

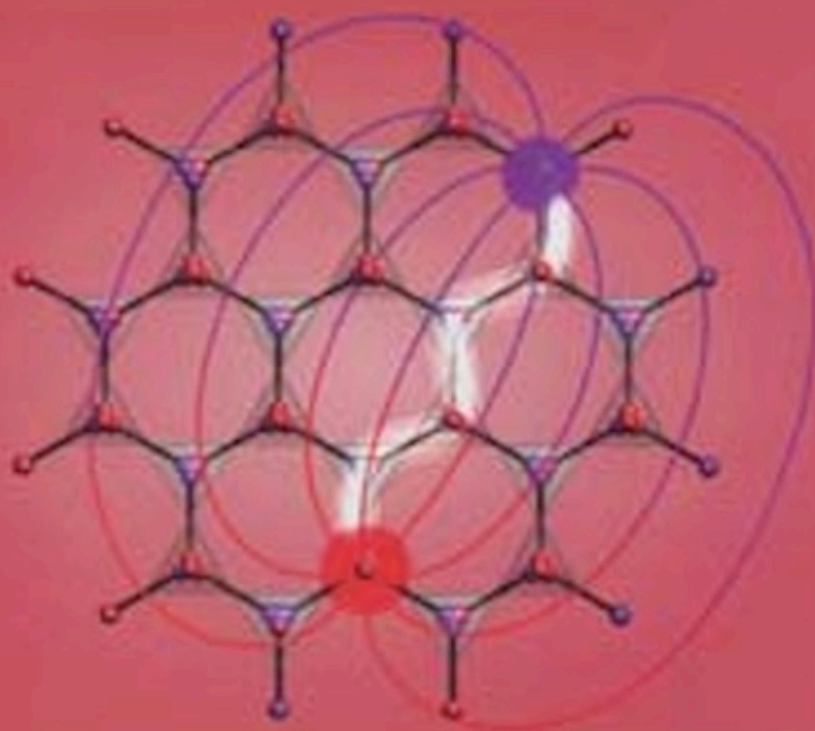
چاپ دوم

۱۰۰۰ جلد



مبانی نظریه گروه‌ها

برای فیزیکدانان



ترجمه
دکتر محسن سررشته‌ای

ا.و. جوشی

مبانی نظریهٔ گروهها
برای فیزیکدانان

ترجمهٔ

دکتر محسن سربیشه ای

فهرست مطالب کتاب

شماره صفحه	عنوان
۱۰	پیشگفتار چاپ سوم
۱۱	پیشگفتار چاپ دوم
۱۲	پیشگفتار چاپ اول
۱۵	۱- نظریه مجرد گروهها
۱۵	۱-۱. گروه چیست؟
۲۴	۱-۲. جدول ضرب
۲۸	۱-۳. عناصر مزدوج وردهها
۳۰	۱-۴. زیرگروهها
۳۶	۱-۵. ضرب مستقیم گروهها
۳۷	۱-۶. ایزومرفیزم و همومرفیزم
۴۰	۱-۷. گروههای جایگشت
۴۳	۱-۸. گروههای متمایز از یک مرتبه معین
۴۶	مسائل فصل اول
۵۲	کتاب شناسی فصل اول
۵۳	۲- فضاهای هیلبرت و عملگرها
۵۳	۲-۱. فضاهای برداری و فضاهای هیلبرت
۶۰	۲-۲. هندسه مختصات و جبر برداری در یک نمادگذاری جدید
۶۸	۲-۳. فضای توابع
۷۳	۲-۴. عملگرها

- ۸۲ ۵-۲. جمع مستقیم و ضرب مستقیم ماتریسها
- ۸۷ مسائل فصل دوم
- ۸۹ کتاب شناسی فصل دوم
- ۹۰ ۳- نظریه نمایش گروه‌های محدود
- ۹۰ ۳-۱. مقدمه
- ۹۴ ۳-۲. زیرفضاهای تغییرناپذیر و نمایشهای کاهش پذیر
- ۱۰۱ ۳-۳. لم شور و قضیه تعامد
- ۱۰۹ ۳-۴. تعبیر قضیه تعامد
- ۱۱۱ ۳-۵. مشخصه‌های یک نمایش
- ۱۱۶ ۳-۶. مثال C_{4V}
- ۱۲۵ ۳-۷. نمایش منظم
- ۱۲۷ ۳-۸. توابع پایه متقارن شده برای نمایشهای کاهش پذیر
- ۱۳۷ ۳-۹. نمایشهای کاهش پذیر دیگر
- ۱۳۹ ۳-۱۰. ضرب مستقیم نمایشها
- ۱۴۳ ۳-۱۱. نمایشهای یک گروه ضرب مستقیم
- ۱۴۹ مسائل فصل سوم
- ۱۵۲ کتاب شناسی فصل سوم
- ۱۵۳ ۴- گروه‌های پیوسته و نمایشهای آن
- ۱۵۴ ۴-۱. گروه‌های توپولوژیکی و گروه‌های لی
- ۱۶۳ ۴-۲. گروه دوران محوری $(2) SO$
- ۱۶۸ ۴-۳. گروه دوران سه بعدی $(3) SO$
- ۱۷۷ ۴-۴. گروه لورنتز
- ۱۷۹ ۴-۵. گروه یکانی خاص $(2) su$
- ۱۹۳ ۴-۶. مولدهای $U(n)$ و $su(n)$
- ۱۹۵ ۴-۷. جبر لی و نمایشهای یک گروه لی
- ۱۹۹ ۴-۸. گروه یکانی خاص $(3) su$

مسائل فصل چهارم

۲۰۴

کتاب شناسی فصل چهارم

۲۰۶

۵- نظریه گروهها در مکانیک کوانتومی (الف)

۲۰۷

۵-۱. فضاهاى هیلبرت در مکانیک کوانتومی

۲۰۸

۵-۲. تبدیلات یک تابع

۲۱۱

۵-۳. جابجاییهای فضایی و زمانی

۲۱۶

۵-۴. تقارن هامیلتونی

۲۱۹

۵-۵. کاهش ناشی از تقارن

۲۲۵

۵-۶. اغتشاش و شکافتگی تراز

۲۳۲

۵-۷. قضیه عنصر ماتریسی و قواعد گزینش

۲۳۵

۵-۸. تقارن دینامیکی

۲۳۹

۵-۹. تقارنهای وارونی زمانی و وارونی فضایی

۲۴۸

مسائل فصل پنجم

۲۵۷

کتاب شناسی فصل پنجم

۲۵۸

۶- نظریه گروهها در مکانیک کوانتومی (ب)

۲۵۹

۶-۱. تقارنهای اتمی

۲۵۹

۶-۲. قواعد انتخاب برای گذار اتمی

۲۶۹

۶-۳. اثر زیمن

۲۷۱

۶-۴. جمع اندازه حرکتهای زاویه ای

۲۷۳

۶-۵. عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر

۲۸۷

۶-۶. عناصر ماتریسی عملگرهای تانسوری

۲۹۸

مسائل فصل ششم

۳۰۳

کتاب شناسی فصل ششم

۳۰۵

۷- تقارنهای بلورشناختی و مولکولی

۳۰۶

۷-۱. گروههای نقطه ای بلورشناختی

۳۰۷

۷-۲. گروه انتقال و گروههای فضایی

۳۱۸

۳۲۳	۳-۷ . گروههای نقطه ای مولکولی
۳۲۶	۴-۷ . نمایشهای کاهش ناپذیر گروههای نقطه ای
۳۳۸	۵-۷ . گروه دوگانه
۳۴۵	۶-۷ . شکافتگی میدان بلوری ترازهای اتمی
۳۵۹	مسائل فصل هفتم
۳۵۱	کتاب شناسی فصل هفتم
۳۵۲	۸- نظریه گروهها در فیزیک حالت جامد
۳۵۲	۸-۱ . مسأله ساختار الکترونی بلورها
۳۵۴	۸-۲ . گروه انتقال و شبکه معکوس
۳۶۱	۸-۳ . نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فضایی
۳۷۳	۸-۴ . نوارهای انرژی الکترون آزاد: شبکه های یک بعدی و دو بعدی
۳۸۱	۸-۵ . نوارهای انرژی الکترون آزاد: شبکه های سه بعدی
۳۸۹	۸-۶ . نوارهای انرژی بلورهای واقعی
۳۹۸	مسائل فصل هشتم
۳۹۹	کتاب شناسی فصل هشتم
۴۰۰	ضمیمه الف: ثابتهای کشسانی بلورها
۴۰۹	ضمیمه ب: پیزوالکتریسیته و خودگیری دی الکتریک
۴۱۵	ضمیمه ج: تقارن وارونی زمانی و بتهگنی
۴۲۰	ضمیمه د: توابع و نگاشتها
۴۲۳	فهرست راهتما
۴۲۸	نام اشخاص
۴۳۰	واژه نامه
۴۳۳	مراجع و کتابشناسی

به : مادوبالا

و مان جاری

آن بی کران است، این بی کران است؛ از آن بی نهایت این بی نهایت سرچشمه
گرفته است. از آن بی نهایت، این بی نهایت را برمی داریم، باز هم بی نهایت
برجای می ماند.

ایشاواسیا اریاتیشا

پیشگفتار چاپ سوم

در چاپ حاضر چندین تغییر و اصلاح کوچک اعمال شده است. در این تغییرات نظرات و پیشنهادهای دانشجویانی که این درس را با من داشته‌اند و پیشنهادهایی که از چندین مدرّس دریافت کرده‌ام مورد نظر قرار گرفته است. چون تعیین جدولهای مشخصه، حتی برای گروههای ساده مانعی برای اکثر دانشجویان است، از این رو فصل سوم چاپ حاضر شامل یک فلوچارت است که روش تعیین جدول مشخصه یک گروه را، همراه با یک مثال که روش را بطور دقیق نشان می‌دهد، مرحله به مرحله تشریح می‌کند. یک ضمیمه درباره نگاشتها و توابع نیز به کتاب افزوده شده و از افزودن مطالب در سطح پیشرفته خودداری شده است. از بسیاری از خوانندگان به خاطر پیشنهادهای مفیدشان تشکر می‌کنم.

پیشگفتار چاپ دوم

باعث بسی خوشحالی است که اینک چاپ دوم این کتاب را انتشار می‌دهم. از این که چاپ اول این کتاب مورد توجه فیزیکدانان قرار گرفته بسیار مسرورم. درین مدت کماکان تدریس نظریه گروهها را به عهده داشته‌ام و استقبال دانشجویان مشوق من بوده است.

در چاپ حاضر چند تغییر کوچک در جای جای کتاب اعمال شده است. بخشهای ۱-۱، ۲-۱، ۱-۶، ۲-۲، ۱-۲، ۲-۲ بطور قابل ملاحظه‌ای بازنویسی شده است. به فصل چهارم یک بخش در مورد گروه لورنتز افزوده شده است.

از دکتر ر. واسودوان، که اکنون در دپارتمان ریاضی کالج مهندسی منطقه‌ای تیروچیراپالی می‌باشد، به خاطر بحثهای مفید و روشن ساختن بسیاری از نکات ریاضی قدردانی می‌کنم. همچنین از دکتر بی. پین کومار آگاروال در دپارتمان فیزیک دانشگاه الله‌آباد و دکتر تولسی داس در دپارتمان فیزیک انستیتو تکنولوژی هند، کاپور، به خاطر مکاتبات سودمند با ایشان، قدردانی می‌کنم. بالاخره از آن دسته از خوانندگانی که زحمت خواندن دقیق چاپ اول را تحمل کرده و پیشنهادهای اصلاحی داده‌اند تشکر می‌کنم.

پیشگفتار چاپ اول

یک دلیل عمده که مرا به نوشتن این کتاب وادار کرد این بود که در حال حاضر کتاب جامعی در سطح مقدماتی برای فیزیکدانها وجود ندارد. آنچه از تجربه شخصی خود در زمان دانشجویی به یاد دارم این است که برای یافتن اطلاعات مقدماتی در زمینه نظریه گروهها و نظریه نمایش مجبور بودم به دهها کتاب مراجعه کنم. آنچه مطلوب است این است که دانشجویی که می خواهد در این زمینه شروع به مطالعه کند، بتواند اغلب (یا ترجیحاً تمام) مطالب لازم را در یک کتاب، که به عنوان کتاب درسی دوره نظریه گروهها برای دانشجویان فوق لیسانس انتخاب می شود، بیابد. در راستای همین هدف است که سعی کرده ام مطالب گوناگون نظیر فضاهای برداری، فضاهای هیلبرت، عملگرها، ضرب مستقیم ماتریسها، گروههای توپولوژیکی، همبندی و فشردگی و غیره را گردآوری کنم. این مطالب مباحث ریاضی محض می باشند و یک دانشجوی رشته فیزیک مجبور است برای تسلط یافتن در این مفاهیم به دپارتمان ریاضی مراجعه کند.

با گنجاندن چنین مباحثی که برای فهم تمام مراحل کاربردهای نظریه گروهها در فیزیک بطور عام ضروری است، بعضی از مهمترین و روشن سازترین کاربردها در مکانیک کوانتومی، فیزیک اتمی و فیزیک حالت جامد نیز آورده شده است. به عنوان مثال کاربردهای عام در مکانیک کوانتومی شامل تقارن و بهنگی، اعداد کوانتومی خوب، قضیه عنصر ماتریسی، شکافتگی ترازها و قواعد انتخاب، تقارن دینامیکی، تقارن وارونی زمان و غیره می باشد.

در فیزیک اتمی، کاربردهای نظریه گروهها به قواعد انتخاب، اثر زیمن، جمع

اندازه حرکت‌های زاویه‌ای، عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر و قضیه ویگنر - اکارت مورد بحث قرار گرفته است. شکافتگی میدان بلوری تراز‌های اتمی، منطقه‌های بریلوئن و ساختار الکترونی بلورها به عنوان نمونه‌های کاربرد در فیزیک حالت جامد بررسی شده است.

هدف عمده من این بوده است که مطالب کتاب را در سطح مقدماتی ارائه کنم. به همین دلیل اغلب برای روشن شدن مطلب دقت کافی می‌پذورم نداشته‌ام. سعی شده است مطالب به گونه‌ای ارائه شود که در تمام مراحل، دانشجویان اصول بنیادی را بخوبی درک کنند. با کسب این اصول، دانشجویان می‌توانند در هر راستایی دانش خود را گسترش دهند. به عنوان مثال، فصل چهارم در گروه‌های پیوسته پایه مناسبی برای فیزیک ذرات بنیادی فراهم می‌آورد. لیکن تنها اصول بنیادی (۲) SU و (۳) SU مورد بحث قرار گرفته و به محض این که به فیزیک ذرات بنیادی می‌رسیم، موضوع را متوقف کرده‌ام.

با وجودی که چند موضوع ویژه در ضمیمه‌ها آورده شده است، خود نیز آگاهم که تعداد بسیاری از کاربردهای نظریه گروه‌ها ناگفته مانده است. از آن جمله می‌توان از نقش تقارن در ارتعاشات مولکولی، خواص مختلف بلورها، نظریه میدان بلوری، دینامیک شبکه، طرح‌های تقارنی بالاتر برای ذرات بنیادی و تعداد بسیاری کاربردهای دیگر، نام برد. لیکن، به اعتقاد من، تنها یک فرد متخصص ممکن است به این عناوین مراجعه کند؛ و لذا این کتاب در شکل کنونی اش نیاز یک دانشجوی تازه کار را بخوبی برآورده می‌سازد.

در حال حاضر، تنها تعداد خیلی کمی از دانشگاه‌های هندوستان درس نظریه گروه‌ها را برای دانشجویان فوق لیسانس (فیزیک) ارائه می‌دهند. امیدوارم دسترسی به یک کتاب مقدماتی نظیر این، هرچه بیشتر فرآیند گنجاندن نظریه گروه‌ها در فهرست دروس دوره فوق لیسانس (فیزیک) در دانشگاه‌ها را سرعت بخشد. در خلال ارائه این درس در سه سال گذشته، که بر مطالب این کتاب بنا شده بود، سعی کرده‌ام با توجه به اشکالات دانشجویان، به منظور برطرف کردن موانع آنان در ارائه مطالب تفسیراتی بدهم. امیدوارم این کتاب هم برای مدرسان و هم برای دانشجویان مفید واقع شود.

در پایان هر فصل تعداد زیادی مسأله آورده شده است. این کار به دو منظور

انجام گرفته. اولاً این امکان را به دانشجو می دهد تا ضمن درك بهتر اصول دخیل، فهم خود از درس را نیز بیازماید. ثانیاً بعضی از مسائل می تواند به عنوان تعمیمهای مطالب بررسی شده در فصل مربوطه در نظر گرفته شود. غالباً از نتایج چنین مسائلی در فصلهای بعدی استفاده شده است.

از داوران این کتاب به خاطر پیشنهادهای ارزشمندشان که در جهت بهتر شدن آن بوده است تشکر می کنم. از آقای ساندرشان کوماریال برای کمک در غلط گیری سپاسگزارم. دریافت هر گونه تذکر و پیشنهاد از طرف خوانندگان موجب خوشحالی نویسنده خواهد بود.

نظریه مجرد گروهها

پیدایش نظریه گروهها به بیش از ۱۵۰ سال قبل، در اوایل قرن نوزدهم برمی گردد. پیشرفتهای اولیه نظریه گروهها توسط ریاضیدانان مشهوری از جمله گاوس، کوشی، آبل، هامیلتون، گالوا، سیلوستر، کایلی و بسیاری دیگر انجام شده است. مع الوصف این نظریه تا پیش از ظهور مکانیک کوانتومی جدید در سال ۱۹۲۵، کاربرد زیادی در فیزیک نداشت. اما پس از آن به کاربرد نظریه گروه در فیزیک پی برده شد و این ابزار جدید در محاسبات مربوط به ساختار و طیفهای اتمی توسط عدّه‌ای از جمله اچ. ا. بت، ای. پی. ویگنر و سایرین مورد استفاده قرار گرفت. امروزه استفاده از نظریه گروهها در اغلب شاخه‌های فیزیک و شیمی فیزیک اجتناب ناپذیر است.

اگرچه یک ریاضیدان عموماً به نظریه انتزاعی گروهها بیشتر توجه دارد، برای یک فیزیکدان نظریه نمایشی گروههاست که مورد استفاده مستقیم در فیزیک کوانتومی و سایر شاخه‌های فیزیک می‌باشد. در این فصل تنها جنبه‌هایی از نظریه انتزاعی گروهها را بررسی خواهیم کرد که برای فهم نظریه نمایشی مورد نیاز است، این نظریه در فصل سوم برای گروههای محدود و در فصل چهارم برای گروههای پیوسته دنبال خواهد شد.

۱-۱ گروه چیست؟

مجموعه تمام اعداد صحیح $I = \{ \dots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3, \dots \}$ را

در نظر بگیرید، برای این مجموعه چهار خاصیت زیر را می‌توان در نظر گرفت: (الف) مجموع هر دو عضو مجموعه I خود یک عدد صحیح است و لذا به مجموعه تعلق دارد، (ب) مجموعه شامل یک عنصر 0 می‌باشد که صفر نامیده می‌شود و دارای این خاصیت است که برای هر عضو m از I داریم $m+0=0+m=m$ ، (ج) برای هر عنصر m از I ، یک عنصر منحصر بفرد n وجود دارد که به I تعلق داشته و داریم: $m+n=n+m=0$ ؛ مسلماً $n=-m$ ، (د) اگر m ، n و p سه عنصر از I باشند در این صورت $m+(n+p)=(m+n)+p$ یعنی، قانون جمع شرکت پذیر است.

یک مجموعه دیگر را در نظر بگیرید: مجموعه $U(n)$ ، تمام ماتریسهای یکانی مرتبه n ، که در آن n یک عدد صحیح مشخص و محدود است. این مجموعه دارای چهار خاصیت زیر است: (الف) اگر U و V دو ماتریس یکانی مرتبه n دلخواه باشد، حاصلضرب UV آنها نیز یک ماتریس یکانی مرتبه n است و لذا به مجموعه $U(n)$ تعلق دارد، (ب) این مجموعه شامل ماتریس یک I است با خاصیت $UI=IU=U$ ، به ازای هر $U \in U(n)$ ، (ج) اگر U یک عنصر از $U(n)$ باشد، یک عنصر منحصر بفرد V متعلق به $U(n)$ وجود دارد بطوری که $UV=VU=I$ ، (د) اگر U ، V و W سه عنصر از این مجموعه باشند، $U(VW)=(UV)W$. توجه کنید چهار خاصیتی که اعضای دو مجموعه فوق در آنها صدق می‌کنند از نظر ماهیت بسیار شبیه به هم می‌باشند. در واقع، این خواص یک گروه را تعریف می‌کنند و هر دو مجموعه‌ای که در بالا مورد بحث قرار گرفت مثالهایی از یک گروه می‌باشند.

بطور مجرد یک گروه مجموعه‌ای از عناصر متمایز $G = \{E, A, B, C, D, \dots\}$ است که دارای یک قانون ترکیب (نظیر جمع، ضرب، ضرب ماتریس و ...) است بطوری که خواص زیر برقرار باشد:

(الف) از ترکیب هر دو عنصر A و B از G عنصری متعلق به G به دست آید.

بنابراین،

$$A \circ B \in G, B \circ A \in G \quad (1-1)$$

ترکیب دو عنصر از G را توسط نشانه \circ نمایش داده ایم. بطور نمادی می‌توان نوشت:

$$A \circ B \in G \forall A, B \in G.$$

این خاصیت به خاصیت بستاری گروه موسوم است و می‌گوییم که مجموعه تحت قانون ترکیب بسته است.

(ب) یک عنصر همانی $E \in G$ وجود داشته باشد. بطوری که برای تمام عناصر A از G ، $(A \in G)$:

$$E \circ A = A \circ E = A \quad (2-1)$$

بطور نمادی
 $\exists E \in G \ni E \circ A = A \circ E = A \forall A \in G$
 E را عنصر همانی G می‌نامیم.

(ج) برای هر عنصر A از G ، $(A \in G)$ ، یک عنصر منحصر بفرد B ، $(B \in G)$ وجود داشته باشد بطوری که

$$A \circ B = B \circ A = E \quad (3-1)$$

بطور نمادی
 $\forall A \in G \exists B \in G \ni A \circ B = B \circ A = E$
 B را معکوس A می‌نامیم، در این صورت A نیز معکوس B خواهد بود.

(د) قانون ترکیب عناصر گروه شرکت پذیر است، یعنی برای هر A ، B ، C متعلق به G :

$$A \circ (B \circ C) = (A \circ B) \circ C. \quad (4-1)$$

بطور نمادی
 $A \circ (B \circ C) = (A \circ B) \circ C \forall A, B, C \in G.$

تعداد عناصر یک گروه، مرتبه گروه نامیده می‌شود. یک گروه که شامل تعداد محدودی عنصر باشد یک گروه محدود نامیده می‌شود؛ گروهی که شامل تعداد بی‌نهایت عنصر باشد یک گروه نامحدود نامیده می‌شود. یک گروه نامحدود ممکن است گسسته یا پیوسته باشد: اگر تعداد عناصر در گروه بی‌نهایت شمارش پذیر باشد (نظیر تعداد کلیه اعداد صحیح) گروه گسسته است، اگر تعداد عناصر گروه شمارش پذیر نباشد (نظیر مجموعه اعداد حقیقی)، گروه پیوسته است.

نمونه‌های دیگری از گروهها عبارتند از:

(i) گروه مرتبه دو متشکل از اعداد حقیقی ۱ و -۱ - که قانون ترکیب آن همان ضرب

معمولی است.

(ii) گروه مرتبه چهار متشکل از اعداد مختلط $1, i, -1, -i$ (که در آن $i^2 = -1$)

است، تحت عمل ضرب.

(iii) گروه نامحدود گسسته تمام اعداد حقیقی صحیح که در بالا بحث شد. قانون

ترکیب همان جمع است و عنصر همانی 0 .

(iv) مجموعه تمام اعداد حقیقی با عمل جمع. این یک گروه پیوسته با عنصر

همانی 0 است. معکوس عنصر b منهای آن، یعنی $-b$ است.

(v) مجموعه تمام اعداد حقیقی مثبت تحت ضرب. عنصر همانی است و

معکوس x عبارت است از: $\frac{1}{x}$.

(vi) مجموعه یک نقطه ای که شامل تنها واحد است یک گروه مرتبه یک تحت عمل

ضرب تشکیل می دهد.

(vii) مجموعه دو ماتریس $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ و $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ تحت ضرب ماتریسی.

(viii) مجموعه تمام ماتریسهای مربعی غیر تکیه مرتبه n (n یک عدد صحیح مثبت

است) تحت ضرب ماتریسی.

(ix) اگر k یک عدد صحیح مثبت باشد، مجموعه $(0, 1, 2, \dots, k-1)$ متشکل از

k عدد صحیح با عمل جمع به مدول (k) تشکیل یک گروه می دهند.^۲ عنصر همانی صفر و

معکوس عنصر $k-r$ ، r است.

(x) اگر p یک عدد اول بزرگتر از 1 باشد، مجموعه $(1, 2, \dots, p-1)$ متشکل از

$(p-1)$ عدد صحیح، تحت ضرب به مدول (p) یک گروه تشکیل می دهند. عنصر همانی

1 و معکوس عنصر r عبارت است از: $\frac{sp+1}{r}$ که در آن s کوچکترین عدد صحیحی است

^۲ عدد n به مدول (k) عبارت است از باقیمانده تقسیم n بر k . بنابراین 10 به مدول (6) برابر 4 و 3

به مدول (3) برابر صفر است. در مثال (ix)، فرض کنید $k=6$ باشد در این صورت $3+4=1$ و $5+1=0$

والی آخر.

^۳ به زیرنویس قبلی توجه کنید. در این مثال با فرض $p=7$ ، داریم: $5=3+4$ و $7=2+5$ و ...

معکوس 4 برابر 2 است زیرا $4 \cdot 2 = 1$.

که $(sp+1)$ بر Γ بخش پذیر باشد.

(xi) مجموعه تمام ماتریسهای مرتبه $m \times n$ تحت جمع ماتریسی. عنصر همانی،

ماتریس صفر مرتبه $m \times n$ است و معکوس عنصر A منفی آن، یعنی $-A$ است.

در مثالهای بالا به دو قانون بنیادی ترکیب برخورد کردیم - جمع و ضرب - که هر دو

هم به اسکالرها و هم به ماتریسها نسبت داده شد. وقتی قانون ترکیب یک گروه جمع باشد،

معکوس یک عنصر معکوس جمعی نامیده می شود و هرگاه قانون ترکیب، ضرب باشد

معکوس یک عنصر معکوس ضربی نامیده می شود. بدین ترتیب اگر x یک عدد باشد، x^{-1}

معکوس جمعی آن و $\frac{1}{x}$ معکوس ضربی آن خواهد بود، به شرط آن که $x \neq 0$ باشد. اگر A

یک ماتریس باشد، A^{-1} معکوس جمعی و A^{-1} معکوس ضربی آن است به شرط این که A

غیر تکنیه باشد. همین طور در مورد گروه اعداد، 0 عضو همانی جمع و 1 عضو همانی

ضرب است و در مورد گروه ماتریسها، ماتریس صفر (از مرتبه مناسب) عضو همانی جمع و

ماتریس واحد (از مرتبه مناسب) عضو همانی ضرب می باشد.

از این به بعد نشانه \circ را حذف خواهیم کرد و به عنوان مثال AB را به جای $A \cdot B$

خواهیم نوشت. همین طور، اغلب کلمه «ضرب» را به جای «ترکیب» گروه به کار

می بریم.

ضرب عناصر گروه الزاماً جابجایی نیست، یعنی عموماً $BA \neq AB$. اگر تمام

عناصر خاصیت جابجایی داشته باشند، گروه را گروه آبدلی می نامیم. همان طوری که

خواهیم دید چنین گروههایی اهمیت زیادی دارند. تمام گروههایی که در بالا در نظر

گرفتیم، بجز گروه $U(n)$ - ماتریسهای یکانی مرتبه n و گروه ماتریسهای غیر تکنیه مرتبه n

همگی گروههای آبدلی هستند.

۱-۱-۱ گروه تبدیلات

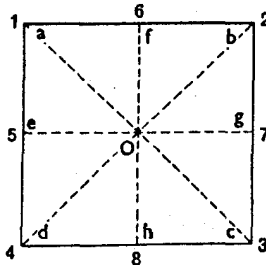
گروههای تبدیلات سیستمهای فیزیکی برای یک فیزیکدان اهمیت ویژه ای دارند^۴.

تبدیلی که سیستم فیزیکی را تغییر نمی‌دهد، یک تبدیل متقارن سیستم نامیده می‌شود. بدین ترتیب، هر دوران یک دایره حول محوری که عمود بر صفحه دایره و از مرکز آن می‌گذرد یک تبدیل متقارن است. جایگشت دو اتم یکسان در یک مولکول یک تبدیل متقارن برای مولکول است.

اکنون نشان می‌دهیم که مجموعه تمام تبدیلهای متقارن یک سیستم یک گروه تشکیل می‌دهند. ابتدا توجه کنید که اگر دو تبدیل متقارن سیستم را متوالیاً انجام دهیم، سیستم تغییرناپذیر می‌ماند. بنابراین ترکیب هر دو تبدیل متقارن سیستم خود یک تبدیل تقارنی است، یعنی، مجموعه موردنظر تحت قانون تبدیلات متوالی بسته است. می‌توانیم یک تبدیل همانی تعریف کنیم که سیستم را تغییر نمی‌دهد، و مسلماً این تبدیل به مجموعه تعلق دارد. ملاحظه می‌کنیم که برای یک تبدیل متقارن معین، یک تبدیل معکوس وجود دارد که این نیز متعلق به مجموعه است. بالاخره تبدیلات متوالی سیستم از قانون شرکت پذیری تبعیت می‌کنند. بدین ترتیب ثابت می‌شود که مجموعه موردنظر یک گروه است. گروه کلیه تبدیلات تقارنی یک سیستم گروه تقارنی سیستم نامیده می‌شود.

۲-۱-۱ گروه تقارنی یک مربع

فرض کنید از یک مقوای یک مربع به صورت نشان داده شده در شکل (۱-۱) بریده‌ایم. حال نقاط مختلف مربع را مطابق شکل علامت گذاری می‌کنیم: گوشه‌های مربع را با a, b, c, d ، وسطهای اضلاع را با e, f, g, h ، و مرکز آن با O نشان

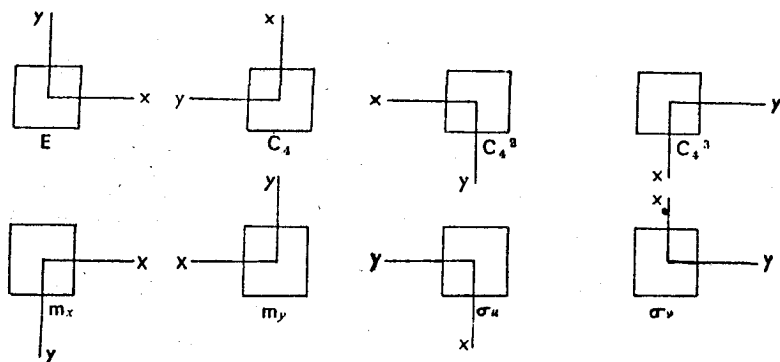


شکل ۱-۱ محورهای صفحات تقارن یک مربع.

می دهیم. نقاط شماره گذاری شده توسط ۱، ۲، ۸۰۰۰ روی صفحه کاغذ ثابت شده اند (این اعداد روی مربع قرار ندارند). حال فرض کنید مربع را به اندازه یک زاویه قائمه حول خطی که بر مربع عمود است و از 0 می گذرد دوران دهیم. در این صورت بجز علامتهای a, b, \dots, h هیچ گونه تغییری در مربع احساس نخواهیم کرد. کلیه چنین تبدیلات تقارنی این مربع (نظیر دوران یا انعکاس، بدون تا کردن یا بریدن آن) را که وضعیت مرزهای آن را تغییر نمی دهد ولی یک وضعیت متمایز برای نقاط علامت گذاری شده a, b, \dots, h به وجود می آورد، در نظر بگیرید. قبل از برشمردن کلیه این نوع تبدیلات مناسب است چند کلمه ای دربارهٔ نمادگذاری ای که مورد استفاده قرار خواهیم داد بیان کنیم.

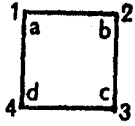
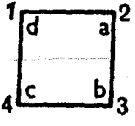
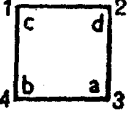
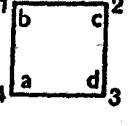
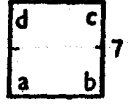
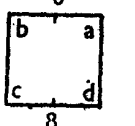
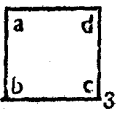
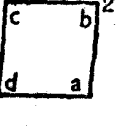
اگر دورانی به اندازه زاویه $\frac{2\pi}{n}$ (n یک عدد صحیح مثبت است) حول یک محور سیستم را تغییر نپذیر بگذارد، این محور را محور تقارن n گانه سیستم نامیده و عمل مربوطه را با C_n نمایش می دهیم. توانهای صحیح آن، که خود نیز تبدیلات تقارنی سیستم می باشند، با C_n^k نشان داده می شوند؛ C_n^k معرف k عمل متوالی C_n روی سیستم، یا دوران $\frac{2\pi k}{n}$ حول این محور است. انعکاس در یک صفحه توسط m یا σ همراه با نماد فوقانی که مشخص کنندهٔ صفحهٔ انعکاس است نمایش داده می شود. تبدیل همانی با E نمایش داده می شود.

وقتی تبدیلات تقارنی یک مربع را که در جدول (۱-۱) آورده شده اند برمی شمیریم نمادگذاری خلاصه شدهٔ «انعکاس در یک خط» را به کار می بریم که به معنی «انعکاس در



شکل ۱-۲ هم ارزی تبدیلات یک مربع با تبدیلات یک دستگاه مختصات دکارتی.

جدول ۱-۱ تبدیلات تقارنی یک مربع

نشانه	عمل	
E	همانی	
C_4	دوران به اندازه ۹۰ درجهت عقربه‌های ساعت حول محوری که بر صفحه مربع عمود و از ۰ می‌گذرد.	
C_4^2	دوران به اندازه ۱۸۰ درجه حول محور بالا.	
C_4^3	دوران به اندازه ۲۷۰ درجهت عقربه‌های ساعت حول همان محور	
m_x	انعکاس در خط 5-7	
m_y	انعکاس در خط 6-8	
σ_u	انعکاس در خط 1-3	
σ_v	انعکاس در خط 2-4	

صفحه عمود بر مربع است که از خط موردنظر می گذرد.

می توان مشاهده کرد که اعمال نشان داده شده در جدول (۱-۱) تمام تبدیلات تقارنی یک مربع را شامل می شود، یعنی، تبدیل دیگری وجود ندارد که مربع را در همان وضعیت قرار بدهد و درعین حال یک نمادگذاری متمایز جدیدی برای نقاط a, b, c, \dots, h بدهد. ممکن است تصور کنید انعکاس نسبت به نقطه O یک تبدیل جدیدی است، اما می توان بسادگی ثابت کرد که با C_4^2 یکسان است.

قابل توجه است که این هشت تبدیل متناظرند با هشت طریق مختلفی که می توانیم یک دستگاه مختصات دکارتی که محورهای آن با اضلاع مربع موازیند انتخاب کنیم. اینها در شکل (۱-۲) نشان داده شده است. می توانیم دستگاه مختصات را ثابت نگه داشته و مربع را تبدیل کنیم، که دوران فعال نامیده می شود یا مربع را ثابت نگه داریم و دستگاه مختصات را تبدیل کنیم، که دوران غیرفعال نامیده می شود. باید توجه داشت که یک تبدیل در دوران فعال هم ارزش تبدیل معکوس در دوران غیرفعال است.

بنابراین اگر در دوران فعال C_4 را به عنوان یک دوران مربع در جهت عقربه های ساعت تعریف کنیم، در دوران غیرفعال، C_4 به معنی یک دوران دستگاه مختصات در خلاف جهت عقربه های ساعت است. این قرارداد در سرتاسر این کتاب به کار خواهد رفت و صریحاً در شکل (۱-۲) نشان داده شده است.

می توان بسادگی ثابت کرد که مجموعه هشت تبدیل جدول (۱-۱) یک گروه است که گروه تقارنی یک مربع نامیده می شود. عمل C_4 و پس از آن عمل σ_{II} روی مربع را در نظر بگیرید این را می توان به صورت زیر دید:

$$\sigma_{II} C_4 \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = \sigma_{II} \begin{bmatrix} d & a \\ c & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d & c \\ a & b \end{bmatrix} = m_x \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} \quad (5-1)$$

که در نمادگذاری با عملگرها آن را می توان به صورت زیر نوشت:

$$\sigma_{II} C_4 = m_x, \quad (6-1)$$

یعنی: اعمال C_4 و σ_u روی مربع یادرواقع روی هرسیستمی نتایج یکسانی می‌دهند. معکوس یک عمل، عملی است که اثر آن را خستی کند. عمل متوالی $C_4^3 C_4$ روی یک مربع را در نظر بگیرید.

$$C_4^3 C_4 \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = C_4^3 \begin{bmatrix} d & a \\ c & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} \quad (7-1)$$

اگر C_4 و C_4^3 را به ترتیب عکس اعمال کنیم همان نتیجه را به دست خواهیم آورد. بنابراین برطبق (۳-۱)، C_4 معکوس C_4^3 است و بالعکس. در نمادگذاری عملگری می‌توان نوشت:

$$(C_4)^{-1} = C_4^3 \quad \text{یا} \quad C_4 C_4^3 = C_4^3 C_4 = E. \quad (8-1)$$

یا

به عنوان تمرین دانشجویان می‌توانند نشان دهند هر یک از این هشت تبدیل تقارنی دارای یک معکوس است که دقیقاً یکی از همین هشت تبدیل می‌باشد. بالاخره این تبدیلات از قانون شرکت پذیری تبعیت می‌کنند، لذا، مجموعه تبدیلات تقارنی یک مربع یک گروه تشکیل می‌دهند یک گروه تقارنی یک مربع که از مرتبه هشت می‌باشد در بلورشناسی با C_{4v} نشان داده می‌شود.

۲-۱ جدول ضرب

اعمال زیر را در نظر بگیرید.

$$C_4 m_x = \sigma_u, \quad \sigma_u C_4^3 = m_y, \\ \sigma_u \sigma_v = C_4^2, \quad \dots$$

۵- گروه‌های نقطه ای بلورشناسی در فصل هفتم مورد بحث قرار خواهند گرفت. اگر به جای انعکاسها، دوراناتها به اندازه π حول چهار خط شکل (۱-۱) را در نظر بگیریم، گروه D_4 را داریم که این نیز یک گروه تقارنی مربع است و دارای هشت عنصر است ($E, C_4, C_4^2, C_4^3, C_2, C_2', C_2'', C_2'''$) که C_{2v} معرف دوران دوگانه حول خط v -۵، و ... است، برای جزئیات بیشتر به فصل ۷ رجوع کنید.

کلیه چنین ضربهای عناصر گروه را می توان توسط یک جدول که جدول ضرب گروه نامیده می شود نمایش داد. این جدول برای گروه تقارنی یک مربع، C_{4v} ، در جدول (۲-۱) نشان داده شده است. توجه کنید که در چند عمل متوالی نظیر ... ABC، ترتیب عمل از راست به چپ است. بنابراین در حاصلضرب $C_4 m_x$ ، m_x عمل اول و C_4 عمل دوم است. ازین رو جزء $C_4 m_x$ در جدول (۲-۱) در ستون متناظر با m_x و سطر متناظر با C_4 خواهد بود.

ترتیب سطرها و ستونها در نوشتن جدول ضرب یک گروه اهمیتی ندارد. ترتیبی که در این سطرها انتخاب کرده ایم با ترتیبی که برای ستونها نوشته ایم متفاوت است. ترتیب به گونه ای است که یک عنصر در ستون اول (عمل دوم) معکوس عنصر متناظر در سطر اول (عمل اول) باشد. اگر جدول ضرب به این طریق نوشته شود، قطر اصلی تنها شامل عنصر همانی E است. مزیت این ترتیب در بخش ۳-۷ روشن خواهد شد.

جدول ۱-۲ جدول ضرب برای گروه C_{4v} .

عمل اول عمل دوم	عمل اول							
	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_x	m_y	σ_u	σ_v
E	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_x	m_y	σ_u	σ_v
C_4^3	C_4^3	E	C_4	C_4^2	σ_v	σ_u	m_x	m_y
C_4^2	C_4^2	C_4^3	E	C_4	m_y	m_x	σ_v	σ_u
C_4	C_4	C_4^2	C_4^3	E	σ_u	σ_v	m_y	m_x
m_x	m_x	σ_v	m_y	σ_u	E	C_4^2	C_4^3	C_4
m_y	m_y	σ_u	m_x	σ_v	C_4^2	E	C_4	C_4^3
σ_u	σ_u	m_x	σ_v	m_y	C_4	C_4^3	E	C_4^2
σ_v	σ_v	m_y	σ_u	m_x	C_4^3	C_4	C_4^2	E

۱-۲-۱ قضیه تجدید آرایش

باتوجه به جدول ضرب (۲-۱) ملاحظه می کنیم که هر عنصر گروه یک بار و فقط

یک بار در هر ستون ظاهر شده است. این به قضیه تجدید آرایش موسوم است. ترتیب عناصر در هر سطر (ستون) با ترتیب عناصر در سطر (ستون) دیگر متفاوت است.

برای اثبات این قضیه ابتدا نشان می‌دهیم که هیچ عنصری نمی‌تواند بیش از یکبار در یک سطر یا ستون قرار گیرد. زیرا فرض کنید عنصر D در ستون متناظر با عنصر A دو بار تکرار شود. این بدان معنی است که دو عنصر، مانند: B و C ، وجود دارند بطوری که

$$BA=D \text{ و } CA=D.$$

با ضرب از چپ در A^{-1} داریم:

$$B=DA^{-1}, C=DA^{-1},$$

که نشان می‌دهد $B=C$ که برخلاف این فرض است که عناصر گروه از یکدیگر متمایزند. همین طریق استدلال می‌تواند برای نشان دادن این که هیچ عنصری نمی‌تواند بیش از یکبار در یک سطر اتفاق بیفتد مورد استفاده قرار گیرد.

اکنون قسمت دوم بسادگی اثبات می‌شود: چون هیچ عنصری نمی‌تواند بیش از یکبار در یک سطر یا ستون قرار گیرد و چون تعداد جاهایی که باید در هر ستون پر شود با مرتبه گروه برابر است، هر عنصر باید یکبار و فقط یکبار در هر سطر و در هر ستون قرار گیرد. بدین ترتیب اثبات کامل می‌شود.

یک نتیجه مهم این قضیه این است که اگر f هر تابعی از عناصر گروه باشد، در این

صورت

$$\sum_{A \in G} f(A) = \sum_{A \in G} f(AB), \quad (9-1)$$

که در آن B یک عنصر از گروه محدود G است و جمع بندی روی تمام عناصر گروه انجام می‌شود.

۲-۲-۱ مولدهای یک گروه محدود

می‌توان با شروع از مجموعه مشخصی از عناصر یک گروه که در چند رابطه صدق

می کنند کلیه عناصر گروه را به دست آورد. کوچکترین مجموعه عناصری را در نظر بگیرید که توانها و حاصلضربهایشان تمام عناصر گروه را بدهد. عناصر این مجموعه را مولدهای گروه می نامیم. در این جا فقط گروههای محدود را بررسی می کنیم و به وسیله دو مثال مطلب را روشن می سازیم.

مثال ۱ - می خواهیم با شروع از یک عنصر A که فقط در رابطه $A^n = E$ صدق می کند بطوری که n کوچکترین عدد صحیحی است که درین رابطه صدق می کند، یک گروه تشکیل دهیم.

چون A یک عضو گروه است، تمام توانهای صحیح آن نیز باید اعضای گروه باشند. بدین ترتیب، عناصر جدید A^2, A^3, \dots را ایجاد می کنیم و این عمل در $A^n = E$ متوقف می شود. توانهای بالاتر A عناصر جدیدی نخواهند داد زیرا $A^{n+k} = A^k$. بنابراین گروه مورد نظر عبارت است از: $(A, A^2, \dots, A^{n-1}, A^n = E)$ که مرتبه آن n است.

مثال ۲ - می خواهیم از دو عنصر A و B که در روابط:

$$A^2 = B^3 = (AB)^2 = E.$$

صدق می کنند یک گروه ایجاد کنیم.

این گروه باید شامل عناصر E, A, B و B^2 باشد زیرا $A^2 = E$ و $B^3 = E$ است. اما باید شامل تمام حاصلضربهای A, B و B^2 نیز باشد. لذا دو عنصر جدید گروه AB و BA را نیز به دست می آوریم. می توان نشان داد که A و B جابجاپذیر نیستند زیرا اگر چنین باشد از رابطه $(AB)^2 = E$ داریم:

$$E = ABAB = A^2B^2 = B^2,$$

که درست نیست. لذا AB و BA عناصر متمایزی هستند. بدین ترتیب شش عنصر گروه را ایجاد کردیم E, A, B, B^2, AB, BA .

اکنون می توان نشان داد که این مجموعه یک گروه است، یعنی با عمل ضرب بسته است. فرض کنید می خواهیم نشان دهیم که حاصلضرب $(AB)B = AB^2$ به این مجموعه تعلق دارد. از رابطه $(AB)^2 = E$ داریم: $(AB)^{-1} = AB$ یا $B^{-1}A^{-1} = AB$ یا $AB = B^{-1}A$ زیرا، $A^2 = E$ ، اما از $B^3 = E$ ، داریم: $B^{-1} = B^2$ لذا

$AB=B^2A$. با استفاده از این داریم:

$$(AB)B=B^2AB=B^2B^2A=BA,$$

که محققاً متعلق به این مجموعه است. همین طور می توان ثابت کرد که معکوس هر عنصر این مجموعه نیز به مجموعه تعلق دارد. لذا گروه مورد نظر عبارت است از: (E, A, B, B^2, AB, BA) ، که مرتبه آن شش است.

