воспользуемся разложением функций на  $\Phi(p)$  по четырехмерным сферическим функциям. Эти функции, подобно трехмерным, получаются как сферические значения гармонических полиномов. Гармоническим полиномом  $n$ -й степени называется однородный полином  $P_n$  степени  $n$  от координат  $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4$ , удовлетворяющий четырехмерному уравнению Лапласа:

$$\Delta^4 P_n = \left( \frac{\partial^2}{\partial \xi_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_2^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_3^2} + \frac{\partial^2}{\partial \xi_4^2} \right) P_n = 0.$$

Подставляя в  $P_n$  выражения  $\xi_k$  через сферические координаты (1), получаем функцию  $Y_n(p) = Y_n(\alpha, \vartheta, \varphi)$ , которая и называется сферической функцией  $n$ -го порядка ( $n = 0, 1, 2, \dots$ ). Как можно показать, сферические функции разных порядков ортогональны друг другу в смысле скалярного произведения (2). Всякая функция  $\Phi$  из пространства  $\mathfrak{F}$  од-

нозначно разлагается в ряд по сферическим функциям:  $\Phi = \sum_{n=0}^{\infty} Y_n$ . Тем самым пространство  $\mathfrak{F}$  разлагается в ортогональную сумму подпространств аналогично разложению (1.4.7):

$$\mathfrak{F} = \bigoplus_{n=1}^{\infty} \mathfrak{F}_n, \quad (3.3.6)$$

где  $\mathfrak{F}_n$  — подпространство из всех сферических функций  $(n-1)$ -го порядка<sup>\*)</sup>. Каждое  $\mathfrak{F}_n$  является собственным подпространством оператора Казимира  $\Lambda^2$  с собственным значением  $n^2 - 1$ . Можно доказать, что все  $\mathfrak{F}_n$  неприводимы по отношению к группе  $SO(4)$ .

Четырехмерные сферические функции  $Y_{n-1}(\alpha, \vartheta, \varphi)$  ( $n = 1, 2, \dots$ ) однозначно разлагаются по ортонормированному базису, состоящему из функций

$$\Phi_{nlm}(\alpha, \vartheta, \varphi) = \Pi_{nl}(\alpha) Y_l^m(\vartheta, \varphi), \quad (3.3.7)$$

где  $\Pi_{nl}(\alpha)$  — некоторые полиномы от  $\cos \alpha$  и  $\sin \alpha$ , а  $Y_l^m(\vartheta, \varphi)$  — обычные (трехмерные) сферические функции, причем  $n = 1, 2, \dots$ ; для данного  $n, l = 0, 1, \dots, n-1$ ; для данного  $l, m = -l, -l+1, \dots, l-1, l^{**}$ . При фиксированном  $n$  имеем разложение

$$Y_{n-1}(\alpha, \vartheta, \varphi) = \sum_m c_{nlm} \Phi_{nlm}(\alpha, \vartheta, \varphi). \quad (3.3.8)$$

При фиксированных  $n, l$  получаем подпространство  $\mathfrak{F}_{nl}$ . Этим подпрост-

<sup>\*)</sup> В действительности разложение (6) тесно связано с (1.4.7): существует изоморфизм пространства волновых функций  $\mathfrak{A}$  и пространства  $\mathfrak{F}$ , переводящий одно разложение в другое. Для выражения этого изоморфизма, а также для упрощения дальнейших обозначений, в подпространство  $\mathfrak{F}_n$  включены полиномы степени  $n-1$  (а не  $n$ ).

<sup>\*\*) Подробное изложение теории многомерных сферических функций с современной групповой точки зрения см. в [1].</sup>

ранствам соответствует разложение

$$\mathfrak{F}_n = \bigoplus_{l=0}^{n-1} \mathfrak{F}_{nl}. \quad (3.3.9)$$

Преобразования подгруппы  $SO(3)$  (сохраняющие  $\xi_4$ ) действуют, очевидно, только на переменные  $\vartheta, \varphi$ , так что каждое  $\mathfrak{F}_{nl}$  — инвариантное подпространство  $SO(3)$ . Базис в  $\mathfrak{F}_{nl}$  составляют все  $\Phi_{nlm}$  с фиксированными  $n, l$ , следовательно, размерность  $\mathfrak{F}_{nl}$  равна  $2l+1$ . Отсюда получается в силу (9) размерность  $\mathfrak{F}_n$ : она равна  $n^2$ . Легко убедиться, что каждое подпространство  $\mathfrak{F}_{nl}$  неприводимо относительно подгруппы  $SO(3)$  (ср. изоморфное разложение (1.4.9)).

Все  $\Phi_{nlm}$  с индексами, удовлетворяющими указанным выше неравенствам, составляют базис пространства  $\mathfrak{F}$ . Этот базис изображается клетками табл. 1. Вертикальные столбцы табл. 1 изображают неприводимые подпространства  $\mathfrak{F}_n$  подгруппы  $SO(4)$ , вертикальные прямоугольники — неприводимые подпространства  $\mathfrak{F}_n$  подгруппы  $SO(3)$ .

Этим завершается разложение представления Фока, соответствующее цепочке подгрупп  $SO(4) \supset SO(3)$ . Подгруппа  $SO(3)$  (сохраняющая  $\xi_3$ ) уже не представляет интереса, поскольку все  $\Phi_{nlm}$  — собственные функции ее генератора  $L_{12}$ , так что неприводимые подпространства  $SO(2)$  одномерны. С алгебраической точки зрения представление Фока страдает серьезным недостатком: оно приводимо, что указывает на возможность расширения этого представления на большую группу. Такой группой и является конформная группа  $SO(4, 2)$ .

Для расширения представления Фока уже не удастся воспользоваться формулой типа (3), прямо задающей операторы представления по матрицам группы. Применяется метод, описанный на представлении базиса алгебры Ли. Мы приведем здесь окончательный вид операторов, представляющих генераторы конформной группы  $SO(4, 2)$  (см. 3.2). Алгебраические методы, приводящие к этим результатам, не могут быть здесь изложены, и для понимания дальнейшего достаточно знать о существовании представления, иметь в виду строение его базиса, изображаемое табл. 1, и помнить специальное свойство операторов  $\Gamma_+, \Gamma_-$ , приведенное ниже.

Начнем с того, что выберем в подпространствах  $\mathfrak{F}_n$  новые базисы, не связанные с разложением (9), но удобные для записи операторов представления  $SO(4, 2)$ . При данном  $n$  в пространстве  $\mathfrak{F}_n$  действуют перестановочные эрмитовы операторы  $J_3, K_3$ , представляющие матрицы алгебры Ли группы  $SO(4)$  (см. (2.13)). Можно составить базис пространства  $\mathfrak{F}_n$  из общих собственных векторов этих операторов. Положим  $j = (n-1)/2$ , тогда  $j$  — целое или полуцелое число,  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ . Обозначим через  $|j, \sigma, \tau\rangle$  собственный вектор операторов  $J_3, K_3$  с собственными значениями соответственно  $\sigma, \tau$ . Оказывается, что в  $\mathfrak{F}_n$  существуют векторы  $|j, \sigma, \tau\rangle$  ( $j = (n-1)/2$ ;  $\sigma = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ ;  $\tau = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ ),

$$(3.3.10)$$

составляющие ортонормированный базис  $\mathfrak{F}_n$ . Число их, как легко сосчитать, равно  $n^2$ , в соответствии с размерностью  $\mathfrak{F}_n$ . С помощью базиса (10) можно определить в пространстве  $\mathfrak{F}$  18 операторов, соответствующих матрицам (2.13), по выписанным ниже формулам, где операторы обозначены теми же буквами, что и матрицы:

$$\begin{aligned} J_+ |j, \sigma, \tau\rangle &= [(j + \sigma + 1)(j - \sigma)]^{1/2} |j, \sigma + 1, \tau\rangle, \\ J_- |j, \sigma, \tau\rangle &= [(j + \sigma)(j - \sigma + 1)]^{1/2} |j, \sigma - 1, \tau\rangle, \\ J_3 |j, \sigma, \tau\rangle &= \sigma |j, \sigma, \tau\rangle; \\ K_+ |j, \sigma, \tau\rangle &= [(j + \tau + 1)(j - \tau)]^{1/2} |j, \sigma, \tau + 1\rangle, \\ K_- |j, \sigma, \tau\rangle &= [(j + \tau)(j - \tau + 1)]^{1/2} |j, \sigma, \tau - 1\rangle, \end{aligned} \quad (3.3.11)$$

$$\begin{aligned}
K_3|j, \sigma, \tau\rangle &= \tau|j, \sigma, \tau\rangle; \\
P_+|j, \sigma, \tau\rangle &= i[(j + \sigma + 1)(j - \tau + 1)]^{1/2}|j + 1/2, \sigma + 1/2, \tau - 1/2\rangle, \\
P_-|j, \sigma, \tau\rangle &= -i[(j + \sigma)(j - \tau)]^{1/2}|j - 1/2, \sigma - 1/2, \tau + 1/2\rangle, \\
P_0|j, \sigma, \tau\rangle &= (j + (\sigma - \tau + 1)/2)|j, \sigma, \tau\rangle; \\
Q_+|j, \sigma, \tau\rangle &= -i[(j - \sigma + 1)(j + \tau + 1)]^{1/2}|j + 1/2, \sigma - 1/2, \tau + 1/2\rangle, \\
Q_-|j, \sigma, \tau\rangle &= i[(j - \sigma)(j + \tau)]^{1/2}|j - 1/2, \sigma + 1/2, \tau - 1/2\rangle, \\
Q_0|j, \sigma, \tau\rangle &= (j - (\sigma - \tau - 1)/2)|j, \sigma, \tau\rangle; \\
S_+|j, \sigma, \tau\rangle &= -i[(j + \sigma + 1)(j + \tau + 1)]^{1/2}|j + 1/2, \sigma + 1/2, \tau + 1/2\rangle, \\
S_-|j, \sigma, \tau\rangle &= i[(j + \sigma)(j + \tau)]^{1/2}|j - 1/2, \sigma - 1/2, \tau - 1/2\rangle, \\
S_0|j, \sigma, \tau\rangle &= (j + (\sigma + \tau + 1)/2)|j, \sigma, \tau\rangle; \\
T_+|j, \sigma, \tau\rangle &= i[(j - \sigma + 1)(j - \tau + 1)]^{1/2}|j + 1/2, \sigma - 1/2, \tau - 1/2\rangle, \\
T_-|j, \sigma, \tau\rangle &= -i[(j - \sigma)(j - \tau)]^{1/2}|j - 1/2, \sigma + 1/2, \tau + 1/2\rangle, \\
T_0|j, \sigma, \tau\rangle &= (j - (\sigma + \tau - 1)/2)|j, \sigma, \tau\rangle
\end{aligned}$$

(где подразумевается, что символы  $|j, \sigma, \tau\rangle$  в правых частях, не удовлетворяющие условиям  $-j \leq \sigma \leq j$ ,  $-j \leq \tau \leq j$ , заменяются нулями). Как показывает прямая проверка, операторы (11) удовлетворяют тем же перестановочным соотношениям, что и матрицы, обозначенные теми же буквами, т. е. соотношениям (2.16). Кроме того, они связаны зависимостью (2.14). Из (2.13), (2.14) можно выразить матрицы  $L_{\alpha\beta}$  через  $J_+$ ,  $J_-$ ,  $J_0$ , ...,  $S_+$ ,  $S_-$ ,  $S_0$ , а затем подставить в эти выражения операторы (11). Полученные операторы, обозначаемые также через  $L_{\alpha\beta}$  ( $1 \leq \alpha, \beta \leq 6$ ), имеют те же перестановочные соотношения (2.12). Тем самым построено представление группы  $SO(4, 2)$  в пространстве  $\mathfrak{F}$ . По определению (11) операторы  $L_{\alpha\beta}$  могут быть заданы бесконечными матрицами, каждая из которых содержит лишь два ненулевых элемента. Легко проверить, что эти матрицы эрмитовы, а тем самым эрмитовы и операторы  $L_{\alpha\beta}$ . Следовательно, построенное выше представление унитарно. Обозначим его через  $\{T_c\}$ .