مولدهای گروه منحصر بفرد نیستند، می توان آنها را به طرق مختلف انتخاب کرد. بنابراین به عنوان مثال، گروه مرتبه شش مثال دوم فوق می تواند توسط هر یک از مجموعه مولدهای زیر ایجاد شود:

(A, B) ، (A, B^2) ، (A, AB) ، (A, AB) ، (B, AB) ، و غیره. به مسأله (۱-۲۳) مراجعه

کنید.

۳-۱ عناصر مزدوج ورده ها

رابطه نظیر:

$$A^{-1}BA=C, \quad (10-1)$$

را که در آن A ، B و C عناصر یک گروه هستند، در نظر بگیرید. وقتی چنین رابطه ای بین دو عنصر B و C برقرار باشد گوئیم که این دو عضو مزدوج یکدیگرند. این عمل را تبدیل تشابه B به وسیله A ، می نامیم. واضح است که:

$$ACA^{-1}=B. \quad (11-1)$$

سادگی می توان چنین روابطی بین عناصر گروه C_{4v} به دست آورد. بنابراین رابطه

$$C_4^{-1}m_x C_4 = m_y, \quad (12-1)$$

نشان می دهد که m_x و m_y مزدوج یکدیگرند.

سادگی می توان نشان داد که اگر B مزدوج C و B مزدوج D نیز باشد، در این صورت C و D عناصر مزدوج هستند، یا B ، C و D همگی مزدوج یکدیگرند.

بلافاصله نتیجه می شود که می توان یک گروه را به مجموعه هایی تجزیه کرد بطوری که همه عناصر یک مجموعه مزدوج یکدیگر باشند ولی هیچ دو عنصری که متعلق به

دو مجموعه متفاوت هستند مزدوج یکدیگر نباشند. در واقع چنین مجموعه‌هایی از عناصر رده‌های مزدوجی یا رده‌های یک گروه می‌گیریم. عنصر همانی E در هر گروه به تنهایی تشکیل یک رده می‌دهد زیرا برای هر عنصر A داریم $A^{-1}EA = E$. به عنوان تمرین به عهده دانشجویان می‌گذاریم که نشان دهند رده‌های C_{4v} عبارتند از:

$$(E), (C_4, C_4^3), (C_4^2), (m_x, m_y), (\sigma_u, \sigma_v). \quad (1-13)$$

در موردی که با گروه‌های تبدیلاتی سر و کار داریم که از دورانها، انعکاسها و وارونی یک سیستم فیزیکی تشکیل شده‌اند قواعد ساده‌ای وجود دارد که امکان می‌دهد بدون محاسبات صریح برای تمام عناصر گروه، رده‌های آنها را تعیین کنیم. این قواعد عبارتند از:

(i) دورانهای به اندازه زوایای متفاوت باید به رده‌های متفاوتی تعلق داشته باشند. بنابراین C_4 و C_4^2 از C_{4v} به رده‌های مختلف تعلق دارند (مسأله ۱ - ۱۷ را ببینید).

(ii) دورانهای در جهت عقربه‌های ساعت و در جهت خلاف عقربه‌های ساعت حول یک محور و به اندازه یک زاویه فقط و فقط زمانی متعلق به یک رده هستند که تبدیلی در گروه وجود داشته باشد که جهت محور را معکوس کند یا جهت دستگاه مختصات دکارتی را عوض کند (یعنی دستگاه راست گرد را به چپ گرد یا بالعکس تبدیل کند). بدین ترتیب C_4 و C_4^3 از C_{4v} به یک رده تعلق دارند زیرا یک انعکاس (نظیر m_x یا σ_u) جهت دستگاه مختصات را عوض می‌کند.

(iii) دورانهای به یک اندازه حول دو محور متفاوت یا انعکاس در دو صفحه متمایز فقط و فقط زمانی به یک رده تعلق دارند که این دو محور یا این دو صفحه بتوانند توسط عنصری از گروه به یکدیگر تبدیل شوند. بنابراین m_x و m_y به یک رده تعلق دارند زیرا خط ۵-۷ شکل (۱-۱) می‌تواند با اعمال C_4 به خط ۸-۶ برسد، σ_u و m_x به یک رده تعلق ندارند زیرا هیچ عملی در C_{4v} وجود ندارد که خط ۳-۱ را به خط ۷-۵ برساند.

این روشهای ساده در به دست آوردن رده‌های گروه‌های نقطه‌ای بلورشناسی و مولکولی به وسیله تجسس بسیار مفیدند.

۱-۳-۱ ضرب رده ها

ضرب دو رده را به صورت زیر تعریف می کنیم. فرض کنید $C_i = (A_1, A_2, \dots, A_m)$ و $C_j = (B_1, B_2, \dots, B_n)$ دو رده (که ممکن است یکسان یا مختلف باشند) از یک گروه با m و n عضو باشند. حاصلضرب این دو رده را به صورت مجموعه ای که شامل حاصلضرب هر عنصر از C_i در تمام عناصر C_j باشد تعریف می کنیم. هر عنصر را به تعداد همان دفعاتی که در حاصلضرب وارد می شود وارد می کنیم. بنابراین:

$$C_i C_j = (A_1 B_1, A_1 B_2, \dots, A_1 B_n, \dots, A_m B_1, \dots, A_m B_n). \quad (14-1)$$

سادگی می توان نشان داد که مجموعه $C_i C_j$ از رده های کامل تشکیل شده است. کافی است نشان دهیم که اگر عنصر $A_l B_k$ به مجموعه $C_i C_j$ تعلق داشته باشد، هر عنصر مزدوج $A_l B_k$ نیز به این مجموعه تعلق دارد. یک عنصر مزدوج $A_l B_k$ نسبت به یک عنصر X از گروه G را در نظر بگیرید:

$$\begin{aligned} X^{-1}(A_l B_k)X &= (X^{-1}A_l X)(X^{-1}B_k X) \\ &= A_r B_s, \end{aligned} \quad (15-1)$$

که در آن، بنا به تعریف رده، A_l به A_r و C_i به B_s و C_j تعلق دارد. لذا $A_r B_s$ به مجموعه $C_i C_j$ تعلق خواهد داشت.

در این صورت می توانیم ضرب دو رده یک گروه را به عنوان یک جمع رده های کامل گروه بیان کنیم.

$$C_i C_j = \sum_k a_{ijk} C_k, \quad (16-1)$$

که در آن a_{ijk} ها اعداد صحیح غیرمنفی هستند که تعداد دفعاتی که رده C_k در حاصلضرب $C_i C_j$ وارد شده است را می دهد و جمع بندی روی تمام رده های گروه می باشد.

۱-۴ زیر گروهها

یک مجموعه H را یک زیر گروه از گروه G گوئیم چنانچه H خود تحت همان قانون ترکیب G یک گروه باشد و تمام عناصر H در G نیز باشند.

به عنوان مثال، چهار عنصر (E, C_4, C_4^2, C_4^3) از C_{4v} را در نظر بگیرید.

بسادگی می توان نشان داد که این مجموعه در تمام اصول موضوعی که یک گروه را تعریف می کنند، صدق می کند، لذا این یک زیرگروه C_{4v} است، مثالهای دیگری از زیرگروههای C_{4v} عبارتند از: (E, C_4^2, m_x, m_y) ، (E, O_H) و غیره.

هر گروه G دارای دو زیرگروه بدیهی است - عنصر همانی و خود گروه G - . یک زیرگروه H از G ، زیرگروه خاص نامیده می شود اگر $H \neq G$ باشد، یعنی اگر G عناصر بیشتری از H داشته باشد.

اگر رده های دو زیرگروه (E, C_4, C_4^2, C_4^3) و (E, C_4^2, m_x, m_y) را حساب کنیم درمی یابیم که در هر دوی این گروهها، هر عنصر خود تشکیل یک رده می دهد (مسأله ۱-۱۲ را ببینید). عناصر C_4 و C_4^3 به یک رده در گروه (E, C_4, C_4^2, C_4^3) تعلق ندارند زیرا عملی در این گروه وجود ندارد که جهت دستگاه مختصات را تغییر دهد. همین طور m_x و m_y در گروه (E, C_4^2, m_x, m_y) به یک رده تعلق ندارند زیرا عملی در گروه وجود ندارد که محور x را به y تبدیل کند. بنابراین حائز اهمیت است که توجه شود عناصری که در گروه بزرگتر به یک رده تعلق دارند ممکن است در زیرگروه کوچکتر به یک رده تعلق نداشته باشند.

۱-۴-۱ گروههای دوره ای

اگر A عنصری از یک گروه G باشد، تمام توانهای صحیح A نظیر A^2 ، A^3 و ... نیز باید به G تعلق داشته باشند. اگر G یک گروه محدود باشد باید یک عدد صحیح متناهی مانند n وجود داشته باشد بطوری که:

$$A^n = E, \quad (17-1)$$

عنصر همانی باشد. کوچکترین عدد صحیح مثبت غیر صفری که در $(17-1)$ صدق می کند مرتبه عنصر A نامیده می شود.

گروه $(A, A^2, A^3, \dots, A^n = E)$ که قبلاً در مثال ۱ از بخش (۱-۲-۲) مورد بحث قرار دادیم دارای این خاصیت است که هر یک از عناصرش عبارت است از یک عنصر بخصوص که بتوان عددی رسیده است. چنین گروههایی را گروههای دوره ای می نامیم.

یک گروه که توسط یک عنصر ایجاد می‌شود یک گروه دوره‌ای نامیده می‌شود. واضح است که گروه‌های دوره‌ای آبلی هستند، در حالی که عکس آن لزوماً صحیح نیست.

۱-۴-۲ هم مجموعه‌ها

یک زیرگروه $H = (H_1 = E, H_2, \dots, H_h)$ از مرتبه h متعلق به گروه G را که از مرتبه g است در نظر بگیرید. فرض کنید X یک عنصر از G باشد. کلیه حاصلضرب‌هایی نظیر XE, XH_2 و غیره را تشکیل دهید و مجموعه این عناصر را به صورت زیر نمایش دهید^۶:

$$XH = (XE, XH_2, XH_3, \dots, XH_h). \quad (18-1)$$

اکنون دو مورد به وجود می‌آید. X ممکن است در زیرگروه H باشد یا ممکن است در H نباشد. اگر X عنصری از H باشد، مجموعه XH باید بنابه تعریف با گروه H یکسان باشد. در مجموعه XH ، تنها عناصر H جا بجا شده‌اند. این مطلب را می‌توانیم به صورت زیر نشان دهیم:

$$X \in H. \quad \text{اگر } XH = H. \quad (19-1)$$

از طرف دیگر، اگر X به H تعلق نداشته باشد، می‌توان نشان داد که هیچ عنصری از مجموعه XH به H تعلق ندارد. برای نشان دادن این امر خلاف آن را فرض می‌کنیم. لذا فرض کنید که XH_i به ازای مقداری از i ($1 \leq i \leq h$) به H تعلق داشته باشد. حال چون H یک گروه است، H_i^{-1} نیز به H تعلق دارد. لذا نتیجه می‌شود که: عنصر $X = H_i^{-1} (XH_i)$ در H است که برخلاف فرضی است که X عضوی از H نباشد. این ثابت می‌کند که H و XH هیچ عنصر مشترکی ندارند. گوییم که H و XH مجموعه‌های مجزا هستند و در نمادگذاری نظریه مجموعه‌ای این چنین بیان می‌کنیم که فصل مشترک H و XH مجموعه تهی ϕ است.

$$H \cap (XH) = \phi. \quad (20-1)$$

مجموعه XH ، هم مجموعه چپ H نسبت به X در G نامیده می‌شود. بطور مشابه می‌توانیم هم مجموعه راست H نسبت به X در G را به صورت مجموعه عناصر زیر تعریف

۶- این ضرب یک مجموعه در یک عضو است. قبلاً در بخش ۱-۳-۱ ضرب دو مجموعه را مورد

کنیم:

$$HX = (EX, H_2X, H_3X, \dots, H_hX), \quad (21-1)$$

که اگر X در H نباشد این نیز از H مجزا خواهد بود. همه عناصر هم مجموعه چپ و هم مجموعه راست باید به گروه بزرگتر G تعلق داشته باشند زیرا X و همچنین H_i به G تعلق دارند.

۱-۴-۳ یک قضیه درباره زیر گروهها

تقریباً در نیمه راه اثبات یک قضیه مهم هستیم: اگر گروه H از مرتبه h یک زیر گروه G با مرتبه g باشد، آنگاه g مضرب صحیحی از h است.

برای اثبات فرض کنید $H = (E, H_2, H_3, H_4, \dots, H_h)$ زیر گروه G باشد. مانند قبل هم مجموعه چپ H نسبت به عنصر X ($X \in G$) را که به H تعلق ندارد تشکیل دهید. همان طوری که در بالا نشان دادیم تمام عناصر XH_i ($1 \leq i \leq h$) به G تعلق دارند ولی هیچ کدام از آنها عضو H نیستند. بدین ترتیب h عنصر جدید از گروه G داریم. تاکنون h عضو از G را ایجاد کرده ایم:

$$H \cup XH = (E, H_2, H_3, \dots, H_h, X, XH_2, \dots, XH_h). \quad (22-1)$$

اگر این کار کل گروه G را کامل نکند، عنصر دیگر Y از عناصر باقیمانده G را انتخاب کنید بطوری که Y به H و به XH تعلق نداشته باشد. مجدداً هم مجموعه چپ YH را تشکیل دهید، بنابه استدلال قبلی تمام عناصر YH باید به G تعلق داشته باشند ولی هیچ کدام از عناصر YH نمی توانند به H متعلق باشند. یعنی مجموعه های H و YH مجزا هستند. اکنون ثابت می کنیم که مجموعه های YH و XH نیز مجزا هستند. زیرا، اگر عنصر YH_i با عنصر XH_j ($1 \leq i, j \leq h$) یکسان باشد، داریم:

$$YH_i = XH_j, \quad \text{یا:}$$

$$Y = XH_j H_i^{-1} \quad (23-1)$$

$$\equiv XH_k \quad \text{مثلاً}$$

که در آن $1 \leq k \leq h$ ، Y به XH تعلق دارد که برخلاف فرض است. بدین ترتیب یک

مجموعه با h عنصر دیگر از G داریم که با عناصر قبلی $3h$ عنصر تشکیل می دهند.

$$HUXHUYH$$

$$=(E, H_2, \dots, H_h, X, XH_2, \dots, XH_h, Y, YH_2, \dots, YH_h). \quad (24-1)$$

اگر هنوز هم گروه G کامل نشده باشد، یکی دیگر از عناصر باقیمانده G را انتخاب می کنیم و همین عمل را تکرار می کنیم. هر دفعه h عنصر جدید به دست می آوریم که همگی باید متعلق به G باشند و لذا مرتبه G باید مضرب صحیحی از h باشد.

عدد صحیح g/h را شاخص زیرگروه H در G می نامیم.

دیدیم که اگر یک عنصر A از یک گروه محدود G از مرتبه n باشد، مجموعه $(A, A^2, \dots, A^n = E)$ یک زیرگروه G است. از این رو نتیجه می گیریم که مرتبه هر عنصر یک گروه محدود باید مرتبه گروه را عاقد کند.

۴-۴-۱ زیرگروههای نرمال و گروههای عامل

اگر هم مجموعه های چپ و راست یک زیرگروه H نسبت به تمام عناصر X ($X \in G$) یکسان باشند، در این صورت H را یک زیرگروه نرمال یا زیرگروه تغییرناپذیر G می نامیم این شرط را می توان به ازای هر $X \in G$ به صورت:

$$XH=HX,$$

$$X^{-1}HX=H \quad (25-1)$$

یا:

باید داشته باشیم:

$$X^{-1}H X=H_i. \quad (26-1)$$

همچنین می توانیم این شرط را به گونه ای دیگر بیان کنیم: اگر بخواهیم هر عنصر

$$XH$$
 با یکی از عناصر HX برابر باشد یا: $XH_i=H_jX$

اما این درست همان رابطه مزدوج بودن عناصر H_i و H_j است و نشان می دهد که اگر یک عنصر H_i به یک زیرگروه نرمال H از G تعلق داشته باشد، تمام عناصر مزدوج H_i نیز به H تعلق دارند. این را اغلب این طور بیان می کنیم که یک زیرگروه نرمال از رده های کامل گروه

بزرگتر تشکیل شده است. عکس این مطلب نیز صحیح است، یعنی اگر یک زیرگروه H از رده های کامل G تشکیل شده باشد، H یک زیرگروه نرمال G است (مسأله ۱-۲۶ را ببینید). از این رو می توان این را به عنوان تعریف دیگری از یک زیرگروه نرمال در نظر گرفت. به عنوان مثال (E, C_4^2, m_x, m_y) یک زیرگروه نرمال C_{4v} است درحالی که (E, m_x) نیست.

اکثون یک مفهوم مهم دیگر را وارد می کنیم، و آن یک گروه عامل است. ابتدا آن را در قالب یک مثال نشان می دهیم و سپس به بحث عام درباره آن می پردازیم. یک زیرگروه نرمال از C_{4v} ، مثلاً $K_1 = (E, C_4^2)$ را در نظر بگیرید و تمام هم-مجموعه های متمایز آن را نسبت به عناصر مختلف C_{4v} تشکیل دهید. در این جا با خود K_1 چهار هم مجموعه متمایز داریم:

$$\begin{aligned} K_1 &= (E, C_4^2), & K_2 &= (C_4, C_4^3), \\ K_3 &= (m_x, m_y), & K_4 &= (\sigma_u, \sigma_v). \end{aligned} \quad (27-1)$$

می توانیم مجموعه این هم مجموعه ها را یک گروه بدانیم اگر حاصلضرب دو هم مجموعه را به صورت زیر تعریف کنیم: حاصلضرب دو هم مجموعه مجموعه ای است که از ضرب هر عنصر هم مجموعه اول در تمام عناصر دیگری به دست آید، عناصر تکراری باید فقط یکبار به حساب آیند. عموماً حاصلضرب دو هم مجموعه به ترتیب عوامل ضرب بستگی دارد. بنابراین:

$$\begin{aligned} K_2 K_3 &= (C_4, C_4^3) (m_x, m_y) \\ &= (\sigma_u, \sigma_v, \sigma_u, \sigma_v) \rightarrow (\sigma_u, \sigma_v) = K_4. \end{aligned} \quad (28-1)$$

می توان دید که مجموعه $K = (K_1, K_2, K_3, K_4)$ تحت ضرب هم مجموعه ای تعریف شده در بالا بسته است. بطور مشابه، می توان ثابت کرد که این مجموعه در سایر شرایط لازم برای گروه بودن، صدق می کند. از این رو نتیجه می شود که مجموعه K ، تحت یک قانون ترکیب معین یک گروه است. این گروه K را گروه عامل G نسبت به زیرگروه نرمال

K_1 نامند.

بطور کلی اگر H یک زیرگروه نرمال از G باشد، مجموعه هم مجموعه های متمایز H در G ، همراه با ضرب مجموعه ای تعریف شده در بالا، گروه عامل یا گروه خارج قسمت G نسبت به H نامیده می شود و به صورت زیر نشان داده می شود:

$$K = G/H. \quad (29-1)$$

اگر g مرتبه G و h مرتبه H باشد، بسادگی می توان دید که مرتبه K عبارت است از $\frac{g}{h}$ ، که شاخص H در G است.

۱-۵ ضرب مستقیم گروهها

ضرب مستقیم دو گروه $H = (H_1 = E, H_2, \dots, H_h)$ از مرتبه h و $K = (K_1 = E, K_2, \dots, K_k)$ از مرتبه k گروهی است مانند G از مرتبه $g = hk$ که عناصر آن از ضرب کردن هر عنصر H در تمام عناصر K به دست می آید به شرط آن که H و K هیچ عنصر مشترکی بجز همانی E نداشته باشند و (ii) هر عنصر H با هر عنصر K جابجاپذیر باشد. ضرب مستقیم گروه به صورت زیر نشان داده می شود:

$$G = H \otimes K = (E, EK_2, EK_3, \dots, EK_k, H_2K_2, \dots, H_2K_k, \dots, H_hK_k). \quad (30-1)$$

واضح است که H و K هر دو زیرگروههای G هستند. زیرگروههای C_{4v} مثال ساده ای از این مفهوم می باشند.

بنابراین:

$$(E, m_x) \otimes (E, m_y) = (E, C_4^2, m_x, m_y). \quad (31-1)$$

ضرب مستقیم گروهها، ساده ترین روش برای گسترش دادن یک گروه است. این مفهوم در مطالعه تقارن سیستمهای فیزیکی نظیر اتمها، مولکولها، بلورها، هسته ها و ذرات بنیادی کاربرد دارد. به عنوان مثال، فرض کنید G یک گروه تقارنی (یک سیستم) باشد که فقط از دورانه های سره تشکیل شده است. فرض کنید بعداً بفهمیم که وارونی، J نیز یک تبدیل تقارنی سیستم است، عملگر وارونی J همراه با همانی E یک گروه از مرتبه ۲

تشکیل می دهند، (E, J) ، چون وارونی با تمام دورانها جابجاپذیر است، می توانیم ضرب مستقیم G با (E, J) را در نظر بگیریم تا یک گروه تقارنی بزرگتر $G \otimes (E, J)$ را برای سیستم به دست آوریم.

اگرچه در واقع ممکن نیست ادعا کنیم که تمام تقارنهای یک سیستم معین رایافته ایم، بطور طبیعی مطلوب این است که هرچه بیشتر از این تقارنها را بدانیم. وقتی در فصلهای پنجم و ششم به کاربردهای نظریه گروه در مکانیک کوانتومی بپردازیم، این مفهوم را دقیقتر مورد بحث قرار خواهیم داد.

۱-۶ ایزومرفیزم و هومرفیزم

جدول ضرب گروه، نظیر آنچه در جدول (۱-۲) برای گروه یک مربع نشان داده شده است یک گروه را بطور کامل مشخص می کند و شامل تمام اطلاعات درباره ساختار تحلیلی گروه می باشد. تمام گروههایی که جدولهای ضرب مشابهی داشته باشند، ساختار یکسانی خواهند داشت، گوییم که این گروهها ایزومرفیزم یکدیگرند.

از نظر ریاضی، یک ایزومرفیزم بین دو گروه $G = \{E, A, B, C, \dots\}$ و $G' = \{E', A', B', C', \dots\}$ که مرتبه هر دو g است، وجود دارد اگر تناظر یک به یک بین عناصر G و G' وجود داشته باشد. به عبارت دیگر، اگر تناظر یک به یک به صورت $A \rightarrow A', B \rightarrow B', C \rightarrow C'$ و غیره باشد، در این صورت ضربی نظیر $AB = C$ در گروه G به معنی $A'B' = C'$ در گروه G' است. بدین ترتیب جدول ضرب G' را می توان تنها با جایگزین کردن عناصر G توسط عناصر نظیر G' از روی جدول ضرب G به دست آورد. باید توجه داشت که عنصر همانی یک گروه تحت نگاشت ایزومرفیک متناظر با عنصر همانی گروه دیگر است.

به عنوان مثال، می توان دید که گروه $\{1, +i, -1, -i\}$ با گروه دورانها، $\{E, C_4, C_4^2, C_4^3\}$ تحت نگاشت:

$$1 \leftrightarrow E, i \leftrightarrow C_4, -1 \leftrightarrow C_4^2, -i \leftrightarrow C_4^3.$$

ایزومرفیک است. بنابراین، به عنوان مثال، حاصل ضرب $i(-i) = 1$ در یک گروه

متناظر است، با حاصلضرب $C_4^2 C_4^3 = C_4$ در گروه دیگر. بعداً به مثالهای زیادی از ایزومرفیزم برخورد خواهیم کرد.

در بسیاری از موارد به تناظر چند به یک یا نگاشت از یک گروه به گروه دیگر (یا بطور کلی، یک مجموعه به مجموعه دیگر) برمیخوریم. اگر به هر عنصر A در G_1 یک عنصر منحصر بفرد $\phi(A)$ از G_2 متناظر باشد بطوری که $\phi(AB) = \phi(A)\phi(B)$ گوییم یک همومرفیزم از گروه G_1 به گروه G_2 دیگر وجود دارد. نگاشت ϕ باید بر تمام عناصر G_1 تعریف شود. عنصر $\phi(A)$ از G_2 تصویر یا نقش عنصر A از G_1 تحت همومرفیزم نامیده می شود. هر چند هر عنصر A از G_1 به یک عنصر منحصر بفرد $\phi(A)$ از G_2 نگاشته می شود، ممکن است چندین عنصر از G_1 به یک عنصر از G_2 نگاشته شود. بنابراین ممکن است با وجود $A \neq B$ ، داشته باشیم $\phi(A) = \phi(B)$. اگر n عنصر از G_1 به هر عنصر از G_2 نگاشته شوند گوییم که نگاشت n به یک یا همومرفیزم از G_1 به G_2 وجود دارد. واضح است که اگر $n = 1$ باشد، نگاشت به ایزومرفیزم کاهش می یابد.

برای این که مفاهیم را روشنتر بیان کنیم نمادگذاری نسبتاً متفاوتی را معرفی می کنیم. فرض کنید $G = \{E, A, \dots\}$ یک گروه از مرتبه g و $G' = \{E_1, E_2, \dots, E_n, A_1, \dots\}$ گروهی از مرتبه ng باشد (توجه کنید که تنها یک عنصر، مثلاً E_1 ، عنصر همانی G' است). فرض کنید که بتوانیم گروه G' را به g مجموعه (E_i) ، (A_j) و غیره تجزیه کنیم بطوری که هر کدام شامل n عنصر باشد و این که عناصر G' بتوانند بر طبق قاعده

$$\begin{aligned} E_1, E_2, \dots, E_n &\rightarrow E; \\ A_1, A_2, \dots, A_n &\rightarrow A; \text{ etc.} \end{aligned} \quad (32-1)$$

به عناصر G نگاشته شوند. در این صورت گوییم گروه G' با گروه G همومرفیک است اگر نگاشت به گونه ای باشد که حاصلضرب

$$A_i B_j = C_k, \quad 1 \leq k \leq n, \quad (33-1)$$

در G' به معنای $AB = C$ در G باشد و بالعکس، که در آن C تصویر عناصر C_1, C_2, \dots, C_n متعلق به G' در G است. گوییم که همومرفیزم یا نگاشت n به یک از G' به G وجود دارد.

باز هم زیر گروههای C_{4v} مثال ساده ای از همومرفیزم است. بدین ترتیب گروه (E, C_4^2, m_x, m_y) همومرفیک گروه (E, m_x) است با نگاشت دو به یک:

$$E, C_4^2 \rightarrow E; m_x, m_y \rightarrow m_x. \quad (۳۴-۱)$$

۱-۶-۱ مجموعه (E_i) یک زیر گروه نرمال G' است

بطور کلی می توان نشان داد که مجموعه (E_i) از G' ، که عناصر E_1, E_2, \dots, E_n آن به عنصر همانی E در G نگاشته شده اند، یک زیر گروه نرمال G' است. برای اثبات این مطلب، ابتدائاً نشان می دهیم که مجموعه (E_i) یک گروه است. در گروه G داریم $EE = E$ ، لذا بنا به تعریف همومرفیزم، حاصلضرب هر دو عنصر E_j و E_k از G' باید به همان مجموعه (E_i) متعلق باشد. بنابراین مجموعه (E_i) تحت عمل ضرب بسته است. اکنون باید نشان دهیم که عنصر همانی، که آن را موقتاً با E' نشان می دهیم به مجموعه (E_i) تعلق دارد. فرض کنید E' به مجموعه دیگری از G' ، مثلاً (A_j) ، متعلق باشد، در این صورت برای هر عنصر $B_k \in G'$ باید داشته باشیم $B_k E' = E'$. از طرفی بنا بر همومرفیزم باید در G داشته باشیم $AB = B$ ، که تنها زمانی ممکن است که $A = E$ یعنی تنها وقتی که $E' \in (E_i)$ است. حال براضی می توان نشان داد که اگر $E_j \in (E_i)$ آنگاه E_j^{-1} نیز به مجموعه (E_i) تعلق دارد. در نتیجه (E_i) یک گروه است.

برای اثبات قسمت دوم، که (E_i) یک زیر گروه نرمال G' است، هم مجموعه های چپ و راست آن با هر عنصر، مثلاً $A_i \in G'$ ، را در نظر می گیریم، یعنی $A_i (E_j)$ و $(E_j) A_i$ را در نظر می گیریم. چون در G داریم $EA = AE = A$ ، هر عنصر حاصلضرب نظیر $A_i E_j$ یا $E_j A_i$ از G' باید به مجموعه (A_i) تعلق داشته باشد. به علاوه، حاصلضربهای A_i در تمام n عنصر E_j از مجموعه (E_j) مجموعه (A_i) را کامل می کند. بطور خلاصه، هر عنصر (A_i) باید فقط و فقط یکبار در ضرب $A_i (E_j)$ اتفاق بیفتد. همین امر در مورد $A_i (E_j)$ نیز صادق است. بنابراین داریم:

$$\begin{aligned} A_i (E_j) &= (A_i), \\ (E_j) A_i &= (A_i), \end{aligned} \quad (۳۵-۱)$$

که نشان می‌دهد (E_i) یک زیرگروه نرمال G' است.

مجموعه (E_i) را از G' که بر E از G نگاشته می‌شود کرنل همومرفیزم نامند. از این رو قضیه بالا را می‌توان بطور خلاصه به شرح زیر بیان کرد: کرنل همومرفیزم از G' به G یک زیرگروه نرمال G' است.

عنصر همانی یک مثال ساده از همومرفیزم است. یک همومرفیزم از هر گروه G' به گروهی با مرتبه یک که فقط شامل عنصر همانی است وجود دارد، که این گروه به نوبه خود یک زیرگروه نرمال هر گروه است.

۷-۱ گروه‌های جایگشت

این گروه‌ها در مکانیک کوانتومی ذرات یکسان از اهمیت فوق العاده‌ای برخوردارند. یک سیستم از n شیء یکسان در نظر بگیرید. اگر جای دو یا چند تا از این اشیاء را تعویض کنیم آرایش حاصل از آرایش اولیه غیر قابل تشخیص است. می‌توانیم هر تعویض را به عنوان یک تبدیل سیستم در نظر بگیریم و در این صورت کلیه چنین تبدیلاتی یک گروه تشکیل می‌دهند که سیستم تحت آن تغییرناپذیر است. چون کلاً $n!$ جایگشت برای n شیء وجود دارد، گروه دارای مرتبه $n!$ است. این گروه را گروه جایگشت n شیء یا گروه متقارن درجه n می‌نامیم و معمولاً با S_n نمایش داده می‌شود.

به عنوان یک مثال مشخص، سه شیء یکسان را در نظر بگیرید، ملاحظه می‌کنیم که شش جایگشت وجود دارد که می‌توان آنها را به صورت زیر نوشت:

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad (36-1)$$

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 2 & 1 \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix}.$$

برچسبهای ۱، ۲، ۳ معرف مکانهای اشیاء اند و نه خود اشیاء^۸. این سیستم شش

۸- در مکانیک کوانتومی سعی در برچسب زدن ذرات یکسان بیهوده است.

(حالت) ممکن دارد که می توان آنها را به صورت زیر نمایش داد:

$$\psi_1=(1 \ 2 \ 3), \quad \psi_2=(2 \ 3 \ 1), \quad \psi_3=(3 \ 1 \ 2), \quad (۳۷-۱)$$

$$\psi_4=(2 \ 1 \ 3), \quad \psi_5=(3 \ 2 \ 1), \quad \psi_6=(1 \ 3 \ 2).$$

شش عملگر (۳۶-۱) روی هریک از شش حالت فوق عمل می کنند و عمل آنها به صورت زیر تعبیر می شود. عمل A ، به عنوان مثال، روی هر حالت i بدین معنی است که شیء واقع در مکان ۲ در مکان ۱ قرار گیرد و شیء مکان ۳ در مکان ۲ و شیء مکان ۱ به مکان ۳ برده شود. بدین ترتیب:

$$A\psi_1=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} (1 \ 2 \ 3)=(2 \ 3 \ 1)=\psi_2; \quad (۳۸-۱ \text{ الف})$$

$$C\psi_2=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 1 & 3 \end{pmatrix} (2 \ 3 \ 1)=(3 \ 2 \ 1)=\psi_5. \quad (۳۸-۱ \text{ ب})$$

می توان به سهولت نشان داد که مجموعه شش جایگشت (۳۶-۱) یک گروه است.

اعمال متوالی دو جایگشت روی یک حالت می تواند بسادگی محاسبه شود. بنابراین، با اعمال A مثلاً از چپ در (۳۸-۱) داریم:

$$A(C\psi_2)=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 2 & 3 & 1 \end{pmatrix} (3 \ 2 \ 1)=(2 \ 1 \ 3)=\psi_4. \quad (۳۹-۱)$$

اما همین طور داریم:

$$F\psi_2=\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 1 & 3 & 2 \end{pmatrix} (2 \ 3 \ 1)=(2 \ 1 \ 3)=\psi_4. \quad (۴۰-۱)$$

بنابراین:

$$AC\psi_2=F\psi_2. \quad (۴۱-۱)$$

می توان مشاهده کرد که اگر از هر حالت دیگری شروع کنیم نتیجه یکی است، یعنی:

$$AC\psi_i=F\psi_i, \quad 1 \leq i \leq 6. \quad (۴۲-۱)$$

از این رو، در نمادگذاری عملگری، می توان نوشت:

$$AC=F. \quad (۴۳-۱)$$

به عنوان تمرین در مسأله (۱-۱۹) به عهده دانشجویان قرار داده شده است تا جدول ضرب S_3 را تشکیل دهند.

به مورد عام n شی' یکسان برمی گردیم. ملاحظه می کنیم که هر جایگشت این اشیا را می توان به عنوان تعویض یا ترانهش متوالی دو بدوی این اشیا در نظر گرفت. یک ترانهش (mk) روی n شی' یکسان را به عنوان عملی تعریف می کنیم که در آن اشیا واقع در مکانهای m و k با یکدیگر تعویض شوند بدون این که مکان سایر اشیا تغییر داده شود. سپس می توان ثابت کرد که گروه متقارن S_n از درجه n (محدود) می تواند به وسیله $(n-1)$ ترانهش (۱۲) ، (۱۳) ... $(۱n)$ ایجاد شود.

به عنوان یک مثال، مجموعه مولدهای S_3 ، دو ترانهش (۱۲) و (۱۳) می باشند. کلیه عناصر S_3 را می توان از حاصلضربهای این مولدها به دست آورد. بنابراین $B = (۱۳)(۱۲)$ ، $C = (۱۲)$ ، $F = (۱۳)(۱۲)$ و غیره که برطبق قرارداد ترتیب عمل از راست به چپ است.

اگر یک جایگشت از تعداد زوجی ترانهش تشکیل شده باشد، جایگشت زوج نامیده می شود، اگر از تعداد فردی ترانهش تشکیل شده باشد جایگشت فرد نامیده می شود. بنابراین عملگرهای E ، A و B در $(۱-۳۶)$ جایگشتهای زوج و عملگرهای C ، D و F جایگشتهای فرد می باشند.

حاصلضرب دو جایگشت زوج یا دو جایگشت فرد، یک جایگشت زوج است، و حاصلضرب یک جایگشت فرد و یک جایگشت زوج، یک جایگشت فرد می باشد. در این صورت نتیجه می شود که مجموعه تمام جایگشتهای زوج در گروه S_n یک زیرگروه تشکیل می دهند^۹. این گروه به عنوان گروه متناوب درجه n نامیده می شود و معمولاً با A_n نمایش داده می شود. بدیهی است که مرتبه آن $\frac{n!}{2}$ است. بدین ترتیب، گروه متناوب درجه ۳ عبارت است از: $A_3 = (E, A, B)$ که عناصر آن در $(۱-۳۶)$ تعریف شده است.

بحث بیشتری درباره گروه جایگشت و رده های آن در بخش ۳-۱-۶ ارائه خواهد

شد.

۹- نتیجه مشابه برای مجموعه جایگشتهای فرد برقرار نیست. چرا؟

۸-۱ گروههای متمایز از یک مرتبه معین

قبلاً گفتیم که گروههای ایزومرفیک دارای ساختارهای تحلیلی یکسانی هستند. ممکن است تعدادی گروه ایزومرفیک برای وضعیتهای فیزیکی کاملاً متفاوتی نامزد باشند، اما کافی است فقط یکی از آنها را بطور ریاضی بررسی کنیم. عناصر تعدادی از گروههای ایزومرفیک ممکن است ماتریس یا جایگشتهای یا تبدیلات مختصات باشند. کافی است گروهی را مطالعه کنیم که با تمام اینها ایزومرفیک است و لزومی ندارد که عناصر آن دارای هیچ «معنایی» باشند و می تواند به مفهوم مجرد بررسی شود. توجه کنید که کل نظریه بر چهار اصل موضوعه بنیادی گروه بنا شده است که بطور کامل مستقل از هر نوع تعبیر خاصی است که به عناصر گروه داده می شود. از این رو این بخش از نظریه را نظریه مجرد گروهها می نامیم. می توانیم هر تعبیری که وضعیت فیزیکی مورد نظر اقتضا می کند به عناصر گروه «متناسب» و نتایج مرتبط را «استخراج» کنیم.

از این رو مناسب است که گروههای متمایز (غیر ایزومرفیک) با مرتبه معین n را بشماریم. این امر برای مقادیر کوچک n ساده است. در زیر ساختارهای ممکن گروههای از مرتبه $n = 1$ تا $n = 6$ را می آوریم.

(i) $n = 1$. فقط یک ساختار متمایز وجود دارد: گروهی که تنها عنصر آن عنصر همانی E است.

(ii) $n = 2$. باز هم فقط یک ساختار متمایز وجود دارد: گروه (E, A) که چون از مرتبه ۲ است، A^2 باید برابر E باشد. هر گروه مرتبه ۲ باید با (E, A) ایزومرفیک باشد مثالهایی از این گروهها عبارت است از: (E, m_x) و (E, σ_{11}) و $(-1, 1)$ و غیره.

(iii) $n = 3$. این مورد نیز فقط یک ساختار دارد: گروهی که توسط یک عنصر A از مرتبه ۳ ایجاد می شود یعنی $(A, A^2, A^3 = E)$.

(iv) $n = 4$. این پایستترین مرتبه ای است که برای آن دو گروه غیر ایزومرفیک وجود دارد. اگر این گروه را با (E, A, B, C) مشخص کنیم، در این صورت دو ساختار ممکن در زیر مورد بحث قرار می گیرد.

همان طوری که در انتهای بخش ۱-۴-۳ بحث کردیم، عناصر A, B, C و

می تواند از مرتبه ۲ یا ۴ باشند. اگر یک عنصر، مثلاً A ، از مرتبه ۴ باشد، نتیجه می شود که سه عنصر باقیمانده باید برابر توانهای A باشند و ساختار زیر را به دست می آوریم:

$$A^2=B, A^3=C, A^4=E. \quad (۴۴-۱)$$

این گروه دوره ای از مرتبه ۴، $(A, A^2, A^3, A^4 = E)$ را می دهد.

در مورد دوم، وقتی هیچ عنصری از مرتبه ۴ نباشد، نتیجه می شود که تمام عناصر

(به استثنای همانی) از مرتبه ۲ هستند، لذا:

$$A^2=B^2=C^2=E. \quad (۴۵-۱)$$

در این صورت نتیجه مسأله (۱-۱۱) نشان می دهد که گروه باید آبلی باشد. حال

حاصلضرب AB را در نظر بگیرید: دو وضع ممکن عبارتند از: $AB = C$ و $AB = E$.

اما $AB = E$ به معنای این است که B معکوس A است، در حالی که از (۴۵-۱) ملاحظه

می کنیم که A خودش معکوس خود می باشد. به عبارت دیگر، $AB = E$ نتیجه می دهد که

$$B = A \quad \text{لذا تنها امکان عبارت است از: } AB = C.$$

در این صورت دو ساختار غیرایزومرفیک عبارتند از:

$$(A, A^2, A^3, A^4 = E), \quad \text{(الف) گروه دوره ای از مرتبه ۴،}$$

(ب) گروه آبلی غیردوره ای از مرتبه ۴، (E, A, B, C) با ساختار $A^2=B^2=C^2=E$ ،

$CA=B$ ، $BC=A$ ، $AB=C$ این گروه غیردوره ای با پایتترین مرتبه است. هر گروه

مرتبه ۴ باید با یکی از این دو گروه ایزومرفیک باشد.

(v) $n = 5$. تنها یک ساختار متمایز در این مورد ممکن است: گروه دوره ای از

$$\text{مرتبه ۵، } (A, A^2, A^3, A^4, A^5 = E).$$

(vi) $n = 6$. در این جانیز دو گروه متمایز (غیرایزومرفیک) وجود دارد که تنها به

اثبات قسمتی از آن می پردازیم.

فرض کنید گروه عبارت باشد از: (E, A, B, C, D, F) مانند قبل، توجه کنید که

مرتبه تمام عناصر بجز E باید ۲، ۳ یا ۶ باشد. اگر مرتبه هریک از عناصر ۶ باشد، نتیجه

می شود که یک گروه دوره ای از مرتبه ۶ داریم: $(A, A^2, A^3, A^4, A^5, A^6 = E)$

بنابراین برای یافتن ساختار ممکن دوم، این مورد را مستثنا می کنیم.

اکنون نشان می دهیم که همه عناصر A, B, C, D و F نمی توانند از مرتبه ۲ باشند. زیرا اگر چنین باشد بنابه مسأله (۱-۱۱) گروه آبدلی است. سپس دو عنصر، مثلاً A و B را با شرط $A^2 = B^2 = E$ در نظر بگیرید و فرض کنید $AB = BA = C$. واضح است که مجموعه (E, A, B, C) از چهار عنصر، یک زیرگروه از مرتبه ۴ است. اما این ممکن نیست، زیرا این قضیه بنیادی در مورد زیرگروهها را که بنا برآن مرتبه یک زیرگروه باید مرتبه گروه را عاد کند، نقض می کند. بنابراین نتیجه می گیریم که حداقل یکی از عناصر از مرتبه ۳ است.

قسمت باقیمانده اثبات به عهده خواننده گذاشته می شود. دو ساختار حاصله عبارتند از:

(الف) یک گروه دوره ای $(A, A^2, A^3, A^4, A^5, A^6 = E)$.

(ب) یک گروه غیردوره ای (E, A, B, C, D, F) که غیرآبدلی است و دارای ساختار $A^3 = B^3 = E, A^2 = C^2 = D^2 = F^2 = E, B = A^2, AC = F, CA = D, BC = D$ و غیره است. این گروه غیرآبدلی با پایتترین مرتبه است و با S_3 ایزومرفیک می باشد.

اگرچه در اصل می توان با این روش تا مقادیر بالاتر n ادامه دهیم ولی این کار ساده نخواهد بود. عموماً با افزایش n ، تعداد گروههای غیرایزومرفیک افزایش می یابد. لیکن دو تذکر قابل توجه است:

(i) به ازاء هر مقدار محدود n ، همواره یک گروه دوره ای وجود دارد که توسط یک عنصر از مرتبه n ایجاد می شود یعنی: $(A, A^2, \dots, A^n = E)$.

(ii) اگر مرتبه n یک گروه یک عدد اول باشد، در این صورت تنها یک ساختار ممکن وجود دارد، یعنی گروه دوره ای مرتبه n .

این فصل را با یک مثال حل شده به پایان می بریم.

مثال

ثابت کنید که یک زیرمجموعه از گروه G دستگامی از مولدهای G است اگر و فقط اگر هیچ زیرگروه خاصی از G وجود نداشته باشد که شامل تمام عناصر مجموعه S باشد.

یک زیر مجموعه از گروه G را انتخاب کنید بطوری که G^S یک سیستم از مولدهای G باشد. ابتدا فرض کنید که یک زیر گروه خاص H از G وجود داشته باشد بطوری که $S \subseteq H \subseteq G$. چون H یک گروه است و S در H وجود دارد، توانها و حاصلضربهای عناصر S عناصری را می‌دهد که تنها متعلق به H می‌باشند و نه G ، که برخلاف این فرض است که S یک سیستم از مولدهای G است. لذا اگر S یک سیستم از مولدهای G باشد هیچ زیر گروه خاص از G که شامل S باشد وجود ندارد.

حال فرض کنید، هیچ زیر گروه خاصی از G ، که شامل S باشد، وجود نداشته باشد. با در نظر گرفتن توانها و حاصلضربهای عناصر S یک گروه ایجاد کنید. فرض کنید این امر به گروه K منجر شود، واضح است که $K \subseteq G$. اما بنا به فرض G شامل هیچ زیر گروه خاصی که S را دربر داشته باشد، نیست. لذا نتیجه می‌گیریم که $K = G$ ، که نشان می‌دهد S یک سیستم از مولدهای G است.

بدین ترتیب اگر هیچ زیر گروه خاصی از G که شامل S باشد، وجود نداشته باشد، S یک سیستم از مولدهای G است.

نتیجهٔ مورد نظر از ترکیب دو نتیجهٔ فوق حاصل می‌شود.

مسائل فصل اول

۱-۱. نشان دهید که مجموعه‌های زیر تحت قوانین داده شده تشکیل گروه می‌دهند و آنها را بر طبق خواص شان طبقه بندی کنید:

(الف) مجموعهٔ کلیهٔ اعداد گویا 10 تحت جمع

(ب) مجموعهٔ کلیهٔ اعداد گویای غیر صفر تحت ضرب اسکالر

(ج) مجموعهٔ کلیهٔ اعداد مختلط تحت جمع

۱۰- یک عدد گویا عددی است که بتواند به صورت نسبت دو عدد صحیح بیان شود، p/q . یک عدد

حقیقی که نتوان آن را به صورت نسبت دو عدد صحیح نوشت (نظیر $\sqrt{2}$) عدد اصم یا گنگ نامیده می‌شود.