Покажем, что представление  $\{T_c\}$  неприводимо. Поскольку подпространства  $\mathfrak{F}_n$  неприводимы уже для подгруппы  $SO(4)$ , достаточно доказать, что операторы алгебры Ли соединяют между собой подпространства  $\mathfrak{F}_n$  (вертикальные столбцы табл. 1). Рассмотрим операторы

$$G_+ = P_+ + Q_+, \quad G_- = P_- + Q_-. \quad (3.3.12)$$

Из (11) следует, что

$$\begin{aligned}
G_+|j, \sigma, \tau\rangle &= i[(j + \sigma + 1)(j - \tau + 1)]^{1/2}|j + 1/2, \sigma + 1/2, \tau - 1/2\rangle - \\
&- i[(j - \sigma + 1)(j + \tau + 1)]^{1/2}|j + 1/2, \sigma - 1/2, \tau + 1/2\rangle,
\end{aligned} \quad (3.3.13)$$

$$\begin{aligned}
G_-|j, \sigma, \tau\rangle &= -i[(j + \sigma)(j - \tau)]^{1/2}|j - 1/2, \sigma - 1/2, \tau + 1/2\rangle + \\
&+ i[(j - \sigma)(j + \tau)]^{1/2}|j - 1/2, \sigma + 1/2, \tau - 1/2\rangle.
\end{aligned} \quad (3.3.14)$$

Отсюда видно, что  $G_+$  переводит векторы  $\mathfrak{F}_n$  в векторы  $\mathfrak{F}_{n+1}$ , так как увеличение  $j$  на  $1/2$  означает увеличение  $n$  на 1, и аналогично  $G_-$  переводит векторы  $\mathfrak{F}_n$  в векторы  $\mathfrak{F}_{n-1}$ . Покажем, что правая часть (13) всегда отлична от нуля. Поскольку  $-j \leq \sigma, \tau \leq j$ , должно быть  $-(j + 1/2) \leq \sigma \pm 1/2 \leq j + 1/2$ ,  $-(j + 1/2) \leq \tau \pm 1/2 \leq j + 1/2$ , так что оба вектора в правой части не равны нулю и ортогональны друг другу, коэффициенты же при них отличны от нуля, откуда и следует требуемое утверждение. Применяя к ненулевому вектору пространства  $\mathfrak{F}_{n+1}$  операторы  $SO(4)$ , получаем инвариантное подпространство этой подгруппы, и так как  $\mathfrak{F}_{n+1}$  неприводимо для  $SO(4)$ , таким способом получается все пространство

$\mathfrak{F}_{n+1}$ . Начиная с  $\mathfrak{F}_1$ , можно получить действием операторов  $SO(4, 2)$  все пространство  $\mathfrak{F}$ , что и доказывает неприводимость представления  $\{T_c\}$ .

Докажем еще, для дальнейшего применения, что при  $n \geq 2$  оператор  $G_-$  переводит вектор  $|j, 1/2, 0\rangle$  в ненулевой вектор. В самом деле, в этом случае правая часть (13) сводится к первому слагаемому, не равному нулю.

Как будет показано ниже, операторы  $G_+$ ,  $G_-$  служат для описания менделеевских гомологических рядов.

Важно заметить, что числа  $n, l, m$ , служащие для нумерации базисных векторов  $\Phi_{nlm}$ , получаются из представления группы  $SO(4, 2)$  способом, описанным в 1.4. Именно, оператор  $R_0 = -L_{56}$  (выражающийся также в виде  $P_0 + Q_0$  и  $S_0 + T_0$ , см. (2.14)), перестановочен с подгруппой  $SO(4)$  и, следовательно, является ее оператором Казимира, что проще всего усмотреть из соотношений (2.12). Этот оператор принадлежит алгебре Ли группы  $SO(4, 2)$ , но не подгруппы  $SO(4)$ . Значение  $R_0$  на пространстве  $\mathfrak{F}_n$  нетрудно найти, применив этот оператор к любому вектору  $|j, \sigma, \tau\rangle$  с  $j = (n-1)/2$  и воспользовавшись выражениями (11) для  $P_0, Q_0$  или  $S_0, T_0$ ; оно равно  $n$ . Операторы  $L^2 = (J_1 + K_1)^2 + (J_2 + K_2)^2 + (J_3 + K_3)^2$  и  $L_{12} = J_3 + K_3$ , представляющие подгруппу  $SO(3)$ , имеют собственные значения  $l(l+1)$ , соответственно  $m$ . Таким образом,  $n, l(l+1), m$  являются квантовыми числами конформной группы. Число  $l$  само по себе не имеет прямого группового смысла, т. е. не является собственным значением какого-либо связанного с группой оператора, но задает собственное значение  $l(l+1)$ , а потому и само называется квантовым числом.

### 3.4. Группа симметрии системы элементов

Сравнивая таблицу элементов 7 с табл. 1, изображающей базис представления конформной группы  $\{T_c\}$ , легко заметить, что квантовые числа конформной группы  $n, l, m$  недостаточны для однозначной нумерации элементов: четвертое число Маделунга  $s$  не имеет еще группового обоснования. При переходе от табл. 1 к системе элементов происходит «удвоение», аналогичное спинному расщеплению энергетических уровней водорода. Так же как каждому набору квантовых чисел  $(n, l, m)$  соответствует *два* энергетических уровня водорода, отличающихся значением проекции спина  $s_3$ , каждому набору  $(n, l, m)$  соответствует *два* элемента, с различными значениями числа Маделунга  $s$ . Это наводит на мысль ввести нечто вроде «химического спина», воспользовавшись для него математическим описанием Паули, а именно перейти от однокомпонентных векторов состояния к двухкомпонентным. Между двумя системами есть существенное различие: расщепление энергетических уровней водорода мало по сравнению с разностями значений энергии при изменении водородных квантовых чисел  $n, l, m$ , между тем как элементы с одинаковыми значениями чисел Маделунга  $n, l, m$  и с разными  $s$  отличаются друг от друга по атомному весу и другим характеристикам не менее, чем элементы с разными  $n, l, m$ . Но, как мы уже видели на примере унитарной симметрии адронов, далекое расхождение масс в мультиплеттах не мешает их описанию с помощью группы симметрии. Поэтому мы воспользуемся аппаратом спина, пренебрегая упомянутым различием.

Мы определили представление  $\{T_c\}$  группы  $SO(4, 2)$  в пространстве Фока  $\mathfrak{F}$ , состоящем из интегрируемых в квадрате функций  $\Phi$ , заданных на сфере  $S^3(\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2 + \xi_4^2 = 1)$  четырехмерного евклидова пространства. В дальнейшем построении функции  $\Phi$  играют роль, аналогичную однокомпонентным волновым функциям Шредингера  $\psi(x, y, z)$ . Введем *двухкомпонентные функции*, аналогичные двухкомпонентным волновым функциям Паули (ср. (2.1.1)):

$$\Phi = \begin{bmatrix} \Phi_1(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) \\ \Phi_2(\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4) \end{bmatrix}, \quad (3.4.1)$$

вить связь с обычным описанием, будем задавать элементы их атомными номерами, имеющими прямой экспериментальный смысл. Подчеркнем, что атомный номер не является квантовым числом и вообще не входит в нашу теорию, а служит лишь экспериментальной характеристикой элемента, заменяющей его название. Итак, надо установить взаимно однозначное соответствие между целыми положительными числами  $Z = 1, 2, 3, \dots$  и наборами чисел  $(n, l, m, s)$ , удовлетворяющими условиям

$$\begin{aligned} n &= 1, 2, \dots; \\ l &= 0, 1, \dots, n-1; \\ m &= -l, -l+1, \dots, l-1, l; \\ s &= -1/2, 1/2. \end{aligned} \quad (3.4.6)$$

Такое соответствие задается «лексикографическим правилом» Маделунга:

(1) Элементы располагаются в порядке возрастания атомного номера  $Z$ .

(2) Наборы  $(n, l, m, s)$  располагаются в порядке возрастания  $n+l$ ; при заданном  $n+l$  — в порядке возрастания  $n$ ; при заданных  $n+l, n$  — в порядке возрастания  $m$ ; при заданных  $n+l, n, m$  — в порядке возрастания  $s$ .

(3)  $Z$ -му элементу ставится в соответствие  $Z$ -й набор.

Как легко убедиться, табл. 7 заполнена элементами в соответствии с этим правилом. Как отмечает Маделунг [7, с. 586], «теоретического обоснования этого способа упорядочения таблицы до сих пор не имеется», и далее подчеркивает: «Эта таблица является выражением эмпирического правила». Предлагаемая в данной работе теория дает обоснование такого упорядочения. Подчеркнем еще раз, что атомный номер  $Z$  не входит в нашу теорию. Поэтому мы обосновываем не само правило соответствия (6), а выбор параметров  $n, l, m, s$ , служащих для естественной нумерации элементов, с указанными выше областями изменения этих параметров. Обоснование состоит в том, что эти параметры являются квантовыми числами группы  $SU(2) \times SO(4, 2)$  и что групповой подход позволяет классифицировать элементы по их свойствам.

Но, прежде всего, групповой подход обнаруживает в нумерации Маделунга некоторую неестественность и тем самым необходимость ее изменения. В самом деле, в «лексикографическое правило» входят не числа  $n, l, m, s$  в отдельности, но наряду с  $n, m, s$  также сумма  $n+l$ . Как уже отмечалось выше,  $l$  само по себе не является настоящим квантовым числом, т. е. собственным значением некоторого эрмитова оператора, представляющего элемент универсальной обертывающей алгебры группы симметрии  $SU(2) \times SO(4, 2)$ ; таким квантовым числом является  $l(l+1)$  — собственное значение оператора  $L^2 = L_{12}^2 + L_{23}^2 + L_{31}^2$ , а  $l$  всего лишь задает это квантовое число. Но тогда сумма  $n+l$  не имеет группового смысла: это сумма квантового числа  $n$  (собственного значения оператора  $R_0 = -L_{56}$ ) и числа  $l$ , не являющегося квантовым числом. Поэтому с точки зрения группового описания системы элементов число  $n+l$  не должно входить в формулировку «лексикографического правила». Следовательно, мы должны заменить нумерацию Маделунга другой, по возможности столь же закономерно описывающей свойства элементов, но свободной от этого недостатка.

Если посмотреть на табл. 7 «по диагонали», то можно заметить, что для диагональных рядов прямоугольников значение  $n+l$  постоянно. Рассмотрим все прямоугольники с нечетным значением  $n+l$  и положим для них  $v = (1/2)(n+l+1)$ . При  $v=1$  получаем прямоугольник (H, He), при  $v=2$  — ряд из прямоугольников (Na, Mg), (B — Ne), при  $v=3$  — ряд из прямоугольников (Rb, Sr), (Ga — Kr), (Sc — Zn) и т. д. Для прямоугольников с четным значением  $n+l$  положим  $v = (1/2)(n+l)$ .

$\nu = 1$   
 $\delta = -1/2 \quad \delta = 1/2$

$\nu = 2$   
 $\delta = -1/2 \quad \delta = 1/2$

$\nu = 3$   
 $\delta = -1/2 \quad \delta = 1/2$

$\nu = 4$   
 $\delta = -1/2 \quad \delta = 1/2$

$\lambda = 0$	H	Li	Na	K	Rb	Cs	Fr		$\left. \begin{matrix} \sigma = -1/2 \\ \sigma = 1/2 \end{matrix} \right\} \mu = 0$
	He	Be	Mg	Ca	Sr	Ba	Ra		
$\lambda = 1$		B	Al	Ga	In	Tl		$\left. \begin{matrix} \mu = -1 \end{matrix} \right\}$	
		C	Si	Ge	Sn	Pb			
		N	P	As	Sb	Bi		$\left. \begin{matrix} \mu = 0 \end{matrix} \right\}$	
		O	S	Se	Te	Po			
		F	Cl	Br	I	At		$\left. \begin{matrix} \mu = 1 \end{matrix} \right\}$	
		Ne	Ar	Kr	Xe	Rn			

$\lambda = 2$	Sc	Y	Lu	Lr
	Ti	Zr	Hf	Ku
	V	Nb	Ta	
	Cr	Mo	W	
	Mn	Tc	Re	
	Fe	Ru	Os	
$\lambda = 3$	Co	Rh	Ir	
	Ni	Pd	Pt	
	Cu	Ag	Au	
	Zn	Cd	Hg	

La	Ac
Ce	Th
Pr	Pa
Nd	U
Pm	Np
Sm	Pu
Eu	Am
Gd	Cm
Tb	Bk
Dy	Cf
Ho	Es
Er	Fm
Tm	Md
Yb	No

При  $\nu = 1$  получаем прямоугольник (Li, Be), при  $\nu = 2$  — ряд из прямоугольников (K, Ca), (Al — Ar), при  $\nu = 3$  — ряд из прямоугольников (Cs, Ba), (In — Xe), (Y — Cd) и т. д. В табл. 8 диагональные ряды с нечетным  $n + l$  расположены в нечетных вертикальных столбцах, диагональные ряды с четным  $n + l$  — в четных рядах вертикальных столбцов. Можно заметить, что отдельно взятые нечетные, соответственно



четные столбцы табл. 8 образуют таблицу того же строения, как табл. 7. В каждой из этих двух таблиц столбцы нумеруются числом  $\nu$  (вместо  $n$ ), а квантовые числа  $l, m, s$  остаются прежними. С каждой из них можно поэтому связать представление  $\{T_{u,c}\}$  в том же смысле, как с табл. 7. Таким образом получается два эквивалентных представления группы  $SU(2) \times SO(4, 2)$ . Чтобы отметить новое расположение элементов, заменим  $l, m, s$  соответственно на  $\lambda, \mu, \sigma$ ; например, в «нечетной» таблице N получает адрес ( $\nu=2, \lambda=1, \mu=0, \sigma=-1/2$ ), Cг получает адрес ( $\nu=3, \lambda=2, \mu=-1, \sigma=1/2$ ); в «четной» таблице Cl получает адрес ( $\nu=2, \lambda=1, \mu=1, \sigma=-1/2$ ); U получает адрес ( $\nu=4, \lambda=3, \mu=-2, \sigma=1/2$ ). В табл. 8 «нечетная» и «четная» таблицы смещены, причем столбцы «нечетной» обозначены числом  $\sigma=-1/2$ , а столбцы «четной» — числом  $\delta=1/2$ . Можно заметить, что при рассмотрении табл. 7 «по диагонали» получается в точности табл. 8.