(د) مجموعه کلیه اعداد مختلط غیر صفر تحت ضرب اسکالر

(ه) مجموعه هشت ماتریس زیر تحت ضرب ماتریسی

$$\left\{ \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}, \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \right\}$$

(و) مجموعه کلیه ماتریسهای یکانی مرتبه n تحت ضرب ماتریسی

(ز) مجموعه کلیه اعداد زوج تحت جمع

(ح) مجموعه کلیه اعداد مختلط با قدر مطلق واحد تحت ضرب اسکالر

۲-۱. نشان دهید که مجموعه های زیر تحت قوانین داده شده تشکیل گروه

نمی دهند. در کدام اصل گروه صدق نمی کنند؟

(الف) مجموعه کلیه اعداد حقیقی تحت ضرب

(ب) مجموعه کلیه اعداد حقیقی غیر صفر تحت جمع

(ج) مجموعه کلیه اعداد صحیح فرد، تحت (الف) ضرب، (ب) جمع

(د) مجموعه $\{1, 2, \dots, p-1\}$ از $(p-1)$ عدد صحیح تحت ضرب به مدول

(p) ، که در آن p یک عدد اول نباشد.

۳-۱. (الف) آیا سه ماتریس

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix}, \quad B = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

تشکیل یک گروه می دهند (تحت ضرب ماتریسی)؟ کمترین تعداد ماتریسهای را به آنها

بافزایید تا با این مجموعه تشکیل یک گروه بدهند. این ماتریسهای اضافی لازم را پیدا کنید و

جدول ضرب و رده های این گروه را بنویسید. آیا این گروه با (E, C_4, C_4^2, C_4^3)

ایزومرفیک است یا با (E, C_4^2, m_x, m_y) یا با هر دو؟

(ب) به گروهی که در مسأله بالا به دست آمد، یک ماتریس دیگر به صورت زیر

اضافه می کنیم:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

اکنون نیز، کمترین تعداد ماتریسهایی را پیدا کنید که به این مجموعه بیفزاییم تا گروه تشکیل دهند. نشان دهید که گروه حاصل از مرتبه هشت می باشد و با C_{4v} ایزومرفیک است [در بخش (۳-۹) از این واقعیت استفاده خواهیم کرد.]

۴-۱. نشان دهید که n ریشه n ام واحد، یعنی: $\exp\left(\frac{i 2\pi k}{n}\right)$ تحت ضرب اسکالر، یک گروه دوره ای تشکیل می دهند. نشان دهید که اگر m یک مقسوم علیه صحیح n باشد، در این صورت گروه مزبور دارای یک زیرگروه از مرتبه m است.

۵-۱. جدولهای ضرب گروه را برای گروههای مثال (ix) از بخش ۱-۱ به ازای $k=4$ و $k=5$ و گروههای مثال (x) به ازای 7 و $5=p$ تشکیل دهید.

۶-۱. جدول ضرب گروه حاصل از هفت ماتریس مسأله ۱-۱ را بنویسید. رده ها و کلیه زیرگروهها را به دست آورید. کدامیک زیرگروه نرمال هستند؟ با یافتن تناظرهای مناسب نشان دهید که این گروه با گروه C_{4v} ، که در این فصل مورد بررسی قرار گرفت، ایزومرفیک است.

۷-۱. گروه ماتریسی ای را بسازید که دو عضو آن به صورت زیر باشند:

$$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \text{ و } \begin{bmatrix} 0 & i \\ i & 0 \end{bmatrix}.$$

نشان دهید که این گروه از مرتبه ۸ است و دارای ۵ رده می باشد ولی با گروه C_{4v} ایزومرفیک نیست. (راهنمایی: نشان دهید که گروه ماتریسی ای که در این جا ایجاد کرده اید دارای شش عضو مرتبه ۴ است در حالی که C_{4v} تنها دارای دو عضو مرتبه ۴ می باشد. از این رو جدولهای ضرب این دو نمی توانند یکسان باشند.) (این مطلب نشان می دهد که دو گروه با مرتبه های یکسان که تعداد رده های آنها هم یکی است لزوماً ایزومرفیک نیستند).

۸-۱. حاصلضربهای رده های مختلف گروه C_{4v} را به دست آورید و آنها را

برطبق معادله (۱-۱۶) بر حسب مجموع رده ها بیان کنید.

۹-۱. از دو عنصر A و B با شرایط $A^2 = B^k = (AB)^2 = E$ ، که در آن k یک عدد صحیح متناهی بزرگتر از ۱ است، یک گروه تشکیل دهید، سپس مرتبه آن را پیدا کنید.

(چنین گروههایی را گروههای دو وجهی می نامیم و به D_k نمایش می دهیم.)

۱۰-۱. مولدهای گروههای C_{4v} و S_3 کدامند؟ مولدهای گروه ماتریسی مساله

۱-۱ ه کدامند؟

۱۱-۱. نشان دهید گروهی که در آن همه عناصر بجز عنصر همانی از مرتبه ۲

می باشند، آبلی است.

۱۲-۱. نشان دهید یک عنصر از یک گروه G به تنهایی یک رده تشکیل می دهد

اگر و فقط اگر با تمام عناصر G جابجاپذیر باشد. آنگاه نشان دهید که در یک گروه آبلی هر عنصر یک رده است.

۱۳-۱. فرض کنید H یک زیرگروه G و S یک زیرمجموعه دلخواه از G باشد.

(الف) فرض کنید $(S; H)$ مجموعه عناصری از H باشد که هر کدام با تمام

عناصر S جابجاپذیرند، یعنی:

$$C(S; H) = \{X \in H \mid XA = AX \forall A \in S\}.$$

نشان دهید که $(S; H)$ یک گروه است. (این گروه به متمرکزکننده S در H موسوم است.)

(ب) فرض کنید $(S; H)$ مجموعه عناصری از H باشد که به ازای تمام

X های متعلق به H داشته باشیم: $SX = X^{-1}S$ یعنی:

$$N(S; H) = \{X \in H \mid X^{-1}SX = S\}.$$

نشان دهید که $(S; H)$ یک گروه است. (این گروه به بهنجارکننده S در H موسوم است.)

۱۴-۱. نشان دهید که گروه ایجاد شده توسط دو عنصر جابجاپذیر A و B با

شرایط $A^2 = B^2 = E$ دوره ای است. مرتبه گروه چند است؟

۱۵-۱. فرض کنید H یک زیرگروه G و XH هم مجموعه ای از H و جدا از آن

باشد و فرض کنید Y عنصری از G باشد که به H و XH تعلق نداشته باشد. نشان دهید که

لازم نیست YXH هم از H و هم از XH جدا باشد. (راهنمایی: نشان دهید که اگر قرار باشد YXH جدا از هر دو باشد، آنگاه قضیه بخش ۱-۴-۳ منجر به نتیجه غلطی می‌شود که برطبق آن عدد صحیح g/h باید توان صحیحی از ۲ باشد.)

۱۶-۱. نشان دهید که هر زیرگروه با شاخص ۲ یک زیرگروه نرمال است.

۱۷-۱. نشان دهید که تمام عناصر متعلق به یک رده گروه دارای یک مرتبه اند. با

ارائه یک مثال مخالف، نشان دهید که عکس مطلب فوق صادق نیست.

۱۸-۱. فرض کنید C_i یک رده از یک گروه باشد و C_i^* مجموعه عناصر معکوس

عناصر C_i باشد. نشان دهید که C_i^* نیز یک رده است. (رده C_i^* معمولاً معکوس رده C_i

نامیده می‌شود.)

۱۹-۱. جدول ضرب گروه متقارن S_3 را تشکیل دهید و رده‌های آن را به دست

آورید.

۲۰-۱. نشان دهید که گروه متقارن S_n با درجه n ، با گروه متقارن S_2 با درجه ۲

همومرفیک است.

۲۱-۱. گروه متقارن یک مثلث متساوی الاضلاع را بسازید (این گروه در

بلورشناسی با C_{3v} نشان داده می‌شود). جدول ضرب، رده‌ها، زیرگروه‌ها و زیرگروه‌های

نرمال آن را بنویسید. نشان دهید که C_{3v} با S_3 ایزومرفیک است.

۲۲-۱. گروه متناوب درجه ۴ (A_4) را بسازید. جدول ضرب آن را بنویسید و

رده‌های آن را به دست آورید ۱۱.

۲۳-۱. اگر $G = H \otimes K$ ، نشان دهید که:

(الف) H و K هر دو زیرگروه‌های نرمال G می‌باشند؛

(ب) گروه عامل G/H با K ایزومرفیک است؛

(ج) G با H و K هر دو همومرفیک است؛

(د) تعداد رده‌های G با حاصلضرب تعداد رده‌های H در K برابر است.

۲۴-۱. نشان دهید که گروه C_{4v} تحت عمل ضرب با گروه $(-1, 1)$ همومرفیک است. همچنین نشان دهید که این نگاشت همومرفیک ۴ به ۱ را می توان به سه طریق متمایز برقرار ساخت.

۲۵-۱. با فرض $A^2 = B^3 = (AB)^2 = E$ ، و شروع از عناصر زیرگروه ایجاد کنید: (الف) (A, AB) ، (ب) (B^2, BA) ، نشان دهید که در هر دو مورد همان گروه مثال ۲ از بخش ۱-۲-۲ به دست می آید.

۲۶-۱. نشان دهید که اگر زیرگروه H از گروه بزرگتر G از رده های کامل G تشکیل شده باشد، در این صورت H زیرگروه نرمال G است، یعنی هم مجموعه های راست و چپ H نسبت به هر عنصر G یکسانند.

۲۷-۱. گروه متقارن S_4 از درجه چهار با مولدهای (12) ، (13) و (14) را در نظر بگیرید. در نمادگذاری متن، یعنی $(12) = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 3 & 4 \end{pmatrix}$ و ... (الف) دو جایگشت:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 4 & 3 & 2 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{و} \quad B = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 3 & 1 & 4 & 2 \end{pmatrix}$$

را به صورت حاصلضرب مولدها بیان کنید.

(ب) مرتبه عناصر A و B چند است؟ تعداد ترانشها در هریک از این عناصر را پیدا کنید.

(ج) حاصلضربهای AB و BA را به دست آورید.

(د) معکوس هریک از دو عنصر را به دست آورید.

۲۸-۱. زیرگروهی از گروه متقارن S_4 را پیدا کنید که چند جمله ای $x_1 x_2 + x_3 + x_4$ را تغییر ندهد. (یک چنین گروهی، گروه چند جمله ای مربوطه نامیده می شود.)

۲۹-۱. گروه چند جمله ای $x_1 x_2 + x_3 x_4$ را پیدا کنید و ثابت کنید، گروه به دست آمده در مسأله (۱-۲۸)، زیرگروه آن می باشد.

۳۰-۱. ثابت کنید گروه اعداد مثبت تحت عمل ضرب با گروه اعداد حقیقی تحت عمل جمع ایزومرفیک است. (راهنمایی: نگاشت ایزومرفیک با گرفتن لگاریتم برقرار

می شود.)

۳۱-۱. فرض کنید G یک گروه دوره ای از مرتبه ۱۲ باشد که به وسیله عنصر A ایجاد می شود و H زیر گروهی که به وسیله عنصر A^3 ایجاد می گردد. تمام هم مجموعه های H در G را پیدا کنید و جدول ضرب گروه عامل G/H را به دست آورید.

۳۲-۱. مجموعه شش تابع زیر را در نظر بگیرید:

$$f_1(x) = x, \quad f_2(x) = 1-x, \quad f_3(x) = x/(x-1), \\ f_4(x) = 1/x, \quad f_5(x) = 1/(1-x), \quad f_6(x) = (x-1)/x.$$

فرض کنید عمل ترکیب دو تابع به صورت جایگذاری یک تابع در دیگری تعریف شده باشد (یعنی تابع تابع). از این رو به عنوان مثال داریم:

$$(f_5 f_3)(x) = f_5(f_3(x)) = f_5(x/(x-1)) = 1/(1-x/(x-1)) \\ = 1-x = f_2(x),$$

بنابراین: $f_5 f_3 = f_2$. نشان دهید که این مجموعه تحت این قانون ترکیب یک گروه است. نشان دهید که:

$$(f_5)^{-1} = f_5, \quad \text{و} \quad (f_i)^{-1} = f_i \quad \text{for } i=2, 3, 4.$$

بالاخره، نشان دهید که گروه با S_3 یا C_{3v} ایزومرفیک است.

۳۳-۱. گروههای متقارن یک پنج ضلعی منتظم و یک شش ضلعی منتظم را تعیین کنید. رده های این گروهها را نیز پیدا کنید.

کتاب شناسی فصل اول

Albert (1956), Chapter 1; Alexandroff (1959); Dixon (1967); Falicov (1967); Hall (1968); Hamermesh (1964); Jansen and Boon (1967); Margenau and Murphy (1966), Chapter 15; Meijer and Bauer (1962); Schenkman (1965); Tinkham (1964); Wigner (1959).

فضاهای هیلبرت و عملگرها

یکی از اصول موضوعه مکانیک کوانتومی این است که به هر مشاهده پذیر فیزیکی، یک عملگر هرمیتی متناسب می شود و مجموعه تمام ویژه تابعهای یک عملگر هرمیتی یک مجموعه کامل است. فضای هیلبرت عملگرها عبارت است از مجموعه کلیه ترکیبات خطی ویژه تابعهای آن. هر حالت سیستم توسط یک بردار از فضای هیلبرت که عملگر روی آن عمل می کند، نشان داده می شود. سپس «هر» تابع را به صورت یک ترکیب خطی از این ویژه تابعها بسط می دهیم. گاهی این کار خطرناک و گمراه کننده است مگر این که بدانیم تابع موردنظر به فضای هیلبرت تعلق دارد و شرایطی که تحت آن یک چنین بسطی انجام شده است، ممکن است. در این فصل مفاهیم فضاهای هیلبرت و عملگرها را توسعه می دهیم و زمینه را برای کاربرد نظریه گروه در مکانیک کوانتومی فراهم می سازیم. از بسیاری جهات این فصل مستقل از فصل اول است. مع الوصف این دو فصل پایه بقیه کتاب را تشکیل می دهند.

۱-۲ فضاهای برداری و فضاهای هیلبرت

در این بخش ایده فضاهای هیلبرت را وارد می کنیم. بعضی از خواص مهم این فضاها در بخش بعدی تشریح خواهد شد. با فضای جبر برداری سه بعدی معمولی آشنا هستیم. ولی برای یک ریاضیدان، فضای سه بعدی معمولی درست مثال خاصی از مفهوم عام یک فضای برداری با بُعد دلخواه است. در واقع این مفهوم صرفاً مجرد، فضاهای n بعدی (n یک عدد صحیح مثبت محدود یا بی نهایت است) در بسیاری از مسائل فیزیک

جدید و ریاضی ضروری است.

قبل از هر چیز، مناسب است که یک میدان را به اختصار تعریف کنیم. فرض کنید F مجموعه عناصر (a, b, c, d, \dots) باشد و فرض کنید دو عمل دوتایی برای عناصر F تعریف شده باشد: یک عمل که با $+$ نمایش داده می‌شود (عمل جمع). و یک عمل که با \cdot نمایش داده می‌شود (عمل ضرب). در این صورت F یک میدان است اگر:

(i) F تحت جمع یک گروه آبدلی باشد. با عنصر همانی که با 0 نمایش داده می‌شود و صفر نامیده می‌شود.

(ii) مجموعه عناصر غیر صفر F نیز یک گروه آبدلی تحت ضرب تشکیل دهند. عنصر همانی این گروه با 1 نمایش داده می‌شود و آن را واحد می‌نامیم.

در این جا به ذکر سه مثال از میدان که اغلب به آنها مراجعه خواهیم کرد می‌پردازیم:

(الف) مجموعه تمام اعداد حقیقی، که معمولاً با R نمایش داده می‌شود؛

(ب) مجموعه تمام اعداد مختلط، که معمولاً با C نمایش داده می‌شود؛

(ج) مجموعه تمام اعداد گویا که با Q نمایش داده می‌شود.

اگر زیاد دقیق نباشیم می‌توان گفت میدانها، سیستمهای عددی ریاضی می‌باشند. یک مثال از میدان محدود در مسأله (۲-۱۲) آمده است. عناصر میدان را اسکالر می‌نامیم.

اکنون یک فضای برداری را تعریف می‌کنیم و زیر بخشهای بعدی گامهایی به سوی تعریف یک فضای هیلبرت می‌باشد.

۲-۱-۱ فضای برداری

مجموعه L عنصر u, v, w, \dots یک فضای برداری روی میدان F نامیده می‌شود چنانچه دو شرط زیر برقرار باشد:

(الف) یک عمل جمع در L تعریف شود که آن را با $+$ نمایش می‌دهیم، بطوری که L تحت جمع یک گروه آبدلی باشد. عنصر همانی این گروه با 0 نمایش داده می‌شود.

(ب) هر اسکالر از میدان F و هر عنصر از L بتوانند توسط یک عمل که ضرب اسکالر نامیده می شود، ترکیب شوند و نتیجه یک عنصر از L باشد، بطوری که برای هر u ، v ($u, v \in L$) و a, b ($a, b \in F$) داشته باشیم:

$$\begin{aligned} a(u+v) &= au+av \in L, \\ (a+b)u &= au+bu \in L, \\ a(bu) &= (a.b)u, \\ 1u &= u, 0u = 0. \end{aligned} \quad (1-2)$$

توجه کنید که 0 یک عنصر از میدان F است، درحالی که 0 عنصر «صفر» از L می باشد. عناصر یک فضای برداری، بردار نامیده می شوند. ضرب دو عنصر از یک فضای برداری لزوماً تعریف شده نیست.^۲

از این به بعد بین 0 و 0 تفاوتی قائل نخواهیم شد.

مثالهایی از فضای برداری:

(i) فضای سه بعدی بردارهای مکان روی میدان اعداد صحیح. در زبان ریاضی پیچیده تر این را باید به عنوان «مجموعه کلیه بردارهای مکان به اضافه اعمال جمع برداری معمولی و ضرب یک اسکالر در یک بردار» توصیف کرد.

(ii) مجموعه n تایی های اعداد نظیر $u = (u_1, u_2, u_3, \dots, u_n)$ روی میدانی که اسکالرهایی u_i به آن تعلق دارند. بدین ترتیب مجموعه کلیه n تایی های اعداد مختلط یک فضای برداری روی C و مجموعه کلیه n تایی های اعداد گویا یک فضای برداری روی Q است. دو عنصر u و $w = (w_1, w_2, \dots, w_n)$ از این مجموعه برابرند اگر و فقط اگر به ازای تمام i ها $u_i = w_i$ باشد ($1 \leq i \leq n$) این را با نوشتن $u = w$ نشان می دهیم. جمع دو بردار u و $v = (v_1, v_2, \dots, v_n)$ از این فضا و ضرب اسکالر به صورت زیر تعریف می شود:

$$\begin{aligned} (u_1, u_2, \dots, u_n) + (v_1, v_2, \dots, v_n) &= (u_1 + v_1, u_2 + v_2, \dots, u_n + v_n), \\ c(u_1, u_2, \dots, u_n) &= (cu_1, cu_2, \dots, cu_n). \end{aligned} \quad (2-2)$$

۲- اگر ترکیب دو عنصر از یک فضای برداری تعریف شده باشد و این ترکیب به فضا نیز تعلق داشته

باشد (با چند شرط دیگر روی حاصلضرب)، یک جبر داریم.

به علاوه اگر $u_i = 0$ ($1 \leq i \leq n$) گوئیم که $u = 0$.

مثال (i) در بالا یک مورد خاص از مثال حاضر است. و عبارت است از مجموعه

کلیه سه تایی‌های اعداد حقیقی.

(iii) مجموعه تمام اعداد حقیقی.

(iv) مجموعه تمام اعداد مختلط.

(v) مجموعه تمام اعداد گویا.

در سه مثال اخیر بردارها و اسکالرها یکسانند. اگر یک فضای برداری روی میدان

اعداد حقیقی تعریف شده باشد آن را یک فضای برداری حقیقی می‌نامیم، یک فضای برداری

که روی میدان اعداد مختلط تعریف شده باشد فضای برداری مختلط نامیده می‌شود.

۲-۱-۲ فضای حاصلضرب داخلی

یک فضای برداری L که روی یک میدان F تعریف شده باشد، که در آن F میدان

اعداد مختلط یا حقیقی باشد، علاوه بر این در یک شرط اضافی دیگر صدق کند، یک

فضای حاصلضرب داخلی نامیده می‌شود. این شرط اضافی عبارت است از:

(ج) به هر دو عنصر u و v ($u, v \in L$) یک عدد منحصر بفرد متعلق به میدان F

وابسته باشد. که با (u, v) نشان داده شده و حاصلضرب داخلی یا حاصلضرب اسکالر u و v

نامیده می‌شود، و دارای خواص زیر باشد:

$$\begin{aligned} (u, v) &= (v, u)^*, \\ (au, bv) &= a^*b (u, v), \\ (w, au + bv) &= a(w, u) + b(w, v), \end{aligned} \quad (3-2)$$

که در آن ستاره، معرف مزدوج مختلط است.

فضای خطی کلیه n تایی‌های اعداد مختلط یک فضای حاصلضرب داخلی است اگر

حاصلضرب اسکالر دو عنصر u و v را به صورت عدد مختلط زیر تعریف کنیم:

$$(u, v) = \sum_{i=1}^n u_i^* v_i. \quad (4-2)$$

فضای سه بعدی معمولی بردارهای مکان نیز با قاعده آشنایی که برای حاصلضرب اسکالر دو بردار داریم یک فضای حاصلضرب داخلی است. در واقع فضاهای برداری ذکر شده به عنوان مثالهای بعد از (۲-۲) با در نظر گرفتن قواعد مناسب برای حاصلضرب همه فضاهای حاصلضرب داخلی هستند.

باتوجه به (۲-۴) حاصلضرب داخلی یک عنصر در خودش برابر است با:

$$(u, u) = \sum_{i=1}^n |u_i|^2, \quad (5-2)$$

که در آن $\|u\|$ معرف قدر مطلق عدد داخل علامت است. نماد زیر را معرفی می کنیم:

$$\|u\|^2 \equiv (u, u). \quad (6-2)$$

وجذر غیر منفی این عدد حقیقی، که با $\|u\|$ نمایش داده می شود، نرم بردار u نامیده می شود. واضح است که، در زبان متداول، با طول یک بردار متناظر است. بسادگی می توان دید که نرم دارای خواص زیر است:

$$(i) \|u\| \geq 0 \quad (\|u\| = 0 \text{ اگر و فقط اگر } U = 0)$$

$$(ii) \|u + v\| \leq \|u\| + \|v\| \quad \text{این همان نامساوی مثلثی معمولی است.}$$

$$(iii) \|au\| = |a| \|u\|$$

قبل از ادامه بحث و تعریف فضای هیلبرت، باید دنباله کوشی را معرفی کنیم.

۲-۱-۳ دنباله کوشی

اگر به هر عدد صحیح مثبت n بتوانیم یک عدد c_n (که عموماً مختلط است) وابسته کنیم، در این صورت گوییم اعداد $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots$ تشکیل یک دنباله نامحدود، یا به اختصار تشکیل یک دنباله می دهند.

دنباله $c_1, c_2, \dots, c_n, \dots$ به یک عدد c یا حد c همگراست، اگر برای هر عدد حقیقی مثبت ϵ هر چقدر کوچک باشد، یک عدد صحیح مثبت (محدود) N وجود داشته باشد بطوری که برای هر عدد صحیح n ($n > N$) داشته باشیم:

$$|c_n - c| < \epsilon. \quad (7-2)$$

عدد c را حد این دنباله می‌گوییم.

دنباله c_1, c_2, \dots را دنباله کوشی می‌گوییم اگر به ازای هر عدد حقیقی مثبت ϵ

هر قدر کوچک باشد، بتوانیم یک عدد صحیح مثبت محدود N پیدا کنیم بطوری که به ازای

هر دو عدد صحیح n و m ($n, m > N$) داشته باشیم:

$$|c_n - c_m| < \epsilon. \quad (1-2)$$

مثالهایی از دنباله‌های همگرا و در نتیجه کوشی، عبارتند از:

(i) دنباله اعداد حقیقی که جملات آن عبارتند از: $c_n = 2 + \frac{5}{n}$

یعنی: $7, \frac{9}{2}, \frac{11}{3}, \frac{13}{4}, 3, \frac{17}{6}, \dots, \frac{2n+5}{n}, \dots$

با حد $c = 2$

(ii) $c = 0$ با حد 0 و $\frac{1}{2}, \frac{1}{3}, \dots, \frac{1}{n}, \dots$

(iii) $c = 2/0$ با حد $1/9, 1/99, 1/999, \dots$

(iv) دنباله اعداد مختلط با جمله عمومی $c_n = \frac{5n+3}{4n} + i \frac{2n-8}{3n}$ با حد $\frac{5}{4} + i \frac{2}{3}$

دنباله‌های زیر واگرا هستند:

(i) دنباله اعدادی که جمله عمومی آن $c_n = p^n$ ($p > 1$) می‌باشد.

(ii) دنباله اعداد صحیح مثبت $1, 2, 3, 4, \dots, n, \dots$

با وجودی که در بحث بالا، یک دنباله را با ارجاع به اعداد (حقیقی و مختلط)

تعریف کردیم، به وضوح می‌توانیم ایده فوق را به دنباله‌هایی از عناصر دلخواه تعمیم دهیم

به شرط آن که همگی دارای ماهیت یکسانی باشند. بنابراین می‌توانیم از دنباله بردارها در

فضای دو یا سه بعدی، دنباله n تایی در فضای برداری شان و غیره صحبت کنیم. البته در هر

مورد باید کمیت‌های $|c_n - c_m|$ و $|c_n - c|$ را به هنگام بررسی همگرایی شان، بطور مناسبی

تعبیر کنیم.

این امر را برای یک دنباله n تایی نشان می‌دهیم زیرا سایر مثالها به عنوان مورد

خاصی از این نتیجه می شوند.

یک دنباله از عناصر در فضای برداری کلیه n تایی هایی (حقیقی یا مختلط) را در نظر بگیرید که جملات آنها به صورت $u^{(1)}, u^{(2)}, \dots, u^{(k)}, \dots$ می باشد که در آن:

$$u^{(k)} \equiv (u_1^{(k)}, u_2^{(k)}, \dots, u_n^{(k)}). \quad (9-2)$$

این دنباله را کوشی گوئیم، اگر برای هر عدد مثبت ϵ یک عدد صحیح مثبت N وجود داشته باشد بطوری که برای هر دو عدد صحیح k و m ($k, m > N$) داشته باشیم:

$$|u^{(k)} - u^{(m)}| < \epsilon \quad (10-2)$$

$$|u_i^{(k)} - u_i^{(m)}| < \epsilon \quad \text{و} \quad 1 \leq i \leq n. \quad \text{بدین معنی که:}$$

بطور مشابه گوئیم که دنباله به حد $u = (u_1, u_2, \dots, u_n)$ همگراست اگر برای هر عدد حقیقی مثبت ϵ ، بتوانیم یک عدد صحیح مثبت N بیابیم بطوری که برای تمام اعداد صحیح m ($m > N$) داشته باشیم:

$$|u^{(m)} - u| < \epsilon \quad (11-2)$$

بدین معنی که:

$$|u_i^{(m)} - u_i| < \epsilon \quad \text{و} \quad 1 \leq i \leq n.$$

۲-۱-۴ فضای هیلبرت

اکنون آماده ایم تا فضای هیلبرت را تعریف کنیم. خود را به میدان اعداد حقیقی و مختلط محدود می کنیم. یک فضای حاصلضرب داخلی L را در نظر بگیرید. اگر هر دنباله کوشی از عناصر متعلق به L دارای حدی باشد که خود به L تعلق دارد، فضای L را کامل می نامیم. یک فضای حاصلضرب داخلی کامل را یک فضای هیلبرت می نامیم. مثالهایی از فضاهای هیلبرت و همچنین مثالهایی مخالف آنها را می توان بسادگی ساخت. کلیه فضاهای حاصلضرب داخلی که در بالا مورد بحث قرار گرفت بجز فضای برداری n تایی های اعداد گویا (که به عنوان یک مورد خاص با $n = 1$ مجموعه کلیه اعداد گویا را شامل می شود) نیز فضاهای هیلبرت می باشند. فضای اعداد گویا کامل نیست زیرا می توانیم یک دنباله کوشی در این فضا بسازیم که حد آن یک عدد غیر گویا باشد، که به این

فضا تعلق ندارد. به عنوان مثال، دنباله تقریبهای متوالی برای جذر ۲، یعنی: ... و $1/4142$ و $1/414$ یک دنباله کوشی است که حد آن $1/2$ است و به مجموعه اعداد گویا تعلق ندارد. استدلال مشابهی نشان می‌دهد که مجموعه تمام n تایی‌های اعداد گویا یک فضای هیلبرت نیست.

۲-۲ هندسه مختصات و جبر برداری در یک نمادگذاری جدید

در آنچه به دنبال می‌آید فضاهای هیلبرت را بطور عام بررسی می‌کنیم. یک فضای هیلبرت n بعدی (بعد را در زیر تعریف خواهیم کرد) را با L_n نشان می‌دهیم. هر چند رسم شکل یا نمودار برای فهم یک استدلال در فیزیک محض و ریاضی نباید توصیه شود، می‌توان برای روشن شدن مطلب چند مثال مشخص با $n = 2$ یا $n = 3$ در نظر گرفت. چند مفهوم و خاصیت مهم را ذیلاً برمی‌شمیریم.

(i) در فضای سه بعدی معمولی بردارهای مکان به یک دسته سه تایی از محورهای مختصات نیاز داریم، و هر نقطه در این فضا می‌تواند سه مختصه که در امتداد این سه محور اندازه‌گیری می‌شود مشخص شود. همین طور، در فضای برداری n بعدی به n بردار «مستقل» r_1, r_2, \dots, r_n احتیاج داریم تا کل فضا را پدید آوریم.

دو بردار r_i و r_j از L_n را مستقل خطی گوئیم هرگاه یکی مضرب ثابتی از دیگری نباشد، یعنی، توان یک اسکالر C را به گونه‌ای یافت که داشته باشیم $r_i = Cr_j$ به زبان آشنا، یعنی r_i و r_j بردارهای موازی نیستند. بطور عام m بردار از L_n را یک دسته بردار مستقل خطی گوئیم اگر و فقط اگر معادله

$$\sum_{i=1}^m a_i r_i = 0 \quad (12-2)$$

تنها وقتی همه a_i ها صفر باشند، برقرار باشد.

به عبارت دیگر m بردار مستقل خطی هستند اگر نتوان با ترکیب خطی این بردارها بطوری که ضریب لااقل یکی از آنها غیر صفر باشد عنصر صفر فضا را ساخت. به عبارت دیگر مجموعه m بردار مستقل خطی است اگر نتوان هیچ کدام از آنها را بر حسب ترکیب

خطی $(m - 1)$ بردار دیگر نوشت. یک آزمون ساده برای استقلال خطی یک مجموعه بردار عبارت است از ساختن دترمینان حاصلضربهای اسکالر آنها با یکدیگر که به دترمینان گرام موسوم است.

$$\Gamma = \begin{vmatrix} (r_1, r_1) & (r_1, r_2) & \dots & (r_1, r_m) \\ (r_2, r_1) & (r_2, r_2) & \dots & (r_2, r_m) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (r_m, r_1) & (r_m, r_2) & \dots & (r_m, r_m) \end{vmatrix},$$

اگر $\Gamma = 0$ باشد، نتیجه می شود که یکی از بردارها را می توان به صورت ترکیب خطی از $m - 1$ بردار باقیمانده نوشت، لذا بردارها وابسته خطی هستند. اگر $\Gamma \neq 0$ بردارها مستقل خطی اند.

(ii) در یک فضای برداری کامل n بعدی، یا فضای هیلبرت L_n یک مجموعه از n بردار مستقل خطی را یک مجموعه کامل در L_n می نامیم. اگر تعداد بردارهای انتخاب شده از n کوچکتر باشد، آنها را مجموعه غیرکامل در L_n می گوئیم. مسلم است که این بردارها برای پدید آوردن کل فضا کافی نیستند. از طرف دیگر اگر بیش از n بردار در L_n انتخاب شود، این بردارها یک مجموعه فوق کامل یا مجموعه زاید تشکیل می دهند. این بردارها نمی توانند مستقل خطی باشند و می توان حداقل دو اسکالر غیر صفر a_i پیدا کرد بطوری که:

$$\sum_{i=1}^m a_i r_i = 0, \quad m > n. \quad (13-2)$$

(iii) بعد یک فضای برداری عبارت است از ماگزیم تعداد بردارهای مستقل خطی در آن فضا یا حداقل تعدادی از بردارها که برای پدید آوردن فضا لازم است. به عبارت دیگر، بعد یک فضا برابر است با تعداد بردارهای مستقل خطی لازم و کافی برای پدید آوردن کل فضا. بنابراین در فضای سه بعدی معمولی بردارهای مکان، می توانیم حداکثر سه بردار مستقل خطی بیابیم، عدد سه کمترین تعداد بردار مستقل خطی لازم برای پدید

آوردن فضا نیز می باشد.

یک مجموعه n بردار مستقل خطی در فضای برداری n بعدی را یک پایه می نامیم، و این بردارها را بردارهای پایه می نامیم.

واضح است که انتخاب بردارهای پایه منحصر بفرد نیست یا می توان به بی نهایت طریق آنها را انتخاب کرد.

(iv) اکنون هر بردار u در L_n را می توان برحسب مجموعه کامل بردارهای پایه بسط

داد، یعنی:

$$u = \sum_{i=1}^n u_i r_i, \quad (14-2)$$

که در آن u_i مؤلفه u در راستای r_i است و می گوئیم فضای L_n می تواند بطور کامل توسط بردارهای پایه پدید آید. این نتیجه تنها وقتی صادق است که $\{r_i\}$ یک مجموعه کامل باشد. اسکالرهای u_i ضرایب فوریه u نیز نامیده می شوند و رابطه (۱۴-۲) را بسط فوریه u می نامیم.

(v) برای نرم بردارها در فضای L_n واحدی انتخاب می کنیم (به زبان متداول، واحدی برای «طول» بردارها) یک بردار با نرم واحد را بردار یکه یا بردار بهنجار شده می نامیم. در این صورت، به جای بردارهای پایه \vec{r}_i با نرمهای دلخواه، یک پایه متشکل از بردارهای یکه e_1, e_2, \dots, e_n در L_n انتخاب می کنیم.

(vi) تا این جا بجز استقلال خطی بردارهای پایه، هیچ رابطه دیگری بین آنها فرض نکرده ایم. اما اکنون، بدون کاستن از عمومیت مسأله، برای سهولت و این که محاسبات جبری را ساده تر کنیم، یک مجموعه کامل از بردارهای پایه متعامد انتخاب می کنیم. در فضای سه بعدی معمولی این بدان معنی است که به جای محورهای مایل محورهای مختصات دکارتی را انتخاب کنیم. اگر e_i ها بردارهای پایه راست همجار باشند، داریم:

$$(e_i, e_j) = \delta_{ij}, \quad (15-2)$$

که در آن δ_{ij} دلتای کرونکر است با خاصیت زیر:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } i=j, \\ 0 & \text{if } i \neq j. \end{cases} \quad (۱۶-۲)$$

(vii) در این صورت حاصلضرب اسکالر دو بردار

$$u = \sum_{i=1}^n u_i e_i \quad \text{و} \quad v = \sum_{i=1}^n v_i e_i \quad (۱۷-۲ \text{ الف})$$

برابر است با:

$$(u, v) = (v, u)^* = \sum_{i=1}^n u_i^* v_i. \quad (۱۷-۲ \text{ ب})$$

همچنین

$$\|u\|^2 \equiv (u, u) = \sum_{i=1}^n |u_i|^2. \quad (۱۷-۲ \text{ ج})$$

(viii) یک تبدیل خطی در فضای L_n را می توان توسط یک عملگر T تعریف کرد

بطوری که وقتی T روی یک بردار u ($u \in L_n$) عمل کند یک بردار مانند v بدهد که به L_n تعلق داشته باشد. این عمل به صورت زیر نشان داده می شود:

$$Tu = v. \quad (۱۸-۲)$$

اگر چنین باشد، یعنی اگر به ازای تمام u ها داشته باشیم $Tu \in L_n$ گوئیم، فضای L_n تحت عمل T بسته است.

توجه کنید که این همان تبدیلات غیرفعال است که در بخش ۱-۱-۲ بحث شد. اگر Tu به ازای تمام u ها منحصر بفرد باشد و اگر تبدیل معکوس نیز بطور منحصر بفردی تعریف شود، می گوئیم T نگاشت یک به یک فضای L_n روی خودش است.

عمده‌اً با تبدیلاتی کار داریم که خواص اقلیدسی فضای L_n ، نظیر نرم بردار و حاصلضرب اسکالر دو بردار را حفظ کند. دورانها، انعکاسها و وارونی مثالهای روشنی از چنین تبدیلات می باشند.

(ix) از نظر جنبه های تبدیلات غیرمستقیم می توانیم تبدیلات بردارهای پایه e_j (سایر

چیزها ثابت) به بردارهای پایه جدید e_i' را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$e_i \rightarrow e_i' = T e_i = \sum_{j=1}^n e_j T_{ji}, \quad 1 \leq i \leq n, \quad (۱۹-۲)$$

که در آن T_{ij} اسکالری است که مولفه e_i در راستای e_j را می دهد. تبدیلاتی که یک مجموعه بردارهای پایه راست هنجار را به مجموعه بردارهای راست هنجار دیگر تبدیل کنند، تبدیلات یکانی نامیده می شوند، عملگرهای وابسته آنها را عملگرهای یکانی می نامیم^۲. می توان مشاهده کرد که این تعریف به معنای پایدار ماندن نرم و حاصلضرب اسکالر بردارها در اثر تبدیل است.

(x) معادله (۲-۱۹) در واقع مجموعه π معادله خطی است که می تواند به صورت زیر نوشته شود.

$$T(e_1, e_2, \dots, e_n) = (e_1', e_2', \dots, e_n') \\ = (e_1, e_2, \dots, e_n) \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & \dots & T_{1n} \\ T_{21} & T_{22} & \dots & T_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} & \dots & T_{nn} \end{bmatrix} \quad (2-20)$$

ماتریس مربعی $T = [T_{ij}]$ طرف راست نمایش عملگر T در پایه (e_i) نامیده می شود. (x_i) بردار e_i' در (۲-۱۹) را در نظر بگیرید. اگر حاصلضرب اسکالر آن را با یکی از بردارهای پایه اصلی مثلاً e_k ، به دست آوریم، داریم:

$$(e_k, e_i') = (e_k, Te_i) = (e_k, \sum_{j=1}^n e_j T_{ji}),$$

یا با استفاده از (۲-۱۵)

$$(e_k, Te_i) = T_{ki} \quad (2-21)$$

T_{ki} را عنصر ماتریسی عملگر T بین بردارهای پایه e_k و e_i می نامیم. یعنی اگر عملگر روی e_i عمل کند، بردار حاصل تصویر T_{ki} در راستای e_k خواهد داشت.

۳- اگر بردارهای فضای L_n حقیقی باشند، یعنی اگر L_n روی میدان اعداد حقیقی تعریف شده باشد این تبدیلات و عملگرها به ترتیب تبدیلات متعامد و عملگرهای متعامد نامیده می شوند.

۴- ماتریس $T = [T_{ij}]$ را نباید با عملگر T که در طرف چپ (۲-۲۲) آمده است اشتباه کرد ما اغلب برای عملگر و نمایش ماتریسی آن از یک نشانه استفاده خواهیم کرد.

(xii) حاصلضرب اسکالر هر دو بردار u و Tv از L_n ، که در آن u و v بردارهای

(۲-۱۷ الف) می باشند به صورت زیر داده می شود:

$$\begin{aligned} (u, Tv) &= \left(\sum_k u_k e_k, T \sum_i v_i e_i \right) \\ &= \left(\sum_k u_k e_k, \sum_{i,j} v_i e_j T_{ji} \right) \\ &= \sum_{i,j,k} u_k v_i T_{ji} (e_k, e_j) \\ &= \sum_{i,k} u_k v_i T_{ki}. \end{aligned} \quad (2-22)$$

(xiii) چون بنا به فرض، بردارهای پایه تبدیل یافته e_i' هر کدام به طول واحد و بر

یکدیگر عمودند داریم:

$$(e_i', e_j') = \delta_{ij}. \quad (2-23)$$

نتیجه می شود که ماتریس T دارای خواص زیر است (مسأله ۲-۲ را ببینید).

$$\left. \begin{aligned} \sum_{i=1}^n T_{ij}^* T_{ik} &= \delta_{jk} \\ \sum_{i=1}^n T_{ji}^* T_{ki} &= \delta_{jk}, \end{aligned} \right\} 1 \leq j, k \leq n; \quad \begin{aligned} &(2-24 \text{ الف}) \\ &(2-24 \text{ ب}) \end{aligned}$$

$$|\det T| = 1. \quad (2-24 \text{ ج})$$

اینها همان شرایط معلوم برای یک ماتریس یکانی می باشند. اغلب گفته می شود که تمام سطرها (ستونهای) یک ماتریس یکانی بر یکدیگر عمود و بهنجار شده اند، که دقیقاً همان چیزی است که معادلات (۲-۲۴) می گویند. در نمادگذاری ماتریسی (۲-۲۴) می تواند اجمالاً به صورت زیر نوشته شود:

$$T^\dagger = T^{-1} \quad \text{یا} \quad TT^\dagger = T^\dagger T = E, \quad (2-25)$$

که در آن E ماتریس یکه مرتبه n و T^\dagger مزدوج هرمیتی T می باشد.

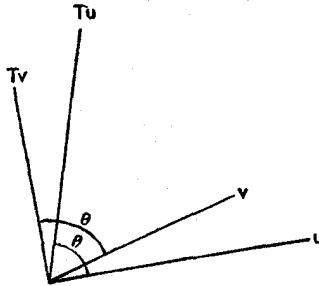
(xiv) حاصلضرب اسکالر دو بردار در L_n تحت تبدیل یکانی تغییرناپذیر است

۵- با وجودی که u و v عناصر یک مجموعه کامل از بردارهای پایه نیستند و ظاهراً ماتریسی برای T

وجود ندارد، در مکانیک کوانتومی (u, Tv) «عناصر ماتریسی» T بین u و v نامیده می شود.

فرض کنید u و v دو بردار از $L_{\mathbb{R}}$ باشند و T یک عملگر یکانی، در این صورت:

$$(Tu, Tv) = (u, v). \quad (26-2)$$



شکل ۱-۲ حاصلضرب اسکالر دو بردار تحت تبدیل یکانی تغییر ناپذیر است.

بدون اثبات رابطه (۲۶-۲)، (به مسأله ۲-۳ رجوع کنید)، تعبیر ساده فیزیکی این نتیجه را در فضای دو بعدی نشان می دهیم. در شکل (۱-۲) چهار بردار u, v, Tu, Tv را با فرض این که T یک دوران در خلاف جهت عقربه های ساعت به اندازه θ حول محور عمود بر صفحه کاغذ است، نشان داده ایم. صحت (۲۶-۲) برای این مورد بخصوص روشن است.

(xv) یک عملگر مهم عملگر تصویری است. و آن عملگری است که وقتی روی یک بردار $u (u \in L_{\mathbb{R}})$ عمل کند تصویر u در راستای یک بردار پایه را بدهد. می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$P_i \equiv e_i (e_i), \quad (27-2)$$

که در آن باید حاصلضرب اسکالر را با برداری که P_i روی آن عمل می کند، در نظر گرفت. بنابراین اگر u بردار (۱۷-۲ الف) باشد در این صورت:

$$P_i u = e_i (e_i, u) = u_i e_i = e_i \text{ تصویر } u \text{ در راستای } e_i \quad (28-2)$$

باید توجه داشت که P_i یک عملگر یکانی نیست.

واضح است که اگر یکبار دیگر عملگر P_i را روی بردار e_i در (۲۸-۲) اثر دهیم

نتیجه همان بردار e_i است، یعنی:

$$P_i(P_i u) = P_i(u_i e_i) = u_i e_i \equiv P_i(u). \quad (29-2)$$

چون این مطلب برای تمام u ها برقرار است، می توانیم رابطه فوق را در نمادگذاری عملگری به صورت زیر بنویسیم:

$$P_i^2 = P_i, \quad (30-2)$$

که یک خاصیت مهم عملگر تصویری است. در واقع هر عملگر P ، که روی فضای هیلبرت L_n عمل می کند، و برای آن $P^2 = P$ (یعنی به ازای $u \in L_n$ ، $P^2 u = P u$) یک عملگر تصویری نامیده می شود. بسادگی می توان ثابت کرد که:

$$\sum_{i=1}^n P_i = E, \quad (31-2)$$

که در آن E عملگر همانی است.

(xvi) اکنون جمع مستقیم دو یا چند فضا را تعریف می کنیم. یک فضای برداری L_n با بعد n و دستگاه مختصات (e_1, e_2, \dots, e_n) و یک فضای برداری L_m ، با بعد m و بردارهای پایه (i_1, i_2, \dots, i_m) را در نظر بگیرید. جمع مستقیم دو فضا عبارت است از فضای برداری تعریف شده به وسیله $t = m + n$ بردار پایه $(e_1, \dots, e_n, i_1, \dots, i_m)$ مشروط بر آن که دو فضا هیچ بردار مشترکی جز بردار صفر نداشته باشند. این بردارهای پایه را می توان با t بردار (k_1, \dots, k_t) مشخص کرد. اگر L_m و L_n فضاهای کاملی باشند، L_t نیز کامل است و هر بردار u در L_t می تواند به صورت زیر بسط داده شود:

$$u = \sum_{i=1}^t u_i k_i. \quad (32-2)$$

که در آن u_i ها اسکالرند.

به عنوان یک مثال ساده، یک فضای برداری دو بعدی (یک صفحه) با بردارهای پایه (x, y) و یک فضای برداری یک بعدی (یک خط) با بردار پایه (z) را که در صفحه (x, y) واقع نیست در نظر بگیرید. اگر عنصر صفر در دو فضا مشترك باشد، فضای جمع مستقیم فضای برداری سه بعدی است با بردارهای پایه (x, y, z) .

(xvii) بالاخره ضرب مستقیم (که ضرب کرونگر نیز نامیده می شود) دو فضای

برداری را در نظر می گیریم. باز هم دو فضای L_m و L_n که در بالا تعریف شد در نظر بگیرد. فضای حاصلضرب مستقیم فضایی است مانند L_p با ابعاد $p=nm$ که توسط p بردار پایه $(e_1 i_1, e_1 i_2, \dots, e_n i_m)$ تعریف می شود.

در نگاه اول به نظر می رسد که $e_j z_k$ به جای یک بردار، یک تانسور باشد، اما به راحتی دیده می شود که می توان آن را یک بردار در فضای p بعدی در نظر گرفت. اگر بردارهای پایه حاصل را با نشانه های جدید (L_1, L_2, \dots, L_p) نمایش دهیم، مانند قبل، اگر L_m و L_n فضاهای کامل باشد، این بردارهای پایه در L_p یک مجموعه کامل تشکیل می دهند. در این صورت هر بردار $v \in L_p$ می تواند به صورت زیر بسط داده شود:

$$v = \sum_{j=1}^p v_j l_j.$$

۳-۲ فضای توابع

مجموعه تمام توابع پیوسته (f, g, h, \dots) که هر کدام تابعی از یک متغیر مستقل x در بازه $[a, b]$ می باشند و مجذور آنها انتگرال پذیر است در نظر بگیرد. برابری دو تابع را به صورت زیر تعریف می کنیم.

دو تابع f و g در بازه $[a, b]$ وقتی با هم برابر گفته می شوند اگر و فقط اگر تساوی $f(x) = g(x)$ به ازای تمام مقادیر x در بازه $[a, b]$ برقرار باشد. برابری دو تابع را به صورت $f = g$ نشان می دهیم.

در این صورت با توجه به تعریف فضای برداری در بخش ۲-۱-۱، ملاحظه می کنیم که اگر جمع دو تابع و ضرب اسکالر را به صورت:

$$(f+g)(x) = f(x) + g(x), \quad (2-34 \text{ الف})$$

$$(cf)(x) = cf(x). \quad (2-34 \text{ ب})$$

تعریف کنیم مجموعه توابع فوق روی میدان F تشکیل یک فضای برداری می دهند.

معادله (۲-۳۴ الف) عمل جمع نقطه به نقطه دو تابع نامیده می شود. اگر توابع مجموعه مورد نظر حقیقی باشند یک فضای برداری روی میدان اعداد حقیقی داریم، اگر مختلط

باشند یک فضای برداری روی میدان اعداد مختلط داریم. همانی در هر دو مورد تابعی است که به ازای تمام مقادیر x در فاصله $[a, b]$ متحد با صفر باشد. وارون یک تابع f تابع $-f$ است با خاصیت $(-f)(x) = -f(x)$ (یعنی، مقدار تابع $-f$ در یک نقطه x منهای مقدار f در آن نقطه است).

به عنوان یک مثال واقعی، مجموعه $\{f_e(x)\}$ از کلیه توابع پیوسته، مجذوراً انتگرال پذیر زوج، متناوب با پریود $2L$ را در نظر بگیرید. عموماً فرض خواهیم کرد که توابع مختلط بتوانند در مجموعه قرار گیرند. مجموع دو تابع از این مجموعه نیز یک تابع پیوسته، مجذوراً انتگرال پذیر، زوج، متناوب، با پریود $2L$ می باشد و لذا به مجموعه تعلق دارد. در واقع بسادگی می توان ثابت کرد که این مجموعه تحت قاعده جمع نقطه به نقطه یک گروه آبدلی است. به علاوه، ضرب اسکالر در اعداد مختلط آن چنان که در (۲-۳۴) (ب) تعریف شده است در شرایط (۲-۱) صدق می کند. لذا نتیجه می شود که مجموعه $\{f_e(x)\}$ یک فضای برداری است، که آن را با L_e نشان می دهیم.

یک فضای برداری که عناصرش توابع باشند فضای توابع نامیده می شود. در این صورت تمام مفاهیم تعمیم داده شده در بخشهای (۲-۱) و (۲-۲) می توانند به فضاهای توابع اعمال شوند، زیرا همان طور که در بخش (۱-۸) در ارتباط با گروهها تأکید شده تعریف ریاضی یک فضای برداری کاملاً مستقل از ماهیت دقیق عناصرش می باشد. این امر آزادی قابل ملاحظه ای به ما می دهد تا بتوانیم فضاهای برداری مختلف را به همان روشهای مجرد، بررسی کنیم.

بدین ترتیب، یک فضای تابع می تواند یک فضای حاصلضرب داخلی شود اگر به هر دو تابع یک اسکالر نسبت دهیم بطوری که شرایط (۲-۳) برقرار باشد. این امر بسادگی امکان پذیر است اگر ضرب داخلی دو تابع f و g را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$(f, g) \equiv \int_a^b f^*(x) g(x) dx, \quad (2-35)$$

که در آن انتگرال روی دامنه $[a, b]$ از x که توابع فضا روی آن تعریف شده اند انجام می شود.

نرم $\|f\|$ یک تابع f عبارت است از ρ :

$$\|f\|^2 \equiv (f, f) = \int_a^b |f(x)|^2 dx. \quad (36-2)$$

یک دنباله کوشی از توابع به صورت زیر تعریف می شود: دنباله $f_1, f_2, \dots, f_n, \dots$ از توابعی یک متغیره روی $[a, b]$ یک دنباله کوشی گفته می شود اگر به ازای هر عدد حقیقی ϵ بتوانیم یک عدد صحیح مثبت N بیابیم بطوری که به ازای تمام اعداد صحیح n و M ($m > N$ و $n > N$) داشته باشیم:

$$\|f_n - f_m\| < \epsilon \quad (37-2)$$

$$\text{یا:} \quad \int_a^b |f_n(x) - f_m(x)|^2 dx < \epsilon.$$

به طریق مشابه (رک: بخش ۲-۱-۳)، می توانیم یک دنباله همگرا و حد آن را تعریف کنیم. سپس تعریف یک فضای هیلبرت توابع بلافاصله حاصل می شود.

مجموعه n تابع f_1, f_2, \dots, f_n از یک فضای برداری یک مجموعه توابع مستقل خطی روی $[a, b]$ می باشند اگر و فقط اگر از معادله

$$\sum_{i=1}^n a_i f_i(x) = 0 \quad (38-2)$$

به ازای تمام x ها در فاصله $[a, b]$ داشته باشیم $a_i = 0$ ($1 \leq i \leq n$)

اگر به فضای برداری L_2 از تمام توابع پیوسته، مجدوراً انتگرال پذیر زوج متناوب با پریمود L_2 برگردیم، ملاحظه می کنیم که هر تابع از این فضا می تواند برحسب سری کسینوسی فوریه بسط داده شود.

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a(n) (1/\sqrt{l}) \cos(n\pi x/l). \quad (39-2)$$

واضح است که مجموعه بی نهایت توابع $\frac{1}{\sqrt{l}} \cos \frac{n\pi x}{L}$ به ازای $0 \leq n \leq \infty$ به عنوان پایه

راست هنجار این فضا عمل می کنند، زیرا توابع این مجموعه در رابطه زیر صدق می کند:

$$\frac{1}{l} \int_{-l}^l \cos(n\pi x/l) \cos(m\pi x/l) dx = \delta_{mn}. \quad (۴۰-۲)$$

بنابراین فضای برداری مورد نظر یک فضای بی نهایت بعدی شمارش ناپذیر است.

۲-۳-۱ فضای دو گانه

برای هر تابع f در فضای L_e ، یک مجموعه ضرایب $a(n)$ داریم، ($0 \leq n < \infty$) مانند (۲-۳۹). این ضرایب می توانند بسادگی از عکس فوری (۲-۳۹) به دست آیند.

$$a(n) = \int_{-l}^l f(x) (1/\sqrt{l}) \cos(n\pi x/l) dx. \quad (۴۱-۲ الف)$$

این ضرایب فوریه منحصر بفردند، یعنی، اگر تابع دیگر g ، ($g \in L_e$) داشته باشیم که ضرایب فوریه آن

$$b(n) = \int_{-l}^l g(x) (1/\sqrt{l}) \cos(n\pi x/l) dx, \quad (۴۱-۲ ب)$$

باشد، در این صورت $a(n) = b(n)$ و ($0 \leq n < \infty$) اگر و فقط اگر روی $[L, -L]$ $f=g$ باشد.

اکنون می توانیم a را به عنوان یک تابع از متغیر گسسته n در نظر بگیریم. بسادگی می توان دید که تابع متناظر با $f+g$ عبارت است از: $a+b$ و تابع متناظر با $-f$ برابر $-a$ است. در واقع، می توان بسادگی ثابت کرد که مجموعه توابع (a, b, \dots) یک فضای برداری است که روی همان میدانی که فضای L_e تعریف شده، تعریف می شود. این فضا، فضای دو گانه L_e نامیده می شود و بردارهای آن تناظر یک به یک با بردارهای L_e دارند. از این رو نتیجه می شود که ابعاد فضای دو گانه نیز بی نهایت شمارش پذیر است.

باید روشن باشد که این با فضای تمام n تایی ها که در آن اکنون n بی نهایت شمارش پذیر است مشابه است. حاصلضرب اسکالر دو تابع در این فضا عبارت است از:

$$(a, b) = \sum_{n=0}^{\infty} a^*(n) b(n). \quad (۴۲-۲ الف)$$

با استفاده از (۲-۴۱) در (۲-۴۲) داریم:

$$(a, b) = \int_{-l}^l f^*(x) g(x) dx = (f, g). \quad (۲-۴۲-ب)$$

در معادله بالا، یک خاصیت مهم تبدیل فوریه را داریم که حاصلضرب اسکالر f و g با حاصلضرب اسکالر تبدیلات a و b ی آنها یکسان است.

۲-۳-۲ جمع مستقیم فضاهای توابع

مجموعه $\{f_0(x)\}$ شامل کلیه توابع پیوسته مجذوراً انتگرال پذیر فرد متناوب با L_0 یعنی توابعی را که در روابط زیر صدق می کنند، در نظر بگیرید:

$$\begin{aligned} f_0(x+2l) &= f_0(x) \\ f_0(-x) &= -f_0(x). \end{aligned} \quad (۲-۴۳)$$

باز هم می توان ثابت کرد که این مجموعه یک فضای برداری^۷ است، که آن را با L_0 نمایش می دهیم.

هر تابع $\phi(x)$ از L_0 را می توان بر حسب سری سینوسی فوریه بسط داد

$$\phi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} \alpha(n) (1/\sqrt{l}) \sin(n\pi x/l). \quad (۲-۴۴)$$

مجموعه بی نهایت تابع $(\frac{1}{\sqrt{l}}) \sin(\frac{n\pi x}{l})$ ، $1 \leq n < \infty$ را می توان به عنوان توابع پایه راست هنجار این فضا انتخاب کرد، زیرا:

$$\frac{1}{l} \int_{-l}^l \sin(n\pi x/l) \sin(m\pi x/l) dx = \delta_{mn}. \quad (۲-۴۵)$$

اکنون می توانیم جمع مستقیم دو فضای توابع L_0 و L_e را در نظر بگیریم زیرا این دو فضا هیچ عنصر مشترکی بجز تابعی که متحد با صفر است، ندارد. در این صورت یک فضا

۷- تابعی که به ازای تمام مقادیر x متحد با صفر باشد هم فرد است و هم زوج. لذا در هر دو فضای

$\{f_0(x)\}$ و $\{f_e(x)\}$ مشترك است و عنصر «صفر» هر دو فضا می باشد.

از تمام توابع متناوب با پریود $2L$ داریم. بسط فوریه یک تابع در این فضا عبارت است از:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a(n) (1/\sqrt{l}) \cos(n\pi x/l) + \sum_{n=1}^{\infty} \alpha(n) (1/\sqrt{l}) \sin(n\pi x/l). \quad (46-2)$$

واضح است که توابع پایه این فضا که در (۴۶-۲) انتخاب شده اند راست هنجارند، زیرا علاوه بر (۲-۴۰) و (۲-۴۵) داریم:

$$\frac{1}{l} \int_{-l}^l \cos(n\pi x/l) \sin(m\pi x/l) dx = 0 \quad \forall n, m. \quad (47-2)$$

فضاهای L_0 و L_0 فضای جمع مستقیم آنها همه بی نهایت بعدی شمارش پذیر هستند. فضای دوگانه L_0 مجموعه تمام توابع (α, β, \dots) می باشد، که هر عنصر آن تبدیل فوریه یک عنصر از L_0 است.

بسادگی می توان مفاهیم این بخش را به توابعی با بیش از یک متغیر تعمیم داد.

۴-۲ عملگرها

در این بخش از نشانه های $\phi_n(x)$ برای توابع پایه راست هنجار یک فضای هیلبرت L از توابع A ، که ممکن است دارای بعد محدود یا بی نهایت باشد استفاده خواهیم کرد. یک عملگر T زمانی در فضای L تعریف شده است که عمل آن روی هر تابع f ($f \in L$) منجر به تابعی شود که به L تعلق دارد. بنابراین:

$$Tf(x) = g(x) \quad g \in L. \quad (48-2)$$

برای این که عمل یک عملگر را روی هر تابعی از L بدانیم، کافی است اثر آن را روی توابع پایه L بدانیم. بنابراین وقتی عملگر T روی یک تابع پایه $\phi_n(x)$ عمل می کند، نتیجه حاصل تابعی از L است، مثلاً $\phi_n'(x)$ که می توان آن را برحسب ترکیب خطی از توابع پایه اصلی بسط داد.

۸- در این جا، x معرف مجموعه متغیرهایی است که توابع L ممکن است به آنها بستگی داشته

$$T \phi_n(x) = \phi_n'(x) = \sum_m \phi_m(x) T_{mn}, \quad n, m = 1, 2, \dots \quad (49-2)$$

این رابطه معرف یک دستگاه معادلات خطی است، به ازای هر مقدار n یک معادله. اگر این رابطه را به صورت بسط یافته بنویسیم داریم:

$$\begin{aligned} (\phi_1', \phi_2', \dots, \phi_n', \dots) &= T (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n, \dots) \\ &= (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n, \dots) \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \dots T_{1n} \dots \\ T_{21} & T_{22} \dots T_{2n} \dots \\ \vdots & \vdots \dots \vdots \\ T_{n1} & T_{n2} \dots T_{nn} \dots \\ \vdots & \vdots \dots \vdots \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (50-2)$$

ماتریس $[T_{ij}]$ نمایش عملگر T در پایه $\{\phi_n\}$ است. می توان بامشابهت با (2-21) دید که یک عنصر ماتریس T عبارت است از:

$$\begin{aligned} T_{mn} &= (\phi_m, \phi_n') = (\phi_m, T\phi_n) \\ &= \int \phi_m^*(x) T\phi_n(x), \end{aligned} \quad (51-2)$$

که در آن S معرف جمع بندی روی متغیرهای گسسته و انتگرال گیری روی متغیرهای پیوسته مجموعه x است که ϕ ها به آنها بستگی دارند (به زیر نویس ۸ مراجعه کنید).

اگر برای بردارهای سطری نمادگذاری زیر را معرفی کنیم:

$$\begin{aligned} \Phi &\equiv (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n, \dots), \\ \Phi' &\equiv (\phi_1', \phi_2', \dots, \phi_n', \dots), \end{aligned} \quad (52-2)$$

در این صورت (49-2) می تواند در نمادگذاری ماتریسی به صورت زیر نوشته شود:

$$\Phi' = \Phi T. \quad (53-2)$$

۱-۴-۲ عملگرهای خاص

در این بخش چند عملگر خاص را بررسی می کنیم. عملگر T را یک عملگر خطی می نامیم اگر برای هر f و g در L داشته باشیم:

$$T(cf+dg) = cTf + dTg, \quad (54-2)$$

که در آن c و d دو اسکالر از میدانی هستند که L روی آن تعریف شده است. از طرف دیگر، T را یک عملگر ضدخطی می‌گوییم اگر

$$T(cf+dg) = c^*Tf + d^*Tg \quad \forall f, g \in L. \quad (55-2)$$

یک مثال روشن از یک چنین عملگری، عملگر مزدوج مختلط است. اگر آن را با K نمایش دهیم، به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$Kf = f^*, \quad K(cf) = c^*Kf = c^*f^*. \quad (56-2)$$

اگر دو عملگر A و B در رابطه زیر صدق کنند:

$$(f, Ag) = (Bf, g) \quad \forall f, g \in L, \quad (57-2)$$

گوییم که A مزدوج هرمیتی B است و بالعکس، که به صورت زیر نشان داده می‌شود:

$$A = B^\dagger, \quad A^\dagger = B. \quad (58-2)$$

فرض کنید:

$$f = \sum_n a_n \phi_n, \quad g = \sum_n b_n \phi_n. \quad (59-2)$$

در این صورت، با استفاده از تعامد ϕ_n ، (۵۷-۲) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\sum_{n,m} a_n^* b_m A_{nm} = \sum_{n,m} a_n^* b_m B_{mn}^*. \quad (60-2)$$

چون این مطلب باید برای تمام f ها و g ها در L برقرار باشد، یعنی برای تمام اسکالرهایی a_n و b_n نتیجه می‌شود که:

$$A_{nm} = B_{mn}^*. \quad (61-2)$$

اگر اسکالرهایی فضای L اعداد حقیقی باشند، (۵۸-۲) و (۶۱-۲) به صورت زیر درمی‌آیند.

$$A = \tilde{B}, \quad \tilde{A} = B, \quad A_{nm} = B_{mn}, \quad (62-2)$$

و گوییم که A ترانهاد B است و بالعکس.

اگر یک عملگر T مزدوج هرمیتی (الحاقی) خودش باشد، آن را هرمیتی یا خودالحاقی می‌نامیم. از (۵۷-۲) ملاحظه می‌شود که T عملگر هرمیتی است فقط و فقط اگر داشته باشیم:

$$(f, Tg) = (Tf, g) \quad \forall f, g \in L. \quad (63-2)$$

باتوجه به (۲-۵۹)، رابطه فوق به صورت زیر درمی آید:

$$T_{nm} = T_{mn}^* \quad (۲-۶۴)$$

که دقیقاً همان تعریف یک ماتریس هرمیتی است، یعنی ماتریس که با مزدوج هرمیتی اش برابر است و به صورت زیر نوشته می شود:

$$T = T^\dagger = (\tilde{T})^* = \tilde{T}^* \quad (۲-۶۵)$$

بنابراین، یک عملگر هرمیتی در یک فضای برداری خطی توسط یک ماتریس هرمیتی نمایش داده می شود.

T را یک عملگر یکانی گوئیم اگر

$$TT^\dagger = T^\dagger T = E, \quad (۲-۶۶)$$

که در آن E عملگر همانی است، می توان بسادگی دید که اگر T یکانی باشد، آنگاه

$$(Tf, Tg) = (f, g) \quad \forall f, g \in L. \quad (۲-۶۷)$$

اگر اسکالرهای فضا اعداد حقیقی باشند، (۲-۶۶) به صورت زیر درمی آید:

$$T\tilde{T} = \tilde{T}T = E, \quad (۲-۶۸)$$

که در این صورت T را یک عملگر متعامد می نامیم.

۲-۴-۲ مسأله ویژه مقداری

قبلاً اثر عملگر T روی یک تابع پایه را مورد بحث قرار دادیم

$$T\phi_n = \sum_m \phi_m T_{mn}. \quad (۲-۴۹)$$

انتخاب مجموعه توابع پایه $\{\phi_n\}$ منحصر بفرد نیست، بدین لحاظ مجموعه توابع پایه راست هنجار $\{\psi_n\}$ در L را طوری انتخاب می کنیم که معادله (۲-۴۹) را تا حد ممکن ساده کند. واضح است که ساده ترین مورد غیربدهی که ممکن است اتفاق بیفتد، موردی است که تنها جمله غیر صفر در طرف راست جمله ψ_n ام باشد، که در این صورت داریم:

$$T\psi_n = T_{nn}\psi_n \equiv t_n\psi_n, \quad (۲-۶۹)$$

که اسکالرهای t_n را تعریف می کند. یک بردار غیر صفر ψ_n که در (۲-۶۹) صدق کند ویژه بردار یا ویژه تابع T متناظر با ویژه مقدار t_n نامیده می شود. مسأله یافتن ویژه مقادیرها و ویژه

تابعهای یک عملگر (که در یک فضای هیلبرت عمل می کند) معمولاً مسأله ویژه مقداری نامیده می شود و معادله (۲-۶۹) را اغلب معادله ویژه مقداری می نامیم.

لزومی ندارد که ویژه مقدارها همه متمایز باشند، یعنی، ممکن است دو یا چند ویژه بردار به یک ویژه مقدار متناظر باشد، در این مورد، چنین ویژه بردارهایی را تبهگن می گوئیم. چندگانگی یک ویژه مقدار عبارت است از تعداد ویژه بردارهای مستقل خطی ای که دارای آن ویژه مقدار باشد.

بجاست که پرسیم آیا هر عملگر دارای ویژه مقدار و ویژه بردار است. اگر فضای برداری L روی میدان اعداد حقیقی تعریف شده باشد، هر عملگری که روی L عمل می کند لزوماً ویژه مقدار و ویژه بردار ندارد. حال عمل دوران به اندازه 90° در فضای برداری دو بعدی بردارهای (حقیقی) مکان را در نظر بگیرید. این عملگر دارای ویژه برداری نیست زیرا هیچ بردار غیر صفری در این فضا وجود ندارد که به صورت ضرب حقیقی خودش تبدیل شود.

اما اگر L یک فضای برداری روی میدان اعداد مختلط باشد، هر عملگر L دارای ویژه مقدار است، اگر هر ویژه مقدار را به تعداد دفعاتی که واقع می شود بشمریم، در این صورت تعداد ویژه مقدارها دقیقاً با بعد فضای L برابر است.
مجموعه ویژه مقدارهای یک عملگر طیف آن نامیده می شود.

۲-۴-۳ قطری کردن

از (۲-۶۹) معلوم می شود که اگر به جای مجموعه $\{\emptyset_n\}$ مجموعه $\{\psi_n\}$ را به عنوان پایه در فضای L انتخاب کنیم، ماتریس معرف عملگر T قطری می شود، یعنی:

$$T_d = \begin{bmatrix} t_1 & & & 0 \\ & t_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & t_n \\ & & & & \ddots \end{bmatrix} \quad (۲-۷۰)$$

ویژه مقدارهای t_n جوابهای معادله درجه N ام زیر است:

$$\det(T - tE) = 0. \quad (۷۱-۲)$$

همان طوری که قبلاً گفتیم N ممکن است بی نهایت باشد، همان طوری که در واقع در اغلب مسائل فیزیکی چنین است. در این صورت با مسأله حل یک دترمینان بی نهایت مواجهیم. اما معمولاً تنها به چند تا از پایتترین ویژه مقدارها در طیف عملگر کار داریم و می توانیم با انتخاب مناسب زیرفضا بطور مناسبی دترمینان را به یک دترمینان جدید با مرتبه محدود N و خطای کوچک، کاهش دهیم.

وقتی ویژه مقدارها بدین طریق تعیین شدند، ویژه تابعها بسادگی به دست می آیند برای این یک ویژه تابع ψ_n متناظر با ویژه مقدار t_n را به عنوان یک ترکیب خطی و توابع پایه اصلی بیان می کنیم:

$$\psi_n = \sum_{m=1}^N \phi_m U_{mn}. \quad (۷۲-۲)$$

اگر هر دو مجموعه $\{\psi_n\}$ و $\{\phi_n\}$ راست هنجار باشند، U یک ماتریس یکانی خواهد بود. حال ψ_n را در نمادگذاری بردار سطری به صورت $\psi_n = (U_{1n}, U_{2n}, \dots, U_{Nn})$ بیان می کنیم. در این صورت معادله ویژه مقادری (۲-۶۹) به صورت زیر نوشته می شود:

$$T\psi_n \equiv (U_{1n}, U_{2n}, \dots, U_{Nn}) \begin{bmatrix} T_{11} & T_{21} & \dots & T_{N1} \\ T_{12} & T_{22} & \dots & T_{N2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ T_{1N} & T_{2N} & \dots & T_{NN} \end{bmatrix} \quad (۲-۷۳ \text{ الف})$$

$$= t_n (U_{1n}, U_{2n}, \dots, U_{Nn}).$$

در مرحله آخر از (۲-۶۹) استفاده کرده ایم توجه کنید که ماتریس تبدیلی که در (۲-۷۳ الف) ظاهر شده است ترانزاده ماتریسی است که در (۲-۴۹) آمده است. علت آن این است که در (۲-۴۹) روی بردارهای پایه ϕ_n عمل می کند (اثر غیرمستقیم)، در حالی که در (۲-۷۳ الف) روی بردارهای فضا عمل می کند و بردارهای پایه را تغییر نمی دهد. (اثر مستقیم) با نوشتن ستون m ام (۲-۷۳ الف)، داریم:

$$\sum_{k=1}^N U_{kn} T_{mk} = t_n U_{mn}, \quad (2-73 \text{ ب})$$

که در آن $1 \leq n \leq N$. این رابطه دستگاه N معادله خطی با N مجهول U_{mn} ($1 \leq m \leq n$) و n ثابت) است. اما به خاطر شرط (۲-۷۱) تمام این معادلات همه مستقل از هم نیستند. اگر ویژه مقدار t_n ، k بار تبهگن باشد، می توان نشان داد که ماتریس $(T - t_n E)$ دارای مرتبه $(N - k)$ است و لذاتنها $(N - k)$ معادله از معادلات (۲-۷۳) مستقلند. این بدان معنی است که می توانیم حداکثر $(N - k)$ مؤلفه U_{mn} (n ثابت) را تعیین کنیم. روش کلی این است که تعداد مثلاً k مؤلفه اول را به دلخواه مشخص کنیم و سپس $(N - k)$ مؤلفه باقیمانده را برحسب آنها به دست آوریم^۹.

بدین ترتیب اختیار زیادی وجود دارد که از این واقعیت ناشی می شود که هر ترکیب خطی ویژه تابعهای تبهگن نیز یک ویژه تابع با همان ویژه مقدار می باشد. می توانیم بطور مناسبی هر k تابع راست هنجار را در این زیرفضای k بعدی انتخاب کنیم.

با به دست آوردن یک مجموعه N ویژه تابع راست هنجار بدین طریق، می توانیم نشان دهیم که نمایش T با پایه $\{\psi_n\}$ یک ماتریس قطری است. معادلات (۲-۴۹) و (۲-۷۲) را در نمادگذاری ماتریسی به صورت زیر می نویسیم:

$$T\Phi = \Phi[T], \quad (2-74 \text{ الف})$$

$$\Psi = \Phi U, \quad (2-74 \text{ ب})$$

که در آن Φ و Ψ معرف بردارهای سطری

$$\Phi = (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N),$$

$$\Psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N),$$

می باشند و بین T و ماتریس $[T]$ فرق گذاشته ایم. از (۲-۷۲) روشن می شود که ستون n ام ماتریس U دقیقاً شامل مؤلفه های ویژه تابع ψ_n است، یعنی:

$$U = \begin{bmatrix} U_{11} & U_{12} & \dots & U_{1n} & \dots & U_{N1} \\ U_{21} & U_{22} & \dots & U_{2n} & \dots & U_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{N1} & U_{N2} & \dots & U_{Nn} & \dots & U_{NN} \end{bmatrix} \quad (۷۵-۲)$$

با ضرب کردن (۷۴-۲) از راست در U ، داریم:

یا

$$T \Phi U = \Phi U U^{-1} [T] U. \quad (۷۶-۲)$$

$$T \Psi = \Psi (U^{-1} [T] U).$$

بنابراین، ماتریس $U^{-1} [T] U$ نمایش عملگر T در پایه $\{\psi_n\}$ است. با توجه به ساختمان U در (۷۵-۲) اکنون می‌توان بسادگی ثابت کرد که داریم:

$$U^{-1} [T] U = T_d.$$

این مطلب را می‌توان با در نظر گرفتن عنصر (l, n) طرف چپ معادله فوق دید که برابر است با

$$\sum_{m,k} [U^{-1}]_{lm} T_{mk} U_{kn} = \sum_m [U^{-1}]_{lm} U_{mn} t_n \quad (\text{توسط } ۷۳-۲ \text{ ب}) \\ = t_n \delta_{ln},$$

که دقیقاً همان عنصر T_d از (l, n) است. پس، از معادله (۷۶-۲) نتیجه می‌شود:

$$T \Psi = \Psi T_d. \quad (۷۷-۲)$$

که همان نتیجه خواسته شده است. این فرایند را قطری کردن یک عملگر می‌نامیم^{۱۰}.

۴-۴-۲ نظریه طیفی عملگرها

خود را به موردی محدود می‌کنیم که در آن فضای هیلبرت عملگر دارای ابعاد

محدودی است علاوه بر این T را یک عملگر هرمیتی یا یک عملگر یکانی در نظر خواهیم گرفت.^{۱۱}

فرض کنید L_n فضای هیلبرت n بعدی ($0 < n < \infty$) باشد که روی میدان اعداد مختلط تعریف شده است، بنابراین T دقیقاً دارای n ویژه مقدار است. فرض کنید t_1, t_2, \dots, t_m ویژه مقدارهای متمایز T باشند، بطوری که $m \leq n$. اگر ویژه مقدار t_i ، k_i بار تبهکن باشد، تعداد k_i ویژه بردار مستقل خطی T در L_n وجود دارد که ویژه مقدارشان t_i است. این ویژه بردارها تشکیل یک پایه برای زیرفضای k_i بعدی، M_i متعلق به L_n می دهند. M_i را ویژه فضای T متناظر با ویژه مقدار t_i می نامیم. هر بردار از M_i یک ویژه بردار T با ویژه مقدار t_i است.

بدین ترتیب ویژه فضاهای $M_1, M_2, \dots, M_i, \dots, M_m$ را متناظر با ویژه مقدارهای $t_1, \dots, t_i, \dots, t_m$ خواهیم داشت. اگر T یک عملگر هرمیتی یا یک عملگر یکانی باشد، در این صورت این زیرفضاها دو به دو متعامدند^{۱۲}؛ دو فضا را متعامد گوئیم اگر هر بردار از یک فضا بر هر بردار از فضای دیگر عمود باشد. در مورد حاضر، این را با نوشتن $M_i \perp M_j$ ($i \neq j$) نمایش می دهیم.

اینک هر بردار u ($u \in L_n$) می تواند بطور منحصر بفردی به صورت زیر بیان شود:

$$u = u_1 + u_2 + \dots + u_m, \quad (78-2)$$

که در آن u_i در M_i قرار دارد. لذا، u_i ها دو به دو متعامدند. عمل T روی u عبارت است از:

$$\begin{aligned} Tu &= Tu_1 + Tu_2 + \dots + Tu_m \\ &= t_1 u_1 + t_2 u_2 + \dots + t_m u_m. \end{aligned} \quad (79-2)$$

۱۱- بحث این قسمت، در واقع برای یک رده عمومی تراز عملگرها که به عملگرهای نرمال موسومند معتبر است. یک عملگر T را عملگر نرمال گوئیم اگر با مزدوج هرمیتی اش جابجاپذیر باشد، یعنی، $TT^J = T^J T$. واضح است که عملگرهای هرمیتی و یکانی عملگرهای نرمال هستند.

۱۲- در این زیربخش، نتایج مهم نظریه طیفی را بدون اثبات ذکر می کنیم. برای اثبات خواننده می تواند به سیمونز (۱۹۶۳) مراجعه کند.

این رابطه، بطور منحصر بفردی عمل T روی هر بردار از فضای هیلبرت L_n را تعیین می کند. برای این که نتیجه فوق را به صورت مناسبتری بیان کنیم m عملگر تصویری P_i را روی زیرفضاهای M_i تعریف می کنیم بطوری که عمل P_i روی u تصویر u روی M_i باشد.

$$P_i u = u_i. \quad (۸۰-۲)$$

در این صورت معادله (۲-۷۹) به صورت زیر درمی آید:

بنابراین می توان نوشت:

$$Tu = t_1 P_1 u + t_2 P_2 u + \dots + t_m P_m u \quad \forall u \in L_n,$$

$$T = t_1 P_1 + t_2 P_2 + \dots + t_m P_m. \quad (۸۱-۲)$$

این رابطه به تجزیه طیفی T موسوم است. برای هر عملگر هرمیتی یا یکانی، که روی یک فضای هیلبرت با بعد متناهی عمل می کند، تجزیه طیفی وجود دارد و منحصر بفرد می باشد.

مفاهیمی را که در این بخش ارائه دادیم ارتباط نزدیکی به مسأله ویژه مقداری در فیزیک داشته و کاربردهای مفیدی در آن دارند، زیرا در مکانیک کوانتومی، با ویژه مقادیرها و ویژه تابعهای عملگرهای هرمیتی سروکار داریم.

۲-۵ جمع مستقیم و ضرب مستقیم ماتریسها

در این جا قدری از بحث فوق منحرف می شویم و دو عمل مهم با ماتریسها را بررسی می کنیم که معمولاً در کتابهای مقدماتی جبر ماتریسی بررسی نمی شود. این دو عبارتند از: جمع مستقیم و ضرب مستقیم (که به ضرب خارجی یا ضرب کروئکر نیز موسوم است) ماتریسها.

۲-۵-۱ جمع مستقیم ماتریسها

جمع مستقیم دو ماتریس مربعی $A = [A_{ij}]$ از مرتبه m و $B = [B_{ij}]$ از مرتبه n یک

ماتریس مربعی C از مرتبه $m+n$ است که به صورت زیر تعریف می شود:

$$\det D = (\det A) (\det B) (\det C), \quad (۲-۸۴ الف)$$

$$\text{trace } D = \text{trace } A + \text{trace } B + \text{trace } C, \quad (۲-۸۴ ب)$$

$$D^{-1} = A^{-1} \oplus B^{-1} \oplus C^{-1}, \quad (۲-۸۴ ج)$$

که می توان باتوجه به (۲-۸۳) دید. همچنین اگر، A_1 و A_2 ماتریسهای مربعی از مرتبه n و

B_1 و B_2 ماتریسهای مربعی از مرتبه m باشند، در این صورت ۱۳ :

$$(A_1 \oplus B_1) (A_2 \oplus B_2) = (A_1 A_2) \oplus (B_1 B_2). \quad (۲-۸۴ د)$$

۲-۵-۲ ضرب مستقیم ماتریسها

ضرب مستقیم دو ماتریس $A = (A_{lm})$ از مرتبه $L \times M$ و $B = [B]_{pq}$ از

مرتبه $P \times Q$ ماتریسی است مانند C از مرتبه $J \times I$ که در آن $I = LP$ و $J = MQ$. این

ماتریس را می توان به صورت زیر نوشت:

$$C = A \otimes B = \begin{bmatrix} A_{11}B & A_{12}B & \dots & A_{1M}B \\ A_{21}B & A_{22}B & \dots & A_{2M}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{L1}B & A_{L2}B & \dots & A_{LM}B \end{bmatrix}, \quad (۲-۸۵)$$

که در آن «عنصر» $A_{lm}B$ یک ماتریس از مرتبه $P \times Q$ است:

$$A_{lm}B = \begin{bmatrix} A_{lm}B_{11} & A_{lm}B_{12} & \dots & A_{lm}B_{1Q} \\ A_{lm}B_{21} & A_{lm}B_{22} & \dots & A_{lm}B_{2Q} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{lm}B_{P1} & A_{lm}B_{P2} & \dots & A_{lm}B_{PQ} \end{bmatrix}. \quad (۲-۸۶)$$

برای به دست آوردن یک عنصر C برحسب عناصر A و B از نمادگذاری

$C = [C]_{lp, mq}$ استفاده می کنیم که در آن یک سطر C توسط نشانه دوگانه (lp) و یک

ستون C توسط نشانه دوگانه (mq) نمایش داده شده است، بطوری که:

$$C_{lp, mq} = A_{lm} B_{pq}. \quad (۸۷-۲)$$

می توانیم سطرها و ستونهای C را توسط دو اندیس جدید i و j ($1 \leq i \leq I, 1 \leq j \leq J$) نمایش دهیم.

$$C \equiv [C_{ij}] = [C_{lp, mq}]. \quad (۸۸-۲)$$

این نمادگذاری نسبتاً پیچیده می تواند با یک مثال روشن شود. ضرب مستقیم:

$$A = \begin{matrix} (1) & (2) & (3) \\ \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{bmatrix} \end{matrix}, \quad B = \begin{matrix} (1) & (2) \\ \begin{bmatrix} h & r \\ k & s \\ l & t \end{bmatrix} \end{matrix}$$

ماتریس 6×6 زیر است:

$$C = A \otimes B = \begin{matrix} (11) & (12) & (21) & (22) & (31) & (32) \\ \begin{bmatrix} ah & ar & bh & br & ch & cr \\ (i2) & ak & as & bk & bs & ck & cs \\ (13) & al & at & bl & bt & cl & ct \\ (21) & dh & dr & eh & er & fh & fr \\ (22) & dk & ds & ek & es & fk & fs \\ (23) & dl & dt & el & et & fl & ft \end{bmatrix} \end{matrix} \quad (۸۹-۲)$$

توجه کنید که سطرها و ستونهای ماتریس C با طرحهای متفاوتی برچسب گذاری شده است. از این رو، ملاحظه می کند که درحالی که سطر سوم C به صورت (۱۳) برچسب زده شده ستون سوم آن به صورت (۲۱) است. یک عنصر از C، به عنوان مثال، عبارت است از:

$$C_{21, 31} = fh = A_{23} B_{11},$$

که با (۸۷-۲) سازگار است. اکنون با مشخص کردن هر نشانه دوگانه با یک عدد، سطرها و ستونها را مجدداً برچسب می زنیم. در این صورت: $[C_{ij}] = [C_{lp, mq}]$ که در آن $i \rightarrow (lp)$ و $j \rightarrow (mq)$ و $1 \leq i, j \leq 6$ بدین ترتیب در مثال فوق داریم: $C_{21, 31} = C_{45}$. در حالت کلی، مشخص کردن نشانه دوگانه با یک نماد را می توان با قرار دادن

$$j = (m-1)Q + q \text{ و } i = (l-1)P + p \text{ : لذا}$$

$$C_{lp, mq} \equiv C_{ij} = C_{(l-1)P+p, (m-1)Q+q}$$

این مفهوم نیز می تواند به ضرب مستقیم بیش از دو ماتریس تعمیم داده شود. هیچ محدودیتی در مرتبه ماتریسهایی که ضرب مستقیم آنها را به دست می آوریم وجود ندارد. اگر A_1, A_2, B_1, B_2 ماتریسهایی باشند که ابعادشان طوری باشد که ضربهای ماتریسی معمولی $A_1 A_2$ و $B_1 B_2$ تعریف شده باشند، در این صورت ضرب مستقیم دارای خاصیت مهم زیر است:

$$(A_1 \otimes B_1) (A_2 \otimes B_2) = (A_1 A_2) \otimes (B_1 B_2). \quad (۹۰-۲) \text{ (الف)}$$

به علاوه اگر F حاصل ضرب مستقیم تعدادی ماتریس مربعی، نظیر A, B, C, \dots باشد، آنگاه

$$\text{trace } F = (\text{trace } A) (\text{trace } B) (\text{trace } C) \dots \quad (۹۰-۲) \text{ (ب)}$$

عمل ضرب مستقیم ماتریسها شرکت پذیر است، بنابراین:

$$A \otimes (B \otimes C) = (A \otimes B) \otimes C \equiv A \otimes B \otimes C. \quad (۹۱-۲)$$

این عمل نسبت به جمع توزیع پذیر نیز هست یعنی:

$$A \otimes (C+D) = A \otimes C + A \otimes D. \quad (۹۲-۲)$$

به علاوه، از (۹۰-۲) الف) نتیجه می شود که:

$$\begin{aligned} (AB) \otimes (AB) \otimes (AB) &= (AB) \otimes ((A \otimes A) (B \otimes B)) \\ &= (A \otimes A \otimes A) (B \otimes B \otimes B). \end{aligned} \quad (۹۳-۲)$$

با تعمیم معادله فوق، داریم:

$$(AB)^{[k]} = (A)^{[k]} (B)^{[k]}, \quad (۹۴-۲)$$

که در آن k مرتبه

$$A^{[k]} = \underbrace{A \otimes A \otimes A \otimes \dots \otimes A}_k \quad (۹۵-۲)$$

بالاخره اگر A و B ماتریسهای مربعی با ویژه مقدارها و ویژه بردارهای λ_i ، x_i و μ_j ، y_j باشند ویژه مقدارهای $A \otimes B$ عبارتند از: $\lambda_i \mu_j$ و ویژه بردارهایشان عبارتند از: $x_i \otimes y_j$.

یعنی اگر $Ax_i = \lambda_i x_i$ و $By_j = \mu_j y_j$ آنگاه

$$(A \otimes B)(x_i \otimes y_j) = \lambda_i \mu_j (x_i \otimes y_j). \quad (2-96)$$

اثبات این رابطه مستقیماً از (2-9 الف) نتیجه می‌شود. این مفاهیم در فصل بعدی بسیار مفید خواهد بود.

مسائل فصل دوم

۱-۲. نشان دهید که هر یک از مجموعه‌های زیر یک فضای برداری تشکیل می‌دهند. همچنین معین کنید چه گونه در هر کدام از این فضاها، بردارهای پایه را انتخاب می‌کنید. بعد هر فضا چند است؟ میدانی که هر فضا روی آن تعریف شده است، کدام است؟

(i) مجموعه بردارهایی که سرعت‌های ممکن یک ذره آزاد در مکانیک کلاسیک را مشخص می‌کنند.

(ii) مجموعه بردارهایی که بردارهای موجی ممکن یک ذره آزاد در مکانیک کلاسیک یا مکانیک کوانتومی را مشخص می‌کنند (توجه کنید که این مجموعه را معمولاً فضای $k \rightarrow$ می‌نامند).

(iii) مجموعه جوابهای پیوسته مجذوراً انتگرال پذیر یک معادله دیفرانسیلی خطی همگن معمولی از مرتبه n .

(iv) مجموعه توابع پیوسته مجذوراً انتگرال پذیری که به چند متغیر بستگی دارند.

(v) مجموعه ماتریسهای مربعی حقیقی مرتبه n .

(vi) مجموعه ماتریسهای مربعی مختلط مرتبه n .

۲-۲. معادله (2-24) را ثابت کنید.

۳-۲. معادله (2-26) را ثابت کنید [راهنمایی: از (2-24) استفاده کنید].

۲-۴. کدام یک از عبارتهای زیر صحیح و کدام غلط است؟ توضیح دهید.

(i) اگر تمام بردارهای یک مجموعه دو به دو متعامد باشند، آن مجموعه، الزاماً یک مجموعه متعامد است.

(ii) اگر تمام بردارهای یک مجموعه دو به دو از یکدیگر مستقل باشند، آنگاه، آن مجموعه الزاماً، یک مجموعه بردارهای مستقل خطی است.

۲-۵. عملگرهای تصویرگر P را که توسط $(2-28)$ تعریف شده اند، در نظر بگیرید. نشان دهید که اگر $i \neq j$ ، در این صورت $P_i P_j = 0$. (معنی این عبارت این است که، عملگرهای تصویرگر دو به دو متعامدند.)

۲-۶. نشان دهید که ویژه مقدارهای یک عملگر هرمیتی حقیقی اند و قدر مطلق ویژه مقدارهای هر عملگر یکانی برابر واحد است.

۲-۷. نشان دهید که توابع $P_0(x)=1$ و $P_1(x)=x$ در بازه $-1 \leq x \leq 1$ متعامدند. اسکالرهای a' و b' را پیدا کنید بطوریکه $P_2(x)=1+a'x+b'x^2$ در همان بازه بر هر دو تابع $P_0(x)$ و $P_1(x)$ متعامد باشد. با این روش، چند جمله ایهای $P_n(x)=1+ax+bx^2+\dots+gx^n$ را طوری ایجاد کنید که $P_n(x)$ ، در بازه $[-1, 1]$ بر هر یک از توابع $P_m(x)$ ، به ازای $0 \leq m \leq n-1$ ، متعامد باشد. [این توابع، بجز در ضرایب ثابت، همان چند جمله ایهای لژاندر هستند].

۲-۸. ویژه مقدارها و ویژه بردارهای ماتریسهای زیر را پیدا کنید:

$$(i) \begin{bmatrix} 1/2 & 0 & -3\sqrt{3}/2 \\ 0 & 1 & 0 \\ -3\sqrt{3}/2 & 0 & -5/2 \end{bmatrix}, \quad (ii) \begin{bmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{bmatrix}.$$

۲-۹. جمع مستقیم و ضرب مستقیم ماتریسهای زیر را پیدا کنید:

$$(i) \begin{bmatrix} 2 & 5 & 9 \\ 1 & 4 & 7 \\ 3 & 3 & 3 \end{bmatrix} \text{ and } \begin{bmatrix} 6 & 4 \\ 2 & 7 \end{bmatrix},$$

$$(ii) \begin{bmatrix} 10 & 3 & -5 \\ -9 & 2 & 5 \\ 0 & 5 & -1 \end{bmatrix} \text{ and } \begin{bmatrix} 3 & 9 & 0 \\ 5 & -7 & 8 \\ 4 & 2 & -2 \end{bmatrix}.$$

۲-۱۰. ضرب مستقیم دو ماتریس زیر را پیدا کنید:

$$\begin{bmatrix} -2 & 3 & 4 \\ 8 & 7 & -6 \end{bmatrix} \text{ and } \begin{bmatrix} 9 \\ 6 \\ 3 \end{bmatrix}.$$

۲-۱۱. در مسأله (۲-۹) معادلات (۲-۸۴ الف)، (۲-۸۴ ب)، (۲-۸۴ ج) و (۲-۹۰ ب) را ثابت کنید.

۲-۱۲. فرض کنید p یک عدد اول باشد و مجموعه p عدد صحیح $(0, 1, 2, \dots, p-1)$ را در نظر بگیرید. نشان دهید که این مجموعه یک میدان با مد جمعی (p) و مد ضربی (p) به عنوان یک عمل دوتایی است. (یک میدان محدود، میدان گالوا نامیده می شود).

۲-۱۳. اگر $T(A)$ نمایش ماتریسی عملگر T در فضای برداری L_a و $T(B)$ نمایش ماتریسی T در فضای برداری L_b باشد، نشان دهید که نمایش ماتریسی T در فضای برداری $L_a \otimes L_b$ ، $T(A) \otimes T(B)$ خواهد بود.