Правило заполнения табл. 8 также «лексикографическое»:

(1) Элементы располагаются в порядке возрастания атомного номера  $Z$ .

(2) Наборы  $(\nu, \delta, \lambda, \mu, \sigma)$  располагаются в порядке возрастания  $\nu$ ; при заданном  $\nu$  — в порядке возрастания  $\delta$ ; при заданных  $\nu, \delta$  — в порядке убывания  $\lambda$ ; при заданных  $\nu, \delta, \lambda$  — в порядке возрастания  $\mu$ ; при заданных  $\nu, \delta, \lambda, \mu$  — в порядке возрастания  $\sigma$ .

(3)  $Z$ -му элементу ставится в соответствие  $Z$ -й набор.

Легко убедиться, что табл. 8 заполнена элементами по этому правилу. Если нам удастся истолковать  $\nu, \delta, \lambda(\lambda+1), \mu, \sigma$  как квантовые числа некоторой группы, только что приведенная нумерация будет свободна от недостатка нумерации Маделунга, поскольку в ней нет неестественных комбинаций вроде  $n+l$ . Фиксируя  $\delta=-1/2$  или  $\delta=1/2$ , получаем базис  $|\nu, \lambda, \mu, \sigma\rangle$ , в точности аналогичный базису  $|n, l, m, s\rangle$  пространства  $\mathfrak{F}^2$ . Можно считать, что таким образом получают два экземпляра пространства  $\mathfrak{F}^2$ , которые мы обозначим через  $\mathfrak{F}^{2-}$  и  $\mathfrak{F}^{2+}$ . В каждом из них задается представление  $T_{u,c}$  группы  $SU(2) \times SO(4, 2)$  точно так же, как выше было задано ее представление в пространстве  $\mathfrak{F}^2$ . Однако полученное представление действует отдельно в каждом из пространств  $\mathfrak{F}^{2-}, \mathfrak{F}^{2+}$ , не связывая их между собой, и каждому набору квантовых чисел  $(\nu, \lambda, \mu, \sigma)$  соответствует два базисных вектора, с  $\delta=-1/2$  и  $\delta=1/2$ , причем число  $\delta$  еще не имеет группового истолкования. Таким образом, необходимо еще одно «удвоение» пространства представления. Мы сделаем это так же, как в (3.4.1). Рассмотрим векторы  $\Psi$ , компонентами которых являются векторы  $\Psi_1, \Psi_2$  пространства  $\mathfrak{F}^2$ :

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}. \quad (3.4.7)$$

Поскольку  $\Psi_1, \Psi_2$  — двухкомпонентные функции, заданные на сфере  $S^3$ , то  $\Psi$  можно считать *четырекомпонентными* функциями на  $S^3$ . В дальнейшем мы будем относить векторы  $\Psi_1, \Psi_2$  к определенным выше двум экземплярам пространства  $\mathfrak{F}^2$ :  $\mathfrak{F}^{2+}$  и соответственно  $\mathfrak{F}^{2-}$ . Обозначим пространство векторов  $\Psi$  через  $\mathfrak{F}^4$  и введем в нем скалярное произведение: для

$$\Psi = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} X_1 \\ X_2 \end{bmatrix}$$

положим

$$\langle \Psi | X \rangle = \langle \Psi_1 | X_1 \rangle + \langle \Psi_2 | X_2 \rangle, \quad (3.4.8)$$

где скалярные произведения справа берутся в пространстве  $\mathfrak{F}^2$ . Исходя из представления  $\{T_{u,c}\}$  группы  $SU(2) \times SO(4, 2)$ , заданного в  $\mathfrak{F}^2$ , можно теперь определить в пространстве  $\mathfrak{F}^4$  представление группы

$$G = SU(2)' \times SU(2) \times SO(4, 2), \quad (3.4.9)$$

где  $SU(2)'$  — второй экземпляр  $SU(2)$ . Для этого достаточно повторить

процедуру (3): поставим в соответствие паре  $(u', C')$ , где  $u'$  — матрица из  $SU(2)'$  и  $C' = (u, C)$  — элемент группы  $SU(2) \times SO(4, 2)$ , оператор  $T_{u', C'} = T_{u', u, C}$ , переводящий  $\Psi$  в  $\Psi'$  по правилу

$$\Psi'_\sigma = \sum_{\tau=1}^2 u'_{\sigma\tau} \widehat{\Psi}_\tau, \text{ где } \widehat{\Psi}_\tau = T_{C'} \Psi_\tau. \quad (3.4.10)$$

Операторы  $T_{u', u, C}$  связаны с  $T_{u, C}$  точно так же, как  $T_{u, C}$  с  $T_C$ , и повторение приведенных выше выкладок показывает, что (10) задает *неприводимое унитарное представление группы G*.

Группа  $G$  и является группой симметрии системы химических элементов. Оператор  $\tau_3$  алгебры Ли подгруппы  $SU(2)' \times 1 \times 1$  имеет собственные значения  $\delta = \pm 1/2$  с собственными векторами вида

$$\Psi_+ = \begin{bmatrix} \Psi_1 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \Psi_- = \begin{bmatrix} 0 \\ \Psi_2 \end{bmatrix}. \quad (3.4.11)$$

Векторы  $\Psi_+$  образуют подпространство, которое можно отождествить с  $\mathfrak{F}^{2+}$ , векторы  $\Psi_-$  — подпространство, которое можно отождествить с  $\mathfrak{F}^{2-}$ . Таким образом,  $\delta$  оказывается квантовым числом группы  $G$ . Так как подгруппу  $1 \times SU(2) \times SO(4, 2)$  можно отождествить с  $SU(2) \times SO(4, 2)$ , числа  $v, \lambda(\lambda + 1), \mu, \sigma$  также являются квантовыми числами группы  $G$ . Следовательно, адреса элементов в табл. 8 задаются *наборами квантовых чисел группы G*, нумерующими базисные векторы

$$|v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle \quad (3.4.12)$$

пространства  $\mathfrak{F}^4$ . Как будет видно в следующем параграфе, квантовое число  $\delta$ , введенное из алгебраических соображений, входит в массовую формулу для атомных весов, чем и оправдывается второе «удвоение» пространства представления.

Обозначая через  $\tau_k, \tau'_k$  генераторы алгебры Ли подгруппы  $SU(2)$ , соответственно  $SU(2)'$ , можно описать действие операторов, представляющих эти генераторы в пространстве  $\mathfrak{F}^4$ , формулами

$$\begin{aligned} \tau_+ |v, \delta, \lambda, \mu, -1/2\rangle &= |v, \delta, \lambda, \mu, 1/2\rangle, \\ \tau_- |v, \delta, \lambda, \mu, 1/2\rangle &= |v, \delta, \lambda, \mu, -1/2\rangle, \\ \tau_3 |v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle &= \sigma |v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle, \\ \tau'_+ |v, -1/2, \lambda, \mu, \sigma\rangle &= |v, 1/2, \lambda, \mu, \sigma\rangle, \\ \tau'_- |v, 1/2, \lambda, \mu, \sigma\rangle &= |v, -1/2, \lambda, \mu, \sigma\rangle, \\ \tau'_3 |v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle &= \delta |v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle \end{aligned} \quad (3.4.13)$$

(ср. (5)), между тем как операторы алгебры Ли подгруппы  $SO(4, 2)$  действуют лишь на квантовые числа  $\lambda, \mu, v$  по формулам (3.11), с заменой  $n, l, m$  на  $v, \lambda, \mu$ .

Приступим теперь к цепочке подгрупп группы (9), задающей симметрию системы элементов. Фиксируя единичную матрицу в  $SU(2)'$ , получаем подгруппу  $1 \times SU(2) \times SO(4, 2)$ . Далее, взяв подгруппу  $SO(4)$  в  $SO(4, 2)$ , как это описано в 3.2, получаем подгруппу  $1 \times SU(2) \times SO(4)$ , элементы которой полностью задаются матрицей  $u$  из  $SU(2)$  и четырехмерным вращением  $O$  из  $SO(4)$ ; опуская в обозначении этой подгруппы множитель 1, положим

$$G_1 = SU(2) \times SO(4). \quad (3.4.14)$$

Поскольку каждое из пространств  $\mathfrak{F}_n$  неприводимо для подгруппы  $SO(4)$ , операторы алгебры Ли этой подгруппы переводят любой вектор (12) в векторы, составляющие базис  $\mathfrak{F}_n$ , оставляя при этом неизменными квантовые числа  $\delta, \sigma$ . С другой стороны, операторы  $\tau_\pm$ , представляющие комплексную оболочку алгебры Ли подгруппы  $SU(2)$ , меняют число  $\sigma = -1/2$  на  $1/2$  и обратно. Тем самым каждый столбец табл. 8 изображает базис неприводимого представления подгруппы  $G_1$ . Этим

определяется редукция основного представления  $\{T_{u',u,c}\}$  группы  $G$  по подгруппе  $G_1$ .

Следующая подгруппа цепочки симметрии получается, если взять в  $SO(4, 2)$  подгруппу  $SO(3)$ , как это описано в 3.2; группа

$$G_2 = SU(2) \times SO(3), \quad (3.4.15)$$

элементы которой задаются матрицей  $u$  из  $SU(2)$  и трехмерным вращением  $O$  из  $SO(3)$ , является подгруппой  $G_1$ . Как мы видели в 3.3, операторы  $SO(3)$  действуют на число  $\mu$ , оставляя неизменными все остальные квантовые числа; в частности,  $J_+ + K_+$ ,  $J_- + K_-$  увеличивает, соответственно уменьшает,  $\mu$  на единицу. С другой стороны, оператор  $\tau_+$  подгруппы  $SU(2)$  увеличивает  $\sigma$  на единицу, а  $\tau_-$  уменьшает  $\sigma$  на единицу. Следовательно, каждый прямоугольник табл. 8 изображает базис неприводимого представления подгруппы  $G_2$ . Тем самым описана редукция основного представления группы  $G$  по подгруппе  $G_2$ .

Таким образом, построена цепочка групп

$$G = SU(2) \times SU(2) \times SO(4, 2) \supset SU(2) \times SO(4) \supset SU(2) \times SO(3), \quad (3.4.16)$$

(где первый множитель  $SU(2)$  в правой части заменяет введенную выше группу  $SU(2)'$ , второй экземпляр  $SU(2)$ ). Цепочка групп (16) задает симметрию системы элементов и играет основную роль в нашей теории, наряду с видоизмененной цепочкой групп, рассматриваемой ниже. Откладывая до гл. 4 детальное сопоставление этой симметрии с экспериментальными данными, отметим здесь некоторые факты, подтверждающие правильность выбора цепочки групп (16). Согласно общим принципам классификации частиц, изложенным в 2.7, редукция основного представления группы симметрии  $G$  по подгруппам цепочки должна приводить к естественному разбиению мультиплетов частиц на меньшие мультиплеты, в пределах которых частицы связаны некоторыми общими свойствами. Оставляя пока в стороне подгруппу  $G_1$ , роль которой будет выяснена в дальнейшем, рассмотрим мультиплеты подгруппы  $G_2$ , изображаемые вертикальными прямоугольниками табл. 8. Легко заметить, что заполняющие их элементы составляют известные  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - и  $f$ -семейства. В частности, лантаноиды и актиноиды естественно выделяются нашей классификацией как мультиплеты подгруппы  $G_2$ ; таким образом, при нашем групповом подходе исчезает совмещение этих элементов в одной клетке таблицы и каждый элемент занимает вполне определенное место, указанное его «адресом» в таблице  $(\nu, \delta, \lambda, \mu, \sigma)$ , т. е. соответствующими ему квантовыми числами группы симметрии. Тем самым атомы всех элементов приводятся во взаимно однозначное соответствие с векторами ортонормированного базиса (12), выделенными как собственные векторы коммутирующих операторов, задающих квантовые числа. Кроме того, по принципам классификации, изложенным в 2.7, эти же базисные векторы должны изображать состояния системы с определенными значениями массы, т. е. должны быть собственными векторами оператора массы. Такой оператор будет построен в следующем параграфе.