کتاب شناسی فصل دوم

Albert (1956), Chapter 3; Courant and Hilbert (1966), Chapter 1; Halmos (1958); Helmberg (1969); Jackson (1962); Joshi (1984); Margenau and Murphy (1966), Chapter 10; Meijer and Bauer (1962), Chapter 1; Meschkowski (1968); von Neumann (1955); Newing and Cunningham (1967); Schmeidler (1965); Shilov (1965); Simmons (1963), Chapters 10 and 11; Trigg (1964); Van der Waerden (1949).

نظریه نمایش گروه‌های محدود

در فصل اول چند اندیشهٔ مقدماتی از گروه‌ها را برحسب مفاهیم مجرد عناصر دو مجموعه مورد بحث قرار دادیم. در فصل دوم عملگرها را که روی فضاهاى هیلبرت عمل می‌کردند بررسی کردیم و خواصی از آنها را که به کار فیزیک کوانتومی ارتباط پیدا می‌کرد مطالعه کردیم. در فیزیک به گروه‌های تبدیلاتی علاقه مندیم که روی فضاهاى هیلبرت مناسب سیستمهای فیزیکی عمل می‌کنند. هر بردار از فضای هیلبرت یک «حالت» سیستم را مشخص می‌کند. در بخش ۲-۲ مفهوم ماتریس معرف یک عملگر در یک فضای هیلبرت را وارد کردیم. از این رو طبیعی به نظر می‌رسد که این دو مفهوم را ترکیب کنیم و ماتریسهای معرف تمام عناصر یک گروه را به دست آوریم. مطالعهٔ چنین ماتریسهایی تحت نظریهٔ نمایش گروه‌ها قرار می‌گیرد. در این فصل، فقط گروه‌های محدود را بررسی خواهیم کرد، هر چند اغلب نتایج یا به همان خوبی در مورد گروه‌های محدود برقرار است و یا به آسانی قابل اصلاح می‌باشد. گروه‌های پیوسته و نمایشهای آنها در فصل بعدی مورد بحث قرار خواهند گرفت.

۳-۱ مقدمه

۳-۱-۱ تعریف:

فرض کنید $G = \{E, A, B, C, \dots\}$ یک گروه محدود از مرتبه g باشد و عنصر همانی آن E باشد. فرض کنید $T = \{T(E), T(A), T(B), \dots\}$ یک مجموعه از ماتریسهای مربعی باشد که مرتبهٔ همهٔ آنها یکی است و دارای خاصیت زیر می‌باشد:

$$T(A) T(B) = T(AB), \quad (۳-۱-الف)$$

یعنی، اگر در گروه G ، $AB = C$ باشد، در این صورت:

$$T(A) T(B) = T(C), \quad (۳-۱-ب)$$

به مجموعه ماتریسهای T یک نمایش گروه G گفته می‌شود. مرتبه ماتریسهای T ، بعد نمایش نامیده می‌شود.

فرض کنید L_n یک فضای برداری n بعدی باشد که عملگرهای G روی آن عمل می‌کنند. فرض کنید $\{\emptyset_j\}$ یک پایه راست هنجار در L_n باشد. در این صورت عمل یک عنصر A ($A \in G$) روی یک بردار پایه توسط رابطه زیر داده می‌شود. ((۲-۱۹) و (۲-۲۰) را ببینید.)

$$A \phi_i = \sum_{j=1}^n \phi_j T_{ji}(A), \quad (۲-۳)$$

که در آن $T(A)$ نمایش A در پایه $\{\emptyset_j\}$ است. سپس یک عنصر ماتریس $T(A)$ ، با مشابهت با (۲-۲۱) توسط رابطه زیر داده می‌شود:

$$T_{ji}(A) = (\phi_j, A \phi_i). \quad (۳-۳)$$

می‌توانیم بطور مشابه ماتریسهای متناظر با تمام عناصر G را (با همان پایه $\{\emptyset_j\}$) به دست آوریم. در این صورت واضح است که این ماتریسها یک نمایش G را ایجاد می‌کنند، زیرا از یک طرف

$$AB \phi_i = A \sum_{j=1}^n \phi_j T_{ji}(B) = \sum_{k,j=1}^n \phi_k T_{kj}(A) T_{ji}(B),$$

و از طرف دیگر

$$AB \phi_i = \sum_{k=1}^n \phi_k T_{ki}(AB).$$

چون دو عمل فوق باید یک نتیجه بدهد، داریم:

$$\sum_{j=1}^n T_{kj}(A) T_{ji}(B) = T_{ki}(AB) \quad \forall 1 \leq i, k \leq n;$$

$$T(A)T(B)=T(AB), \quad \text{یا:}$$

که همان (۳-۱-الف) است.

ممکن است وسوسه شویم و نتیجه گیری کنیم که T تحت عمل ضرب ماتریسی یک گروه است، لیکن باید در این جا دقت کنیم زیرا ماتریسهای T لزوماً همگی متمایز نیستند. اگر هر ماتریس متمایز T فقط یکبار در نظر گرفته شود مجموعه حاصل مسلماً تحت عمل ضرب ماتریسی، یک گروه است. از این به بعد هر گاه به «گروه» T اشاره کردیم، در واقع مقصود ما مجموعه ماتریسهای متمایز T است.

اگر تمام ماتریسهای T متمایز باشند، مسلماً تناظر یک به یک بین عناصر G و ماتریسهای T برقرار است. در این صورت، گروههای G و T با یکدیگر ایزومرفیک هستند و نمایش تولید شده توسط ماتریسهای T ، نمایش وفادار G نامیده می شود. از طرف دیگر، اگر ماتریسهای T همگی متمایز نباشند، تنها یک همومرفیزم از G به T وجود دارد و یک چنین نمایشی را نمایش بی وفای G می نامیم.

ساده ترین نمایش یک گروه با وابسته کردن واحد^۱ به هر عنصر گروه به دست

می آید. بنابراین در مثال گروه C_{4v} (رک: بخش ۱-۱-۲)، تناظر زیر را خواهیم داشت:

$$\text{عنصر} \quad E \quad C_4 \quad C_4^2 \quad C_4^3 \quad m_x \quad m_y \quad \sigma_u \quad \sigma_v$$

$$\text{نمایش} \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1 \quad 1.$$

عموماً مجموعه $(1, 1, \dots, 1)$ محققاً یک نمایش برای هر گروه می باشد. به عنوان مثال، حاصلضرب دو عنصر مثلاً σ_u در C_{4v} در مورد بالا متناظر است با $1 \times 1 = 1$ در نمایش مربوطه آن را «نمایش همانی» می نامیم.

واضح است که نمایش همانی یک نمایش بی وفای هر گروه است. مجموعه هشت ماتریس، مسأله ۱-۱ (۷) یک نمایش باوفای C_{4v} است، زیرا همان طوری که در مسأله (۶-۱) نشان داده شده است، با گروه C_{4v} ایزومرفیک است. هر گروه لااقل دارای یک نمایش باوفاست، اثبات این مطلب در تمرین (۳-۱۴) بعهده دانشجویان گذاشته شده است.

۱- یک عدد ثابت، حالت خاص یک ماتریس است، و عبارت است از یک ماتریس مربعی از مرتبه

۳-۱-۲ چند خاصیت نمایش یک گروه

توجه کنید که عنصر همانی E ی گروه G برای تمام عناصر A ، $(A \in G)$ دارای این خاصیت است که $EA=AE=A$. بر حسب ماتریسهای یک نمایش، این بدان معنی است که:

$$T(E)T(A) = T(A)T(E) = T(A). \quad (۴-۳)$$

ملاحظه می‌کنیم که این معادله تنها زمانی برقرار است که $T(E)=E$ ، یعنی $T(E)$ ماتریس واحد باشد^۲. بنابراین، در هر نمایشی، عنصر همانی گروه باید با ماتریس واحد از مرتبه مناسب نمایش داده شود.

با قرار دادن A^{-1} به جای B در (۳-۱-الف)، داریم:

$$\begin{aligned} T(A)T(A^{-1}) &= T(AA^{-1}) = T(E) = E, & \text{یا} \\ T(A^{-1}) &= [T(A)]^{-1}. & (۵-۳) \end{aligned}$$

یعنی نمایش ماتریسی معکوس یک عنصر برابر است با معکوس ماتریس معرف آن عنصر. فرض کنید دو نمایش زیر از یک گروه G را داریم:

$$\begin{aligned} T_1 &= \{T_1(E), T_1(A), \dots\}, \\ T_2 &= \{T_2(E), T_2(A), \dots\}. \end{aligned}$$

اگر یک ماتریس غیرتکینه S وجود داشته باشد، بطوری که برای تمام عناصر گروه G داشته باشیم:

$$T_1(A) = S^{-1} T_2(A) S, \quad T_1(B) = S^{-1} T_2(B) S, \quad (۶-۳)$$

در این صورت T_1 و T_2 را نمایشهای هم ارز گروه G می‌نامیم. یعنی می‌توان ماتریسهای مجموعه اول را با یک «تبدیل تشابه» بردارهای مختصات فضایی برداری که هر دو نمایش در آن تعریف شده‌اند، از ماتریسهای مجموعه دوم به دست آورد. این را با رابطه زیر نمایش می‌دهیم:

$$T_1 = S^{-1} T_2 S. \quad (۷-۳)$$

۲- بر طبق قرارداد ما از نشانه E هم برای عملگر همانی و هم برای ماتریس واحد استفاده خواهیم کرد.

اگر دو نمایش یک گروه هم ارز نباشند، این دو را نمایشهای «غیر هم ارز» یا متمایز می نامیم.

۲-۳ زیرفضاهای تغییرناپذیر و نمایشهای کاهش پذیر

بدیهی است که فضای برداری L_n که برای تولید یک نمایش گروه G به کار می رود دارای خاصیت زیر است:

برای هر عنصر A از G و هر بردار $\phi \in L_n$ ، $\phi \in A$ نیز به L_n تعلق دارد. در این صورت می گیریم که فضای برداری L_n تحت تبدیلات G بسته است، یا بطور ساده تر، تحت G بسته است. یعنی عمل هر عنصر از G روی هر بردار از L_n به برداری خارج از L_n منجر نمی شود. یک فضای برداری L_m را زیرفضای، یک فضای برداری دیگر L_n می گوئیم اگر هر بردار از L_m در L_n نیز قرار داشته باشد. اگر بردارهای L_m تمام فضای L_n را فرا نگیرد، در این صورت L_m را «زیرفضای خاص» L_n می نامیم. بدین ترتیب L_n نیز یک زیرفضای خودش می باشد، ولی مسلماً یک زیرفضای خاص نیست.

فضای برداری L_n ، که تحت G بسته است، ممکن است دارای یک زیرفضای خاص L_m باشد که تحت G تغییرناپذیر است. در چنین موردی، L_m یک زیرفضای تغییرناپذیر L_n تحت G نامیده می شود و فضای L_n را کاهش پذیر تحت G می گوئیم.

۱-۲-۳ کاهش پذیری یک نمایش

مانند قبل، فرض کنید $\{T(E), T(A), T(B), \dots\}$ یک نمایش L_n در G باشد. اکنون بیان می کنیم که اگر L_n دارای یک زیرفضای تغییرناپذیر L_m ($m < n$) تحت G باشد، آنگاه ماتریسهای نمایش در یک پایه مناسب به صورت زیرند:

$$T(A) = \begin{bmatrix} D^{(1)}(A) & 0 \\ X(A) & D^{(2)}(A) \end{bmatrix}, \quad (A-3)$$

$\begin{matrix} m \times m & & m \times (n-m) \\ \hline & & 0 \\ \hline (n-m) \times m & & (n-m) \times (n-m) \end{matrix}$

که در آن $D^1(A)$ و $D^2(A)$ ماتریسهای مربعی به ترتیب از مرتبه m و $n-m$ می باشند.

$X(A)$ از مرتبه $(n-m) \times m$ و 0 ، ماتریس صفر از مرتبه $m \times (n-m)$ است. برای نشان دادن این نکته از نمادگذاری سطری بردار استفاده می‌کنیم:

$$\phi_i = (0 \ 0 \ 0 \dots 1_i \ 0 \dots 0), \quad (9-3)$$

یعنی، ستون i ام یک و سایر عناصر صفر است. برچسب گذاری n بردار پایه را می‌توان برای سهولت طوری انتخاب کرد که m بردار پایه اول در L_m باشد. در این صورت عمل $A \in G$ ، روی یک بردار پایه ϕ_μ ($1 \leq \mu \leq m$) به صورت زیر نوشته می‌شود:

$$A\phi_\mu = (0 \ 0 \dots 1_\mu \ 0 \dots 0) \begin{bmatrix} T_{11} \dots T_{1m} & T_{1,m+1} \dots T_{1n} \\ \vdots & \vdots \\ T_{m1} \dots T_{mm} & T_{m,m+1} \dots T_{mn} \\ \hline T_{m+1,1} \dots & \dots T_{m+1,n} \\ \vdots & \vdots \\ T_{n1} \dots T_{nm} & T_{n,m+1} \dots T_{nn} \end{bmatrix} \begin{matrix} 1 \times n \\ \\ \\ n \times n \end{matrix}$$

$$= (T_{\mu 1} \ T_{\mu 2} \dots T_{\mu m} \ T_{\mu, m+1} \dots T_{\mu n}), \quad (10-3)$$

که برای اختصار به جای $T_{ij}(A)$ ، T_{ij} نوشته ایم. اما چون L_m خودش تحت G تغییرناپذیر است، بردار تبدیل یافته $A\phi_\mu$ نیز به L_m متعلق است، لذا مؤلفه هایش در راستای بردارهای پایه $\phi_{m+1}, \phi_{m+2}, \dots, \phi_n$ ، باید صفر باشد یعنی:

$$T_{\mu k}(A) = 0, \quad m+1 \leq k \leq n. \quad (11-3)$$

اما، μ دلخواه است و فرض کنید از 1 تا m مقدار بگیرد، در این صورت ملاحظه می‌کنیم که تمام عناصر داخل بلوک مستطیلی از مرتبه $m \times (n-m)$ در گوشه راست بالایی $T(A)$ صفرند. در نتیجه $T(A)$ دارای همان شکل نشان داده شده در (۸-۳) است.

حاصلضرب دو عنصر از گروه G را در نظر بگیرید، مثلاً $AB=C$. برحسب

ماتریسهای نمایش بالا، داریم: $T(A)T(B) = T(C)$ یا:

$$T(C) = \begin{bmatrix} D^{(1)}(A) & 0 \\ X(A) & D^{(2)}(A) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} D^{(1)}(B) & 0 \\ X(B) & D^{(2)}(B) \end{bmatrix} \quad (12-3)$$

$$= \begin{bmatrix} D^{(1)}(A)D^{(1)}(B) & 0 \\ X(A)D^{(1)}(B) + D^{(2)}(A)X(B) & D^{(2)}(A)D^{(2)}(B) \end{bmatrix}$$

اما $T(C)$ خود باید به شکل زیر باشد:

$$T(C) = \left[\begin{array}{c|c} D^{(1)}(C) & 0 \\ \hline X(C) & D^{(2)}(C) \end{array} \right]$$

لذا، داریم:

$$D^{(1)}(A) D^{(1)}(B) = D^{(1)}(C), \quad (۱۳-۳)$$

$$D^{(2)}(A) D^{(2)}(B) = D^{(2)}(C),$$

$$X(A) D^{(1)}(B) + D^{(2)}(A) X(B) = X(C). \quad (۱۴-۳)$$

از (۱۳-۳) ملاحظه می‌شود که دو مجموعه $D^{(1)} = \{D^{(1)}(E), D^{(1)}(A), \dots\}$ و $D^{(2)} = \{D^{(2)}(E), D^{(2)}(A), \dots\}$ نیز دو نمایش جدید برای گروه می‌دهند که ابعادشان به ترتیب m و $n-m$ است. همچنین واضح است که بردارهای پایه $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_m\}$ بردارهای پایه برای نمایش $D^{(1)}$ و $n-m$ بردار پایه باقیمانده $\{\phi_{m+1}, \dots, \phi_n\}$ بردارهای پایه برای $D^{(2)}$ می‌باشند.

در این مورد می‌گوییم T یک نمایش کاهش پذیر است. بدین ترتیب ملاحظه می‌کنیم که کاهش پذیری یک نمایش به وجود یک زیرفضای تغییرناپذیر خاص کل فضا ارتباط دارد.

فضای برداری p بعدی ($n-m = p$) که با بردارهای پایه $\{\phi_{m+1}, \dots, \phi_n\}$ تعریف می‌شود را با L_p نمایش می‌دهیم.

۳-۲-۲ یک قضیه درباره نمایشها

اکنون نشان می‌دهیم که هر نمایش T از یک گروه محدود، که ماتریسهای آن ممکن است غیریکانی باشند، (از طریق یک تبدیل تشابه) با یک نمایش توسط ماتریسهای یکانی معادل است. برای این منظور، یک ماتریس هرمیتی را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$H = \sum_{A \in G} T(A) T^\dagger(A), \quad (۱۵-۳)$$

که جمع بندی روی تمام عناصر گروه G است. از یک قضیه جبر ماتریسی استفاده می‌کنیم

که بنابه آن یک ماتریس هرمیتی می‌تواند توسط یک تبدیل یکانی قطری کامل شود. اگر U تبدیل لازم باشد، در این صورت:

$$U^{-1} H U = H_d, \quad (16-3)$$

که در آن H_d یک ماتریس قطری است که عناصر قطری آن ویژه مقادیرهای (حقیقی) H می‌باشند. با قرار دادن (۱۵-۳) در (۱۶-۳)، داریم:

$$\begin{aligned} H_d &= U^{-1} \sum_{A \in G} T(A) T^+(A) U \\ &= \sum_{A \in G} U^{-1} T(A) U U^{-1} T^+(A) U \\ &= \sum_{A \in G} T'(A) T'^+(A), \end{aligned} \quad (17-3)$$

که در آن $T'(A) = U^{-1} T(A) U$. عنصر k ام قطر اصلی در (۱۷-۳) عبارت است از:

$$\begin{aligned} [H_d]_{kk} &\equiv d_k = \sum_{A \in G} \sum_j T_{kj}'(A) T_{jk}'^+(A) \\ &= \sum_{A \in G} \sum_j T_{kj}'(A) T_{kj}'^*(A) \\ &= \sum_{A \in G} \sum_j |T_{kj}'(A)|^2. \end{aligned} \quad (18-3)$$

چون همه جملات در جمع بندی، غیر منفی است، داریم: $d_k \geq 0$. اما d_k تنها زمانی صفر است که به ازای تمام مقادیر j و تمام عناصر A ، $(A \in G)$ ، داشته باشیم، $T_{kj}'(A) = 0$. در این صورت در ترمینان تمام ماتریسهای نمایش صفر است، موردی که مستثنا کرده ایم. لذا $d_k \geq 0$ ، یعنی d_k باید مثبت باشد^۳.

به عنوان یک نتیجه، واضح است که H_d یک ماتریس غیر تکیه نیز هست. از این رو می‌توانیم هر توانی از ماتریس H_d را به دست آوریم، برای این کار کافی است تمام عناصر قطر اصلی H را به همان توان برسانیم، یعنی:

$$[(H_d)^p]_{kk} = (d_k)^p. \quad (19-3)$$

۳- ماتریسی که تمام ویژه مقادیر هایش مثبت باشد یک ماتریس مثبت معین نامیده می‌شود.

که در آن p یک عدد حقیقی مثبت یا منفی است.

در این صورت ماتریس تبدیل تشابه لازم که ماتریسهای غیریکانی $T(A)$ را به

ماتریسهای یکانی $\Gamma(A)$ تبدیل می کند عبارت است از:

$$V = UH_d^{1/2}, \quad (20-3)$$

که از آن داریم:

$$\Gamma(A) = V^{-1} T(A) V \\ = H_d^{-1/2} U^{-1} T(A) U H_d^{1/2} \quad (21-3)$$

$$= H_d^{-1/2} T'(A) H_d^{1/2}. \quad (22-3)$$

برای این که نشان دهیم ماتریسهای $\Gamma(A)$ واقعاً یکانی هستند، توجه کنیم که:

$$\begin{aligned} \Gamma(A) \Gamma^\dagger(A) &= [H_d^{-1/2} T'(A) H_d^{1/2}] [H_d^{1/2} T'^\dagger(A) H_d^{-1/2}] \\ &= H_d^{-1/2} T'(A) H_d T'^\dagger(A) H_d^{-1/2} \\ &= H_d^{-1/2} T'(A) \sum_{B \in G} T'(B) T'^\dagger(B) T'^\dagger(A) H_d^{-1/2} \quad \text{به کمک (2-17)} \\ &= H_d^{-1/2} \sum_{B \in G} T'(AB) T'^\dagger(AB) H_d^{-1/2} \\ &= H_d^{-1/2} H_d H_d^{-1/2} \\ &= E, \end{aligned} \quad \text{به کمک (1-9)}$$

که نشان می دهد $\Gamma(A)$ یک ماتریس یکانی است.

اگر عناصر گروه G ، عملگرهای یکانی باشند، تبدیل تشابه از نمایش T به نمایش Γ دارای یک مفهوم ساده فیزیکی است - این تبدیل به معنی رفتن از یک دستگاه مختصات مایل به دستگاه مختصات متعامد است. طبیعت غیریکانی ماتریسهای $T(A)$ و غیره دلالت بر این دارد که بردارهای پایه L_n ، که به عنوان پایه برای نمایش T انتخاب شده اند، راست هنجار نیستند، درحالی که نمایش Γ توسط ماتریسهای یکانی نشان می دهد که بردارهای پایه برای نمایش Γ راست هنجارند. متوسط ماتریس V در (3-20) به این تبدیل از دستگاه مختصات مایل، مثلاً $\Phi = (\phi_1, \dots, \phi_n)$ به دستگاه مختصات متعامد $\Psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n)$ دست یافته ایم، بطوری که $\Psi = \Phi V$ است. از این نظر، آنچه در این قضیه بیان کرده ایم در واقع چیز بسیار ساده و تقریباً بدیهی است. می توان در هر فضای برداری با تعداد محدودی بُعد

یک مجموعه بردار پایه راست هنجار انتخاب کرد، که مسلماً صحیح است. مشکل تعمیم این قضیه به نمایش‌های بی‌نهایت بعدی یا به نمایش‌های گروه‌های بی‌نهایت در همگرایی جمع بندی‌های مختلفی است که در اثبات به آنها مواجه می‌شویم. مع ذلک می‌توان ثابت کرد که این قضیه برای دسته‌های معینی از گروه‌های بی‌نهایت که گروه‌های فشرده نامیده می‌شوند، و در فصل بعدی مورد بحث قرار خواهند گرفت، برقرار است.

به خاطر این قضیه، از این به بعد تنها نمایش‌های با ماتریس‌های یکانی را در نظر خواهیم گرفت. بدون شک این امر بطور قابل ملاحظه‌ای کار را تسهیل خواهد کرد.

۳-۲-۳ نمایش‌های کاهش ناپذیر

اگر نمایش T که در بالا در نظر گرفته شد کاهش پذیر باشد، نمایش $\Gamma = \{\Gamma(E), \Gamma(A), \dots\}$ که توسط (۳-۲۱) تعریف شده است، نیز کاهش پذیر است، زیرا این دو در یک فضا تعریف شده‌اند و هم‌ارز می‌باشند. به علاوه، چون ماتریس‌های Γ یکانی هستند، باید به شکل زیر باشند:

$$\Gamma(A) = \left[\begin{array}{c|c} S^{(1)}(A) & 0 \\ \hline 0 & S^{(2)}(A) \end{array} \right], \quad (23-3)$$

که در آن دو نمایش توسط ماتریس‌های یکانی، $S(1) = \{S(1)(E), S(1)(A), \dots\}$ و $S(2) = \{S(2)(E), S(2)(A), \dots\}$ را داریم که در فضاهای L_p و L_m تعریف شده‌اند و از این رویه ترتیب هم‌ارز با $D(1)$ و $D(2)$ می‌باشند.

ممکن است که نمایش‌های $S(1)$ و $S(2)$ باز هم کاهش پذیر باشند یعنی ممکن است فضاهای L_p و L_m هم در درونشان شامل زیرفضاهای (ویژه) تغییر ناپذیر باشند. این فرایند می‌تواند آن قدر ادامه یابد تا دیگر نتوانیم یک تبدیل یکانی پیدا کنیم که کلیه ماتریس‌های نمایش را بیشتر کاهش دهد. بنابراین، شکل نهایی ماتریس‌های نمایش Γ مانند زیر خواهد بود:

$$\Gamma(A) = \left[\begin{array}{c} \Gamma^{(1)}(A) \\ \Gamma^{(2)}(A) \\ \vdots \\ \Gamma^{(s)}(A) \end{array} \right] \quad (24-3)$$

که در آن کلیه ماتریسهای Γ دارای ساختار کاهش یافته یکسانی هستند. وقتی چنین کاهش کاملی از نمایش حاصل شد، نمایشهای مؤلفه‌ای $\Gamma(1), \Gamma(2), \dots, \Gamma(s)$ را نمایشهای کاهش ناپذیر گروه G می‌نامیم و نمایش Γ را کاملاً کاهش یافته می‌نامیم.

توجه کنید که ممکن است یک نمایش کاهش ناپذیر بیش از یکبار در کاهش یک نمایش کاهش پذیر Γ واقع شود. ماتریسهای نمایش Γ دقیقاً جمع مستقیم ماتریسهای نمایشهای کاهش ناپذیر مؤلفه‌ای می‌باشند و این را به صورت زیر نشان می‌دهیم:

$$\begin{aligned} \Gamma &= a_1 \Gamma^{(1)} \oplus a_2 \Gamma^{(2)} \oplus \dots \oplus a_c \Gamma^{(c)} \\ &= \sum_i a_i \Gamma^{(i)}, \end{aligned} \quad (25-3)$$

که در رابطه دوم علامت جمع بندی به مفهوم جمع مستقیم است.

در وهله اول ممکن است از (۲۴-۳) چنین به نظر برسد که تعداد نمایشهای کاهش ناپذیر متمایز یک گروه بسیار زیاد و نامحدود است. اما، برای گروههای محدود این طور نیست، زیرا نمایشهای کاهش پذیر یک گروه در شرایط مختلفی صدق می‌کنند که تعدادشان را محدود می‌کند و در همان حال، در کاربردهای نظریه گروهها در مسائل فیزیکی بسیار مفید است. در چند بخش بعدی به مطالعه چنین خواصی از نمایشهای کاهش ناپذیر خواهیم پرداخت. به عنوان مثال نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} در بخش (۳-۶) مورد بحث قرار خواهد گرفت.

۳-۳ لم شور و قضیه تعامد

دو قضیه وجود دارد که از اهمیت اساسی برخوردارند و به عنوان لم های شور نامیده می شوند و در مطالعه نمایشهای تقلیل ناپذیر یک گروه فوق العاده مفیدند. این قضیه ها به قضیه تعامد نمایشهای کاهش ناپذیر نیز منجر می شوند و ما اکنون آنها را بررسی می کنیم. فرض می شود فضایی که این نمایشها در آن تعریف شده اند یک فضای برداری مختلط است.

۱-۳-۳ لم اول شور

اگر $\Gamma^{(i)}$ یک نمایش کاهش ناپذیر گروه G باشد و اگر ماتریس P با تمام ماتریسهای $\Gamma^{(i)}$ جابجاپذیر باشد، آنگاه P باید یک ماتریس ثابت باشد. یعنی $P = cE$ که در آن c یک اسکالر است. این لم را با دو روش اثبات می کنیم.

اثبات اول: فرض کنید A یک عنصر از گروه G باشد؛ سپس برای تمام A ها داریم:

$$\Gamma^{(i)}(A)P = P\Gamma^{(i)}(A) \quad A \in G. \quad (26-3)$$

اگر ابعاد $\Gamma^{(i)}$ برابر n باشد، P یک ماتریس مربعی از مرتبه n است، چون دربخش (۲-۳) تذکر دادیم که ماتریسهای یک نمایش می تواند یکانی در نظر گرفته شود، نتیجه می شود که هر یک از ماتریسهای $\Gamma(A)$ و $\Gamma(B)$ و غیره دارای یک مجموعه کامل از n ویژه بردار است. چون P با $\Gamma(A)$ و غیره جابجاپذیر است، نتیجه می شود که P نیز دارای n ویژه بردار مستقل خطی است^۴. فرض کنید x_j ها ویژه بردارهای P با ویژه مقدارهای c_j باشند. در این صورت داریم:

$$Px_j = c_j x_j. \quad (27-3)$$

با ضرب طرفین از چپ در $\Gamma^{(i)}(A)$ ، به دست می آوریم:

۴- p -ماتریس یک عملگر در همان فضای L_n است که $L^{(i)}$ در آن تعریف شده است.

$$\begin{aligned} \Gamma^{(i)}(A) P x_j &= \Gamma^{(i)}(A) c_j x_j, \\ P \Gamma^{(i)}(A) x_j &= c_j \Gamma^{(i)}(A) x_j, \end{aligned} \quad (28-3)$$

رابطه فوق بدین معنی است که $\Gamma^{(i)}(A) x_j$ به ازای تمام A ها ($A \in G$) ویژه بردارهای P بیا همان ویژه مقدار c_j می باشند. فرض کنید m تا از این ویژه بردارهای مستقل P ، که همگی دارای یک ویژه مقدار c_j هستند، وجود داشته باشد. اما ویژه بردارهای متعلق به یک ویژه مقدار یک زیر فضای L_m ایجاد می کنند که تحت G تغییرناپذیر است. حال اگر، L_m یک زیر فضای خاص L_n باشد، یعنی، اگر L_m همان L_n نباشد، در این صورت L_m دارای یک زیر فضای تغییرناپذیر است و همانطوری که در بخش ۳-۲-۱ نشان داده شده است نمایش $\Gamma^{(i)}$ باید کاهش پذیر باشد که این خلاف فرض است. بنابراین L_m باید با L_n یکسان باشد، که در این صورت تمام ویژه مقدارهای P با یکدیگر برابر بوده و مساوی، مثلاً $c_j \equiv c_j$ می باشند و در نتیجه $P = cE$.

یک امکان دیگر در بررسی فوق وجود دارد، و آن این که، زیر فضای تغییرناپذیر L_m ممکن است تنها شامل بردار صفر باشد. لیکن، این مورد مستثنای شود زیرا اگر x یک بردار صفر باشد، بطور بدیهی در معادله ویژه مقداری $Px = cx$ با هر ویژه مقدار دلخواه c صدق می کند. بدین ترتیب قضیه اثبات شد.

اثبات دوم: ابتدا نشان می دهیم که هر ماتریس هرمیتی که با همه ماتریسهای کاهش پذیر جابجاپذیر باشد، مضرب ثابتی از ماتریس واحد است. فرض کنید H یک ماتریس هرمیتی باشد که با همه ماتریسهای نمایش $\Gamma^{(i)}$ جابجاپذیر است. بنابراین به ازای تمام A ها:

$$H \Gamma^{(i)}(A) = \Gamma^{(i)}(A) H \quad A \in G. \quad (29-3)$$

فرض کنید U یک تبدیل یکانی باشد که H را قطری می کند، یعنی:

$$U^{-1} H U = H_d, \quad U H_d U^{-1} = H, \quad (30-3)$$

که در آن H_d یک ماتریس قطری است با عناصر قطر اصلی، مثلاً d_i ، که ویژه مقدارهای H می باشند. (ماتریس H از مرتبه n ، تعداد ابعاد نمایش $\Gamma^{(i)}$ ، است).

فرض کنید ویژه مقدارهای H همگی برابر نباشند. حال یک ویژه مقدار معین را که، مثلاً k بار تکرار شده است، در نظر بگیرید، که در آن $1 \leq k \leq n$. با جابجا کردن ستونهای U ، مرتبه ویژه مقدارهای d_i در H_d می‌تواند به دلخواه تغییر کند. فرض کنید یک چنین جابجایی انجام دهیم و ویژه مقدارهای یکسان مورد نظر را در k محل اول H_d قرار دهیم، بطوری که:

$$d_1 = d_2 = \dots = d_k \neq d_\mu, \quad k+1 \leq \mu \leq n. \quad (31-3)$$

با ضرب رابطه (۲۹-۳) از چپ در U^{-1} و از راست در U داریم:

$$U^{-1} H U U^{-1} \Gamma^{(i)}(A) U = U^{-1} \Gamma^{(i)}(A) U U^{-1} H U,$$

یا به ازای تمام A ها:

$$H_d \Gamma^{(i)'}(A) = \Gamma^{(i)'}(A) H_d, \quad \text{for all } A \in G, \quad (32-3)$$

که در آن $\Gamma^{(i)'}(A)$ و غیره، ماتریسهای یک نمایش هم ارز $\Gamma^{(i)}$ هستند. با در نظر گرفتن عنصر (j, μ) از دو طرف (۳۲-۳)، داریم:

$$d_j \Gamma_{j\mu}^{(i)'}(A) = \Gamma_{j\mu}^{(i)'}(A) d_\mu,$$

یا به ازای تمام A ها:

$$(d_j - d_\mu) \Gamma_{j\mu}^{(i)'}(A) = 0 \quad \text{for all } A \in G,$$

بر طبق (۳۱-۳)، اگر $1 \leq j \leq k$ و $k+1 \leq \mu \leq n$ آنگاه $d_j \neq d_\mu$. لذا به ازای تمام A ها:

$$\Gamma_{j\mu}^{(i)'}(A) = 0 \quad \text{for } 1 \leq j \leq k, \\ k+1 \leq \mu \leq n,$$

(۳۳-۳)

ماتریسهای $\Gamma^{(i)'}(A)$ دارای شکل زیرند:

$$\begin{matrix} & \overbrace{\hspace{2cm}}^k & \overbrace{\hspace{2cm}}^{n-k} \\ \left. \begin{matrix} k \\ \hline n-k \end{matrix} \right\} & \left[\begin{array}{cc} & \\ \hline & 0 \end{array} \right] \end{matrix}.$$

(۳۴-۳)

که به شکل (۸-۳) می باشد، که نشان می دهد نمایش $\Gamma^{(i)}$ و از این رو نمایش هم ارز آن $\Gamma^{(i)}$ باید کاهش پذیر باشد. اما بنابه فرض، $\Gamma^{(i)}$ یک نمایش کاهش ناپذیر است، که اگر و فقط اگر $k=n$ باشد، یعنی اگر و فقط اگر ویژه مقادیرهای H برابر باشند، ممکن است. این نشان می دهد که $H=H_0$ و H باید یک ماتریس اسکالر باشد.

حال فرض کنید P ماتریسی باشد که با تمام ماتریسهای نمایش $\Gamma^{(i)}$ جابجاپذیر است. در این صورت با مزدوج هرمیتی (۳-۲۶) به ازای تمام A ما داریم:

$$\begin{aligned} P^\dagger \Gamma^{(i)\dagger}(A) &= \Gamma^{(i)\dagger}(A) P^\dagger, & \text{یا:} \\ P^\dagger [\Gamma^{(i)}(A)]^{-1} &= [\Gamma^{(i)}(A)]^{-1} P^\dagger & \text{یا:} \\ P^\dagger \Gamma^{(i)}(A^{-1}) &= \Gamma^{(i)}(A^{-1}) P^\dagger & (۳-۳۵) \end{aligned}$$

لذا P^\dagger با تمام ماتریسهای $\Gamma^{(i)}$ جابجاپذیر است. می توانیم دو ماتریس هرمیتی H_1 و H_2 را طوری تعریف کنیم که:

$$H_1 = (P + P^\dagger)/2, \quad H_2 = i(P^\dagger - P)/2; \quad (۳-۳۶ \text{ الف})$$

$$P = H_1 + iH_2, \quad P^\dagger = H_1 - iH_2. \quad (۳-۳۶ \text{ ب})$$

اگر P و P^\dagger هر دو با ماتریسهای $\Gamma^{(i)}$ جابجاپذیر باشند، معادلات (۳-۳۶ الف) نشان می دهند که H_1 و H_2 نیز با این ماتریسها جابجاپذیرند. در این صورت همان طوری که در بالا نشان داده شده، H_1 و H_2 باید ماتریسهای ثابت باشند، از این رو از (۳-۳۶ ب) نتیجه می شود که P باید یک ماتریس ثابت باشد، که اثبات را کامل می کند.

اهمیت این قضیه در این واقعیت نهفته است که معکوس آن نیز درست است. بنابراین اگر هیچ ماتریسی بجز یک ماتریس ثابت با تمام ماتریسهای یک نمایش جابجاپذیر نباشد، در این صورت نمایش کاهش پذیر است. (این واقعیت بعداً در بخش ۴-۵-۱ مورد استفاده، قرار می گیرد.)

۳-۲-۲ لم دوم شور

اگر $\Gamma^{(i)}$ و $\Gamma^{(j)}$ دو نمایش کاهش پذیر یک گروه G باشند که ابعادشان به ترتیب l_1 و l_2 است و اگر یک ماتریس M (از مرتبه $l_1 \times l_2$) به ازای تمام A ما در رابطه زیر صدق کند:

$$\Gamma^{(i)}(A)M = M\Gamma^{(j)}(A) \quad (37-3)$$

در این صورت یا (الف) $M=0$ یا (ب) $\det M \neq 0$ ، که در این صورت $\Gamma^{(i)}$ و $\Gamma^{(j)}$ نمایشهای هم‌ارزند.

باید توجه کنید که دو نمایش تنها زمانی می‌توانند هم‌ارز باشند که ابعادشان برابر باشد. لذا اگر $l_i \neq l_j$ فقط مورد (الف) امکان‌پذیر است.

اثبات: طرفین (37-3) را مزدوج هریمیتی می‌کنیم، داریم:

$$M^\dagger \Gamma^{(i)\dagger}(A) = \Gamma^{(j)\dagger}(A) M^\dagger \quad (A \in G) \text{ به ازای تمام } A \text{ ها}$$

$$M^\dagger \Gamma^{(i)}(A^{-1}) = \Gamma^{(j)}(A^{-1}) M^\dagger \quad (A \in G) \text{ به ازای تمام } A \text{ ها}$$

طرفین را از راست در M ضرب می‌کنیم، داریم:

$$M^\dagger \Gamma^{(i)}(A^{-1}) M = \Gamma^{(j)}(A^{-1}) M \quad (A \in G) \text{ به ازای تمام } A \text{ ها}$$

$$M^\dagger M \Gamma^{(i)}(A^{-1}) = \Gamma^{(j)}(A^{-1}) M \quad (A \in G) \text{ به ازای تمام } A \text{ ها} \quad (38-3)$$

بنابراین ماتریس $M^\dagger M$ با $\Gamma^{(j)}(A^{-1})$ ، به ازای تمام A ها ($A \in G$) جابجاپذیر است و

از این رو، بنا به لم قبلی، باید یک ماتریس ثابت باشد.

$$M^\dagger M = cE. \quad (39-3)$$

موردی را در نظر بگیریم که در آن $l_i = l_j = n$ از (39-3) داریم:

$$\det(M^\dagger M) = \det(M^\dagger) \det(M) = c^n. \quad (40-3)$$

اگر $c \neq 0$ در این صورت $\det M \neq 0$ (زیرا $\det M^\dagger = (\det M)^*$)؛ لذا M^{-1} وجود

دارد و از (37-3) داریم:

$$\Gamma^{(i)}(A) = M^{-1} \Gamma^{(j)}(A) M$$

که نشان می‌دهد $\Gamma^{(i)}$ و $\Gamma^{(j)}$ نمایشهای هم‌ارزند. اگر $c = 0$ در این صورت با در نظر

گرفتن عنصر (i, j) از (39-3)، داریم:

$$\sum_k M_{ik}^\dagger M_{ki} = 0,$$

یا:

$$\sum_k M_{ki}^* M_{ki} = \sum_k |M_{ki}|^2 = 0,$$

که فقط و فقط زمانی ممکن است که $M_{ki} = 0$ ، $(1 \leq k \leq n)$. اما i دلخواه است و می‌تواند هر مقداری از یک تا n را بگیرد، لذا $M = 0$.

در مورد دوم، وقتی $l_j \neq l_i$ ، می‌توانیم بدون ازدست دادن کلیت مسأله، فرض کنیم، $l_j < l_i$. با افزودن $(l_j - l_i)$ سطر صفر به ماتریس M ، ماتریس جدید M' حاصل می‌شود.

$$M' = \left[\begin{array}{c} \overbrace{\quad}^{l_j} \\ M \\ \dots \\ \mathbf{0} \end{array} \right] \left. \begin{array}{l} \\ \\ \\ \end{array} \right\} \begin{array}{l} l_i \\ \\ \\ l_j - l_i \end{array} \quad (3-41-الف)$$

که از آن داریم:

$$M'^{\dagger} = \left[\begin{array}{cc} \overbrace{\quad}^{l_i} & \overbrace{\quad}^{l_j - l_i} \\ M^{\dagger} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots \end{array} \right] \left. \begin{array}{l} \\ \\ \end{array} \right\} l_j. \quad (3-41-ب)$$

بسادگی می‌توان دید که $M'^{\dagger} M' = M^{\dagger} M$ ، لذا

$$\det(M'^{\dagger} M') = \det(M^{\dagger} M),$$

$$\det(M'^{\dagger}) \det(M') = c^n,$$

در این جا $l_j = n$ قرار داده ایم . اما باتوجه به (۳-۴۱) ، $\det(M') = \det(M'^{\dagger}) = 0$ ، لذا $M^{\dagger} M = 0$ و $c = 0$. بار دیگر عنصر (i, j) از $M^{\dagger} M$ را در نظر بگیرید، ملاحظه می‌کنید که $M = 0$. و این اثبات لم را کامل می‌کند.

۳-۳-۳ قضیهٔ تعامد

به عنوان یک کاربرد از دو لم فوق، یک ماتریس M را که به صورت زیر داده می‌شود

تشکیل می‌دهیم:

$$M = \sum_{A \in G} \Gamma^{(i)}(A) X \Gamma^{(j)}(A^{-1}), \quad (3-42)$$

که در آن $\Gamma^{(i)}$ و $\Gamma^{(j)}$ دو نمایش کاهش پذیر غیر هم ارز گروه G از مرتبه g با ابعاد l_i و l_j می باشند و X یک ماتریس دلخواه از مرتبه $l_i \times l_j$ و مستقل از عناصر گروه است. با ضرب کردن دو طرف (۳-۴۲) از چپ در $\Gamma^{(i)}(B)$ ، که در آن $B \in G$ ، داریم:

$$\begin{aligned} \Gamma^{(i)}(B)M &= \Gamma^{(i)}(B) \sum_{A \in G} \Gamma^{(j)}(A) X \Gamma^{(j)}(A^{-1}) \\ &= \sum_{A \in G} \Gamma^{(i)}(BA) X \Gamma^{(j)}(A^{-1}) \\ &= \sum_{C \in G} \Gamma^{(i)}(C) X \Gamma^{(j)}(C^{-1}B) \quad (۳-۴۳) \\ &\quad BA = C \text{ در آن} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{C \in G} \Gamma^{(i)}(C) X \Gamma^{(j)}(C^{-1}) \Gamma^{(j)}(B) \\ &= M \Gamma^{(j)}(B), \end{aligned}$$

رابطه فوق برای تمام B ها برقرار است، از این رو بنا به لم دوم شور داریم: $M = 0$.
با در نظر گرفتن عنصر (k, s) رابطه (۳-۴۲) به دست می آوریم:

$$\sum_{A \in G} \sum_{p, q} \Gamma_{kp}^{(i)}(A) X_{pq} \Gamma_{qs}^{(j)}(A^{-1}) = 0. \quad (۳-۴۴)$$

برای این منظور، ماتریس دلخواه X را ماتریسی انتخاب می کنیم که تمام عناصرش بجز عنصر (m, n) که برابر واحد انتخاب می کنیم صفر باشد. یعنی، $X_{pq} = \delta_{pm} \delta_{qn}$. در این صورت از معادله فوق داریم:

$$\begin{aligned} \sum_{A \in G} \Gamma_{km}^{(i)}(A) \Gamma_{ns}^{(j)}(A^{-1}) &= 0, \quad \text{یا} \\ \sum_{A \in G} \Gamma_{km}^{(i)}(A) \Gamma_{sn}^{(j)*}(A) &= 0, \quad (۳-۴۵-الف) \end{aligned}$$

به ازای $1 \leq k, m \leq l_i, 1 \leq n, s \leq l_j$.