Сделаем некоторые замечания о мультиплетах подгруппы  $G_2$ . Как видно из табл. 8, не все актиноиды входят в мультиплет  $(\nu=4, \delta=1/2, \lambda=3)$ : с точки зрения предлагаемой классификации  $Lg$  и  $Ku$  начинают уже новое семейство  $(\nu=4, \delta=1/2, \lambda=2)$ . Таким образом, актиноиды разбиваются на отдельные семейства, что должно проявляться в их свойствах по мере получения новых трансурановых элементов. Далее, по нашей классификации  $Lu$  исключается из семейства лантаноидов  $(\nu=4, \delta=-1/2, \lambda=3)^*$ . Он входит в семейство  $(\nu=4, \delta=-1/2, \lambda=2)$  вместе с  $Hf$ ,  $Ta$  и т. д.

\* К тому же заключению приводит, впрочем, и модель электронных оболочек (см. [6, с. 321]).

### 3.5. Массовая формула для атомных весов

Массовая формула, предлагаемая для атомных весов элементов, аналогична описанной в 2.5 массовой формуле Гелл-Манна — Окубо для масс адронов, составляющих мультиплет группы  $SU(3)$ . Каждый мультиплет  $SU(3)$  делится на изотопические мультиплеты, т. е. мультиплеты подгруппы  $SU(2)$ , в каждом из которых массы частиц весьма близки друг к другу, по сравнению с различием масс между изотопическими мультиплетами. В соответствии с этим массовая формула для адронов состоит из двух слагаемых (не считая «нерасщепленной» массы мультиплета  $M_0$ ): слагаемого  $M_1$  (2.5.3), задающего средние массы изотопических мультиплетов, и меньшего слагаемого  $M_2$  (2.5.4), задающего отклонения масс отдельных адронов от средних масс изотопических мультиплетов.

Атомные веса не обнаруживают сходства с массами адронов в том смысле, что элементы нельзя разделить на семейства с относительно близкими массами, аналогичные изотопическим мультиплетам. Если считать, что наименьшие мультиплеты нашей симметрии, т. е. мультиплеты подгруппы  $G_2$ , должны играть такую же роль, как изотопические мультиплеты в  $SU(3)$ -симметрии, то можно все же предположить, что «средние» атомные веса этих мультиплетов, т. е.  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - и  $f$ -семейств элементов, должны описываться формулой, аналогичной формуле (2.5.3) для средних масс изотопических мультиплетов. Сильный разброс масс в пределах каждого семейства свидетельствует о большем нарушении симметрии, чем в случае адронов. Тем более удивительно, что средние атомные веса прямоугольников табл. 8 обнаруживают несомненную закономерность. Идея искать закономерность для этих средних масс поддается аналогии с массовыми формулами для адронов. Поскольку мы не умеем описать расщепление масс в пределах мультиплетов группы  $G_2$ , предположим, что «средние» массы, характеризующие «нерасщепленные» мультиплеты  $G_2$ , равны средним арифметическим атомных весов элементов, входящих в эти мультиплеты. В табл. 9 эти средние атомные веса помещены в квадратные рамки. При этом можно заметить, что разности этих средних масс, стоящие между квадратами по горизонталям, приблизительно пропорциональны числам 1, 1, 3, 3, 5, 5, ... (кроме первой из них), разности же по вертикалям — числам 1, 2, 3, ... Особенно заметна стабилизация разностей с увеличением  $v$ . Массовая формула, описывающая такое положение вещей, может быть записана в виде

$$M = m_0 + a[\delta(2v - 3) - 5v + 11/2 + 2(v^2 - 1)] - b\lambda(\lambda + 1), \quad (3.5.1)$$

где  $m_0$ ,  $a$ ,  $b$  — коэффициенты, выбираемые по экспериментальным данным (как и в массовых формулах для групп  $SU(3)$  и  $SU(6)$ ). Некоторые комбинации квантовых чисел, входящих в (1), являются собственными значениями операторов Казимира:  $v^2 - 1$  есть значение оператора Казимира группы  $SO(4)$  (см. 3.3) и тем самым подгруппы  $G_1$ , а  $\lambda(\lambda + 1)$  — значение оператора Казимира группы  $SO(3)$  (см. 1.4) и тем самым подгруппы  $G_2$ . Легко проверить, что при изменении  $v$ ,  $\delta$  и  $\lambda$  получаются разности масс, подчиняющиеся описанным выше закономерностям.

Поскольку в табл. 9 горизонтальные разности повторяются, в массовую формулу неизбежно должна войти четность столбца табл. 8, выраженная квантовым числом  $\delta$ ; таким образом, замена нумерации Маделунга, предпринятая выше по алгебраическим соображениям, вводит как раз требуемое опытом квантовое число.

При  $m_0 = 8,0$ ,  $a = 16,1$ ,  $b = 5,0$  из формулы (1) получаются средние массы мультиплетов ( $v$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ ), указанные в табл. 10. Как видно из сравнения таблиц 9, 10, формула (1) описывает 18 масс с помощью трех параметров; за исключением мультиплета (1,  $-1/2$ , 0) (содержащего Н и He), точность описания сравнима с полученной для мезонных

$$\nu = 4, \quad \delta = 1/2$$

**Таблица 10**

	$v = 1$	$v = 2$	$v = 3$	$v = 4$
$\lambda = 0$	$\delta = 1/2$ 8,16	$\delta = -1/2$ 24,2	$\delta = 1/2$ 40,3	$\delta = -1/2$ 216,9
$\lambda = 1$		14,3	30,3	207,0
$\lambda = 2$			78,5	126,7
$\lambda = 3$			58,7	106,9
				187,2
				157,4
				237,7
				287,3
				267,5
				297,2
				$\delta = 1/2$

Рис. 1. Зависимость между числом протонов и нейтронов.

+ — средние значения  $m$  для мультиплетов,  $\circ$  — по массовой формуле.

мультиплетов. Это дает основание рассматривать (1) как массовую формулу для атомов химических элементов, в том же смысле, как формулы Гелл-Манна — Окубо [24, 31] и Бега — Синга [19] для адронов. Формула (1) хорошо согласуется с известной кривой  $Z - A$ , выражающей зависимость между числом протонов и нейтронов. Эта зависимость изображена на рис. 1. На том же рисунке кружки и крестики изображают мультиплеты ( $\nu$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ ), для каждого из которых  $Z$  равно среднему атомному номеру элементов мультиплета, а  $A$  — средний атомный вес элементов мультиплета.

Можно заметить, что массы мультиплетов описываются формулой (1) тем лучше, чем тяжелее элементы, и рассматривать эту формулу как «асимптотическую». При  $m_0 = 1$ ,  $a = 17$ ,  $b = 5,5$  из (1) получаются средние атомные веса для «тяжелых» элементов, указанные в табл. 11. Эти значения можно сопоставить с приведенными в табл. 9. Значения в скобках представляют собой предсказываемые средние атомные веса мультиплетов трансурановых элементов: например, для мультиплета (4,  $1/2$ , 2), начинающегося с Lg и Ku, средний атомный вес должен быть 274.

Такую точку зрения на массовую формулу (1) можно сопоставить с предложенной Вигнером  $SU(4)$ -симметрией для тяжелых ядер [34], долго не получавшей признания; как выяснилось в последние годы, эта симметрия «восстанавливается», начиная примерно с  $A = 120$ . Отметим, что формула (1) также становится весьма точной для этих значений  $A^*$ . Более того, для тяжелых элементов стабилизируются и разности их отдельных атомных весов, как показывают разности атомных весов элементов с  $\nu = 3$ ,  $\lambda = 1$  и с  $\nu = 3$ ,  $\lambda = 2$  при переходе от  $\delta = -1/2$  к  $\delta = 1/2$ . Это позволяет предсказывать не только средние значения, но и атомные веса отдельных трансурановых элементов. При описанном переходе средняя разность атомных весов равна 88,6. Поскольку согласно (1) разности при переходе от  $\nu = 4$ ,  $\delta = -1/2$  к  $\nu = 4$ ,  $\delta = 1/2$  должны быть те же, можно предсказать атомные веса экафранция Fr', экарадия Ra', и т. д., расположенных в табл. 8 справа от Ff, Ra, ...; для этого достаточно прибавить 88,6 к атомным весам Fr, Ra, .... Сопоста-

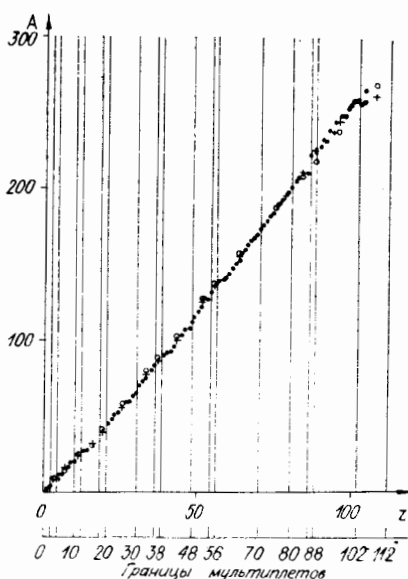


Таблица 11

Значения $\lambda$	Значения $\nu, \delta$			
	3, $-1/2$	3, $1/2$	4, $-1/2$	4, $1/2$
0	86	137	222	(307)
1	75	126	211	(296)
2	53	104	189	(274)
3	—	—	156	241

\* Группа  $SU(4)$  алгебраически родственна конформной группе: комплексные оболочки их алгебр Ли изоморфны между собой.

вим полученные значения с предсказаниями Сиборга [13], сделанными с помощью оболочечной модели:

	Fr'	Ra'	Tl'	Pb'	Bi'	Po'	At'	Rn'
Формула (1)	312	315	293	296	298	299	299	311
Сиборг	315	316	297	298	—	—	311	314

В случаях, рассмотренных Сиборгом, заметное расхождение получается лишь для At'. Для  $Ku = Hf'$  из (1) получается 265, предсказание Сиборга было 272; экспериментальное значение 261. Для Ta' ( $Z = 105$ ) из (1) получается  $A = 270$ . При сравнении с экспериментальными данными следует учитывать, что для трансурановых элементов находили массовые числа более легких (нейтронно-дефицитных) изотопов, между тем как массовая формула относится, по-видимому, к наиболее устойчивым изотопам, имеющим более высокие массовые числа.

## Глава 4

### КЛАССИФИКАЦИЯ И СВОЙСТВА ЭЛЕМЕНТОВ

#### 4.1. Малые мультиплеты и химические свойства

Детальное описание химических свойств требует уточнения построенной выше симметрии. Для этого прибавим к цепочке групп  $G \supset G_1 \supset G_2$  (3.4.16), задающей симметрию, еще одну группу  $G_3$ .

Представление  $\{u_o\}$  (см. 2.1) сопоставляет каждому вращению  $O$  из  $SO(3)$  матрицу  $u_o$  из  $SU(2)$  и тем самым пару  $(u_o, O)$ , т. е. элемент группы  $G_2$ . Это представление определено лишь локально, для всех матриц  $O$ , достаточно близких к единичной; в этом смысле и будет построена интересующая нас подгруппа  $G_3^*$ . При перемножении  $(u_o, O)$  дают пары того же вида:  $(u_{o_1}, O_1)(u_{o_2}, O_2) = (u_{o_1}u_{o_2}, O_1O_2) = (u_{o_1O_2}, O_1O_2)$ , обратные пары имеют тот же вид:  $(u_o, O)^{-1} = (u_{o^{-1}}, O^{-1})$ . Следовательно, такие пары образуют подгруппу в  $G_2$ , которая и обозначается  $G_3$ . Поскольку пары  $(u_o, O)$  (для вращений  $O$ , близких к единичному) находятся во взаимно однозначном соответствии с вращениями  $O$ , подгруппа  $G_3$  локально изоморфна  $SO(3)$ . Мы обозначим ее через  $SO(3)_c$ , где индекс  $c$  указывает на особую роль этой подгруппы в описании химических свойств элементов.

Однопараметрические подгруппы группы  $SO(3)$  имеют вид  $\{e^{-i\alpha A_k}\}$  ( $k = 1, 2, 3$ ); так как представление  $\{u_o\}$  переводит их в однопараметрические подгруппы  $\{e^{-i\alpha\tau_k}\}$  группы  $SU(2)$ , то соответствующие однопараметрические подгруппы в  $SO(3)_c$  имеют вид

$$(e^{-i\alpha\tau_k}, e^{-i\alpha A_k}) = (1, e^{-i\alpha A_k})(e^{-i\alpha\tau_k}, 1).$$

Поскольку матрицам  $A_1, A_2, A_3$  соответствуют в группе  $G$  вращения  $L_{23} = J_1 + K_1, L_{31} = J_2 + K_2, L_{12} = J_3 + K_3$ , в основном представлении группы  $G$ , описанном в 3.3, пару  $(1, e^{-i\alpha A_k})$  изображает оператор  $e^{-i\alpha(J_k + K_k)}$ ; пару  $(e^{-i\alpha\tau_k}, 1)$  изображает оператор  $e^{-i\alpha\tau_k}$ . Тем самым однопараметрическим подгруппам  $SO(3)_c$  соответствуют подгруппы операторов  $e^{-i\alpha(J_k + K_k)} e^{-i\alpha\tau_k}$  ( $k = 1, 2, 3$ ).

Напомним теперь общую теорему: если операторы  $A, B$  перестановочны, то  $e^A \cdot e^B = e^{A+B}$ . Отсюда следует, что предыдущие однопарамет-

\*) Нетрудно было бы построить эту подгруппу и в целом, но мы не будем здесь этим заниматься.

рические подгруппы операторов можно записать в виде  $e^{-i\alpha(\tau_k + J_k + K_k)}$  и, таким образом, их генераторами являются операторы

$$\tau_k + (J_k + K_k) \quad (k = 1, 2, 3). \quad (4.1.1)$$

Мы воспользуемся дальше известной из атомной физики процедурой «сложения моментов», которую опишем сначала в общем виде. Пусть дано представление группы  $G' \times G''$ , где каждая из групп  $G'$ ,  $G''$  — либо  $SU(2)$ , либо  $SO(3)$ . Пусть в этом представлении базис алгебры Ли группы  $G'$  (соответственно  $G''$ ) изображается операторами  $C_k$  (соответственно  $D_k$ ),  $k = 1, 2, 3$ . Предположим, что представление подгруппы  $G' \times 1$ , заданное операторами  $C_k$ , неприводимо и имеет размерность  $2j_1 + 1$ , представление подгруппы  $1 \times G''$ , заданное операторами  $D_k$ , неприводимо и имеет размерность  $2j_2 + 1$ . Тогда представление группы  $G' \times G''$  неприводимо и имеет размерность  $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ . Построим в  $G' \times G''$  подгруппу  $G_3$ , как это было бы сделано выше, алгебра Ли которой изображается операторами  $C_k + D_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ). Тогда редукция представления  $G' \times G''$  по этой подгруппе приводит к неприводимым представлениям  $G_3$  размерностей  $2j + 1$ , где  $j = |j_1 - j_2|$ ,  $|j_1 - j_2| + 1, \dots, j_1 + j_2$ , причем каждое из соответствующих подпространств представления встречается в разложении один раз.

Вернемся теперь к неприводимым представлениям группы  $G_2 = SU(2) \times SO(3)$ , к которым мы пришли в 3.4, нумеруемым наборами квантовых чисел  $(\nu, \delta, \lambda)$  и изображаемым прямоугольниками табл. 8. Каждое из них задается фундаментальным представлением  $SU(2)$  (которое можно рассматривать как двумерное неприводимое представление  $SO(3)$ ) и  $(2\lambda + 1)$ -мерным неприводимым представлением  $SO(3)$ . При редукции по подгруппе  $SO(3)_c$  из такого представления получают неприводимые представления этой последней подгруппы, для которых последовательность Клебша — Гордана  $|j_1 - j_2|, \dots, j_1 + j_2$  со значениями  $j_1 = 1/2$  и  $j_2 = \lambda$  сводится к двум членам  $\lambda - 1/2, \lambda + 1/2$  при  $\lambda > 0$  и к одному члену  $1/2$  при  $\lambda = 0$ . Следовательно, при  $\lambda > 0$  представление  $(\nu, \delta, \lambda)$  группы  $G_2$  приводится к двум неприводимым представлениям подгруппы  $G_3 = SO(3)_c$  размерностей  $(2(\lambda - 1/2) + 1 = 2\lambda$  и  $2(\lambda + 1/2) + 1 = 2\lambda + 2$ , а при  $\lambda = 0$  — к одному двумерному неприводимому представлению (т. е. исходное представление остается неприводимым). Тем самым при  $\lambda > 0$  мультиплеты подгруппы  $G_2$  приводятся к двум мультиплетам подгруппы  $G_3$ , как показано в табл. 12. Вводя для указанных неприводимых представлений  $\iota_\lambda = \lambda - 1/2$ ,  $\iota_\lambda = \lambda + 1/2$ , имеем  $2\lambda = 2\iota_\lambda + 1$ ,  $2\lambda + 2 = 2\iota_\lambda + 1$ . Разумеется, «настоящими» квантовыми числами являются при этом значения  $\iota_\lambda(\iota_\lambda + 1)$  оператора Казимира группы  $SO(3)_c$ , равного

$$\sum_{k=1}^3 (\tau_k + J_k + K_k)^2. \quad (4.1.2)$$

Таким образом, мы построили цепочку групп

$$\begin{aligned} G &= SU(2) \times SU(2) \times SO(4, 2) \supset \\ &\supset SU(2) \times SO(4) \supset SU(2) \times SO(3) \supset SO(3)_c, \end{aligned} \quad (4.1.3)$$

которую следует рассматривать как продолжение цепочки (3.4.16). Согласно принципам классификации частиц, изложенным в 2.7, векторы выделенного базиса, изображающие частицы нашей системы, должны принадлежать наименьшим мультиплетам симметрии, т. е. мультиплетам подгруппы  $G_3$ . Это значит, что векторы  $|\nu, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle$ , построенные в 3.4, уже не составляют выделенный базис, поскольку  $\mu, \sigma$  не являются больше квантовыми числами симметрии, и указанные векторы не принадлежат неприводимым пространствам группы  $G_3$ . Изменение базиса производится следующим образом. Поскольку  $\nu, \delta, \lambda$  связаны с



$\nu = 1$ $\delta = -1/2 \quad \delta = 1/2$		$\nu = 2$ $\delta = -1/2 \quad \delta = 1/2$		$\nu = 3$ $\delta = 1/2 \quad \delta = 1/2$		$\nu = 4$ $\delta = -1/2 \quad \delta = 1/2$		
$\lambda = 0$	H He	Li Be	Na Mg	K Ca	Rb Sr	Cs Ba	Fr Ra	$\iota_\lambda = 1/2$
$\lambda = 1$		B C	Al Si	Ga Ge	In Sn	Tl Pb		$\iota_\lambda = 1/2$
	N O F Ne	P S Cl Ar	As Se Br Kr	Sb Te I Xe	Bi Po At Rn			$\iota_\lambda = 3/2$
$\lambda = 2$			$\kappa = -3/2$ $\kappa = -1/2$ $\kappa = 1/2$ $\kappa = 3/2$	Sc Ti V Cr	Y Zr Nb Mo	Lu Hf Ta W	Lr Ku	$\iota_\lambda = 3/2$
				Mn Fe Co Ni Cu Zn	Tc Ru Rh Pd Ag Cd	Re Os Ir Pt Au Hg		$\iota_\lambda = 5/2$
$\lambda = 3$						La Ce Pr Nd Pm Sm	Ac Th Pa U Np Pu	$\iota_\lambda = 5/2$
						Eu Gd Tb Dy Ho Er Tm Yb	Am Cm Bk Cf Es Fm Md No	$\iota_\lambda = 7/2$

группами  $G$ ,  $G_1$ ,  $G_2$ , они остаются квантовыми числами цепочки (3), а вместо  $\mu$ ,  $\sigma$  вводятся новые квантовые числа, связанные с  $G_3$ . Одно из них — это  $\iota_\lambda$ , связанное с оператором Казимира подгруппы  $G_3$ . Другое квантовое число  $\kappa$  есть собственное значение оператора  $q_3 = \tau_3 + J_3 + K_3$ , принадлежащего алгебре Ли группы  $G_3 = SO(3)_c$ . Поскольку для мультиплетов  $SO(3)_c$  число  $\iota_\lambda$  полуцелое,  $\kappa$  пробегает следующие *полуцелые* значения:

$$\kappa = -\iota_\lambda, -\iota_\lambda + 1, \dots, \iota_\lambda - 1, \iota_\lambda, \text{ где } \iota_\lambda = \lambda - 1/2, \lambda + 1/2, \quad (4.1.4)$$

Квантовые числа  $\nu$  (значение оператора Казимира группы  $SO(4)$ ),  $\delta$  (значение генератора группы  $SU(2)'$ ),  $\lambda$  (связанное со значением  $\lambda(\lambda+1)$  оператора Казимира группы  $SO(3)$ ) и  $\iota_\lambda$  (связанное со значе-

нием  $u_\lambda(u_\lambda + 1)$  оператора Казимира группы  $SO(3)_c$  задают неприводимое подпространство  $(v, \delta, \lambda, u_\lambda)$  группы  $SO(3)_c$ , изображаемое прямоугольником табл. 12. Возьмем в этом подпространстве нормированные собственные векторы

$$|v, \delta, \lambda, u_\lambda, \kappa\rangle \quad (4.1.5)$$

оператора  $q_3$ , где  $\kappa$  пробегает значения (4). Векторы (5), по построению принадлежащие «малым» мультиплетам цепочки групп (3), составляют выделенный базис этой цепочки.

Таким образом, удлинение цепочки групп, выражающей симметрию системы, приводит к изменению выделенного базиса, векторы которого должны изображать элементы. Это изменение можно сопоставить с так называемым «смещением» частиц в адронных мультиплетах (ср. цепочки групп (2.3.8), (2.5.1)). В случае системы элементов различные базисы также служат для описания разных свойств элементов. Заметим, впрочем, что в массовой формуле (3.5.4) участвуют лишь квантовые числа  $v, \delta, \lambda$ , входящие и в новый набор квантовых чисел  $(v, \delta, \lambda, u_\lambda, \kappa)$ , так что описание атомных весов с принятой нами точностью (т. е. средних атомных весов  $(v, \delta, \lambda)$ -мультиплетов) совместимо и с расширенной цепочкой групп (3).

Новый базис требует и нового правила заполнения таблицы элементами, т. е. правила соответствия

$$Z \leftrightarrow (v, \delta, \lambda, u_\lambda, \kappa). \quad (4.1.6)$$

«Лексикографическое правило» принимает теперь следующий вид:

- (1) Элементы располагаются в порядке возрастания  $Z$ ;
- (2) Наборы  $(v, \delta, \lambda, u_\lambda, \kappa)$  располагаются в порядке возрастания  $v$ ; при заданном  $v$  — в порядке возрастания  $\delta$ ; при заданных  $v, \delta$  — в порядке убывания  $\lambda$ ; при заданных  $v, \delta, \lambda$  — в порядке возрастания  $u_\lambda$ ; при заданных  $v, \delta, \lambda, u_\lambda$  — в порядке возрастания  $\kappa$ .
- (3)  $Z$ -му элементу ставится в соответствие  $Z$ -й набор.

Набор  $(v, \delta, \lambda, u_\lambda, \kappa)$  представляет собой «адрес» элемента, определяющий его место в табл. 12; легко убедиться, что табл. 12 заполнена символами по только что приведенному правилу. Напомним, что атомный номер не является квантовым числом нашей теории, а рассматривается как экспериментальная характеристика элемента; лексикографическое правило устанавливает соответствие между этой характеристикой и наборами квантовых чисел, задающими естественную нумерацию элементов в нашей симметрии. Это правило вводится, таким образом, как связь с экспериментом, поскольку квантовые числа непосредственно не наблюдаемы.

Мультиплеты подгрупп  $G_1, G_2, G_3$ , изображаемые соответственно столбцами, парами смежных прямоугольников и отдельными прямоугольниками табл. 12, определяют иерархическую классификацию химических элементов, соответствующую групповой симметрии (3). Как уже было сказано, естественность этой классификации проявляется прежде всего

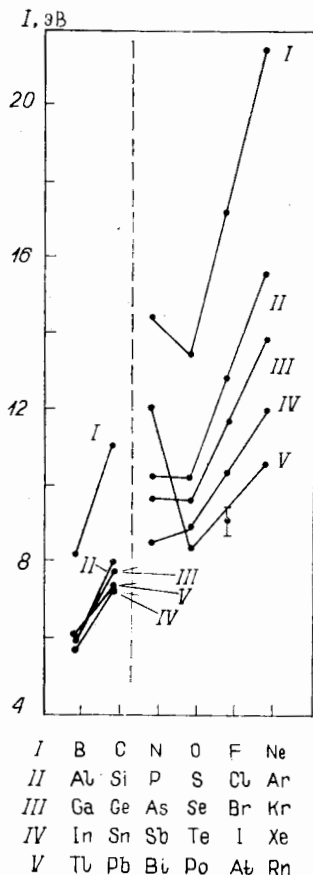


Рис. 2. Первые потенциалы ионизации.