به بیان دیگر این رابطه می رساند که اگر عنصر (k, m) نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(i)}$ را در مزدوج مختلط عنصر (s, n) از نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(j)}$ ضرب کنیم و حاصل را روی

عناصر گروه جمع بندی کنیم، نتیجه برابر صفر می شود.
 سپس با جایگزین کردن $\Gamma^{(j)}$ در $(3-42)$ توسط $\Gamma^{(i)}$ یک ماتریس N را می سازیم،
 یعنی:

$$N = \sum_{A \in G} \Gamma^{(i)}(A) X \Gamma^{(i)}(A^{-1}). \quad (3-46)$$

با روشی که منجر به $(3-43)$ شد، می توانیم نشان دهیم که:

$$\Gamma^{(i)}(A) N = N \Gamma^{(i)}(A)$$

از این رو بنا به لم اول شور ملاحظه می کنیم که N باید یک ماتریس ثابت باشد، مثلاً $N = a E$ که در آن E ماتریس واحد از مرتبه l_i است. مجدداً با در نظر گرفتن عنصر (k, s) ام $(3-46)$ داریم:

$$\sum_{A \in G} \sum_{p, q} \Gamma_{kp}^{(i)}(A) X_{pq} \Gamma_{qs}^{(i)}(A^{-1}) = a \delta_{ks}. \quad (3-47)$$

مانند قبل، اگر فرض کنیم $X_{pq} = \delta_{pm} \delta_{qn}$ آنگاه

$$\sum_{A \in G} \Gamma_{km}^{(i)}(A) \Gamma_{ns}^{(i)}(A^{-1}) = a \delta_{ks}. \quad (3-48)$$

برای این که بتوانیم استنتاجی از $(3-48)$ بکنیم، باید ابتدا اسکالر a را پیدا کنیم.
 برای این منظور، رد ماتریسهای دو طرف $(3-46)$ را محاسبه می کنیم:

$$\begin{aligned} \text{trace } N &= a l_i = \sum_{k=1}^{l_i} \sum_{A \in G} \sum_{p, q} \Gamma_{kp}^{(i)}(A) X_{pq} \Gamma_{qk}^{(i)}(A^{-1}), \\ &= \sum_{p, q} X_{pq} \sum_{A \in G} \sum_k \Gamma_{qk}^{(i)}(A^{-1}) \Gamma_{kp}^{(i)}(A) \\ &= \sum_{p, q} X_{pq} \sum_{A \in G} \Gamma_{qp}^{(i)}(A) \\ &= g \sum_{p, a} X_{pq} \delta_{pq} = g \text{ trace } X, \end{aligned}$$

$$a = g (\text{trace } X) / l_i. \quad (3-49)$$

اما با توجه به ماتریس X داریم: $\text{trace } X = 0$ مگر این که $m=n$ که در این صورت،

$\text{trace } X = 1$. بطور خلاصه δ_{mn} . لذا از (۳-۴۸) داریم:

$$\sum_{A \in G} \Gamma_{km}^{(i)}(A) \Gamma_{ns}^{(i)}(A^{-1}) = (g/l_i) \delta_{ks} \delta_{mn}, \quad (۳-۴۵-ب)$$

اکنون دو نتیجه (۳-۴۵-الف) و (۳-۴۵-ب) را در یک معادله ترکیب می‌کنیم:

$$\sum_{A \in G} \Gamma_{km}^{(i)}(A) \Gamma_{ns}^{(j)}(A^{-1}) = (g/l_i) \delta_{ij} \delta_{ks} \delta_{mn},$$

یا

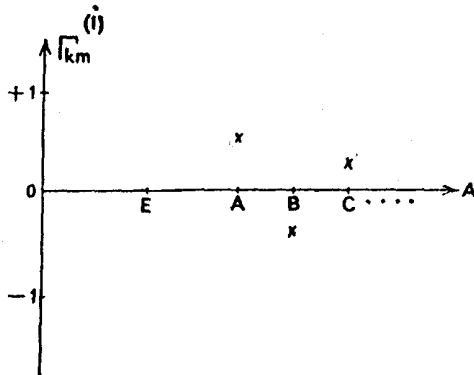
$$\sum_{A \in G} \Gamma_{km}^{(i)}(A) \Gamma_{mn}^{(j)*}(A) = (g/l_i) \delta_{ij} \delta_{ks} \delta_{mn}. \quad (۳-۵۰)$$

این معادله را قضیهٔ تعامد بزرگ برای نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه نامند و موقعیتی اساسی در نظریهٔ نمایشهای گروه دارد.

۳-۴-۳ تعبیر قضیهٔ تعامد

معادله (۳-۵۰) در زبان فضاهاى بردارى خطى تعبیر بسیار ظریفی دارد. فرض کنید

تعداد کل نمایشهای کاهش ناپذیر متمایز یک گروه محدود $G = \{E, A, B, \dots\}$ از مرتبه g ، برابر c باشد. $\Gamma_{km}^{(i)}$ را به عنوان تابعی از عناصر گروه G در نظر بگیرید. این تابع Γ فقط در g «نقطه» گسسته E, A, B و غیره تعریف شده است. اگر بخواهیم تابع Γ را نسبت به متغیر A رسم کنیم چیزی شبیه آنچه در شکل (۳-۱) نشان داده شده است، خواهیم داشت:



شکل ۳-۱ عنصر ماتریس (k, m) نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(i)}$ به صورت تابعی از عناصر گروه.

برای هر مقدار متفاوت i, k و m ($1 \leq i \leq c, 1 \leq k, m \leq l_j$)، یک چنین تابعی داریم، ولذا تعداد کل توابع برابر است با $\sum_{i=1}^c l_i^2$ (برای هر مقدار i ، تعداد l_i^2 تابع داریم). کلیه این توابع یک فضای برداری g بعدی تعریف می‌کنند زیرا یک تابع در این فضا می‌تواند با داشتن « g » مؤلفه‌اش بطور کامل مشخص شود. این فضا را عموماً فضای گروه می‌نامند.

در این صورت طرف چپ (۳-۵۰) دقیقاً حاصلضرب اسکالر دو تابع $\Gamma_{km}^{(i)}$ و $\Gamma_{sn}^{(j)}$ است. [۲-۳۵] را ببینید:

$$(\Gamma_{sn}^{(j)}, \Gamma_{km}^{(i)}) \equiv \sum_{A \in G} \Gamma_{sn}^{(j)*}(A) \Gamma_{km}^{(i)}(A). \quad (51-3)$$

در این صورت (۳-۵۰) می‌رساند که تمام توابع مختلف نظیر $\Gamma_{km}^{(i)}$ بر یکدیگر عمودند. اما هنوز نمی‌دانیم که آیا این توابع کاملند یا خیر، یعنی، آیا کل فضا را پدید می‌آورند یا خیر. مع ذلک، چون تعداد بردارهای مستقل در یک فضای برداری نمی‌تواند از تعداد ابعاد فضا تجاوز کند، رابطه زیر را داریم:

$$\sum_{i=1}^c l_i^2 \leq g. \quad (52-3)$$

همان طوری که قبلاً بیان کردیم این شرطی است که تعداد نمایشهای کاهش ناپذیر گروه G را که از مرتبه g است، محدود می‌کند. بعداً نشان خواهیم داد که علامت تساوی در (۳-۵۲) برقرار است. Γ_{km} را بردارهای نمایش در فضای گروه می‌نامیم.

در وهله اول ممکن است ایده فضای گروه به آسانی درک نشود. لیکن برای این که چیز مشابهی ارائه دهیم، خیلی شبیه به فضای دوبعدی اسپین توابع اسپینی یک ذره، $S = \frac{1}{2}$ است. توابع پایه در این فضا عبارتند از: $X^{1/2}(S_z)$ و $X^{-1/2}(S_z)$ (که مؤلفه اسپین S است)، هر تابع فقط در دو مقدار گسسته آرگومانش، $S_z = \pm 1/2$ تعریف شده است. هر اسپینور دیگر (یک تابع در فضای اسپین) می‌تواند به صورت ترکیب خطی دو تابع بیان گردد. بطور کلی، اگر اسپین ذره j باشد، در این صورت توابع اسپینی یک فضای $(2j+1)$ بعدی تعریف می‌کنند، با توابع پایه $X^{-j}(j_z), X^{-j+1}(j_z), \dots, X^{-1}(j_z), X^0(j_z), \dots, X^{j-1}(j_z), X^j(j_z)$ (که در آن j_z یک

مؤلفه z است)، بعد تابع در $(2j + 1)$ مقدار آرگومان‌ش، $z \leq |z| \leq -z$ ، تعریف شده است.

۳-۵ مشخصه‌های یک نمایش

اکنون یک ایده مهم دیگری وارد می‌کنیم. دیدیم که ماتریسهای یک نمایش گروه در فضای برداری معین منحصر بفرد نیستند، زیرا به انتخاب بردارهای پایه فضای برداری و حتی به نحوه ترتیب بردارهای پایه بستگی دارند. اما، تمام این چنین نمایشها باید توسط تبدیل تشابه به یکدیگر مربوط باشند و از این رو باید هم ارز یکدیگر باشند، زیرا تمام آنها در یک فضای برداری تعریف شده‌اند. اما می‌دانیم که رد یک ماتریس تحت یک تبدیل تشابه تغییرناپذیر است. لذا، مشاهده می‌کنیم که ردهای تمام ماتریسهای یک نمایش بطور منحصر بفردی و بدون توجه به انتخاب بردارهای پایه، یک نمایش را مشخص می‌کنند. فرض کنید Γ یک نمایش (کاهش پذیر یا کاهش ناپذیر) یک گروه G باشد. مشخصه‌های نمایش Γ را به عنوان مجموعه‌ای از ردهای تمام ماتریسهای نمایش Γ ، تعریف می‌کنیم؛ یعنی:

$$\chi(A) = \sum_k \Gamma_{kk}(A). \quad (3-53)$$

واضح است که اگر نمایش یک بعدی باشد، مشخصه با نمایش یکی است. همچنین مشخصه‌های عناصر مزدوج در یک نمایش باهم یکسانند، زیرا رد یک ماتریس تحت یک تبدیل تشابه تغییرناپذیر است. بنابراین، اگر A و B عناصر مزدوج باشند، در این صورت عنصری مانند C وجود دارد بطوری که $A = C^{-1}BC$ یا:

$$\Gamma(A) = \Gamma(C^{-1}) \Gamma(B) \Gamma(C);$$

با گرفتن رد، دو طرف داریم:

$$\begin{aligned} \Gamma(A) &= \text{trace}(\Gamma(B)), \\ \chi(A) &= \chi(B), \end{aligned} \quad (3-54)$$

که در آن از خاصیت دوره‌ای رد استفاده کرده‌ایم، یعنی از این خاصیت که برای هر سه ماتریس P, Q, R داریم:

$$\text{trace}(PQR) = \text{trace}(QRP) = \text{trace}(RPQ).$$

بنابراین در یک نمایش تمام عناصر یک رده یکسانند. از این رو مشخصه تابعی از رده است، درست همان طوری که یک نمایش تابعی از عناصر گروه است.

۳-۵-۱ تعامد مشخصه‌ها

می‌توانیم بلافاصله (۳-۵۰) را به یک رابطه تعامد برای مشخصه‌های نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه تبدیل کنیم. با قرار دادن $s = n$ و $k = m$ در (۳-۵۰) و جمع بندی روی k و s و با استفاده از (۳-۵۳)، داریم:

$$\sum_{A \in G} \chi^{(i)}(A) \chi^{(j)*}(A) = \frac{g}{l_i} \delta_{ij} \quad l_i = g \delta_{ij}. \quad (۳-۵۵)$$

در این جا $X^{(i)}(A)$ مشخصه عنصر A در نمایش $\Gamma^{(i)}$ است. اگر n_k تعداد عناصر در رده C_k ی گروه باشد، در این صورت (۳-۵۵) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\sum_k \sqrt{\frac{n_k}{g}} \chi_k^{(i)} \sqrt{\frac{n_k}{g}} \chi_k^{(j)*} = \delta_{ij}, \quad (۳-۵۶)$$

که در آن $X_k^{(i)}$ مشخصه یک عنصر A در رده C_k در نمایش $\Gamma^{(i)}$ است و غیره، و جمع بندی روی تمام رده‌های متمایز G است.

این رابطه تعامد برای مشخصه‌های نمایشهای کاهش ناپذیری می‌باشد، و شکل (۳-۵۶) پیشنهاد می‌کند که $(\sqrt{n_k/g}) X_k^{(i)}$ را می‌توان به عنوان توابع پایه راست هنجار در یک فضای رد تصور کرد که ابعادش با تعداد رده‌ها در G برابر است. برای هر نمایش کاهش ناپذیر گروه یک چنین تابع پایه مستقلی داریم و از این رو مانند قبل، شرط زیر به دست می‌آید:

$$\text{تعداد رده‌های } G \leq \text{تعداد نمایشهای کاهش ناپذیر } G \quad (۳-۵۷)$$

این که، در واقع علامت تساوی در (۳-۵۷) نیز برقرار است، در بخش (۳-۷) نشان داده خواهد شد. $X^{(i)}$ را بردار مشخصه در فضای رده می‌نامیم.

با در نظر گرفتن علامت تساوی در (۳-۵۷)، رابطه تعامد (۳-۵۶) می‌تواند به

شکل دیگری بیان شود^۶:

$$\sum_{i=1}^c \chi_k^{(i)*} \chi_i^{(i)} = \frac{g}{n_k} \delta_{ki}. \quad (58-3)$$

جمع بندی روی تمام نمایشهای کاهش ناپذیر هم ارز G انجام می‌شود، و (۵۸-۳) نشان دهندهٔ تعامد مشخصه‌ها برای رده‌های مختلف است. اگرچه این رابطه اطلاعات جدیدی دربر ندارد، در نوشتن مشخصه‌های یک گروه بطور تجسسی مفید است.

می‌توانیم رابطهٔ مفیدی برای حاصلضربهای مشخصه‌های یک نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\alpha)}$ به دست آوریم. برای این منظور، حاصلضرب دو رد تعریف شده در بخش (۱-۳-۱) را در نظر می‌گیریم:

$$C_i C_j = \sum_k a_{ijk} C_k. \quad (16-1)$$

حال، ماتریسهای نمایش دهندهٔ عناصر رده C_i در نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\alpha)}$ را جمع می‌کنیم، و ماتریس حاصله را $P_{i\alpha}$ می‌نامیم، یعنی:

$$P_{i\alpha} = \sum_{A \in C_i} \Gamma^{(\alpha)}(A). \quad (59-3)$$

البته، می‌توانیم بطور مشابه ماتریسهای تمام رده‌های G را بسازیم. اکنون برای هر B ، $(B \in G)$ داریم:

$$\begin{aligned} [\Gamma^{(\alpha)}(B)]^{-1} P_{i\alpha} \Gamma^{(\alpha)}(B) &= \sum_{A \in C_i} [\Gamma^{(\alpha)}(B)]^{-1} \Gamma^{(\alpha)}(A) \Gamma^{(\alpha)}(B) \\ &= \sum_{A \in C_i} \Gamma^{(\alpha)}(B^{-1}AB) \\ &= \sum_{A \in C_i} \Gamma^{(\alpha)}(A), \end{aligned} \quad (60-3)$$

۶- این را می‌توان با استفاده از این واقعیت که اگر تمام سطرهای یک ماتریس مربعی محدود بهنجار شده و بر یکدیگر متعامد باشند، در این صورت، ستونهای آن نیز باید بهنجار شده و بر یکدیگر متعامد باشند. به دست آورد. بنابراین، اگر U یک ماتریس محدود با $UU^+ = EU^+U = E$ باشد، در این صورت $U^+U = E$ خواهد برد.

که در آن از (۳-۵) و این واقعیت که وقتی A تمام رد C_i را می پُرشاند، $B^{-1} A B$ نیز رد C_i را می پُرشاند، استفاده کرده ایم. از این رو نتیجه می شود که:

$$\Gamma^{(\alpha)}(B) P_i^\alpha = P_i^\alpha \Gamma^{(\alpha)}(B) \quad (۳-۶۱)$$

یعنی، $P_i^{(\alpha)}$ با تمام ماتریسهای نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\alpha)}$ جابجاپذیر است. بنابه لم اول شور، این بدان معنی است که $P_i^{(\alpha)}$ باید یک ماتریس ثابت باشد:

$$P_i^\alpha = \lambda_i^\alpha E. \quad (۳-۶۲)$$

با در نظر گرفتن رد دو طرف (۳-۵۹)، داریم:

$$\lambda_i^\alpha = (n_i / l_\alpha) \chi_i^{(\alpha)}.$$

یا:

$$\lambda_i^\alpha / l_\alpha = n_i \chi_i^{(\alpha)}, \quad (۳-۶۳)$$

از روی معادله (۱-۱۶) و تعریف ماتریسهای P_i^α در (۳-۵۹) داریم:

$$P_i^\alpha P_j^\alpha = \sum_k a_{ijk} P_k^\alpha. \quad \text{یا با استفاده از (۳-۶۲):}$$

$$\lambda_i^\alpha \lambda_j^\alpha = \sum_k a_{ijk} \lambda_k^\alpha, \quad (۳-۶۴)$$

با جایگذاری (۳-۶۳) در معادله فوق داریم:

$$\frac{n_i}{l_\alpha} \chi_i^{(\alpha)} \frac{n_j}{l_\alpha} \chi_j^{(\alpha)} = \sum_k a_{ijk} \frac{n_k}{l_\alpha} \chi_k^{(\alpha)}, \quad \text{یا:}$$

$$n_i n_j \chi_i^{(\alpha)} \chi_j^{(\alpha)} = l_\alpha \sum_k a_{ijk} n_k \chi_k^{(\alpha)}. \quad (۳-۶۵)$$

باز هم این رابطه در ساختن مشخصه های نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فوق العاده مفید است.

۳-۵-۲ کاهش یک نمایش کاهش پذیر

اغلب چنین اتفاق می افتد که نمایشی از یک گروه داریم که عموماً کاهش پذیر است. یک چنین نمایشی، مثل Γ را می توان مانند (۳-۲۵) به عنوان ترکیب خطی نمایشهای کاهش ناپذیر نوشت. می توانیم تعداد دفعاتی را که یک نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(i)}$ در کاهش Γ رخ می دهد، پیدا کنیم. برای این کار، در دو طرف (۳-۲۵) را می گیریم.

اگر $X(A)$ و غیره، معرفت مشخصه‌های عناصر در نمایش Γ باشند، در این صورت به ازای تمام A ها، $(A \in G)$ ، داریم:

$$\chi(A) = \sum_i a_i \chi^{(i)}(A), \quad (66-3)$$

با ضرب دو طرف این رابطه در $X^{(j)*}(A)$ و جمع بندی روی تمام عناصر G ، داریم:

$$\begin{aligned} \sum_{A \in G} \chi^{(j)*}(A) \chi(A) &= \sum_i a_i \sum_{A \in G} \chi^{(j)*}(A) \chi^{(i)}(A) \\ &= a_j g, \end{aligned} \quad \text{یا:}$$

$$a_j = \frac{1}{g} \sum_{A \in G} \chi^{(j)*}(A) \chi(A). \quad (67-3)$$

این یک روش برای یافتن ضرایب در (۳-۲۵) است. مشخصه‌های نمایشهای کاهش ناپذیر، مشخصه‌های ابتدائی، یا مشخصه‌های ساده نامیده می‌شود. درحالی که مشخصه‌های نمایشهای کاهش پذیر را مشخصه‌های مرکب می‌نامیم. یک مشخصه مرکب می‌تواند مانند (۳-۶۶) به صورت ترکیب خطی مشخصه‌های ساده یک گروه بیان شود.

۳-۵-۳ ملاکی برای کاهش ناپذیری

فرض کنید Γ یک نمایش گروه G با مشخصه X باشد. می‌توانیم مشخصه X را مانند (۳-۶۶) به صورت یک ترکیب خطی از مشخصه‌های ساده G بنویسیم که از آن ضرایب a_j توسط (۳-۶۷) داده می‌شوند. حال (۳-۶۹) را در معادله مزدوج مختلط ضرب می‌کنیم و روی تمام عناصر گروه جمع بندی کرده و حاصل را بر g ، مرتبه G تقسیم می‌کنیم. به دست می‌آید:

$$\begin{aligned} \frac{1}{g} \sum_{A \in G} \chi^*(A) \chi(A) &= \frac{1}{g} \sum_{i,j} a_i^* a_j \sum_{A \in G} \chi^{(i)*}(A) \chi^{(j)}(A). \\ &= \sum_i |a_i|^2. \end{aligned} \quad (68-3)$$

اگر این کمیت برای نمایش Γ ، برابر یک شود، نتیجه می‌گیریم که باید تمام a_j ها بجز یکی، مثلاً a_k که باید برابر یک باشد، صفر شوند (توجه کنید که a_j ها اعداد صحیح

غیرمنفی اند). نتیجه می‌گیریم که نمایش Γ باید با نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(k)}$ یکسان (یا هم‌ارز) باشد. بدین ترتیب یک ملاک بسیار ساده برای کاهش ناپذیری یک نمایش داریم: شرط لازم و کافی برای این که یک نمایش کاهش ناپذیر باشد این است که مشخصه‌های آن در معادله زیر صدق کنند:

$$\sum_{A \in G} \chi^*(A) \chi(A) = g, \quad \text{یا:}$$

$$\sum_k n_k \chi_k^* \chi_k = g, \quad (۶۹-۳)$$

که در آن X_k یک مشخصه رد k ام گروه است.

۳-۶ مثال C_{4v}

به عنوان یک مثال از بحث قبلی درباره نمایشها و مشخصه‌های آنها، مورد گروه C_{4v} را که در فصل اول بررسی کردیم، در نظر می‌گیریم. نشان خواهیم داد که چگونه نمایشهای کاهش ناپذیر و مشخصه‌های مربوطه را بیابیم. در عمل آسانتر است که قبل از نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه مشخصه‌های ساده‌آن را پیدا کنیم.

۳-۶-۱ جدول مشخصه C_{4v}

تا وقتی در بخش بعدی ثابت کنیم، علامت تساوی در (۳-۵۲) و (۳-۵۷) را می‌پذیریم. چون C_{4v} دارای پنج رد است باید پنج نمایش کاهش ناپذیر، مثلاً، L^1, L^2, L^3, L^4 و L^5 ، داشته باشد، که ابعادشان به ترتیب با l_1, l_2, l_3, l_4 و l_5 نمایش داده می‌شود. این ابعاد باید توسط (۳-۵۲) به هم مربوط باشند.

$$l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 + l_4^2 + l_5^2 = 8. \quad (۷۰-۳)$$

تنها جواب ممکن (با l_1 ‌های صحیح) این است که چهار تا از l_1 ‌ها برابر یک و پنجمی برابر دو باشد. ترتیب l_1 ‌ها مهم نیست و لذا برای سهولت فرض می‌کنیم $l_1 = l_2 = l_3 = l_4 = 1$ و $l_5 = 2$. سپس با استفاده از روابط تعامد (۳-۵۶) و (۳-۵۸) جدول مشخصه رامی‌سازیم. این جدول، در جدول (۳-۱) برای گروه C_{4v} نشان داده شده است.

ردها \ مشخصه‌ها	C_1 (E)	C_2 (C_4, C_4^3)	C_3 (C_4^2)	C_4 (m_x, m_y)	C_5 (σ_u, σ_v)
$\chi^{(1)}$	1	1	1	1	1
$\chi^{(2)}$	1	-1	1	-1	1
$\chi^{(3)}$	1	-1	1	1	-1
$\chi^{(4)}$	1	1	1	-1	-1
$\chi^{(5)}$	2	0	-2	0	0

 جدول ۱-۳ جدول مشخصه برای C_{4v} .

سطر اول بسادگی، با داشتن واحد برای مشخصه هر رد به دست می‌آید. این متناظر است با نمایش همانی که در بخش (۱-۳) مورد بحث قرار دادیم. چون، ماتریس معرف E در هر نمایشی ماتریس واحد است، رد یا مشخصه آن برابر 1 ، ابعاد نمایش، است، و این ستون اول جدول را می‌دهد. برای نمایشهای یک بعدی مشخصه با نمایش یکی است و از این رو، برای نمایشهای $\Gamma^{(1)}$ تا $\Gamma^{(4)}$ مشخصه‌ها خرد باید در جدول ضرب صدق کنند. در این صورت برای عناصری که مجذورشان برابر E است (نظیر C_4^2, m_x, σ_u و غیره)، تنها مشخصه‌های مجاز ± 1 می‌باشند. جدول ضرب (۱-۲) برای C_{4v} نشان می‌دهد که $m_x m_y = C_4^2$ (با $\sigma_u \sigma_v = C_4^2$). این می‌رساند که m_x و m_y هر دو توسط $+1$ و یا توسط -1 نشان داده می‌شوند. (یادآوری می‌کنیم که عناصر یک رد دارای مشخصه‌های یکسان هستند) در هر حال $X(C_4^2)$ باید در تمام نمایشهای یک بعدی $+1$ باشد. این، مشخصه‌های C_4^2 را در $\Gamma^{(2)}, \Gamma^{(3)}$ و $\Gamma^{(4)}$ می‌دهد.

برای عناصر C_4^3, C_4 ، با $(C_4^3)^4 = (C_4)^4 = E$ ، نمایشهای یک بعدی

می‌توانند، توانهایی از $i = \sqrt{-1}$ باشند. اما باز هم چون $C_4^2 = (C_4^3)^2 = C_4^2$ ،
 $X(C_4^3)$ و $X(C_4)$ برای $\Gamma(2)$ ، $\Gamma(3)$ و $\Gamma(4)$ فقط می‌توانند ± 1 باشند. حال به رابطه
 تعامد متوسل می‌شویم، هر سطر جدید از مشخصه‌ها باید بر تمام سطرها قبل متعامد
 باشد و باید در شرط بهنجارش (۳-۶۰) صدق کند. این امر با در نظر گرفتن $+1$ برای یکی
 از ردهای C_2 ، C_4 و C_5 در نمایشهای $\Gamma(2)$ ، $\Gamma(3)$ و $\Gamma(4)$ و -1 برای دو رد
 باقیمانده حاصل می‌شود. این مطلب، بطور کامل مشخصه‌ها را برای چهارنمایش اول
 تعیین می‌کند. سطر پنجم بسادگی با استفاده از روابط تعامد برای ستونها [معادله (۳-۵۸)]
 به دست می‌آید.

استدلالهای ارائه شده در بالا برای گروه C_{4v} کاملاً عام می‌باشند و می‌توانند برای
 یافتن جدول مشخصه برای هر گروه محدودی به کار روند. می‌توانیم همواره، همان طوری
 که در بالا نشان دادیم، اولین سطر و اولین ستون را به آسانی به دست آوریم. در مورد
 نمایشهای یک بعدی، سایر درایه‌ها با استفاده از ملاک داده شده در زیر نویس ۷ و استفاده از
 جدول ضرب، به دست می‌آیند. در مورد نمایشهای کاهش ناپذیر با ابعاد بالاتر از یک،
 روابط تعامد بین سطرها و بین ستونها می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. برای گروههای
 پیچیده تر، معادله (۳-۵۹) که شامل حاصلضربهای مشخصه هاست باید به کار برده شود.

چون تعیین جدول مشخصه یکی از مهمترین تمرینها در نظریه گروه است، یک مثال
 دیگر را همراه با یک فلورچارت که روش عمومی را توصیف می‌کند، مورد بحث قرار
 می‌دهیم. مثالی که بررسی می‌کنیم گروه تقارن C_{5v} ی یک پنج ضلعی است که شامل
 همانی، چهار دوران متعالی $\frac{2\pi}{5}$ (C_5 و توانهای آن) و پنج انعکاس در صفحات عمود بر
 صفحه پنج ضلعی است. این گروه دارای ردهای (E) ، $(2C_5)$ ، $(2C_2^5)$ و $(5m)$
 می‌باشد و لذا $g = 10$ و $c = 4$ است. این فلورچارت و مثال در صفحات بعدی مورد بحث
 قرار می‌گیرند. یک مثال دیگر، جدول مشخصه گروه مکعبی O ، در بخش (۷-۴) مورد

۷- بطور کلی، اگر مرتبه عنصر A برابر n باشد، یعنی $A^n = E$ ، تنها نمایش یک بعدی آن می‌تواند
 توانهایی از $\exp\left(\frac{2\pi i}{n}\right)$ باشد، زیرا اینها تنها اعدادی هستند که توان n ام آنها برابر واحد است. به علاوه،
 اینها، اعداد یکنانه هستند، یعنی اعدادی که معکوشان با مزدوج مختلطشان برابر است.

بحث قرار گرفته است.

۲-۶-۳ نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v}

پس از یافتن جدول مشخصه، بسادگی می‌توان تمام نمایشهای کاهش ناپذیر گروه C_{4v} را پیدا کرد. همان طوری که قبلاً تذکر دادیم، سه نمایش کاهش ناپذیر اول با مشخصه‌های مربوط یکسان است. برای $\Gamma^{(5)}$ ، باید یک مجموعه مناسب از توابع پایه را انتخاب کنیم. چون C_{4v} یک گروه تبدیلات در فضای دوبعدی است، واضح است که می‌توان هر دو بردار مستقل از این فضا را به عنوان پایه مولد $\Gamma^{(5)}$ انتخاب کرد، زیرا این بردارها تحت عملهای C_{4v} به ترکیبات خطی خودشان تبدیل می‌شوند. اگر، برای سهولت، دو بردار پایه متعامد (x, y) را انتخاب کنیم، ماتریسهای $\Gamma^{(5)}$ به سهولت پیدا می‌شوند. به عنوان مثال، عمل C_4 روی بردارهای پایه را در نظر بگیرید:

$$C_4 \left[\begin{array}{c} y \\ \uparrow \\ \hline \rightarrow x \\ | \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} | \\ \downarrow \\ \hline x' \\ 0 \end{array} \right] \quad \text{یا:}$$

$$C_4(x, y) = (x', y') = (-y, x) = (x, y) \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (71-3)$$

حال، بنابه تعریف نمایش [معادله (۲-۳) را ببینید]، بلافاصله، داریم:

$$\Gamma^{(5)}(C_4) = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}. \quad (72-3)$$

بطور مشابه، می‌توانیم سایر ماتریسهای $\Gamma^{(5)}$ را به دست آوریم. جدول کامل نمایشهای کاهش ناپذیر گروه C_{4v} در جدول (۲-۳) آمده است.

مسئله یافتن یک نمایش کاهش ناپذیر با بعد بزرگتر از یک اساساً با یافتن یک مجموعه مناسب از $1/2$ تابع پایه (که با ابعاد آن برابر است) که در اثر عناصر گروه به ترکیبات خطی خودشان تبدیل می‌شوند، یکی است. همیشه این کار آسان نیست. چند روش برای یافتن چنین توابع پایه‌ای در بخشهای بعدی مورد بحث قرار می‌گیرد.

جدول مشخصه C_{5V}	خط مشی تمییز جدول مشخصه یک گروه محدود
<p>۱- چون C_{5V} دارای چهار رد است، باید چهار نمایش کاهش ناپذیر متمایز داشته باشد.</p> <p>۲- تعداد ابعاد چهار نمایش کاهش ناپذیر C_{5V} توسط رابطه زیر داده می‌شود:</p> $l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 + l_4^2 = 10$ <p>که با انتخاب ۴ عدد به صورت ۱، ۱، ۲، ۲ برقرار می‌شود. می‌توان انتخاب زیر را اعمال کرد:</p> $l_1 = l_2 = 1 \quad \text{و} \quad l_3 = l_4 = 2$ <p>۳- چهار رد C_{5V} عبارتند از: (E)، $(2C_5)$، $(2C_5^2)$، (5σ). چهار نمایش، کاهش ناپذیر را Γ_1، Γ_2، Γ_3 و Γ_4 می‌نامیم. جدول مشخصه یک جدول 4×4 خواهد بود. این جدول چهار رده را در بالا و چهار نمایش کاهش ناپذیر را در چپ نشان می‌دهد. همان طوری که در زیر مرحله ۵ نشان داده شده است.</p> <p>۴- می‌توانیم اولین نمایش یک بعدی Γ_1 را نمایش همانی انتخاب کنیم و سطر اول جدول مشخصه را با نوشتن واحد در زیر هر یک از چهار رد، مانند آنچه در جدول زیر نشان داده شده است، پر کنیم.</p> <p>۵- چون ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر C_{5V}، همان طوری که در مرحله دوم به دست آمد، ۱، ۱، ۲، ۲ است. درایه در ستون رد (E) نیز خواهند بود. به این ترتیب جدول مشخصه آن طور که تا این جا بدست آمده مانند زیر است:</p>	<p>۱- تعداد نمایشهای کاهش ناپذیر گروه با تعداد ردهای آن برابر است.</p> <p>۲- ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر توسط معادله زیر تعیین می‌شوند: $\sum_{i=1}^g l_i^2 = g$. با یادآوری این که l_i ها اعداد صحیح مثبتند، این معادله، بجز از مقادیر دلخواه l_1, l_2, \dots, l_g دارای یک جواب منحصر بفرد است.</p> <p>۳- اکنون به ساختن جدول مشخصه می‌پردازیم. یک جدول $C \times C$ با ردهای نشان داده شده در بالا و C نمایش کاهش ناپذیر در چپ که با $\Gamma_1, \Gamma_2, \dots, \Gamma_C$ نمایش داده می‌شود، می‌سازیم.</p> <p>۴- هر گروه دارای یک نمایشی است که در آن، هر عنصر توسط واحد نمایش داده می‌شود، که نمایش همانی نامیده می‌شود. این نمایش یک سطر از جدول مشخصه، مثلاً سطر اول را می‌دهد.</p> <p>۵- در هر نمایش، عنصر همانی E با یک ماتریس واحد نمایش داده می‌شود. بنابراین مشخصه نمایش برای رد (E) بعد نمایش است. اینها قبلاً در مرحله ۲ برای نمایشهای کاهش ناپذیر تعیین شده. این، ستون متناظر با رد (E) در جدول مشخصه را می‌دهد. جدول مشخصه، آن طور که تا این جا به دست آورده ایم شبیه شکل زیر است:</p>

C_{5m}	C_1 (E)	C_2 ($2C_5$)	C_3 ($2C_5^2$)	C_4 ($5m$)
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1			
Γ_3	2			
Γ_4	2			

۶- گروه دارای یک نمایش یک بعدی دیگر، Γ_2 ، می‌باشد. انعکاسهای رد C_4 از مرتبه ۲ می‌باشند، درحالی‌که تمام دورانه‌های ردهای C_2 و C_3 از مرتبه ۵ اند. این امر مشخصه‌های ممکن برای رده C_4 را ± 1 و مشخصه‌های ممکن برای ردهای C_2 و C_3 را x^3 ، x^2 ، x ، x^4 و 1 می‌دهد، که در آن $x = \exp(\frac{2\pi i}{5})$. حال دو انعکاس متمایز از رد C_4 را در نظر بگیرید و آنها را با m_i و m_j نشان دهید. ($1 \neq j, i \geq 1, j \leq 5$) می‌توانیم بدون دانستن جدول ضرب کامل گروه، به طبیعت حاصلضرب $m_i m_j$ پی ببریم. اولاً $m_i m_j$ باید به گروه متعلق باشند. ثانیاً، حاصلضرب دو انعکاس یک دوران است زیرا که چنین عملی جهت دستگاه مختصات را بدون تغییر می‌گذارد. به علاوه، چون m_i و m_j انعکاسهای متمایزی هستند، حاصل ضربشان نمی‌تواند برابر E باشد. در انتها این امکان باقی می‌ماند که $m_i m_j$ به C_2 یا C_3 تعلق داشته باشد. در واقع حاصلضرب m_i با چهار انعکاس باقیمانده را بگیریم، دو تا از آنها باید رد C_2 و دو تای دیگر رد C_3 را بدهند.

این بدان معنی است که در نمایش Γ_2

G	C_1 (E)	C_2	...	C_c
Γ_1	1	1	...	1
Γ_2	l_2			
⋮	⋮			
Γ_c	l_c			

۶- اگر نمایشهای کاهش ناپذیر یک بعدی دیگری هم وجود داشته باشد، مشخصه‌های آنها را می‌توان پیدا کرد. در یک نمایش یک بعدی، مشخصه‌ها با ماتریسهای مربوطه یکسانند، از این رو مشخصه‌ها خود باید در جدول ضرب گروه صدق کنند. بخصوص اگر برای یک عنصر معین A، داشته باشیم، $A^n = E$ ، در این صورت، $[\Gamma(A)]^n = \Gamma(E)$ و برای یک نمایش یک بعدی به $X(A) = 1^{1/n}$ یا $[X(A)]^n = 1$ منجر می‌شود. بنابراین، در نمایش یک بعدی، مشخصه‌های ممکن یک عنصر A از مرتبه n، عبارتند از n ریشه nام واحد. سپس با استفاده از خواص ضربی عناصر گروه و این واقعیت که هر سطر جدید از مشخصه‌ها باید بر سطر قبلی متعامد باشد، تمام مشخصه‌های یک بعدی می‌توانند تعیین شوند.

مشخصه‌ها باید در

$$X_2(m_i) X_2(m_j) = X_2(C_5) X_2(C_5)^2, i = j$$

صداقت کنند. همان طوری که قبلاً به دست آوردیم،

مشخصه‌های m_i برابر ± 1 هستند و m_j و m_i چون به

یک رده تعلق دارند، باید مشخصه یکسانی داشته

باشند. لذا حاصلضربشان باید $+1$ باشد، بنابراین

$$X_2(C_5) = X_2(C_5^2) = 1 \text{ بر } \Gamma_2$$

بر Γ_1 متعامد باشد، تنها حالتی که امکان دارد عبارت

است از: $X_2(m_i) = -1$. جدول مشخصه آن طور

که تا این جا به دست آمده، به قرار زیر است:

C_{5^m}	(E)	$(2C_5)$	$(2C_5^2)$	$(5m)$
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1
Γ_3	2			
Γ_4	2			

۷- فرض کنید مشخصه‌های Γ_3 عبارت باشند

از $(2, a, b, c)$ که در آن a, b و c ممکن است

اعداد مختلط باشند. با متعامد ساختن این

مشخصه بر Γ_1 و Γ_2 (با استفاده از $(3-55)$) با

$$i = 3 \text{ و } j = 2 \text{ یا } j = 1, \text{ داریم:}$$

$$2 + 2a + 2b + 5c = 0,$$

$$2 + 2a + 2b - 5c = 0,$$

در نتیجه $c = 0, 1 + a + b = 0$. سپس

بهنجارش Γ_3 $((3-55), i = 3 \text{ یا } j = 3)$ را می‌دهد.

$$4 + 2|a|^2 + 2|b|^2 + 5|c|^2 = 10$$

$$\Rightarrow |a|^2 + |b|^2 = 3.$$

اگر $a = a_1 + i a_2, b = b_1 + i b_2$ تاکنون فقط

سه معادله برای تعیین چهار عدد حقیقی داریم. این

۷- برای نمایشهای با ابعاد بالاتر، باید از

رابطه متعامد استفاده کنیم، یعنی، هر سطر

مشخصه‌ها (که در حالت کلی اعداد مختلطند)

باید بر تمام سطرها قبل متعامد باشد.

همچنین باید در شرط بهنجارش صداقت کند

(ملاک برای کاهش ناپذیری)، یعنی مجموع

مجدورات قدر مطلق مشخصه‌ها برای تمام

عناصر باید برابر مرتبه گروه باشد. متعامد

ستونهای جدول مشخصه، معادله $(3-58)$ نیز

می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد. همچنین اگر

تمام رده‌های گروه، «نخود معکوس» باشند،

در این صورت تمام نمایشهای کاهش ناپذیری

گروه دارای مشخصه‌های حقیقی هستند

(مسئله ۳-۱۳ را ببینید). اگر این معادلات

کافی نباشند، رابطه (۳-۶۵) که حاصلضرب مشخصه‌ها را دربر می‌گیرد، می‌تواند مورد استفاده قرار گیرد.

معادلات عبارتند از:

$$1 + a_1 + b_1 = 0, \quad (i)$$

$$a_2 + b_2 = 0, \quad (ii)$$

$$a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 3. \quad (iii)$$

حال می‌توانیم از (۳-۶۵) استفاده کنیم. اگر

ضرب رده $C_2 = (C_5, C_5^4)$ در خودش را حساب

کنیم، داریم:

$$C_2 C_2 = (C_5^2, E, E, C_5^3) = 2C_1 + C_3.$$

از این رو با $i = j = 2$ ، ضرایب (۱-۱۶) را به

صورت زیر به دست می‌آوریم:

$$a_{221} = 2, a_{223} = 1, a_{22k} = 0 \quad k = 2, 4.$$

باتوجه به این ضرایب در (۲-۶۵) با $a = 3$ ، داریم:

$$a^2 = 2 + b$$

$$a_1^2 - a_2^2 = 2 + b_1, \quad (iv)$$

$$2a_1a_2 = b_2. \quad (v)$$

با ترکیب معادله (v) و (ii)، داریم: $a_1 = -\frac{1}{4}$ یا $a_1 = 0$. اگر جواب اول $a_1 = -\frac{1}{4}$ را در معادلات دیگر قرار دهیم، خواهیم داشت: $a_2^2 = -\frac{5}{4}$ ، که ناسازگار است. از این رو تنها جواب به $b_2 = 0$ منجر می‌شود، که نشان می‌دهد، a و b حقیقی‌اند و در نتیجه:

$$a = (-1 \pm \sqrt{5})/2, \quad b = (-1 \mp \sqrt{5})/2. \quad (vi)$$

در این صورت پنج معادله با چهار مجهول، با یکدیگر سازگارند.

ظاهرآود انتخاب دلخواه برای علامت رادیکال در a و b داریم. اما، این دلخواه

بودن تنها ظاهری است و نه حقیقی. زیرا توجه کنید که یک نمایش دو بعدی دیگر

گروه، یعنی Γ_4 ، وجود دارد. اگر مشخصه‌های Γ_4 را با $(2, p, q, r)$ نمایش دهیم، در

این صورت، تمآمد Γ_4 با Γ_1 و Γ_2 ، بهنجارش Γ_4 و حاصلضرب رده (۳-۶۵) همان

معادلاتی را بر p, q, r می‌دهد که برای a, b, c در بالا به دست آوردیم. بنابراین

داریم:

$$p = (-1 \pm \sqrt{5})/2, \quad q = (-1 \mp \sqrt{5})/2, \quad r = 0. \quad (vii)$$

اما یک شرط دیگر خواهیم داشت و آن اینکه Γ_4 باید بر Γ_3 نیز متعامد باشد. به علاوه Γ_3 و Γ_4 نمی توانند دارای مشخصه های یکسان باشند تا بتواند نمایشهای متمایز باشند، تمام اینها به این واقعیت منجر می شود که می توانیم یک علامت برای رادیکال در a و q ، علامت دیگر را برای b و p انتخاب کنیم. بالاخره به جدول مشخصه زیر می رسم:

C_{5v}	(E)	($2C_5$)	($2C_5^2$)	(5σ)
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1
Γ_3	2	$(-1 + \sqrt{5})/2$	$(-1 - \sqrt{5})/2$	0
Γ_4	2	$(-1 - \sqrt{5})/2$	$(-1 + \sqrt{5})/2$	0

می توانید این را با جدول مشخصه C_{5v} که در جدول (۷-۷) نشان داده شده و قدری با این تفاوت است، مقایسه کنید.

در این جا نشان دادیم که تمام نمایشهای کاهش ناپذیر C_{5v} دارای مشخصه های حقیقی هستند. در واقع، با توجه به این که تمام رد های C_{5v} ، خود معکوس هستند. می توانستیم از همان ابتدا فرض کنیم مشخصه ها اعداد حقیقی اند. این امر مقدار ساده سازی را در مراحل ۶ و ۷ فراهم می آورد.

جدول ۳-۲ نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} .

	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_a	m_g	σ_u	σ_v
$\Gamma(1)$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma(2)$	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1
$\Gamma(3)$	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1
$\Gamma(4)$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma(5)$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$	$\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$

۷-۳ نمایش منظم

اکنون یک مثال از نمایش کاهش پذیر C_{4v} را بررسی می‌کنیم. طبیعی‌ترین راه برای به دست آوردن یک نمایش گروه محدود از تجسس جدول ضرب آن، وقتی طوری نوشته شده باشد که هر عنصر در ستون متتالیه چپ (عملگر دوم در ضرب) معکوس عنصر مربوطه در سطر بالا باشد (اولین عمل در ضرب)، حاصل می‌شود درست همان طوری که جدول (۲-۱) برای C_{4v} را نوشته ایم.

حال ماتریسهای مربعی مرتبه ۸ برای تمام عناصر C_{4v} را به طریق زیر می‌سازیم. ماتریس مربوط به هر عنصر به این ترتیب به دست می‌آید که آن عنصر را در هر جای جدول ضرب ظاهر می‌شود با واحد جایگزین می‌کنیم و جاهای دیگر صفر قرار دهیم. به عنوان مثال $\Gamma(E)$ ماتریس واحد از مرتبه ۸ خواهد بود. ماتریس دیگر، مثلاً $\Gamma(C_4)$ ، شکل زیر را خواهد گرفت:

$$\Gamma(C_4) = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (۷۳-۳)$$

توجه کنید که بنابه قضیه تجدید آرایش، هر سطر یا هر ستون یکبار و فقط یک بار شامل واحد است.

برای این که نشان دهیم چنین ماتریسهای در واقع یک نمایش را در حال کلی ایجاد می‌کنند، به جای این که سطرها و ستونهای ماتریسها را با نمادهای i ، j و غیره اندیس گذاری کنیم با خود عناصر گروه برچسب می‌زنیم، یعنی، می‌توانیم g عنصر گروه G را به عنوان (محورهای مختصات) در فضا گروه g بعدی در نظر بگیریم، چون ضرب توسط یک عنصر یک ترتیب جدیدی از عناصر را می‌دهد (رک: قضیه تجدید آرایش)، اعمال توسط عناصر گروه

را می‌توان به عنوان دورانه‌های این محورهای مختصات در فضای گروه تصور کرد. در این صورت عنصر (B, C) ماتریس A در این نمایش با رابطه زیر داده می‌شود:

$$\Gamma_{B,C}(A) = \delta_{BA,C}, \quad (74-3)$$

که در آن اگر $BA = C$ (یا $B^{-1}C = A$)، آنگاه $\delta_{BA,C} = 1$ و در غیر این صورت $\delta_{BA,C} = 0$. فرض کنید D, F, H عناصری از گروه G باشند بطوری که $AD = F$ ، در این صورت برای این که ماتریسهایی نظیر $(74-3)$ نمایش دهنده گروه G باشند، باید داشته باشیم:

$$\Gamma(A) \Gamma(D) = \Gamma(F). \quad (75-3)$$

با گرفتن عنصر (B, C) از طرف چپ، داریم:

$$\begin{aligned} \sum_{H \in G} \Gamma_{B \cdot H}(A) \Gamma_{H,C}(D) &= \sum_{H \in G} \delta_{BA,H} \delta_{HD,C} \\ &= \delta_{BAD,C} \\ &= \delta_{BF,C} \\ &= \Gamma_{B,C}(F), \end{aligned}$$

که همان عنصر (B, C) طرف راست $(75-3)$ است، که نشان می‌دهد ماتریسهای $\Gamma(A)$ و غیره از جدول ضرب گروه تبعیت می‌کنند.

نمایشی که توسط چنین ماتریسهایی ایجاد می‌شود، نمایش منظم گروه نامیده می‌شود، و از این به بعد آن را با Γ^{reg} نشان خواهیم داد.