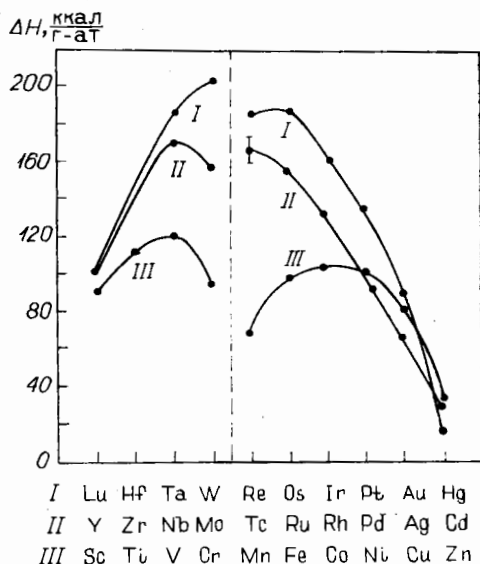
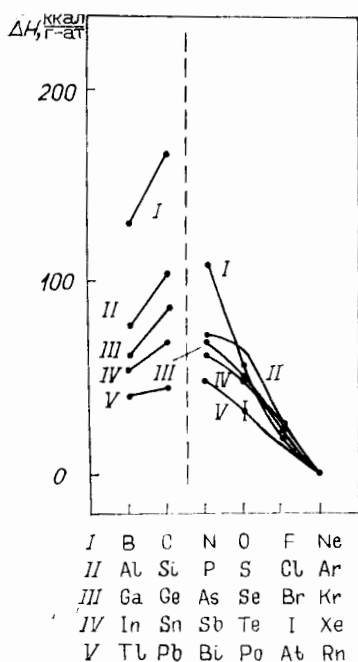


Рис. 3. Энтальпии образования элементов.

в том, что мультиплеты ( $v$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ ) подгруппы  $G_2$  совпадают с известными  $s$ -,  $p$ -,  $d$ - и  $f$ -семействами элементов. При этом квантовое число  $\lambda$  задает число элементов семейства, а  $\delta$  описывает так называемую «вторичную периодичность» элементов.

Чтобы понять смысл «малых мультиплетов», т. е. мультиплетов подгруппы  $G_3$ , будем исходить из некоторого общего представления об описании свойств в квантовой классификации частиц. Если квантовая теория находится в согласии с экспериментальными фактами, то можно рассчитывать, что каждое количественное измеримое свойство частиц, описываемых теорией, должно выражаться «регулярной», т. е. аналитически правильной, функцией от квантовых чисел теории. Конечно, групповой подход не может количественно определить эти закономерности, но может указать некоторые качественные закономерности, об-

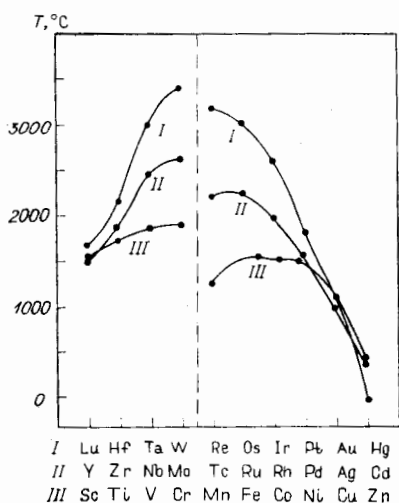


Рис. 4. Температуры плавления.

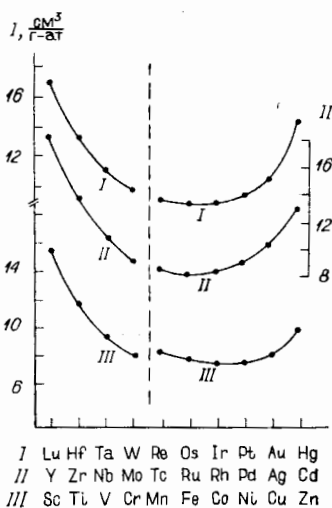


Рис. 5. Атомные объемы.

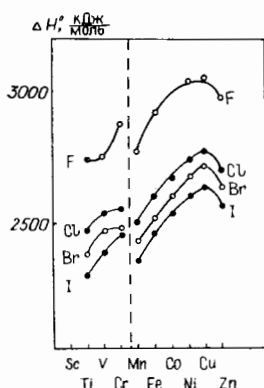
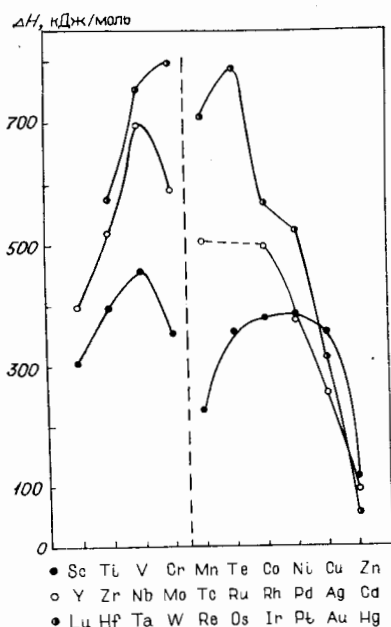


Рис. 7. Энергии ионных решеток  $M^{+2}$ -галогенидов.

Рис. 6. Теплоты испарения.

щие для *всех* свойств. Например, если меняется одно из квантовых чисел, в то время как остальные фиксированы, то свойство  $P$  должно закономерно зависеть от выбранного квантового числа, а при изменении одного из фиксированных чисел эта зависимость должна резко меняться, поскольку квантовые числа — дискретно меняющиеся параметры.

В случае симметрии (3) интересующая нас зависимость должна иметь вид

$$P = P(\nu, \delta, \lambda, \iota, \kappa). \quad (4.1.7)$$

Для разных свойств  $P$  эта зависимость может быть различной и, как правило, неизвестна. Но можно предвидеть некоторые качественные особенности *всех* функций  $P$ . Предположим, например, что значения  $\nu, \delta, \lambda, \iota$  фиксированы:  $\nu = \nu_1, \delta = \delta_1, \lambda = \lambda_1, \iota = \iota_1$ ; тогда при изменении  $\kappa$  из (7) получается некоторая регулярная функция  $P_1(\kappa)$ . Если теперь изменить числа  $\nu, \delta, \lambda, \iota$ , положив  $\nu = \nu_2, \delta = \delta_2, \lambda = \lambda_2, \iota = \iota_2$ , то получится *другая* функция  $P_2(\kappa)$ . Иначе говоря, по отношению к функции  $P(\kappa)$  остальные квантовые числа играют роль параметров, и большое (целочисленное) изменение одного из них резко меняет вид  $P(\kappa)$ . Если фиксировать  $\nu, \delta, \lambda > 0$  (т. е., в обычных терминах, некоторое  $p$ -,  $d$ - или  $f$ -семейство элементов), то при переходе квантового числа  $\iota$  от  $\lambda - 1/2$  к  $\lambda + 1/2$  зависимость должна, следовательно, резко измениться. Это может проявиться в виде «разрыва» на графике, перехода от возрастания к убыванию и т. д. на границе между двумя малыми мультиплетными с одним и тем же  $\lambda$ . В табл. 12 места «перехода» обозначены узкими промежутками между прямоугольниками с одним и тем же  $\lambda$ , но разными  $\iota$ .

Для семейства лантаноидов такое разделение на два подсемейства с различными закономерностями было замечено М. В. Гайсинским и его сотрудниками [2]. Мы видим теперь, что такое разделение является общим законом, связанным с групповой симметрией: *каждое  $p$ -,  $d$ - или  $f$ -семейство из  $4\lambda + 2$  элементов делится на подсемейства из  $2\lambda$  и  $2\lambda + 2$  элементов в порядке возрастания атомных номеров, и зависимость любого количественно измеримого свойства от атомного номера меняется при переходе от первого семейства ко второму.*

Для сравнения этого вывода с экспериментальными данными были рассмотрены разнообразные свойства элементов, в том числе свойства, с которыми обычно связывается их химическое поведение: потенциалы

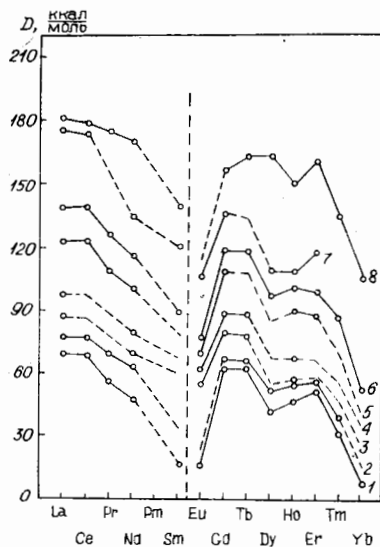
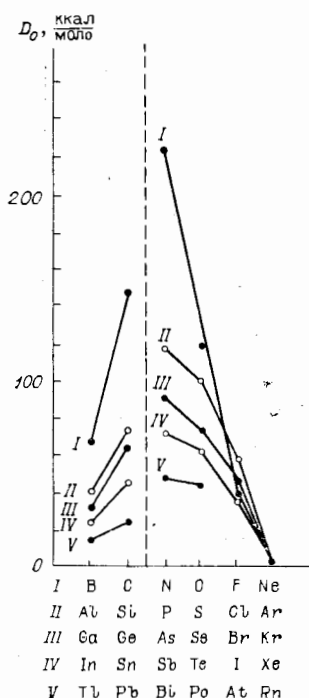


Рис. 9. Энергии разрыва связей соединений лантаноидов.

Рис. 8. Энергии разрыва связей двухатомных молекул.

ионизации; атомные объемы; энтальпии образования элементов; поляризуемость атомов; температура кипения; температура плавления; теплота испарения; сродство к электрону; энергии ионных решеток; энергии разрыва связей двухатомных молекул; энергии разрыва связей соединений лантаноидов. Весь экспериментальный материал поддерживает симметрию (3). Ниже помещено несколько характерных графиков (рис. 2—10), иллюстрирующих изменение зависимостей между малыми мультиплетами; разделяющая их граница обозначена штриховой линией. По-видимому, эта закономерность до сих пор не была замечена и, во всяком случае, не имела объяснения.

Деление семейств на подсемейства, описанное в [11] (таблица на с. 208), было впервые сопоставлено с экспериментальными данными В. М. Бяковым [20]. График, приведенный в этом обзоре, составил Н. И. Сорокин, выбравший для этой цели важные свойства элементов.

## 4.2. Операторы химического сродства

Мы выполнили для системы элементов большую часть программы классификации частиц, изложенной в 2.7. Найдем теперь для этого случая операторы сродства, переводящие друг в друга частицы с аналогичными свойствами. Согласно 2.7 эти операторы должны быть перестановочны с некоторой подгруппой группы симметрии, входящей в цепочку групп (1.3). Возьмем в качестве такой подгруппы  $G_2 = SU(2) \times SO(3)$ .

Покажем, что операторы  $\Gamma_+$ ,  $\Gamma_-$  (см. (3.3.12)) перестановочны с этой подгруппой. В самом деле, из перестановочных соотношений конформной группы (3.2.16) следует, что  $[P_{\pm} + Q_{\pm}, J_{\pm} + K_{\pm}] = [P_{\pm} + Q_{\pm}, J_{\mp} + K_{\mp}] = [P_{\pm} + Q_{\pm}, J_3 + K_3] = 0$ . Отсюда видно, что  $\Gamma_+$ ,  $\Gamma_-$  сохраняют квантовое число  $\mu$ . Далее,  $\Gamma_+$ ,  $\Gamma_-$  перестановочны с оператором Казимира  $(J_1 + K_1)^2 + (J_2 + K_2)^2 + (J_3 + K_3)^2$  подгруппы  $SO(3)$  и тем самым сохраняют квантовое число  $\lambda$ . С другой стороны,  $\Gamma_+ = P_+ + Q_+$  и  $\Gamma_- = P_- + Q_-$  перестановочны с операторами подгруппы  $SU(2)$  и, следовательно, с  $\tau_k$  ( $k=1, 2, 3$ ), а потому сохраняют квантовое число  $\sigma$ . Так как  $\Gamma_+$  и  $\Gamma_-$  перестановочны с  $J_k + K_k$  и  $\tau_k$  в отдель-

ности, они перестановочны с подгруппой  $G_2 = SU(2) \times SO(3)$ . Далее,  $\Gamma_+$ ,  $\Gamma_-$  перестановочны с подгруппой  $SU(2)'$  и тем самым сохраняют квантовое число  $\delta$ . Наконец, как мы видели в 3.3,  $\Gamma_+$  переводит  $\mathfrak{F}_n$  в  $\mathfrak{F}_{n+1}$ , а  $\Gamma_-$  переводит  $\mathfrak{F}_n$  в  $\mathfrak{F}_{n-1}$ ; поэтому в пространстве  $\mathfrak{F}^4$  оператор  $\Gamma_+$  ( $\Gamma_-$ ) повышает (соответственно понижает) квантовое число  $v$  на единицу.

Покажем, что для всех базисных векторов

$$\Gamma_+ |v, \delta, \lambda, \mu, \kappa\rangle \neq 0. \quad (4.2.1)$$

Сначала докажем аналогичное утверждение для векторов старого базиса  $v = |v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle$ . Такой вектор принадлежит неприводимому подпространству группы  $G_2$ , заданному значениями  $v, \delta, \lambda$ . Возьмем  $j = (v-1)/2$  и разложим  $v$  по базису неприводимого подпространства  $(v, \delta)$  группы  $SO(4)$  (опуская квантовые числа  $\sigma, \delta$ ):

$$v = \sum_{\alpha, \beta} \vartheta_{\alpha\beta} |j, \sigma_\alpha, \tau_\beta\rangle, \quad (4.2.2)$$

где сохранены лишь члены с ненулевыми коэффициентами  $\vartheta_{\alpha\beta}$ . Поскольку  $v$  является собственным вектором оператора  $J_3 + K_3$  с собственным значением  $\mu$ , для всех  $\alpha, \beta$  должно быть  $\sigma_\alpha + \tau_\beta = \mu$  (см. (3.3.11)). Выберем член с наибольшим значением  $\sigma_\alpha$  (и тем самым с наименьшим значением  $\tau_\beta$ ). Применим теперь к вектору (2) оператор  $\Gamma_+$ . Согласно (3.3.13) при этом получится с ненулевым коэффициентом вектор  $|j+1/2, \sigma_\alpha+1/2, \tau_\beta-1/2\rangle$ , который не может сократиться с другими членами, поскольку у него наибольшее значение  $\sigma_\alpha$ . Так как векторы базиса  $|j+1/2, \sigma_\alpha, \tau_\beta\rangle$  ортогональны, отсюда следует, что  $\Gamma_+ |v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle \neq 0$ . Как мы видели выше,  $\Gamma_+$  сохраняет квантовые числа  $\delta, \lambda, \mu, \sigma$ , увеличивая  $v$  на единицу; поэтому  $\Gamma_+ |v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle = \eta |v+1, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle$ , где  $\eta \neq 0$ . Применим к предыдущему равенству операторы  $J_+ + K_+, J_- + K_-, \tau_+, \tau_-$ ; пользуясь (3.3.11) (где коэффициенты в правых частях зависят лишь от  $\lambda$ , но не от  $v, \delta$ ) и (3.4.13), легко видеть, что  $\eta$  не зависит от  $\mu, \sigma$ . Тем самым  $\Gamma_+$  переводит ортонормированные базисные векторы  $|v, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle$  в соответствующие базисные векторы  $|v+1, \delta, \lambda, \mu, \sigma\rangle$ , умноженные на  $\eta$ , а это значит, что действие  $\Gamma_+$  сводится к изоморфному отображению пространства мультиплетта  $(v, \delta, \lambda)$  на пространство мультиплетта  $(v+1, \delta, \lambda)$  и умножению на  $\eta \neq 0$ . Так как вектор  $|v, \delta, \lambda, \mu, \kappa\rangle$  принадлежит первому из этих двух пространств, неравенство (1) доказано. Таким образом,

$$\Gamma_+ |v, \delta, \lambda, \mu, \kappa\rangle = \eta |v+1, \delta, \lambda, \mu, \kappa\rangle, \quad (4.2.3)$$

где  $\eta \neq 0$ .

Покажем, далее, что

$$\Gamma_- |v, \delta, \lambda, \mu, \kappa\rangle \neq 0 \text{ при } 0 \leq \lambda \leq v-2. \quad (4.2.4)$$

Так как  $P_h, Q_h$  — эрмитовы операторы, то  $\Gamma_+$  и  $\Gamma_-$  — эрмитово сопряженные операторы в пространстве  $\mathfrak{F}^4$ ; следовательно, для любых векторов  $v, w$  этого пространства

$$\langle \Gamma_+ v | w \rangle = \langle v | \Gamma_- w \rangle. \quad (4.2.5)$$

Возьмем  $v = |v-1, \delta, \lambda, \mu, \kappa\rangle$ ,  $w = |v, \delta, \lambda, \mu, \kappa\rangle$ , где  $0 \leq \lambda \leq v-2$ ; поскольку для значения квантового числа  $v-1$  число  $\lambda$  пробегает значения  $0, 1, \dots, (v-1)-1$ , существует мультиплет  $(v-1, \delta, \lambda)$  и, следовательно, вектор  $v$  входит в базис пространства  $\mathfrak{F}^4$ . Точно так же входит в базис и вектор  $w$ . В силу (3)  $\Gamma_+ v = \eta' w$ , где  $\eta' \neq 0$ , так что левая часть (5) не равна нулю, откуда и вытекает  $\Gamma_- w \neq 0$ .

Наглядный смысл операторов  $\Gamma_+, \Gamma_-$  состоит в том, что они перемещают базисные векторы, изображаемые клетками табл. 12, вправо (соответственно влево) по горизонтальным строкам таблицы. При этом  $\Gamma_+$  всегда переводит базисный вектор столбца  $(v, \delta)$  в базисный вектор

столбца той же четности  $(\nu + 1, \delta)$ , с умножением на некоторый ненулевой множитель. Оператор  $\Gamma_-$  переводит базисный вектор столбца  $(\nu, \delta)$  в базисный вектор столбца той же четности  $(\nu - 1, \delta)$ , с умножением на ненулевой множитель, если только в последнем существует вектор на той же горизонтали (в противном случае, как можно показать, получается нуль).

Покажем теперь, что  $\tau'_+, \tau'_-$  — операторы сродства, соединяющие столбцы разной четности. Поскольку эти операторы перестановочны с подгруппой  $G_1 = SU(2) \times SO(4)$ , они сохраняют квантовые числа  $\nu, \lambda, \iota_\lambda, \kappa$ , связанные с подгруппой  $G_1$ , и меняют только квантовое число  $\delta$  (см. (3.4.13)):

$$\begin{aligned}\tau'_+ |\nu, -1/2, \lambda, \iota_\lambda, \kappa\rangle &= |\nu, 1/2, \lambda, \iota_\lambda, \kappa\rangle, \\ \tau'_- |\nu, 1/2, \lambda, \iota_\lambda, \kappa\rangle &= |\nu, -1/2, \lambda, \iota_\lambda, \kappa\rangle.\end{aligned}\tag{4.2.6}$$

Наглядный смысл операторов  $\tau'_+, \tau'_-$  состоит в том, что  $\tau'_+$  перемещает базисные векторы каждого нечетного столбца табл. 12 по горизонтали в базисные векторы ближайшего правого столбца;  $\tau'_-$  перемещает базисные векторы каждого четного столбца по горизонтали в базисные векторы ближайшего левого столбца. Таким образом, операторы

$$\Gamma_+, \Gamma_-, \tau'_+, \tau'_-\tag{4.2.7}$$

являются операторами сродства, соответствующими подгруппе  $G_2$ .

Как видно из табл. 12, по горизонталям ее располагаются в точности менделеевские гомологические ряды, т. е. семейства элементов с близкими свойствами. Мы выделили эти семейства, исходя из описанного в 2.7 общего принципа выделения аналогов в мультиплетах частиц. Поэтому естественно назвать операторы (7) *операторами химического сродства*.

Теперь выясняется роль подгруппы  $G_1$ : ее мультиплеты содержат по одному представителю каждого ряда менделеевских гомологов, при условии, что этот ряд пересекает соответствующий столбец табл. 12. В этом и состоит смысл периодичности, с точки зрения предлагаемого группового подхода.

Как видно из табл. 12, гомологический ряд, содержащий элемент  $|\nu, \delta, \lambda, \iota_\lambda, \kappa\rangle$ , может пересекать лишь те мультиплеты подгруппы  $G_1$ , для которых  $\lambda \leq \nu - 1$ . Этим определяется треугольная форма таблицы. Отметим, что при  $\nu = 4, \lambda = 3$  наши операторы сродства устанавливают гомологию между лантаноидами и актиноидами, обнаруженную Сиборгом. Таким образом, эта гомология оказывается частным случаем менделеевской, понимаемой в только что описанном смысле. С другой стороны, положение Не в ряду щелочноземельных металлов представляет невязку в этой картине, которую мы не можем объяснить.

Можно надеяться, что квантовые числа нашей симметрии окажутся полезными при описании свойств химических соединений. Атомы, составляющие молекулу, могут быть заданы наборами их квантовых чисел. Пользуясь этими наборами, можно пытаться классифицировать молекулы, не углубляясь в механизм образующего их взаимодействия. Можно также искать закономерности в свойствах молекул в зависимости от квантовых чисел входящих в них элементов.

## Приложение

Е. М. Миркес, А. П. Свитин, А. И. Фет

### МАССОВЫЕ ФОРМУЛЫ ДЛЯ АТОМОВ

На основе концепции групповой симметрии химических элементов и вытекающей из нее теоретико-групповой классификации [11] в работах [16, 22] была предложена массовая формула для атомных весов

$$M = m_0 + a [\delta(2\nu - 3) - 5\nu + 11/2 + 2(\nu^2 - 1)] - b\lambda(\lambda + 1), \quad (1)$$

где  $M$  — средняя масса  $(\nu, \delta, \lambda)$ -мультиплета;  $\nu, \delta, \lambda$  — квантовые числа по теоретико-групповой классификации химических элементов [16, 22] (см. табл. 8 основного текста статьи А. И. Фета);  $m_0, a, b$  — коэффициенты, выводимые из теории.

Соотношение (1) дает средние атомные массы мультиплетов, и в этом смысле оно аналогично известным формулам Гелл-Манна и Окубо [14, 18] и Бега и Синга [15] для адронов.

В работах [16, 22] было показано, что массы тем лучше описываются формулой (1), чем тяжелее элементы. По этой причине было предложено рассматривать эту формулу как «асимптотическую».

Недостатком соотношения (1) является, во-первых, необходимость использования разных наборов коэффициентов  $m_0, a, b$  для легких и тяжелых атомов, во-вторых, использование всего трех квантовых чисел  $\nu, \delta, \lambda$  из пяти возможных  $\nu, \delta, \lambda, i_\lambda, \kappa$  (см. табл. 8).

В настоящем приложении предлагается массовая формула, лишенная отмеченных недостатков. При этом учтены все пять квантовых чисел, в результате чего получены соотношения, позволяющие вычислять не среднюю мультиплетную, а «поэлементную» массу химических элементов.

Для получения полиномов второго, третьего и четвертого порядков был использован стандартный метод регрессионного анализа:

$$M = 62,329 - 82,256\nu - 21,651\delta_1 - 2,089\lambda - 5,511i_\lambda + 1,840\kappa + 32,842\nu^2 + 14,704\nu\delta_1 - 2,047\nu\lambda + 2,515\nu i_\lambda + 0,460\nu\kappa + 1,105\delta_1\lambda + 0,747\delta_1 i_\lambda + 0,114\delta_1\kappa - 9,600\lambda^2 + 4,683\lambda i_\lambda - 0,288\lambda\kappa - 0,088i_\lambda\kappa + 0,081\kappa^2, \quad (2)$$

$$M = 4,148 + 5,515\nu + 3,570\delta_1 + 7,632\lambda - 2,891i_\lambda + 3,436\kappa - 2,162\nu^2 - 6,739\nu\delta_1 - 4,075\nu\lambda + 6,879\nu i_\lambda - 1,768\nu\kappa + 0,032\delta_1\lambda + 1,602\delta_1 i_\lambda + 0,282\delta_1\kappa - 11,630\lambda^2 + 0,075\lambda\kappa + 0,645i_\lambda\kappa - 3,203i_\lambda^2 + 0,704i_\lambda\kappa + 0,364\kappa^2 + 4,944\nu^3 + 4,385\nu^2\delta_1 - 0,408\nu^2\lambda - 1,797\nu^2 i_\lambda + 0,696\nu^2\kappa - 1,172\nu\delta_1\lambda + 0,469\nu\delta_1 i_\lambda + 0,422\nu\delta_1\kappa - 33,518\nu\lambda^2 + 70,230\nu\lambda i_\lambda - 0,214\nu\lambda\kappa - 32,847\nu i_\lambda^2 - 0,711\nu i_\lambda\kappa + 0,175\delta_1\lambda^2 + 2,311\delta_1\lambda i_\lambda - 2,784\delta_1\lambda\kappa - 0,122\delta_1 i_\lambda^2 + 0,703\delta_1 i_\lambda\kappa - 0,475\delta_1\kappa^2 - 0,016\lambda^3 - 4,360\lambda^2 i_\lambda + 13,391\lambda^2\kappa - 0,687\lambda i_\lambda^2 - 15,000\lambda i_\lambda\kappa + 1,231\lambda\kappa^2 - 0,024i_\lambda^3 + 5,045i_\lambda^2\kappa - 0,353i_\lambda\kappa^2 - 0,291\kappa^3, \quad (3)$$

$$M = 3,021 - 4,301\nu + 10,738\delta_1 + 5,761\lambda + 3,615i_\lambda + 2,052\kappa + 4,452\nu^3 +$$



$$\begin{aligned}
& + 8,963v^2\delta_1 - 10,454\lambda^2 - 0,733\lambda i_\lambda^2 - 16,257v\delta_1 - 4,852v\lambda + 2,131v\lambda i_\lambda - \\
& - 0,107v^3 i_\lambda - 0,689v^3\delta_1 + 0,106v^2 i_\lambda^2 - 1,584i_\lambda\kappa + 0,745v\kappa + 0,596\kappa^3 + \\
& + 0,566\delta_1\kappa - 0,063\delta_1\kappa^3 + 0,659\delta_1\lambda + 1,393\delta_1\lambda^3 - 3,929\delta_1\lambda^2 - 0,891\delta_1\lambda^2 i_\lambda + \\
& + 2,199\delta_1\lambda i_\lambda - 0,184\lambda\kappa^3 + 0,071\lambda i_\lambda^2\kappa + 0,824\kappa^2 - 0,243i_\lambda\kappa^2, \quad (4)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
M = & 3,626v^3 - 2,432v\lambda + 1,743v^2\delta_1 + 3,148i_\lambda^2 + \\
& + 2,628\kappa - 7,835\lambda^2 + 0,143v^4 + 0,263v^3\delta_1, \quad (5)
\end{aligned}$$

где  $\delta_1 = 2\delta - 1$ .