واضح است که مشخصه‌های عناصر در این نمایش این چنین است که g برای عنصر E و صفر برای سایر عناصر می‌باشد. اکنون معلوم می‌شود که نمایشهای کاهش ناپذیری در این نمایش کاهش پذیر Γ^{reg} وجود دارد و هر کدام چند مرتبه، یعنی، هدف ما این است که ضرایب a_i در

$$\Gamma^{\text{reg}} = \sum_i a_i \Gamma^{(i)}. \quad (76-3)$$

را پیدا کنیم. از $(67-3)$ داریم:

$$a_i = \frac{1}{g} \sum_{A \in G} \chi^{(i)*}(A) \chi^{\text{reg}}(A),$$

که در آن X^{reg} مشخصه، نمایش منظم است. چون $X^{\text{reg}}(E) = g$ و $X^{\text{reg}}(A) = 0$ ، معادله بالا به صورت زیر درمی آید:

$$a_i = \frac{1}{g} \chi^{(i)*}(E)g, \quad \text{یا}$$

$$a_i = l_i. \quad (۷۷-۳)$$

این رابطه نشان می‌دهد که هر نمایش کاهش ناپذیر گروه به تعداد ابعادش در کاهش نمایش منظم اتفاق می‌افتد، بنابراین داریم:

$$\Gamma^{\text{reg}} = \sum_i l_i \Gamma^{(i)}. \quad (۷۸-۳)$$

با گرفتن زدهای دو طرف (۷۸-۳) برای عنصر E به دست می‌آوریم:

$$\chi^{\text{reg}}(E) = \sum_i l_i \chi^{(i)}(E), \quad \text{یا}$$

$$g = \sum_{i=1}^c l_i^2. \quad (۷۹-۳)$$

که ثابت می‌کند در (۵۲-۳) علامت تساوی برقرار است و لذا، بردارهای نمایش $\Gamma_{\text{km}}^{(i)}$ [بحث بعد از (۵۲-۳) را ببینید] در فضای گروه یک مجموعه کامل از بردارهای متعامد تشکیل می‌دهند.

وقتی نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه که ابعادش در (۷۹-۳) صدق می‌کند، پیدا شد، دیگر هیچ بردار نمایش مستقل دیگری که بر تمام بردارهای نمایش، کاهش ناپذیر عمود باشد، وجود ندارد. این، به نوبه خود بر این دلالت دارد که هیچ بردار مشخصه دیگری که بر تمام بردارهای مشخصه نمایشهای کاهش ناپذیر عمود باشد، وجود ندارد. از این رو، بردارهای مشخصه نمایشهای کاهش ناپذیر نیز باید یک مجموعه کامل از بردارهای مشخصه را در فضای رد تشکیل دهند. این استدلال ساده نشان می‌دهد که در (۵۷-۳) نیز علامت تساوی برقرار است.

۳-۸ توابع پایه مقارن شده برای نمایشهای کاهش ناپذیر

اکنون به مسأله واقعی می‌رسیم و آن این که چگونه یک نمایش کاهش پذیر را کاهش

دهیم. از این به بعد، نمایشهای کاهش پذیر با ابعاد a ، b و غیره را با $\Gamma(a)$ ، $\Gamma(b)$ و غیره، و نمایشهای کاهش ناپذیر با ابعاد α و β و غیره را با $\Gamma^{(\alpha)}$ ، $\Gamma^{(\beta)}$ ، ... نشان می دهیم. در بسیاری از مسائل فیزیک، مجموعه ای از توابع پایه داریم که نمایشی از گروه را ایجاد می کنند. اما، یک چنین نمایشی ممکن است عموماً یک نمایش کاهش پذیر باشد. این نمایش را می توان با یک انتخاب مناسب از زیر مجموعه های توابع پایه، بطوری که هر زیر مجموعه تحت عملیات عناصر گروه یک زیر فضای تغییر ناپذیر تشکیل دهند، کاهش دهیم. اکنون روشی برای به دست آوردن ترکیبات خطی مناسب از توابع پایه را مورد بحث قرار می دهیم و استفاده از این روش را نشان می دهیم.

فرض کنید n تابع پایه $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n\}$ در فضای L_n یک نمایش Γ از گروه را ایجاد کند. ماتریس نمایش دهنده یک عنصر A در این نمایش به صورت زیر داده می شود:

$$A \phi_i = \sum_{j=1}^n \phi_j \Gamma_{ji}(A). \quad (۸۰-۳)$$

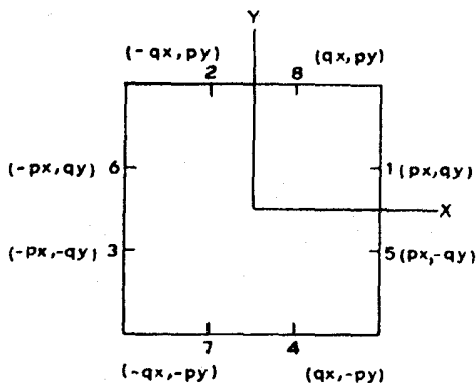
بنابراین به عنوان مثال، می توان دید که هشت تابع $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_8$ متناظر با هشت مکان ۱، ۲، ... و ۸ نمایش داده شده در شکل (۳-۲) یک مجموعه مناسب از توابع پایه برای نمایش منظم C_{4v} تشکیل می دهند. در این شکل، مختصات هشت نقطه صریحاً مشخص شده است. عمل مثلاً C_4 ، روی توابع پایه می تواند در معادله ماتریسی زیر نوشته شود:

$$\begin{aligned} (\phi'_1, \phi'_2, \dots, \phi'_8) &= C_4 (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_8) \\ &= (\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4, \phi_5, \phi_6, \phi_7, \phi_8) \\ &= (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_8) \Gamma^{\text{reg}}(C_4). \end{aligned} \quad (۸۱-۳)$$

که ماتریس معرف C_4 در نمایش منظم در (۳-۷۳) داده شده است.

برای کاهش دادن نمایش Γ که در (۳-۸۰) ایجاد شده است، می خواهیم یک ماتریس تبدیل یکانی مناسب U را پیدا کنیم، بطوری که برای تمام A های موجود در G داشته باشیم:

$$U^{-1} \Gamma(A) U = \Gamma_{\text{red}}(A), \quad (۸۲-۳)$$



شکل ۲-۳ هشت تابع ϕ_i ی مکانهای نشان داده شده در شکل، نمایش منظم C_{4v} را ایجاد می‌کند.

که در آن $\Gamma_{\text{red}}(A)$ و غیره شکل کاهش یافته یا قطری شده بلوکی نظیر (۲۴-۳) دارد. برای این منظور (۸۰-۳) را در نمادگذاری ماتریس به صورت زیر می‌نویسیم:

$$A\Phi = \Phi\Gamma(A),$$

که در آن Φ معرف بردار سطری زیر است:

$$\Phi \equiv (\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_n).$$

اگر U تبدیل موردنظر باشد داریم:

$$\begin{aligned} A\Phi U &= \Phi U U^{-1} \Gamma(A) U \\ A(\Phi U) &= (\Phi U) \Gamma_{\text{red}}(A). \end{aligned} \quad (۸۳-۳)$$

این رابطه مبین این است که اگر به جای توابع پایه Φ ، توابع پایه جدید

$$\Psi = \Phi U \quad (۸۴-۳)$$

را در فضای L_n انتخاب کنیم، ماتریسهای نمایش به شکل قطری شده بلوکی در خواهند آمد. رابطه (۸۴-۳) به شکل باز شده، عبارت است از:

$$\phi_i = \sum_{j=1}^n \phi_j U_{ji}. \quad (۸۵-۳)$$

برای یافتن ضرایب U_{jz} در ترکیبات خطی مناسب ψ_i ، (۳-۸۵) را به شکل دیگری بازنویسی می‌کنیم:

$$\psi_{pm}^\alpha = \sum_{i=1}^n \phi_i U_{\alpha pm}^i, \quad (۳-۸۶)$$

که در آن ψ_{pm}^α عبارتست از تابع پایه m ام برای نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\alpha)}$ که برای مرتبه p م در نمایش کاهش پذیر Γ ظاهر شده است. اگر:

$$\Gamma = \sum_{\alpha=1}^c a_\alpha \Gamma^{(\alpha)}, \quad (۳-۸۷)$$

باشد، در این صورت $1 \leq \alpha \leq c$ ، $1 \leq p \leq a_\alpha$ ، $1 \leq m \leq l_\alpha$ (بعد $\Gamma^{(\alpha)}$) خواهد بود. معادله (۳-۸۶) همان معادله (۳-۸۵) است، ماتریس $[U_{\alpha pm}^i]$ فقط نماد دیگری برای ماتریس $[U_{jz}]$ است؛ مجموعه مقادیر (α, p, m) یک ستون از U را مشخص می‌کنند و هر مقدار i یک سطر از U را نشان می‌دهد. همین طور ψ_{pm}^α دقیقاً نام دیگری برای ψ_i است. چون ابعاد ماتریسها در دو طرف (۳-۸۷) باید یکسان باشد، داریم:

$$n = \sum_{\alpha=1}^c a_\alpha l_\alpha. \quad (۳-۸۸)$$

حال، نتیجه عمل یک عنصر A ، $(A \in G)$ ، روی ψ_{pm}^α این است که یک ترکیب خطی از l_α که نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\alpha)}$ را ایجاد می‌کند و یک زیرفضای تغییرناپذیر l_α بعدی از کل فضا L_Γ را تعریف می‌کند، بدهد. بنابراین:

$$A \psi_{pm}^\alpha = \sum_{k=1}^{l_\alpha} \psi_{pk}^\alpha \Gamma_{km}^{(\alpha)}(A). \quad (۳-۸۹)$$

در چنین موردی، گفته می‌شود که ψ_{pm}^α به ستون m ام نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\alpha)}$ تعلق دارد یا برطبق آن تبدیل می‌شود. فرض کنید توابع پایه ϕ_i راست هنجار باشند. چون می‌خواهیم که توابع پایه حاصل ψ_{pm}^α نیز راست هنجار باشند، U باید یک ماتریس یکانی باشد، و لذا داریم:

$$\sum_{i=1}^n U_{\alpha pm^i}{}^* U_{\beta qk^i} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{pq} \delta_{mk}, \quad (90-3)$$

$$\sum_{\alpha, p, m} U_{\alpha pm^i}{}^* U_{\alpha pm^j} = \delta_{ij}.$$

با اعمال یک عنصر A ، $(A \in G)$ به دو طرف معادله (۳-۸۶) داریم:

$$A \psi_{pm^2} = \sum_{i=1}^n A \phi_i U_{\alpha pm^i}.$$

یا:

$$\sum_{k=1}^{l_\alpha} \psi_{pk^2} \Gamma_{km^{(\alpha)}}(A) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n \phi_j \Gamma_{ji}(A) U_{\alpha pm^i}.$$

با استفاده مجدد از (۳-۸۶) در معادله فوق، به دست می‌آید:

$$\sum_{k=1}^{l_\alpha} \sum_{s=1}^n \phi_s U_{\alpha pk^s} \Gamma_{km^{(\alpha)}}(A) = \sum_{i,j=1}^n \phi_j \Gamma_{ji}(A) U_{\alpha pm^i}.$$

چون ϕ_j ها، توابع مستقلی هستند، ضرایب هر یک از ϕ_j ها در دو طرف باید باهم برابر باشند. از این رو برای تمام A ها، $(A \in G)$ ، $1 \leq s \leq n$ و $1 \leq m \leq l_\alpha$ ، داریم:

$$\sum_{k=1}^{l_\alpha} U_{\alpha pk^s} \Gamma_{km^{(\alpha)}}(A) = \sum_{i=1}^n \Gamma_{si}(A) U_{\alpha pm^i}, \quad (91-3)$$

این یک رابطه بسیار مهمی در تعیین ضرایب $U_{\alpha pm^i}$ است، که از آنها بلافاصله توابع پایه متقارن شده ψ_{pm^2} به دست می‌آید، بسیار کار ساده است. این روش، به روش عملگر تصویری^۹ که در آن توابع پایه متقارن شده از یک تابع مناسب استخراج می‌شوند. بسیار شبیه است.

۸- روش مشابهی توسط ماریوت (۱۹۶۲) مورد استفاده قرار گرفته است، اما نقطه شروع وی با

نقطه شروع ما متفاوت است و روش وی در مرحله نهایی بر مقداری حدس و آزمون و خطا متکی است.

۹- رك: کاتون (۱۹۷۱)، بخش ۶-۲؛ همرمش (۱۹۶۴)، بخش ۳-۱۸؛ تینکام (۱۹۶۴)، بخش

حال (۳-۹۱) را به مورد خاص نمایش منظم یک گروه اعمال می‌کنیم. با تغییر نمادهای s و i به عناصر گروه B و C و با استفاده از (۳-۷۴)، به ازای تمام A ها، ($A \in G$) و $1 \leq m \leq l_\alpha$ نتیجه می‌شود:

$$\sum_{k=1}^{l_\alpha} U_{\alpha pk}^B \Gamma_{km}^{(\alpha)}(A) = \sum_{C \in G} \Gamma_{B,C}^{\text{reg}}(A) U_{\alpha pm}^C = U_{\alpha pm}^{BA}, \quad (92-3)$$

به علاوه اگر برای B عنصر همانی E را انتخاب کنیم، داریم:

$$\sum_{k=1}^{l_\alpha} U_{\alpha pk}^E \Gamma_{km}^{(\alpha)}(A) = U_{\alpha pm}^A. \quad (93-3)$$

این رابطه، همراه با (۳-۹۰) به ما کمک می‌کند تا ماتریس U برای کاهش کامل نمایش منظم را تعیین کنیم.

به عنوان مثال، نتیجه فوق را به کاهش نمایش منظم C_{4v} (با پایه های ϕ_1, \dots, ϕ_8 که قبلاً در این بخش بررسی شد) و تعیین توابع پایه متقارن شده برای نمایشهای کاهش ناپذیر متعددی که در Γ^{reg} واقع می‌شود، اعمال می‌کنیم، چون:

$$\Gamma^{\text{reg}} = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)} \oplus \Gamma^{(3)} \oplus \Gamma^{(4)} \oplus 2\Gamma^{(5)},$$

به هشت تابع پایه متقارن شده نیاز داریم، یکی به هر یک از توابع پایه متعلق به $\Gamma(2)$ ، $\Gamma(1)$ ، $\Gamma(3)$ و $\Gamma(4)$ دو تا به هر یک از دو تابع پایه متعلق به $\Gamma(5)$. معادله (۳-۹۳) عناصر ماتریسی $U_{\alpha pk}^A$ متعلق به یک نمایش کاهش ناپذیر ضرابی که α و p ی یکسانی دارند، را به هم مربوط می‌کند. یک عنصر را بدلتخواه انتخاب می‌کنیم، مثلاً $U_{\alpha pm}^E = a$ ، و سپس با فرض این که A تمام عناصر گروه را بگیرد، سایر عناصر را تعیین می‌کنیم. بالاخره مقدار a با بهنجارش به دست می‌آید. در مورد یک نمایش کاهش ناپذیر l_α بعدی، لازم است با l_α ضریب دلخواه که همگی می‌توانند در آخر به وسیله بهنجارش به دست آیند (با اختلاف ضریب ± 1 ، که باید به وسیله عمل A روی تابع پایه متقارن شده مربوطه تعیین شود) شروع کنیم. بنابراین، برای یافتن دو مجموعه تابع پایه برای $\Gamma(5)$ ، انتخاب زیر را اختیار

می‌کنیم:

$$U_{5p_1} E = a, U_{5p_2} E = b. \quad (94-3)$$

با استفاده از اینها در (۹۳-۳) همراه با نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} که در جدول (۲-۳) داده شده است عناصر ماتریسی زیر را به دست می‌آوریم:

A	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_x	m_y	σ_u	σ_v
$U_{5p_1} A$	a	$-b$	$-a$	b	a	$-a$	$-b$	b
$U_{5p_2} A$	b	a	$-b$	$-a$	$-b$	b	$-a$	a

اگر دو مجموعه ثابتها به ازای $p=2$ و $p=1$ را به ترتیب $a=a_1$ و $b=b_1$ ، $a=a_2$ و $b=b_2$ انتخاب کنیم، تعامد همه سطرهای متمایز ایجاب می‌کند که $a_1 a_2 + b_1 b_2 = 0$. بجز این شرط، چهار ثابت را می‌توانیم بطور دلخواه انتخاب کنیم، بالاخره باید هر سطر (یا هر ستون) را بهنجار کنیم.

ماتریس U برای کاهش Γ^{reg} مربوط به C_{4v} که بدین طریق به دست می‌آید، در زیر داده شده است (قرار داده ایم: $a_1=b_1=1$ و $a_2=-b_2=1$):

a	1	2	3	4	5	5	5	5
p	1	1	1	1	1	1	2	2
m	1	1	1	1	1	2	1	2
$[U_{\alpha p m^A}] =$	E	+	+	+	+	+	+	-
	C_4	+	-	-	+	-	+	+
	C_4^2	+	+	+	+	-	-	+
	C_4^3	+	-	-	+	+	-	-
	m_x	+	-	+	-	+	-	+
	m_y	+	-	+	-	-	+	-
	σ_u	+	+	-	-	-	+	-
	σ_v	+	+	-	-	+	+	+

(95-3)

که یک ضریب $\frac{1}{2}^{-1}$ (۸) به هر علامت مثبت یا منفی وابسته است.

ممکن است بخواهیم بدانیم که آیا ترتیب عملگرها در طرف چپ (یعنی، ترتیب

سطرها در (۳-۹۵)) دلخواه است و آیا می‌توانیم سطرهاى ماتریس بالا را به دلخواه تعویض کنیم. در هر حال، این چنین نیست و ترتیب با ملاحظات زیر تعیین می‌شود. فرض کنید موقتاً، g عملگر گروه G را توسط A_1, \dots, A_g نمایش دهیم. سپس، با شروع از یک تابع پایه معین، که آن را ϕ_1 می‌نامیم، ترتیب عملگرها توسط رابطه $\phi_i = A_i \phi_1$ مشخص می‌شود، یعنی، اگر یک عملگر ϕ_2 را به ϕ_1 تبدیل کند، آن را A_2 می‌نامیم و الا آخر^{۱۰}. به این علت است که در شکل (۳-۲) نقاط ۱، ۲، ...، ۸ را به طریق خاصی برچسب گذاری کرده‌ایم. ترتیب ستونهای U دلخواهند به استثنای این که ستونهای متناظر با یک نمایش کاهش ناپذیر (یک α و p) باید باهم باشند.

با معادله اولیه (۳-۸۶)، بلافاصله توابع پایه متقارن شده Γ^{reg} مربوط به C_{4v} را خواهیم داشت. اینها عبارتند از:

$$\begin{aligned} \Gamma^{(1)} &: \psi_{11}^1 = (\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 + \phi_5 + \phi_6 + \phi_7 + \phi_8) / \sqrt{8}, \\ \Gamma^{(2)} &: \psi_{11}^2 = (\phi_1 - \phi_2 + \phi_3 - \phi_4 - \phi_5 - \phi_6 + \phi_7 + \phi_8) / \sqrt{8}, \\ \Gamma^{(3)} &: \psi_{11}^3 = (\phi_1 - \phi_2 + \phi_3 - \phi_4 + \phi_5 + \phi_6 - \phi_7 - \phi_8) / \sqrt{8}, \\ \Gamma^{(4)} &: \psi_{11}^4 = (\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4 - \phi_5 - \phi_6 - \phi_7 - \phi_8) / \sqrt{8}, \quad (۳-۹۶) \\ \Gamma^{(5)} &: \begin{cases} \psi_{11}^5 = (\phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + \phi_4 + \phi_5 - \phi_6 - \phi_7 + \phi_8) / \sqrt{8}, \\ \psi_{12}^5 = (\phi_1 + \phi_2 - \phi_3 - \phi_4 - \phi_5 + \phi_6 - \phi_7 + \phi_8) / \sqrt{8}, \end{cases} \\ \Gamma^{(5)} &: \begin{cases} \psi_{21}^5 = (\phi_1 + \phi_2 - \phi_3 - \phi_4 + \phi_5 - \phi_6 + \phi_7 - \phi_8) / \sqrt{8}, \\ \psi_{22}^5 = (-\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 - \phi_4 + \phi_5 - \phi_6 - \phi_7 + \phi_8) / \sqrt{8}. \end{cases} \end{aligned}$$

بدین ترتیب با شروع از فضای تابع هشت بعدی با پایه‌های $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_8\}$ مرفق شده‌ایم آن را به شش زیرفضا، که هر کدام تحت عملیات C_{4v} تغییرناپذیر است، کاهش دهیم. چهار زیرفضا، یک بعدی و دو تا دوبعدی است. می‌توان بسادگی ثابت کرد که محققاً این زیرفضاها، زیرفضاهای تغییرناپذیرند. عمل A ، ($A \in C_{4v}$) روی هر یک از چهار تابع اول (۳-۹۶) این اثر را دارد که آن را در ± 1 ضرب می‌کند. درحالی که، عمل

۱۰- توجه کنید که این بحث فقط به نمایش منظم اعمال می‌شود.

$$\psi_{11}^2 \propto xy. \quad (99-3)$$

در این صورت می‌گوییم که تابع ψ_{11}^2 مانند xy تبدیل می‌شود. این بمنزله این است که بگوییم تابع xy نیز یک تابع پایه مناسب برای نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(2)}$ از C_{4v} است؛ اثر $A \in C_{4v}$ روی ψ_{11}^2 مانند اثر آن روی xy است. در جدول (۳-۳)، بدون اثبات نشان داده‌ایم توابع پایه برای نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف چگونه تبدیل می‌شوند. اثبات این را به عهده دانشجویان قرار می‌دهیم.

C_{4v} نمایشهای کاهش ناپذیر	$\Gamma^{(1)}$	$\Gamma^{(2)}$	$\Gamma^{(3)}$	$\Gamma^{(4)}$	$\Gamma^{(5)}$
توابع پایه مانند توابع تبدیل می‌شوند	1	xy	$x^2 - y^2$	$xy(x^2 - y^2)$	$\{x, y\}$

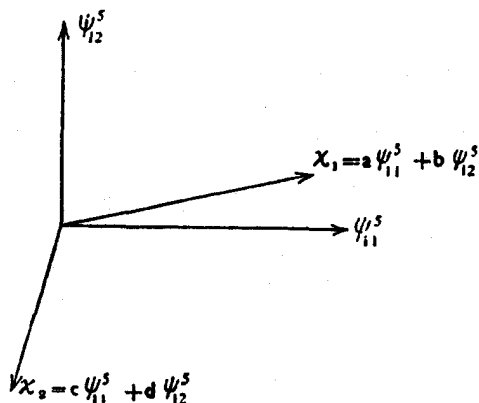
جدول ۳-۳ توابع پایه برای نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} .

باید توجه شود که توابع پایه $\{\psi_{11}^5, \psi_{12}^5\}$ و $\{\psi_{21}^5, \psi_{22}^5\}$ در (۳-۹۶) منحصر بفرد نیستند و از این رو ماتریس U نیز منحصر بفرد نمی‌باشد. به عنوان مثال دو ترکیب خطی از ψ_{11}^5 و ψ_{12}^5 را در نظر بگیرید:

$$X_1 = a\psi_{11}^5 + b\psi_{12}^5,$$

$$X_2 = c\psi_{11}^5 + d\psi_{12}^5,$$

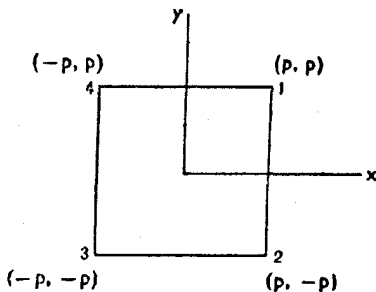
با این شرط که $ad \neq bc$ و X_1 و X_2 دو تابع مستقل در این فضا باشند. [شکل (۳-۳) را ببینید]. می‌توان نشان داد که X_1 و X_2 یک نمایش از C_{4v} را ایجاد می‌کند که با نمایش $\Gamma^{(2)}$ هم‌ارز است [مسئله (۲-۳) را ببینید]. این مثالی جالب از تبدیلات عام در فضای توابع است و این ایده بسادگی می‌تواند به تبدیلات در فضاها با بیش از دو بعد تعمیم داده شود. اگر ماتریس ضرایب $\begin{bmatrix} a & b \\ c & d \end{bmatrix}$ یک ماتریس یکانی باشد، توابع حاصله X_1 و X_2 راست‌هنجار نیز هستند، و آن تبدیل با ترکیبی از دورانها و انعکاسها متناظر است.



شکل ۳-۳

۳-۹ نمایشهای کاهش پذیر دیگر

علاوه بر نمایش منظم، می‌توانیم نمایشهای دیگری گروه را ایجاد کنیم. یک چنین نمایشهایی، عموماً کاهش پذیرند. بنابراین با شروع از هر تابع معین ϕ_1 در فضای هیلبرت عملگرهای گروه G ، می‌توانیم تمام عناصر A ($A \in G$) را روی آن اثر دهیم. بازهم این کار عموماً g تابع مستقل $\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_g$ خواهد داد که دقیقاً نمایش منظم G را ایجاد می‌کنند.



شکل ۴-۳

لیکن، اگر ϕ_1 دارای خواص تقارنی خاصی باشد، تعداد توابع مستقل کمتر از g است،

درواقع، باید یک مقسوم علیه صحیح از g باشد. به عنوان مثال، از یک تابع ϕ_1 در محل ۱ نشان داده شده در شکل (۳-۴) شروع می‌کنیم. با اعمال تمام عملگرهای C_{4v} به این تابع، سه تابع مستقل دیگر در محل‌های ۲، ۳ و ۴ نشان داده شده در شکل (۳-۴) را به دست خواهیم آورد. واضح است که این چهار تابع یک نمایش Γ از C_{4v} را ایجاد می‌کنند، زیرا در اثر اعمال عملگرهای C_{4v} به یکدیگر تبدیل می‌شوند. ماتریسهای نمایشهای Γ توسط رابطه زیر به دست می‌آیند^{۱۱}:

$$A(\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4) = (\phi_1, \phi_2, \phi_3, \phi_4) \Gamma(A). \quad (۳-۱۰۰)$$

چون هیچ نمایش کاهش ناپذیر چهار بعدی از C_{4v} وجود ندارد، Γ باید کاهش پذیر باشد. مشخصه های ماتریسهای Γ به صورت آنچه در زیر آمده است پیدا می‌شوند^{۱۲}:

ردها	C_1	C_2	C_3	C_4	C_5
	(E)	(C_4, C_4^3)	(C_2)	(m_x, m_y)	(σ_v, σ_v')
χ	4	0	0	0	2

با استفاده از (۳-۶۷) می‌توانیم a_i ها، تعداد دفعاتی که یک نمایش کاهش ناپذیر در Γ وجود دارد، را به دست آوریم. در این جا به دست می‌آوریم: $a_1=a_2=a_5=1$ و $a_3=a_4=0$ که می‌دهد:

$$\Gamma = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)} \oplus \Gamma^{(5)}.$$

در موارد ساده‌ای نظیر آنچه با آن سر و کار داریم، این ضرایب را می‌توان بدون

۱۱- توجه کنید که اینها هشت ماتریس ایجاد شده در مسأله (۳-۱) می‌باشند.

۱۲- در این مثال بخصوص، می‌توان به آسانی بدون این که مجبور باشیم تمام ماتریسهای Γ را صریحاً بیابیم، با بررسی شکل (۳-۴) آنها را به دست آوریم. بنابراین، مشخصه A عبارت است از تعداد توابع ϕ_i که تحت A تغییرناپذیر می‌مانند. اما در موقع استفاده این روش ساده در مسائل کلی دیگر، که ضرایب کسری در آنها وجود دارد، باید دقت بشود.

توسل به (۳-۶۷) از بررسی جدول مشخصه گروه پیدا کرد. بنابراین توجه کنید که اگر جمع ردای مشخصه‌های $X(1)$, $X(2)$ و $X(5)$ از C_{4v} را که در جدول (۳-۱) آمده است بگیریم، درست همان مشخصه‌های Γ را که در بالا داده شده است به دست می‌آوریم.

اکنون می‌توانیم (۳-۹۱) را به کار بیندیم تا ضرایب $U_{\alpha pm}^i$ را که ترکیبات خطی متقارن شده ϕ_1 , ϕ_2 , ϕ_3 و ϕ_4 را می‌دهند تعیین کنیم. این ترکیبات به صورت زیر به دست می‌آیند.

$$\begin{aligned} \Gamma^{(1)} : \psi_{11}^1 &= (\phi_1 + \phi_2 + \phi_3 + \phi_4)/2, \\ \Gamma^{(2)} : \psi_{11}^2 &= (\phi_1 - \phi_2 + \phi_3 - \phi_4)/2, \\ \Gamma^{(5)} : \begin{cases} \psi_{11}^5 &= (\phi_1 + \phi_2 - \phi_3 - \phi_4)/2, \\ \psi_{12}^5 &= (\phi_1 - \phi_2 - \phi_3 + \phi_4)/2. \end{cases} \end{aligned} \quad (101-3)$$

ماتریس تبدیل یکانی که از ضرایب ϕ_i های بالا ساخته می‌شود، کلیه ماتریسهای نمایش Γ را به صورت بلوکی قطری می‌کند.

بنابراین بطور کلی، هرگاه نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه کاملاً معلوم باشند، (۳-۹۱) برای تعیین کلیه ضرایب $U_{\alpha pm}^i$ و در نتیجه متقارن سازی توابع پایه، مناسب است. در اغلب موارد عملی، ماتریسهای نمایشهای کاهش پذیر تنها یک عنصر غیر صفر در هر سطر و هر ستون دارند، که در نتیجه فقط یک جمله غیر صفر در طرف راست (۳-۹۱) باقی می‌ماند. علاوه بر این، نمایشهای کاهش ناپذیر تمام گروههای نقطه‌ای بلورشناختی حداکثر سه بعدی اند. این مطلب، تعیین $U_{\alpha pm}^i$ را کاملاً ساده می‌کنند.

۳-۱۰ ضرب مستقیم نمایشها

دو نمایش $\Gamma(a)$ و $\Gamma(b)$ (که ممکن است کاهش پذیر یا کاهش ناپذیر باشند) از گروه G با ضرب مستقیم ماتریسهای متناظر دو نمایش در نظر بگیریم و ماتریسهای جدید را به صورت زیر نمایش دهید:

$$\Gamma(A) = \Gamma^{(a)}(A) \otimes \Gamma^{(b)}(A), \quad (102-3)$$

فرض کنید در گروه G داشته باشیم $AB = C$ ، و حاصل ضرب زیر را در نظر بگیرید:

$$\begin{aligned}\Gamma(A) \Gamma(B) &= [\Gamma^{(a)}(A) \otimes \Gamma^{(b)}(A)] [\Gamma^{(a)}(B) \otimes \Gamma^{(b)}(B)] \\ &= [\Gamma^{(a)}(A) \Gamma^{(a)}(B)] \otimes [\Gamma^{(b)}(A) \Gamma^{(b)}(B)] \quad (۱۰۳-۳) \\ &= \Gamma^{(a)}(C) \otimes \Gamma^{(b)}(C) \\ &= \Gamma(C).\end{aligned}$$

بدین ترتیب ملاحظه می‌کنیم که، ماتریسهای بدست آمده از ضرب مستقیم ماتریسهای دو نمایش نیز در جدول ضرب گروه صدق می‌کنند و لذا یک نمایش از G ایجاد می‌کنند. نمایش Γ را ضرب مستقیم نمایشهای $\Gamma^{(a)}$ و $\Gamma^{(b)}$ می‌نامیم و به صورت $\Gamma = \Gamma^{(a)} \otimes \Gamma^{(b)}$ نشان می‌دهیم. عموماً، ضرب مستقیم دو نمایش کاهش پذیر است؛ اگر یکی از $\Gamma^{(a)}$ یا $\Gamma^{(b)}$ یا هر دو کاهش پذیر باشند تحقیقاً چنین است. از بحث ضرب مستقیم ماتریسها در بخش (۲-۵-۲) واضح است که مشخصه‌های نمایش ضرب مستقیم Γ با حاصلضرب مشخصه‌های متناظر $\Gamma^{(a)}$ و $\Gamma^{(b)}$ برابرند، یعنی:

$$\chi(A) = \chi^{(a)}(A) \chi^{(b)}(A), \quad \text{و غیره} \quad (۱۰۴-۳)$$

ابتدا، کاهش ضربهای مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر G را در نظر می‌گیریم. این

را به صورت زیر نشان می‌دهیم:

$$\Gamma^{(i)} \otimes \Gamma^{(j)} = \sum_k x_k^{i,j} \Gamma^{(k)}, \quad (۱۰۵-۳ \text{ الف})$$

$$\chi^{(i)}(A) \chi^{(j)}(A) = \sum_k x_k^{i,j} \chi^{(k)}(A), \quad \forall A \in G, \quad (۱۰۵-۳ \text{ ب})$$

که در آن $X_k^{(i)}$ ها اعداد صحیح غیر منفی می‌باشند. در این صورت حاصلضرب مستقیم هر دو نمایش:

$$\Gamma^{(a)} = \sum_i a_i \Gamma^{(i)} \quad \text{و} \quad \Gamma^{(b)} = \sum_j b_j \Gamma^{(j)}$$

برطبق رابطه زیر به در مؤلفه کاهش ناپذیری تجزیه می‌شود:

$$\Gamma^{(a)} \otimes \Gamma^{(b)} = \sum_k \left[\sum_{i,j} a_i b_j x_k^{i,j} \right] \Gamma^{(k)}. \quad (۱۰۶-۳)$$

این را می‌توان بسادگی به ضرب مستقیم بیش از دو نمایش تعمیم داد. در جدول (۳-۴) ضربهای مستقیم دو به‌دوی تمام نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} را همراه با تجزیه‌شان آورده‌ایم. اثبات آن را به عنوان تمرین به عهده دانشجویان می‌گذاریم.

۳-۱۰-۱ توابع پایه برای نمایشهای حاصلضرب

توابع پایه برای نمایش ضرب مستقیم می‌تواند بسادگی با ضربهای توابع پایه نمایشهای کاهش ناپذیر تشکیل دهنده آن با یکدیگر به دست آید. بنابراین، فرض کنید نمایش پایه $\{\phi_1, \dots, \phi_{l_i}\}$ کاهش ناپذیر $\Gamma^{(i)}$ و $\{X_1, X_2, \dots, X_{l_i}\}$ پایه نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(j)}$ باشد. در این صورت نمایش $\Gamma = \Gamma^{(i)} \otimes \Gamma^{(j)}$ دارای l_i تابع پایه $\psi_{mn} = \phi_m X_n$ ($1 < m \leq l_i, 1 \leq n \leq l_j$) است.

$\Gamma^{(1)}: \Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(1)} = \Gamma^{(1)};$
$\Gamma^{(2)}: \Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(2)} = \Gamma^{(2)}, \Gamma^{(2)} \otimes \Gamma^{(2)} = \Gamma^{(1)};$
$\Gamma^{(3)}: \Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(3)} = \Gamma^{(3)}, \Gamma^{(2)} \otimes \Gamma^{(3)} = \Gamma^{(4)},$ $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(3)} = \Gamma^{(1)};$
$\Gamma^{(4)}: \Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(4)} = \Gamma^{(4)}, \Gamma^{(2)} \otimes \Gamma^{(4)} = \Gamma^{(3)},$ $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(4)} = \Gamma^{(2)}, \Gamma^{(4)} \otimes \Gamma^{(4)} = \Gamma^{(1)};$
$\Gamma^{(5)}: \Gamma^{(1)} \otimes \Gamma^{(5)} = \Gamma^{(5)}, \Gamma^{(2)} \otimes \Gamma^{(5)} = \Gamma^{(5)},$ $\Gamma^{(3)} \otimes \Gamma^{(5)} = \Gamma^{(5)}, \Gamma^{(4)} \otimes \Gamma^{(5)} = \Gamma^{(5)},$ $\Gamma^{(5)} \otimes \Gamma^{(5)} = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)} \oplus \Gamma^{(3)} \oplus \Gamma^{(4)}.$

جدول ۳-۲ حاصلضرب مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} .

بنا به تعریف یک نمایش، داریم:

$$A(\psi_{11}, \psi_{12}, \dots, \psi_{l_i l_j}) = (\psi_{11}, \psi_{12}, \dots, \psi_{l_i l_j}) (\Gamma^{(i)}(A) \otimes \Gamma^{(j)}(A)).$$

از این جا عمل A روی یک تابع بخصوص ψ_{mn} می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\begin{aligned}
 A \psi_{mn} &= \sum_{(kl)=1}^{l_i l_j} \psi_{kl} [\Gamma^{(i)}(A) \otimes \Gamma^{(j)}(A)]_{kl, mn} && \text{بنا بر (۲-۸۷)} \\
 &= \sum_{k=1}^{l_i} \sum_{l=1}^{l_j} \phi_k \chi_l \Gamma_{km}^{(i)}(A) \Gamma_{ln}^{(j)}(A) \quad \text{by (2.87)} && \text{(۳-۱۰۷)} \\
 &= (A \phi_m)(A \chi_n).
 \end{aligned}$$

این رابطه نشان می‌دهد که چگونه عمل یک عملگر روی یک تابع از فضای حاصلضرب مستقیم را باید انجام داد. در این جا فضای Z یا I بعدی پدید آمده توسط توابع پایه $\{\psi_{mn}\}$ عبارت است از: ضرب مستقیم در فضای پدید آمده به وسیله توابع $\{\phi_m\}$ و $\{X_n\}$.

در این شاخه از جبر مجرد می‌توانیم ضرب مستقیم یک فضای را با خودش نیز به دست آوریم. بنابراین، یک فضای L_n با توابع پایه $\{\emptyset_1, \dots, \emptyset_n\}$ را در نظر بگیرید. فضای ضرب مستقیم $L_n \otimes L_n$ بعدی n^2 دارای توابع پایه $\{\emptyset_1 \emptyset_1, \dots, \emptyset_i \emptyset_j, \dots, \emptyset_m \emptyset_n\}$ است. لیکن، باید در تمام مراحل جبر دقت زیادی اعمال شود و باید به خاطر داشته باشیم که با یک نمادگذاری مجرد سر و کار داریم. از این رو لازم است که بین دو تابع ضرب مستقیم $\emptyset_i \emptyset_j$ و $\emptyset_j \emptyset_i$ ($i \neq j$) فرق بگذاریم، زیرا در این نمادگذاری، این دو تابع دوبردار مستقل در فضای ضرب مستقیم را نشان می‌دهند. برای اجتناب از هرگونه ابهامی، می‌توانیم از توابع پایه پریم دار و بدون پریم استفاده کنیم. به عنوان یک مثال، ضرب مستقیم زیر را در نظر بگیرید:

$$\Gamma \equiv \Gamma^{(5)} \otimes \Gamma^{(5)} = \Gamma^{(1)} \oplus \Gamma^{(2)} \oplus \Gamma^{(3)} \oplus \Gamma^{(4)}; \quad (108-3)$$

(جدول ۳-۴ را ببینید). مجموعه توابع $\{x, y\}$ را به عنوان پایه برای $L^{(5)}$ در نظر می‌گیریم. در این صورت توابع پایه برای نمایش Γ عبارتند از: $\{xx', xy', yx', yy'\}$ اثر یک عملگر، مثلاً $C_4 \in C_{4v}$ روی این توابع می‌تواند بسادگی به دست آید:

$$C_4(xx', xy', yx', yy') = (yy' - yx' - xy', xx') \\ = (xx', xy', yx', yy') \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (109-3)$$

اکنون بسادگی می‌توانیم $(3-107)$ را تحقیق کنیم، بنابراین:

$$C_4(xy) = (C_4 x)(C_4 y) = -yx.$$

همچنین ملاحظه می‌کنیم که:

$$\begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \otimes \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$$

یعنی، ماتریس معرف C_4 در Γ ضرب مستقیم ماتریس معرف آن در $\Gamma^{(5)}$ در خودش می‌باشد.

کاهش (۳-۱۰۸)، اکنون می‌تواند به آسانی بادر نظر گرفتن مشخصه‌های نمایش Γ به دست آید. ترکیبات خطی مقارن شده برای نمایشهای کاهش ناپذیر تشکیل دهنده آن به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} \Gamma^{(1)} : \psi_1 &= [(xx') & & + (yy')] , \\ \Gamma^{(2)} : \psi_2 &= [& (xy') + (yx') &] , \\ \Gamma^{(3)} : \psi_3 &= [(xx') & & - (yy')] , \\ \Gamma^{(4)} : \psi_4 &= [& (xy') - (yx') &] . \end{aligned} \quad (۱۱۰-۳)$$

متذکر می‌شویم که وقتی تعدادی ذرات یکسان در سیستم مورد نظر داشته باشیم، ضرب مستقیم دو نمایش یک گروه مورد نیاز است. بدین ترتیب، در یک اتم دو الکترونی، نظیر هلیوم، اگر تابع موج هریک از الکترونها بر طبق نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه تبدیل شوند، در این صورت تابع موج مرکب دو الکترون (با صرف نظر کردن از اندرکنش الکترون-الکترون) بر طبق نمایشهای ضرب مستقیم این گروه تبدیل خواهد شد.

۳-۱۱. نمایشهای یک گروه ضرب مستقیم

در این بخش، نمایشهای یک گروه را که ضرب مستقیم دو زیر گروه جابجاپذیری باشند، بررسی می‌کنیم. فرض کنید $H = \{E \equiv H_1, H_2, \dots, H_h\}$ و $G = \{E \equiv G_1, G_2, \dots, G_g\}$ دو گروه از مرتبه‌های h و g باشند، بطوری که تمام عناصر H_i با تمام عناصر G_j جابجاپذیر باشند. گروه ضرب مستقیم این دو را که از مرتبه $k = hg$ است با $K = \{E \equiv K_{11}, K_{12}, \dots, K_{1g}, K_{21}, \dots, K_{hg}\}$ نمایش دهید، که در آن یک عنصر K به صورت زیر به دست می‌آید:

$$K_{ij} = H_i G_j. \quad (111-3)$$

فرض کنید $G_j H_n = G_q$ و $H_i H_m = H_p$ در این صورت:

$$\begin{aligned} K_{ij} K_{mn} &= (H_i G_j) (H_m G_n) \\ &= (H_i H_m) (G_j G_n) \\ &= H_p G_q \\ &= K_{pq}. \end{aligned} \quad (112-3)$$

فرض کنید $\Gamma^{(h)}$ یک نمایش از H و $\Gamma^{(g)}$ یک نمایش از G باشد، در این صورت:

$$\begin{aligned} \Gamma^{(h)}(H_i) \Gamma^{(h)}(H_m) &= \Gamma^{(h)}(H_p), \\ \Gamma^{(g)}(G_j) \Gamma^{(g)}(G_n) &= \Gamma^{(g)}(G_q). \end{aligned}$$

با ضرب مستقیم، ماتریسهای طرفین در معادله فوق داریم:

$$(113-3)$$

$$\begin{aligned} \Gamma^{(h)}(H_p) \otimes \Gamma^{(g)}(G_q) &= [\Gamma^{(h)}(H_i) \Gamma^{(h)}(H_m)] \otimes [\Gamma^{(g)}(G_j) \Gamma^{(g)}(G_n)] \\ &= [\Gamma^{(h)}(H_i) \otimes \Gamma^{(g)}(G_j)] [\Gamma^{(h)}(H_m) \otimes \Gamma^{(g)}(G_n)]. \end{aligned}$$

اگر ماتریسهای جدید زیر را تعریف کنیم:

$$\Gamma^{(k)}(K_{pq}) = \Gamma^{(h)}(H_p) \otimes \Gamma^{(g)}(G_q), \quad (114-3)$$

معادله (113-3) به صورت زیر درمی آید:

$$\Gamma^{(k)}(K_{pq}) = \Gamma^{(k)}(K_{ij}) \Gamma^{(k)}(K_{mn}). \quad (115-3)$$

از مقایسه این نتیجه با (112-3)، روشن می شود که این ماتریسهای ضرب مستقیم یک نمایش K را تشکیل می دهند. بنابراین، ضرب مستقیم نمایشهای دو گروه جابجاپذیر یک نمایش از گروه ضرب مستقیم آنهاست.

اکنون می خواهیم نشان دهیم اگر $\Gamma^{(h)}$ و $\Gamma^{(g)}$ به ترتیب نمایشهای کاهش ناپذیر H و G باشند، ضرب مستقیم $\Gamma^{(k)} = \Gamma^{(h)} \otimes \Gamma^{(g)}$ یک نمایش کاهش ناپذیر K است.

همان طوری که قبلاً بحث شد [معادله (3-69) را ببینید]. شرط کاهش ناپذیری می دهد:

$$\sum_{H_i \in H} \chi^{(h)}(H_i) \chi^{(h)*}(H_i) = h,$$

$$\sum_{G_i \in G} \chi^{(g)}(G_i) \chi^{(g)*}(G_i) = g, \quad (۱۱۶-۳)$$

که در آن $X^{(g)}$ و $X^{(h)}$ به ترتیب مشخصه‌های نمایشهای $\Gamma^{(g)}$ و $\Gamma^{(h)}$ می‌باشند. با ضرب دو طرف معادلات فوق در یکدیگر داریم:

$$\begin{aligned} hg \equiv k &= \left[\sum_{H_i \in H} \chi^{(h)}(H_i) \chi^{(h)*}(H_i) \right] \left[\sum_{G_j \in G} \chi^{(g)}(G_j) \chi^{(g)*}(G_j) \right] \\ &= \sum_{H_i \in H} \sum_{G_j \in G} [\chi^{(h)}(H_i) \chi^{(g)}(G_j)] [\chi^{(h)*}(H_i) \chi^{(g)*}(G_j)]. \end{aligned}$$

می‌توانیم بسادگی از (۱۱۴-۳) نتیجه‌گیری کنیم که مشخصه‌های نمایش $\Gamma^{(k)}$ از K حاصلضربهای مشخصه‌های H و G است. بنابراین معادله فوق به صورت زیر درمی‌آید:

$$k = \sum_{K_{ij} \in K} \chi^{(k)}(K_{ij}) \chi^{(k)*}(K_{ij}), \quad (۱۱۷-۳)$$

که ثابت می‌کند، $\Gamma^{(k)}$ یک نمایش کاهش‌ناپذیر K است.

چون در نمایش همانی هر گروه، هر عنصر با واحد نمایش داده می‌شود، نمایش همانی K ضرب مستقیم نمایشهای همانی H و G است. همچنین می‌توان دید که اگر $\Gamma^{(h)}$ و $\Gamma^{(g)}$ یک نمایش کاهش‌پذیر H یا G باشد، در این صورت نمایش ضرب مستقیم K کاهش‌پذیر است.