Соотношения (2)–(5) представляют собой полиномы второй (2), третьей (3) и четвертой (4) и (5) степеней.

Ввиду того, что полный полином 4-й степени содержит 105 коэффициентов, а взятые нами достоверные экспериментальные данные по атомным весам насчитывают только 103 элемента, построение полного полинома невозможно. Кроме того, большое число коэффициентов затрудняет практическое использование формулы. Поэтому возникла задача построения неполных полиномов 4-й степени (соотношения (4) и (5)). Опишем алгоритмы их построения.

Введем обозначения:  $I$  — множество номеров мономов, включенных в полином;  $N$  — множество номеров всех мономов, предназначенных для построения регрессионного полинома;  $S_I$  — среднеквадратичная ошибка аппроксимации полиномом, содержащим только те мономы, номера которых входят в  $I$ . В этих обозначениях алгоритм получения (4) имеет следующий вид.

Шаг 1:  $I = \{1, 2, \dots, 6\}$  (все линейные + свободный член).

Шаг 2:  $i_0: S_{I \cup \{i_0\}} = \min_{i \in N \setminus I} S_{I \cup \{i\}}$ .

Шаг 3:  $I = I \cup \{i_0\}$ .

Шаг 4: Если  $S_I > S$ , то снова шаг 2.

В тех же обозначениях алгоритм получения формулы (5) выглядит следующим образом:

1.  $I = \{i_1, \dots, i_8\}$ .

2.  $I_0 = I$ ,  $l = 1$ .

3.  $i_0: S_{I \setminus \{i_l\} \cup \{i_0\}} = \min_{i \in N \setminus I \cup \{i_l\}} S_{I \setminus \{i_l\} \cup \{i\}}$ .

4.  $i_l = i_0$ ,  $l = l + 1$ , если  $l \leq 8$ , снова шаг 3.

5. Если  $I \neq I_0$ , снова шаг 2.

Среднеквадратичные отклонения для соотношений (2)–(5) равны 4,18; 1,5; 1,25; 1,92 соответственно. Результаты, полученные по соотношениям (1)–(5) для средних атомных масс ( $v$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ )-мультиплетов, сведены в табл. 1. Здесь же даны для сравнения экспериментальные данные по средним мультиплетным массам [10]. Как видно из табл. 1, точность вычисления средней массы ( $v$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ )-мультиплетов в сравнении с экспериментом возрастает при переходе от одного соотношения к другому в следующей их последовательности: (1)  $\rightarrow$  (5)  $\rightarrow$  (2)  $\rightarrow$  (3)  $\rightarrow$  (4). Таким образом, наилучшие результаты удастся получить с использованием тридцатикoeffициентного неполного полинома четвертой степени (4). Соотношение (4) дало наилучшие результаты для семи мультиплетов: (1, 1, 0), (2, 0, 0), (2, 1, 0), (3, 1, 1), (3, 1, 2), (4, 0, 3), (4, 1, 3). Соотношения (3), (2) и (5) дали наилучшие результаты для пяти, трех и двух мультиплетов соответственно: (2, 0, 1), (2, 1, 1), (3, 0, 0), (3, 1, 0), (4, 0, 0); (3, 0, 1), (4, 0, 1), (4, 0, 2); (1, 0, 0), (3, 0, 2).

В табл. 2 приведены атомные массы отдельных трансурановых элементов, предсказываемые на основе соотношений (1)–(5). Эти данные сопоставляются с предсказаниями Г. Сиборга, сделанными с помощью оболочечной модели [13]. Как видно из табл. 2, в четырех слу-



Таблица 2. Атомные массы трансурановых элементов, предсказанные Г. Сиборгом [13] и по соотношениям (1)–(5)

Элемент	Атомный номер	Предсказанная масса (источник)					
		Г. Сиборг [13]	Соотношения				
			(1)	(2)	(3)	(4)	(5)
Tl'	113	297	293	280	292	291	295
Pb'	114	298	296	293	300	296	296
Bi'	115	298	298	287	298	297	299
Po'	116	298	299	290	303	300	302
At'	117	311	299	293	309	304	304
Rn'	118	314	311	297	315,5	309	307
Fr'	119	315	312	296	318	312	313
Ra'	120	316	315	300	326	317	316

чаях из пяти возможных лучшее согласование с данными Г. Сиборга достигается за счет соотношения (5) (элементы  $Tl'$ ,  $Pb'$ ,  $Fr'$ ,  $Ra'$ ). В двух других случаях (элементы  $At'$ ,  $Rn'$ ) результаты, более близкие к предсказаниям Г. Сиборга, дает соотношение (3). Как показано в табл. 1, для средних атомных масс мультиплетов (4, 1, 0) и (4, 1, 1) наилучшее согласие достигается с использованием соотношений (4) и (3) соответственно. Кроме того, учитывая данные табл. 1, свидетельствующие о большей достоверности предсказаний, сделанных на основе соотношений (4) и (3), можно предположить, что истинные значения атомных масс указанных трансурановых элементов ближе не к предсказаниям Г. Сиборга, а к предсказаниям, задаваемым соотношениями (3) и (4). Однако выбор между ними затруднителен, поэтому в качестве гипотетического прогноза для этих элементов можно дать средние атомные массы, даваемые соотношениями (3) и (4):

Tl'	Pb'	Bi'	Po'	At'	Rn'	Fr'	Ra'
291,5	298	297,5	301,5	306,5	312,25	315	321,5

Таким образом, на основе групповой классификации химических элементов получены несколько видов массовой формулы (соотношения (1)–(5)). При сравнении с экспериментальными данными установлено, что наилучшие результаты достигаются с использованием соотношений (3) и особенно (4), отвечающих полному полиному третьей степени и неполному полиному четвертой степени от пяти квантовых чисел  $v$ ,  $\delta$ ,  $\lambda$ ,  $i_\lambda$ ,  $\kappa$  соответственно.

Даны предсказания атомных масс ряда трансурановых элементов с атомными номерами от 113 до 120.

Авторы признательны А. Н. Горбаню за плодотворные обсуждения рассмотренных в приложении вопросов.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Виленкин Н. Я. Специальные функции и теория представлений групп.— М.: Наука, 1965.
2. Гайсинский М. Влияние 4f- и 5f-электронов на химические свойства элементов // Столетие периодической системы элементов.— М.: Наука, 1969.— С. 68–74.
3. Жувикин Г. В., Хефферлин Р. Периодическая система двухатомных молекул: теоретико-групповой подход // Вестн. ЛГУ.— 1983.— Вып. 16, № 3.— С. 10–16.
4. Зоммерфельд А. Строение атомов и спектры.— М.: Гостехиздат, 1956.— Т. I, Т. II.
5. Конопельченко Б. Г. Группа  $SO(2, 4) + R$  и таблица Менделеева.— Новосибирск, 1972.— (Препринт/АН СССР. Сиб. отделение. Ин-т ядерной физики).
6. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Квантовая механика.— М.: Наука, 1974.
7. Маделунг Э. Математический аппарат физики.— М.: Гостехиздат, 1960.
8. Малкин И. А., Манько В. И. Симметрия атома водорода // Письма в ЖЭТФ.— 1965.— Т. 2, № 5.— С. 230–234.

9. Паули В. Волновая механика.— М.: Гостехиздат, 1947.
10. Радциг А. А., Смирнов Б. М. Параметры атомов и молекул.— М.: Атомиздат, 1986.
11. Румер Ю. Б., Фет А. И. Группа Spin (4) и таблица Менделеева // Теорет. и мат. физика.— 1971.— Т. 9, № 2.— С. 203—210.
12. Румер Ю. Б., Фет А. И. Теория унитарной симметрии.— М.: Наука, 1970.
13. Сиборг К. Расширение пределов периодической системы // Столетие периодической системы элементов.— М.: Наука, 1969.— С. 21—39.
14. Фет А. И. Конформная группа и химическое сродство // Письма в ЖЭТФ.— 1981.— Т. 20, № 1.— С. 24—26.
15. Фет А. И. Конформная симметрия химических элементов // Теорет. и мат. физика.— 1975.— Т. 22, № 3.— С. 323—334.
16. Фет А. И. Групповая симметрия химических элементов // Журн. физ. химии.— 1981.— Т. 55, № 3.— С. 622—629.
17. Фок В. А. Атом водорода и не-евклидова геометрия // Изв. АН СССР. Сер. VII. Отд-ние математики и естественных наук.— 1935.— № 2.— С. 169—179.
18. Barut A. O. Group Structure of the Periodic System // Structure of Matter, Rutherford Centennial Symposium.— New Zealand, 1972.— P. 127—136.
19. Bég M., Singh V. Splitting of Spin-Unitary Spin Supermultiplets // Phys. Rev. Letters.— 1964.— V. 13, N 13.— P. 113—116.
20. Vyakov V. M., Kulakov Y. I., Rumer Y. B., Fet A. I. Group-Theoretical Classification of Chemical Elements.— М., 1976—77.— (Препринт/АН СССР. Ин-т теорет. и эксперим. физики; 1976.— Ч. I.— 28 с.— № ИТЕР-26; 1976.— Ч. II.— 40 с.— № ИТЕР-90; 1977.— Ч. III.— 25 с.— № ИТЕР-7).
21. Fet A. I. The System of Elements from the Group-Theoretic Viewpoint.— Новосибирск, 1979.— 45 с.— (Препринт/АН СССР. Сиб. отд-ние. Ин-т неорганической химии; № 1).
22. Fet A. I. The Madelung Numbers and the System of Chemical Elements // Теоретико-групповые методы в физике. Т. 1. Тр. междунар. сем. Звенигород, 1979.— М.: Наука, 1980.— С. 327—336.
23. Gell-Mann M. California Inst. of Technology, Synchrotron Laboratory Report CSTL-20, 1961.
24. Gell-Mann M. Symmetries of Barions and Mesons // Physical Review.— 1962.— V. 125, N 3.— P. 1067—1084.
25. Gürsey F., Radicati L. A. Spin and Unitary Spin Independence of Strong Interactions // Physical Review Letters.— 1964.— V. 13, N 5.— P. 173—175.
26. Hefferlin R., Campbell R., Kuhlman H. a. o. The Periodic Table of Diatomic Molecules // J. of Quant. Spectr. and Rad. Transfer.— I: 1979.— V. 21, N 4.— P. 315—336; II: Ibid.— P. 337—354.
27. Hefferlin R., Kuhlman H. The Periodic System for Tree Diatomic Molecules. III // J. Quant. Spectr. and Rad. Transfer.— 1980.— V. 24, N 5.— P. 379—383.
28. Hefferlin R., Kutzner M. Systematics of Ground-State Potential Minima Between Two Main-Group Atoms or Ions // J. of Chemical Physics.— 1981.— V. 75, N 2.— P. 1035—1036.
29. Ne'eman Y. Derivation of Strong Interactions from a Gauge Invariance // Nuclear Physics.— 1961.— V. 26, N 2.— P. 222—229.
30. Novaro O., Berrondo M. Approximate Symmetry of the Periodic Table // J. of Physics, B.— 1972.— V. 5, N 6.— P. 1104—1110.
31. Okubo S. Note on Unitary Symmetry in Strong Interaction // Progress of Theoretical Physics.— 1962.— V. 27, N 5.— P. 949—966.
32. Pais A. Implications of Spin-Unitary Spin Independence // Phys. Rev. Letters.— 1964.— V. 13, N 5.— P. 175—177.
33. Tsu Yao. Unitary Representations of SU(2,2). I // J. of Math. Physics.— 1967.— V. 8, N 10.— P. 1934—1954.
34. Wigner E. On the Quantum Correction For Thermodynamic Equilibrium // Phys. Review.— 1932.— V. 40, June 1.— P. 749—759.