اکنون ثابت می‌کنیم که تمام نمایشهای کاهش‌ناپذیر K ضربهای مستقیم یک نمایش کاهش‌ناپذیر H در یک نمایش کاهش‌ناپذیر G است. فرض کنید تعداد نمایشهای کاهش‌ناپذیر H برابر c_h با ابعاد $l_i^{(h)}$ ($1 \leq i \leq c_h$) باشد. همچنین فرض کنید تعداد نمایشهای کاهش‌ناپذیر G برابر c_g با ابعاد $l_j^{(g)}$ ($1 \leq j \leq c_g$) باشد. در این صورت بنا بر (۳-۷۹)، داریم:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{c_h} [l_i^{(h)}]^2 &= h, \\ \sum_{j=1}^{c_g} [l_j^{(g)}]^2 &= g. \end{aligned}$$

نمایشهای کاهش ناپذیر K که از ضرب مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر H و G به دست می آیند دارای ابعاد $I_{ij}(g) = I_i(h) I_j(k)$ خواهند بود. حال مجموع مجذورهای ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر K را که بدین ترتیب به دست آمده است، در نظر بگیریم:

$$\sum_{i=1}^{c_h} \sum_{j=1}^{c_g} [I_{ij}(k)]^2 = \sum_{i=1}^{c_h} \sum_{j=1}^{c_g} [I_i(h)]^2 [I_j(g)]^2$$

یا:

$$= hg$$

$$= k ;$$

$$\sum_{n=1}^{c_h c_g} [I_n(k)]^2 = k, \quad (118-3)$$

که در آن بعد یک نمایش کاهش ناپذیر K را با $I_n(k) = I_{ij}(k)$ نشان داده ایم. معادله بالا نشان می دهد که ضربهای مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر H و G کلیه نمایشهای کاهش ناپذیر K را دربر می گیرد، یعنی، هیچ نمایش کاهش ناپذیری از K وجود ندارد که نتواند به عنوان ضرب مستقیم یک نمایش کاهش ناپذیر H و یک نمایش کاهش ناپذیر G بیان شود. اگر تعداد نمایشهای کاهش ناپذیر K را با c_k نشان دهیم، در این صورت:

$$c_k = c_h c_g. \quad (119-3)$$

این یک نتیجه بسیار مهم در نظریه گروههای ضرب مستقیم است زیرا اگر K بتواند به عنوان ضرب مستقیم دو یا چند زیرگروه بیان شود، از آن می توان برای ساختن تمام نمایشهای کاهش ناپذیر گروه بزرگتر K از نمایشهای کاهش ناپذیر گروههای کوچکتر استفاده کرد. اگرچه اثبات صریحی در این جا ارائه دادیم، می توانستیم با استفاده از مسأله (۱-۲۳ (iv)) همراه با این واقعیت که تعداد نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه با تعداد ردهای آن برابر است، همین مطلب را اثبات کنیم.

۳-۱۱-۱ توابع پایه برای نمایشهای گروه ضرب مستقیم

توابع پایه برای یک نمایش $\Gamma(k)$ از K (کاهش ناپذیر یا کاهش پذیر) می تواند از ضرب توابع پایه نمایشهای متناظر $\Gamma(h)$ و $\Gamma(g)$ ، که به ترتیب به H و G مربوطند، و ضرب

مستقیمشان نمایش $\Gamma(k)$ است، ساخته شوند. به عبارت دیگر، فضای هیلبرت نمایش $\Gamma(k)$ همان ضرب مستقیم فضاهاى هیلبرت نمایشهای $\Gamma(h)$ و $\Gamma(g)$ است.

تعداد $l(h) = a$ تابع پایه $\Gamma(h)$ را با $\{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_a\}$ نمایش می‌دهیم. در این صورت نمایش $\Gamma(k) = \Gamma(h) \otimes \Gamma(g)$ از K دارای ab تابع پایه $\{\psi_{mn}\}$ است، که در آن $\psi_{mn} = \phi_m X_n$ و $1 \leq n \leq b$ او $1 \leq m \leq a$. اگر یک عنصر K توسط $K_{pq} = K_p G_q$ نشان داده شود، عمل آن روی یک تابع ψ_{mn} به صورت زیر داده می‌شود:

$$\begin{aligned} K_{pq}\psi_{mn} &= \sum_{(kl)=1}^{ab} \psi_{kl} \Gamma_{kl,mn}^{(k)}(K_{pq}) \\ &= \sum_{(kl)=1}^{ab} \phi_k \chi_l [\Gamma_{km}^{(h)}(H_p) \Gamma_{ln}^{(g)}(G_q)] \quad (۱۲۰-۳) \\ &= \left[\sum_{k=1}^a \phi_k \Gamma_{km}^{(h)}(H_p) \right] \left[\sum_{l=1}^b \chi_l \Gamma_{ln}^{(g)}(G_q) \right] \\ &= (H_p \phi_m) (G_q \chi_n). \end{aligned}$$

بدین ترتیب عملگرهای دو گروه تشکیل دهنده K فقط روی توابع فضای هیلبرت مربوطه عمل می‌کنند.

اکنون یک مثال از ضرب مستقیم دو گروه را بررسی می‌کنیم. دو گروه $H = \{E_x, m_x\}$ و $G = \{E_y, m_y\}$ را که هر دو از مرتبه دو هستند در نظر بگیرید، که در آن مانند قبل عملهای m_x و m_y به ترتیب معرّف انعکاس در صفحات xz و yz می‌باشد. برای راحتی عنصر همانی دو گروه را از یکدیگر متمایز کرده‌ایم. چون m_x با m_y جابجایی پذیر است. می‌توانیم ضرب مستقیم H و G را بگیریم تا یک گروه از مرتبه چهار با عناصر $A = E_x m_y$ ، $E = E_x E_y$ ، $B = m_x E_y$ ، $C = m_x m_y$ بدهد. نمایشهای کاهش ناپذیر H و G به صورت زیر خواهند بود:

	گروه H			گروه G	
	E_x	m_x		E_y	m_y
$\Gamma_1^{(h)}$	1	1	$\Gamma_1^{(g)}$	1	1
$\Gamma_2^{(h)}$	1	-1	$\Gamma_2^{(g)}$	1	-1

سپس نمایشهای کاهش ناپذیر K می تواند به آسانی به وسیله کلیه ضربهای مستقیم ممکن کاهش ناپذیر H و G به دست آید. این نمایشها عبارتند از:

گروه K				
	E	A	B	C
$\Gamma_1^{(k)} \equiv \Gamma_{11}^{(k)}$	1	1	1	1
$\Gamma_2^{(k)} \equiv \Gamma_{12}^{(k)}$	1	-1	1	-1
$\Gamma_3^{(k)} \equiv \Gamma_{21}^{(k)}$	1	1	-1	-1
$\Gamma_4^{(k)} \equiv \Gamma_{22}^{(k)}$	1	-1	-1	1

می توان دید که K با گروه $\{E, C_4^2, m_x, m_y\}$ ، که یک زیرگروه C_{4v} است

ایزومرفیک می باشد.

حال ϕ_1 و ϕ_2 را به عنوان توابع پایه برای دو نمایش کاهش ناپذیر H و X_2, X_1 را

به عنوان دو نمایش کاهش ناپذیر G در نظر بگیرید، در این صورت عملیات مختلف

به صورت زیر داده می شوند:

$$\begin{aligned}
 E_x \phi_1 &= \phi_1, & m_x \phi_1 &= \phi_1, \\
 E_x \phi_2 &= \phi_2, & m_x \phi_2 &= -\phi_2; \\
 E_y \chi_1 &= \chi_1, & m_y \chi_1 &= \chi_1, \\
 E_y \chi_2 &= \chi_2, & m_y \chi_2 &= -\chi_2.
 \end{aligned}
 \tag{۱۲۱-۳}$$

در این صورت، یک نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma_{ij}^{(k)} = \Gamma_{ij}^{(k)}$ از K دارای توابع پایه زیر خواهد

بود.

$$\psi_{ij} \equiv \phi_i \chi_j, \quad i, j = 1, 2.$$

به عنوان مثال، نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma_2^{(k)} = \Gamma_{12}^{(k)}$ دارای توابع پایه $\phi_1 X_2$ و $\psi_{12} =$

است، که می تواند بسادگی به صورت زیر اثبات شود:

$$\begin{aligned}
 E \psi_{12} &= (E_x \phi_1) (E_y \chi_2) = \phi_1 \chi_2 = \psi_{12}, \\
 A \psi_{12} &= (E_x \phi_1) (m_y \chi_2) = \phi_1 (-\chi_2) = -\psi_{12}, \\
 B \psi_{12} &= (m_x \phi_1) (E_y \chi_2) = \phi_1 \chi_2 = \psi_{12}, \\
 C \psi_{12} &= (m_x \phi_1) (m_y \chi_2) = \phi_1 (-\chi_2) = -\psi_{12}.
 \end{aligned}$$

اگر دو ذره قابل تشخیص داشته باشیم (نظیر یک الکترون و یک پروتون) که توابع موجشان بر طبق نمایشهای دو گروه تقارن مختلف تبدیل شوند، در این صورت تابع موج کل سیستم بر طبق نمایشهای گروه ضرب مستقیم تبدیل خواهد داشت.

مسائل فصل سوم

۱-۳. اگر ماتریس $T(A)$ در معادله (۳-۸) یک ماتریس یکانی باشد، نشان دهید که ماتریس $X(A)$ باید یک ماتریس صفر باشد. [این ماتریس، به شکل ماتریس $\Gamma(A)$ در معادله (۳-۲۳) است].

۲-۳. فرض کنید $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ توابع پایه نمایش n بعدی Γ ی گروه G باشند. نشان دهید که هر n ترکیب خطی مستقل ψ_i ها نیز نمایشی از G را ایجاد می کنند که هم ارز Γ است.

۳-۳. نشان دهید که اگر Γ یک نمایش گروه G باشد، آنگاه Γ^* (که ماتریسهای آن مزدوج مختلط ماتریسهای متناظر Γ می باشند) نیز نمایشی از G خواهد بود، در حالی که Γ^{-1} (که ماتریسهای آن معکوسهای ماتریسهای متناظر Γ می باشند) و Γ^+ (که ماتریسهای آن مزدوجهای هرمیتی ماتریسهای متناظر Γ می باشند) نمایشهای G نیستند مگر آن که G یک گروه آبله باشد.

۴-۳. نشان دهید که اگر Γ نمایشی از گروه G باشد، Γ و Γ^* یا هردو کاهش پذیرند و یا هردو کاهش ناپذیر می باشند.

۵-۳. جدول مشخصه و جدول نمایشهای کاهش ناپذیر گروه C_{3v} ، گروه تقارنی یک مثلث متساوی الاضلاع، را بسازید.

۶-۳. معادله (۳-۵۸) را از معادله (۳-۵۶) به دست آورید.

۷-۳. جدولهای مشخصه و نمایشهای کاهش ناپذیر گروههای زیر را به دست

آورید:

(الف) یک گروه مرتبه ۳. (ب) یک گروه دوره ای مرتبه ۴. (ج) یک گروه غیردوره ای مرتبه ۴. (د) یک گروه مرتبه ۵. (ه) یک گروه دوره ای مرتبه ۶. (و) یک گروه غیرآبلی مرتبه ۶. (ز) یک گروه دوره ای مرتبه n ، که در آن n یک عدد صحیح مثبت است (به بخش ۱-۸ مراجعه کنید).

۸-۳. جدول مشخصه گروه ایجادشده در مسأله (۱-۷) را به دست آورید. (خواهید دید که این جدول با جدول گروه C_{4v} یکسان است. این امر نشان می دهد که دو گروه که دارای جدولهای مشخصه یکسان باشند، لزوماً ایزومرفیک نیستند).

۹-۳. جدول مشخصه گروه تناوبی A_4 را به دست آورید.

۱۰-۳. جدول (۳-۴) برای ضربهای مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} را

اثبات کنید.

۱۱-۳. فرض کنید $\Gamma^{(i)}$ و $\Gamma^{(j)}$ دو نمایش کاهش ناپذیر غیرهم ارز یک گروه G باشند. نشان دهید که نمایش ضرب مستقیم $\Gamma^{(i)} \otimes \Gamma^{(j)}$ نمایش همانی را شامل نمی شود. همچنین نشان دهید که ضرب مستقیم یک نمایش کاهش ناپذیر در نمایش مزدوج مختلط خودش یکبار و فقط یکبار نمایش همانی را شامل می شود.

۱۲-۳. ضربهای مستقیم تمام نمایشهای کاهش ناپذیر گروه C_{3v} را به دست آورید

و حاصل آنها را به صورت جمعهای مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر تبدیل کنید.

۱۳-۳. فرض کنید C_i^* معکوس رده C_i باشد [مسأله (۱-۱۸) را ببینید]. اگر

$C_i^* = C_i$ ، در این صورت گوئیم که رده C_i خودمعکوس است. نشان دهید که تعداد مشخصه های کاهش ناپذیر حقیقی یک گروه با تعداد ردهای خودمعکوسش برابر است.

۱۴-۳. نشان دهید که هر گروه حداقل دارای یک نمایش وفادار است.

۱۵-۳. معادله (۳-۶۵) را برای مشخصه های C_{4v} که در جدول (۱-۳) آمده

است، اثبات کنید.

۱۶-۳. بطور صریح (با اثر دادن تمام عناصر گروه) نشان دهید که توابع xy و

x^2-y^2 به ترتیب نمایشهای $\Gamma^{(2)}$ و $\Gamma^{(3)}$ ی C_{4v} را ایجاد می کنند.

۱۷-۳. با شروع از توابع: (الف) z ، (ب) x^2 ، (ج) x^3 ، (د) x^2y ، (ه) e^{ix} ،

(و) $\cos x$ ، (ز) $\cos mx$ ، (ح) $\sin ny$ ، (ط) $\exp(an+by)$ با $a \neq b$ ، نمایشهای گروه C_{4v} را ایجاد کنید. در مواردی که نمایش کاهش پذیر است، آن را کاهش دهید و ترکیبات مناسبی از توابعی را که نمایشهای کاهش ناپذیر تشکیل دهند آن را ایجاد می‌کنند، بیابید.

۱۸-۳. مسأله (۳-۱۷) را برای گروه C_{3v} با توابع: (الف) z ، (ب) xy ، (ج) $x^2 - y^2$ ، $y^2 - x^2$ (د) X^2 ، (و) X^3 ، (ز) X^2y ، حل کنید.

۱۹-۳. نمایش منظم گروه C_{3v} را بسازید. مجموعه‌ای از شش تابع که نمایش را ایجاد می‌کنند انتخاب کنید. این نمایش را کاهش دهید و شش تابع پایه متقارن شده که مطابق نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف C_{3v} تبدیل می‌شوند، به دست آورید.

۲۰-۳. نشان دهید که دو نمایش Γ_1 و Γ_2 ی یک گروه متناهی G در صورتی نمایش کاهش ناپذیر مشترکی ندارند که مشخصه‌های آنها متعامد باشند، یعنی:

$$\sum_{k=1}^c n_k \chi_{1k} \chi_{2k}^* = 0,$$

که در آن x_{1k} و x_{2k} به ترتیب مشخصه‌های رد k ام Γ_1 و Γ_2 می‌باشند.

۲۱-۳. نشان دهید که دو تابع $e^{i(x+y)}$ و $e^{i(x-y)}$ نمایش منظم گروه (E, m_x) را ایجاد می‌کنند، که در آن m_x همان طوری که در متن کتاب تعریف شده است، یک انعکاس می‌باشد. دو ترکیب خطی از این توابع را به دست آورید که مطابق نمایشهای کاهش ناپذیر (E, m_x) تبدیل شوند.

۲۲-۳. نشان دهید که تابع $\exp [i(ax+by)]$ به ازای $a \neq b$ یکی از چهار تابعی است که نمایش منظم گروه (E, C_{4v}, m_x, m_y) را ایجاد می‌کنند. یکبار دیگر چهار ترکیب متقارن شده از این توابع را که مطابق نمایشهای کاهش ناپذیر گروه تبدیل می‌شوند، به دست آورید.

۲۳-۳. ثابت کنید نمایش یک بعدی یک گروه باید کاهش ناپذیر باشد.

کتاب شناسی فصل سوم

Boerner (1963); Burrow (1965); Dixon (1967); Falicov (1967); Hamermesh (1964); Kahan (1965); Margenau and Murphy (1966), Chapter 15; Meijer and Bauer (1962); Murnagham (1963); Tinkham (1964); Wigner (1959).

گروههای پیوسته و نمایشهای آن

در فصل اول گروههای محدود و نامحدود را معرفی کردیم و برای هر کدام چند مثال ارائه شد. دیدیم که گروههای محدود در دو دسته طبقه بندی می شوند - گسسته و پیوسته. تعریف آنها را در اینجا تکرار می کنیم: اگر تعداد عناصر یک گروه شمارش پذیر نامحدود باشد، گروه را گسسته می نامیم، در حالی که اگر تعداد عناصر آن شمارش ناپذیر باشد آن را گروه پیوسته می نامیم.

عملاً، تمام نظریه گروههایی که در فصل اول و سوم برای گروههای محدود ارائه دادیم در مورد گروههای گسسته نامحدود نیز برقرار است. تنها وقتی گروههای پیوسته را بررسی می کنیم تغییراتی ضروری خواهد بود. علاوه بر این اصلاحات، چند مفهوم جدید وارد می کنیم که نقطه اتصالی بین نظریه گروههای پیوسته و سایر شاخه های ریاضی را فراهم می آورد، در حالی که نظریه گروههای محدود، بدون این که به هیچ قسمتی از ریاضیات اتکاء داشته باشد، بتهایی وجود دارد. به عبارت دیگر^۱ در نظریه گروههای پیوسته اغلب استفاده زیادی از نظریه معادلات دیفرانسیل معمولی و با مشتق جزئی، توپولوژی و غیره می شود. در این فصل به توسعه نظریه گروههای پیوسته و نمایشهای آنها می پردازیم.

هدف این نیست که به شرح دقیق ریاضی عناوین حاضر پردازیم بلکه هدف عبارت است از معرفی مفاهیم مقدماتی گروههای پیوسته و به طریقی که بسادگی قابل فهم باشد.

۱-۴ گروههای توبولوژیکی و گروههای لی

عناصر یک گروه پیوسته می توانند توسط یک مجموعه پارامترهای حقیقی a_1, a_2, \dots, a_n که حداقل یکی از آنها بطور پیوسته در یک بازه معین تغییر کند، مشخص شوند. این مجموعه پارامترها برای مشخص کردن تمام عناصر گروه باید هم لازم و هم کافی باشند. به عبارت دیگر، نیابستی بتوانیم یک مجموعه که تعداد کمتری پارامتر داشته باشد انتخاب کنیم که کلیه عناصر گروه را مشخص کنند. فرض کنید، تعداد پارامترهای پیوسته، Γ باشد ($1 \leq \Gamma \leq n$). اگر این تعداد محدود باشد، گروه پیوسته را گروه محدود می گوئیم و Γ مرتبه گروه پیوسته نامیده می شود.

مثال ۱: مجموعه کلیه اعداد حقیقی یک گروه پیوسته از مرتبه یک است زیرا هر عدد حقیقی می تواند به وسیله یک پارامتر، مثلاً x که مقادیر $[-\infty, +\infty]$ را می گیرد، مشخص شود.

مثال ۲: تبدیل خطی یک متغیر x به x' را به صورت زیر در نظر بگیرید:

$$x' = ax + b, \quad a, b \in [-\infty, \infty], \quad a \neq 0. \quad (1-4)$$

مجموعه تمام چنین تبدیلاتی یک گروه دو پارامتری تشکیل می دهند، که یک عنصر آن را می توان توسط $T(a, b)$ نشان داد بطوری که:

$$T(a, b)x = x' = ax + b. \quad (2-4)$$

قانون ترکیب را می توان به صورت زیر به دست آورد:

$$\begin{aligned} T(a_1, b_1) T(a_2, b_2)x &= T(a_1, b_1)(a_2x + b_2) \\ &= a_1(a_2x + b_2) + b_1 \\ &= a_1a_2x + a_1b_2 + b_1, \end{aligned} \quad (3-4)$$

بطوری که:

$$T(a_3, b_3) \equiv T(a_1, b_1) T(a_2, b_2) = T(a_1a_2, a_1b_2 + b_1); \quad (4-4 \text{ الف})$$

$$a_3 = a_1a_2, \quad b_3 = a_1b_2 + b_1. \quad (4-4 \text{ ب})$$

از این جا می‌توان دید که عنصر همانی $T(1, 0)$ است و معکوس آن با رابطه زیر داده می‌شود:

$$T(c, d) \equiv T^{-1}(a, b) = T(1/a, -b/a); \quad (۵-۴-الف)$$

$$c = 1/a, \quad d = -b/a. \quad (۵-۴-ب)$$

توجه کنید که در $(۴-۴-ب)$ ، a_3 و b_3 توابع تحلیلی از a_1 ، b_1 ، a_2 و b_2 می‌باشند و c و d در $(۵-۴-ب)$ توابع تحلیلی از a و b هستند.

مثال ۳: مجموعه تمام جابجاییها در یک فضای برداری حقیقی سه بعدی به شکل

زیر:

$$x' = x + a, \quad y' = y + b, \quad z' = z + c, \quad (۶-۴)$$

یک گروه پیوسته سه پارامتری است. اگر عملگر انتقال را با $T(a, b, c)$ نمایش دهیم، عنصر همانی $T(0, 0, 0)$ است و معکوس $T(a, b, c)$ عبارت است از: $T(-a, -b, -c)$

مثال ۴: یک تبدیل همگن خطی دو متغیره از نوع

$$x' = a_{11}x + a_{12}y, \quad (۷-۴)$$

$$y' = a_{21}x + a_{22}y,$$

یا به صورت برداری:

$$r' = Ar, \quad (۸-۴)$$

را در نظر بگیرید که در آن

$$\det A = |a_{ij}| \neq 0. \quad (۹-۴)$$

مجموعه کلیه چنین تبدیلاتی، که از متسب کردن کلیه اعداد حقیقی ممکن به a_{ij} با توجه به شرط $(۹-۴)$ به دست می‌آید، یک گروه است. این یک گروه پیوسته چهار پارامتری است که به گروه خطی در دو بعد موسوم است و با $GL(2)$ نمایش داده می‌شود. می‌توان مشاهده کرد که این گروه تحت ضرب با گروه ماتریسهای غیرتکینه مرتبه دو ایزومرفیک است.

مثال ۵: یک تبدیل همگن خطی با n متغیر (تعمیم یافته مثال چهار) را در نظر

$$x_i' = \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j, \quad 1 \leq i \leq n, \quad |a_{ij}| \neq 0. \quad (۱۰-۴)$$

بگیرید،

مجموعهٔ چنین تبدیلاتی یک گروه پیوسته n^2 پارامتری است که به گروه خطی در n بعد موسوم است و توسط $GL(n)$ نمایش داده می‌شود، این گروه تحت ضرب، با گروه ماتریسهای غیرتکینه مرتبه n ایزومرفیک است.

مثال ۶: مجموعه دورانها حول یک محور یک گروه پیوسته از مرتبه ۱ است، که

پارامتر آن را می‌توان زاویهٔ دوران، مثلاً θ ، که مقادیر فاصله $[-\pi, \pi]$ یا $[0, 2\pi]$ را بگیرد، در نظر گرفت. این گروه را با $SO(2)$ نمایش می‌دهیم. بعداً در بخش (۴-۲) این گروه را دقیقتر مورد بحث قرار خواهیم داد.

مثال ۷: مجموعه دورانها حول محورهایی که از یک نقطهٔ ثابت در فضای سه

بعدي، می‌گذرند، گروهی است که عناصر آن را می‌توان توسط زوایای اولر α ، β و γ مشخص کرد. این گروه که با $SO(3)$ نمایش داده می‌شود در بخش (۴-۲) مورد بحث قرار خواهد گرفت.

۴-۱-۱ گروههای توپولوژیکی

به خاطر طبیعت پیوسته عناصر گروه، مناسب است که یک توپولوژی را در گروه تعریف کنیم. برای سهولت، خود را به گروههایی محدود می‌کنیم که بتوان عناصر آن را در تناظر یک بیک با نقاط یک زیرمجموعهٔ فضای حاصلضرب حقیقی \mathbb{R} بعدی، $S_{\mathbb{R}}$ قرار داد. این زیرمجموعه را فضای پارامتر می‌نامیم.

فرض کنید $P(x)$ نقطهٔ $S_{\mathbb{R}}$ متناظر با عنصر x از گروه G باشد. $P(x)$ را تصویر

۲- در این فصل، عناصر گروه پیوسته را با X همراه با پریم یا شاخص پایین مشخص می‌کنیم.

عنصر x می‌نامیم. حال همسایگی نقطه $P(x)$ در S_T را در نظر بگیرید. این مجموعه تمام نقاط P' از S_T است که برای آنها داریم:

$$\|P - P(x)\| < \epsilon, \quad (11-4)$$

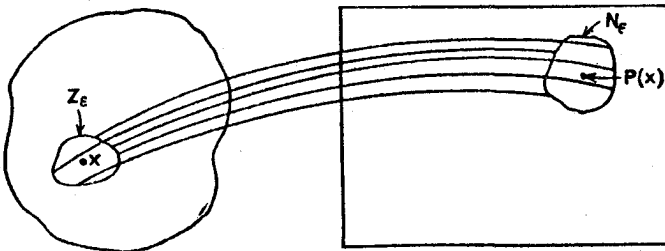
که در آن ϵ یک عدد حقیقی مثبت است. این را ϵ - همسایگی $P(x)$ می‌نامیم و آن را با N_ϵ نمایش می‌دهیم [شکل (۴-۱) را ببینید]. در این صورت نقاط این همسایگی N_ϵ تصویرهای عناصری هستند که همسایگی Z_ϵ عنصر x از G را تشکیل می‌دهند. بطور سببلیک، همسایگی Z_ϵ ، x مجموعه عناصر x' در G است که برای آن:

$$\|P(x') - P(x)\| < \epsilon. \quad (12-4)$$

با استفاده از این مفاهیم، می‌توانیم حد و پیوستگی قوانین ترکیب و وارون عناصر گروه را تعریف کنیم. بنابراین یک ترکیب از عناصر گروه نظیر:

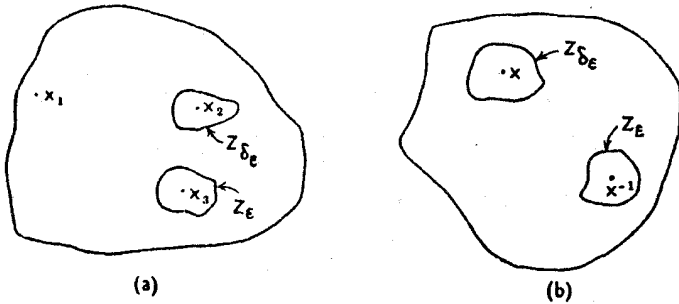
$$x_1 x_2 = x_3. \quad (13-4)$$

را در نظر بگیرید. قانون ترکیب عناصر گروه را در x_2 پیوسته گوئیم اگر به ازای هر $\epsilon > 0$ ، بتوانیم یک عدد حقیقی $\delta > 0$ پیدا کنیم بطوری که برای تمام x های متعلق به همسایگی Z_δ ، x_2 (یعنی تمام x هایی که برای آنها $\|P(x) - P(x_2)\| < \delta$) عنصر $x_1 x_2$ به همسایگی Z_ϵ ، x_3 تعلق داشته باشد (یعنی $\|P(x_1 x) - P(x_3)\| < \epsilon$). معنی این عبارت این است که، یک تغییر کوچک در یکی از عوامل ضرب یک تغییر کوچک در حاصلضرب ایجاد کند. بطور مشابه می‌توانیم پیوستگی قانون وارونی عناصر گروه را



شکل ۴-۱ - N_ϵ - همسایگی $P(x)$ در S_T عبارت است از مجموعه تصاویر عناصر در Z_ϵ - همسایگی

تعریف کنیم [شکل (۲-۴) و مسأله (۴-۱) را ببینید]، بدین ترتیب که یک تغییر کوچک در یک عنصر باعث تغییر کوچکی در معکوس آن می‌شود.



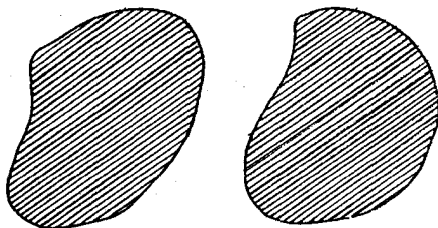
شکل ۲-۴ (الف) پیوستگی قانون ترکیب: برای هر $x \in Z_{\delta\epsilon}$ همسایگی x_2 ، $x_1 \in Z_{\epsilon}$ ، همسایگی x_3 ، که در آن $x_2 = x_3$. (ب) پیوستگی معکوس اعضای گروه: برای هر $x \in Z_{\delta\epsilon}$ ، همسایگی x ، $x^{-1} \in Z_{\epsilon}$ همسایگی x^{-1} ، که در آن $xx^{-1} = e$ ، عنصر همانی گروه است.

اکنون می‌توانیم یک گروه توپولوژیکی را تعریف کنیم: گروه توپولوژیکی گروهی است که قانون ترکیب و قانون وارون در تمام عناصر گروه پیوسته باشند.

۲-۱-۴ همبندی و فشردگی

دو عنصر x_1 و x_2 از یک گروه توپولوژیکی با تصویرهای $P(x_1)$ و $P(x_2)$ در S_T را در نظر بگیرید. اگر بتوانیم $P(x_1)$ و $P(x_2)$ را با یک یا چند مسیر که کاملاً در داخل فضای پارامتر قرار دارد بهم متصل کنیم، فضای پارامتر را همبند و در غیر این صورت ناهمبند می‌گوییم. یک گروه G که فضای پارامتر آن همبند باشد و مسیری که $P(x_1)$ و $P(x_2)$ را بهم متصل می‌کند، در نظر بگیرید. مجموعه عناصری از G را که تصویرهایشان نقاط مسیر بین $P(x_1)$ و $P(x_2)$ باشد، مسیری که x_1 و x_2 را بهم متصل می‌کند می‌نامیم. در این صورت گروهی را همبند می‌گوییم اگر مسیری که هر دو عنصر گروه را بهم متصل کند وجود داشته باشد، یا به عبارت دیگر، اگر فضای پارامتر آن همبند باشد. به عنوان مثال، مشاهده می‌کنیم که گروه دورانها حول یک محور و همچنین گروه

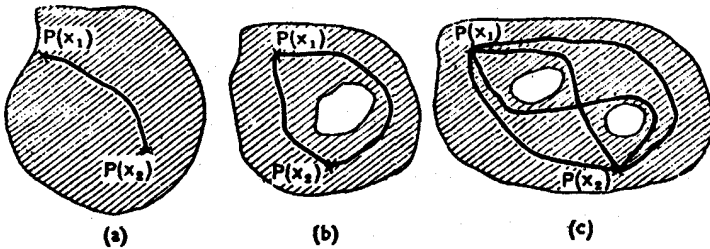
دورانهای ویژه در سه بعد، هر کدام یک گروه همبند می باشند. باید توجه کرد که خاصیت همبندی با طبیعت پیوستگی گروه، که به تغییرات پیوسته یک یا چند پارامتر گروه بستگی دارد، متفاوت است. بنابراین یک گروه پیوسته ممکن است همبند نباشد. به عنوان یک مثال مهم، همان طوری که بعداً خواهیم دید، گروه دوران-وارونی در سه بعد است. همان طوری که در شکل (۴-۳) نشان داده شده است، این بدان معنی است که فضای پارامتر یک گروه ناهمبند پیوسته از دو زیر مجموعه مجزا یا بیشتر تشکیل شده بطوری که هر زیر مجموعه یک فضای همبند است، ولی نمی توان بطور پیوسته از یک نقطه از یک زیر مجموعه به نقطه ای در زیر مجموعه دیگر رفت، بدون این که به خارج از فضای پارامتر برویم.



شکل ۴-۳ ساختار معقول فضای پارامتر یک گروه پیوسته ولی ناهمبند.

یک گروه پیوسته همبند می تواند به علاوه بسته به توپولوژی فضای پارامتر همبند ساده یا همبند چندگانه باشد. یک زیر مجموعه از فضای اقلیدسی S_r را همبند مرتبه k گوئیم اگر دقیقاً k مسیر متمایز وجود داشته باشد که هر دو نقطه از زیر مجموعه را که نتوانند با تغییر شکل پیوسته بدون خارج شدن از زیر مجموعه بهم متصل شوند، بهم متصل کنند. ساختار فضاهای همبند چندگانه در شکل (۴-۴) نشان داده شده است. سپس یک گروه همبند را همبند مرتبه k گوئیم در صورتی که فضای پارامتر آن همبند مرتبه k باشد.

اگر یک گروه توپولوژیکی دارای r پارامتر پیوسته و $n-r$ پارامتر گسسته باشد، فضای پارامتر آن از $n-r$ زیر فضای مجزا تشکیل خواهد شد. تناظر یک بیک بین هر دو جزء



شکل ۴-۲ ساختارهای موجه برای الف) فضای همبند ساده

ب) فضای همبند مضاعف

ج) فضای همبند چهارگانه

در هر مورد، فضای موردنظر ناحیه هاشور خورده است.

مجزای فضای گروه وجود دارد و وقتی خواص تحلیلی گروه موردبحث قرار می‌گیرد، عموماً تنها جزئی (زیر فضای) که شامل عنصر همانی می‌باشد، موردنظر است. بالاخره یک گروه توپولوژیکی را فشرده گوئیم اگر فضای پارامتر آن یک فضای فشرده باشد، یعنی فضای بسته^۲ و کراندار^۳ باشد.

۴-۱-۳ گروه‌های لی

بستگی عناصر x_1, x_2, \dots ، یک گروه توپولوژیکی G با پارامتر پیوسته اش را می‌توان صریحاً به صورت $x_1 = x_1(a_1, a_2, \dots, a_r)$ ، $x_2 = x_2(b_1, b_2, \dots, b_r)$ و غیره نوشت؛ فرض کنید $x_1 x_2 = x_3(c_1, c_2, \dots, c_r)$ و $x_1^{-1} = x_4(d_1, d_2, \dots, d_r)$ پارامترهای x_3 و x_4 را می‌توان به صورت توابعی از پارامترهای x_1 و x_2 نوشت، یعنی:

$$\begin{aligned} c_i &\equiv c_i(a_1, \dots, a_r; b_1, \dots, b_r), \\ d_i &\equiv d_i(a_1, \dots, a_r), \end{aligned} \quad (4-14)$$

۳- یک مجموعه را بسته گوئیم هرگاه دنباله کوشی از عناصر مجموعه که دارای یک عنصر حدی

باشد آن نیز به مجموعه تعلق داشته باشد. بخش ۲-۱-۴ را ببینید.

یک گروه توپولوژیکی را یک گروه لی Γ بعدی می‌گوییم اگر یک همسایگی N عنصر همانی e وجود داشته باشد بطوری که پارامترهای پیوسته حاصلضرب دو عنصر و پارامترهای پیوسته معکوس یک عنصر در N توابع پیوسته مشتق پذیر از پارامترهای عناصر باشد، یعنی اگر برای عناصر N ، c_i ها و d_i ها در $(4-14)$ توابع تحلیلی از a_i ها و b_i ها باشند، مشروط بر آن که اگر x_1 و x_2 در N قرار داشته باشند، x_3 و x_4 نیز در N باشند. به علاوه، قوانینی برای ترکیب $\pi-\Gamma$ پارامتر گسسته باقیمانده وجود داشته باشد.

بهتر است پارامترهای پیوسته یک گروه لی را طوری انتخاب کنیم که تصویر عنصر همانی e مبدأ فضای پارامتر باشد، یعنی $e = x(0, 0, \dots, 0)$. با این پارامترسازی، یک عنصر نزدیک همانی را می‌توان، به خاطر خواص تحلیلی گروه لی، تا مرتبه اول از ϵ_j به صورت زیر نوشت:

$$x(0, 0, \dots, \epsilon_j, \dots, 0) \approx x(0, 0, \dots, 0) + i \epsilon_j I_j(0, 0, \dots, 0), \quad (15-4)$$

عملگر I_j می‌تواند از $(4-15)$ به دست آید و برابر است با:

$$I_j = \lim_{\epsilon_j \rightarrow 0} \left[\frac{1}{i \epsilon_j} \{x(0, \dots, \epsilon_j, \dots, 0) - x(0, 0, \dots, 0)\} \right]. \quad (16-4)$$

تمام خواص یک گروه لی را می‌توان از Γ عملگر I_j ($1 \leq j \leq r$) که کافی است تنها در نزدیکی عنصر همانی گروه تعریف شوند، به دست آورد.

با اعمال متوالی قاعده ضرب، می‌توانیم به یک عنصر گروه که در فاصله محدودی از عنصر همانی قرار دارد برسیم. بنابراین فرض کنید می‌خواهیم عنصر $x(0, 0, \dots, a_j, \dots, 0)$ را ایجاد کنیم. می‌توانیم بنویسیم $a_j = N \epsilon_j$ که در آن N یک عدد صحیح مثبت بزرگ است و لذا ϵ_j یک کمیت کوچک می‌باشد. در این صورت:

$$\begin{aligned} x(0, 0, \dots, a_j, \dots, 0) &= [x(0, 0, \dots, \epsilon_j, \dots, 0)]^N \\ &= [e + i \epsilon_j I_j]^N \\ &= [e + i (a_j/N) I_j]^N. \end{aligned} \quad (17-4)$$

با میل دادن N به سمت بی‌نهایت و استفاده از اتحاد جبری

$$\lim_{N \rightarrow \infty} (1 + x/N)^N = \exp(x),$$

داریم:

$$x(0, 0, \dots, a_j, \dots, 0) = \exp(i a_j I_j), \quad (18-4)$$

که یک نتیجه دقیق است. تابع نمایی طرف راست (۱۸-۴) از نظر فرمولی با بسط آن بر حسب توانهای عملگر I_j معادل است. برای یک عنصر عمومی گروه می توانیم نتیجه فوق را بسادگی تعمیم دهیم و به دست آوریم:

$$x(a_1, a_2, \dots, a_r) = \exp \left[\sum_{j=1}^r i a_j I_j \right]. \quad (19-4)$$

تمام عناصر گروه لی متعلق به زیرمجموعه ای که شامل همانی است می تواند با دادن مقادیر مختلف به پارامترهای a_j در فواصل مختلف، به دست آید. از این رو، عملگرهای I_j را مولدهای گروه می نامیم. یک گروه لی با I پارامتر پیوسته دارای I مولد است. عناصر بی نهایت کوچک یک گروه لی، خود یک گروه آبدلی تشکیل می دهند. بنابراین، اگر داشته باشیم:

$$x_k \equiv x(0, 0, \dots, \epsilon_k, \dots, 0) = e + i \epsilon_k I_k,$$

$$x_j \equiv x(0, 0, \dots, \epsilon_j, \dots, 0) = e + i \epsilon_j I_j.$$

در این صورت، تا مرتبه اول نسبت به ϵ ها داریم:

$$x_k x_j = x_j x_k \simeq e + i(\epsilon_k I_k + \epsilon_j I_j), \quad (20-4)$$

که باز یک عنصر بی نهایت کوچک G است.

۴-۱-۴ نمایش یک گروه پیوسته

فرض کنید مجموعه ماتریسهای $\Gamma(x)$ یک نمایش گروه لی G را ایجاد کنند. گوئیم

Γ یک نمایش پیوسته G است اگر

$$\Gamma(x) \rightarrow \Gamma(x') \text{ as } x \rightarrow x'. \quad (21-4)$$

گروه G با گروه ماتریسهای Γ همومورفیک است و ماتریسهای Γ می توانند توسط همان پارامترهایی که برای مشخص کردن عناصر G به کار می رود، مشخص شوند. در

این صورت معادله (۴-۲۱) بدین معنی است که وقتی مقادیر پارامترها در فضای پارامتر بطور پیوسته از مقادیر متناظر x به مقادیر متناظر x' تغییر کند، ماتریس مربوطه $\Gamma(x)$ بطور پیوسته به $\Gamma(x')$ برود.

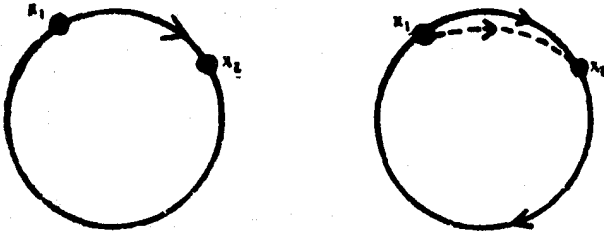
اگر خود را به نمایش‌های پیوسته یک گروه پیوسته فشرده محدود کنیم، در این صورت، قضایای مهم زیر را داریم که آنها را بدون اثبات ذکر می‌کنیم. این قضایا، از یک نظر، تعمیم‌های بعضی از نتایجی است که برای گروه‌های محدود بخوبی برقرار است. (الف) هر نمایش دارای یک نمایش معادل است که ماتریس‌های آن یکانی‌اند. این قضیه را برای گروه‌های محدود در بخش ۳-۲-۲ اثبات کرده‌ایم.

(ب) هر نمایش یکانی کامل کاهش پذیر است، یعنی، می‌تواند به شکل (۳-۲۴) درآید.

(ج) هر نمایش کاهش ناپذیر، دارای ابعاد محدود است.

۲-۴ گروه دوران محوری $SO(2)$

مجموعه دوران‌های یک دایره حول محوری که بر صفحه دایره عمود است و از مرکز آن می‌گذرد، را در نظر بگیرید. هر عنصر این مجموعه می‌تواند توسط یک پارامتر مشخص شود، که می‌توان آن را زاویه دوران ϕ انتخاب کرد که مقادیر بازه $[0, 2\pi]$ را می‌گیرد. واضح است که این یک گروه لی، یک پارامتری، پیوسته، همبند، آبلی و فشرده است که به گروه دوران محوری موسوم است و با $SO(2)$ نمایش داده می‌شود. چون دوران به اندازه ϕ و دوران $2\pi n + \phi$ (n یک عدد صحیح است) یکسان است، فضای پارامتر زیرمجموعه $[0, 2\pi]$ از خط حقیقی است. این گروه را همبند نامتناهی گوئیم، زیرا تعداد بی‌نهایت مسیر وجود دارد که هر دو عنصر از گروه را که نمی‌توان با تغییر شکل پیوسته بدون این که از فضا خارج شد، به یکدیگر منطبق کرد، بهم متصل می‌کند. مسیری که دایره را n بار دور می‌زند با مسیری که n+1 بار دور می‌زند یکسان نیست [شکل (۴-۵) را ببینید].



شکل ۴-۵ گروه $SO(2)$ همبند نامتناهی است.

اگر یک عنصر این گروه را با $T(\phi)$ نمایش دهیم، قانون ترکیب عبارت است از:

$$T(\phi) T(\theta) = T(\theta) T(\phi) = \begin{cases} T(\phi + \theta) & \text{if } \phi + \theta < 2\pi, \\ T(\phi + \theta - 2\pi) & \text{if } \phi + \theta \geq 2\pi. \end{cases} \quad (22-4)$$

عنصر همانی $T(0)$ است و معکوس $T(\phi)$ عبارت است از: $T(2\pi - \phi)$.
 می توان از تبدیلات دستگاه مختصات دکارتی (x, y) در صفحه دایره تحت دورانه‌های گروه $SO(2)$ برای ایجاد یک نمایش گروه استفاده کرد. عمل $T(\phi)$ روی (x, y) به صورت زیر داده می شود:

$$T(\phi)(x, y) \equiv (x', y') = (x, y) \begin{bmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{bmatrix} \quad (23-4)$$

ماتریس تبدیل طرف راست یک ماتریس متعامد مرتبه ۲ است. بنابراین، به هر عنصر $T(\phi)$ از گروه می توان یک ماتریس متعامد 2×2 با دترمینان ۱ + متناسب کرد و مسلماً تناظر یک یک است. مجموعه کلیه ماتریسهای متعامد مرتبه ۲ با دترمینان ۱ + گروهی است که با گروه دوران محوری ایزومرفیک است و لذا یک نمایش دو بعدی از آن را می دهد. این گروه ماتریسی نیز با همان نشانه $SO(2)$ مشخص می شود.

چون گروه دوران محوری آبلی است، کلیه نمایشهای کاهش ناپذیر آن باید یک بعدی باشند. برای یافتن تمام نمایشهای کاهش ناپذیر، با توجه به قاعده ضرب (۲۲-۴) دیده می شود که تنها اعدادی (ماتریسهای 1×1) که در آن صدق می کنند به شکل

$$\chi(\phi) = \exp(c\phi), \quad (24-4)$$

می‌باشند، که c یک عدد و $X(\phi)$ تابع مشخصه $T(\phi)$ است. اما چون $T(2\pi) = e$ ، عنصر همانی است و در هر نمایش یک بعدی باید e توسط واحد نمایش داده شود، داریم $\exp(2\pi c) = 1$ ، و از آن جا داریم $c = im$ ، که در آن m یک عدد صحیح است، یا:

$$\chi^{(m)}(\phi) = \exp(im\phi). \quad (25-4)$$

برای هر مقدار صحیح m یک نمایش کاهش ناپذیر $SO(2)$ داریم که توسط (۲۵-۴) داده می‌شود. قضیهٔ تعامد (۳-۵۵) در این جا، به صورت زیر درمی‌آید:

$$\int_0^{2\pi} \chi^{(m)*}(\phi) \chi^{(m')}(\phi) d\phi = 2\pi \delta_{mm'}. \quad (26-4)$$

اگر نمایش‌های چندمقداری را نیز مجاز بداریم، می‌توان دید که $X^m(\phi) = \exp(im\phi/2)$ ، $X^m(\phi) = \exp(im\phi/3)$ و غیره نیز می‌توانند به عنوان نمایش‌های $SO(2)$ به کار روند، زیرا واضح است که:

$$\exp(im\phi/k) \exp(im\theta/k) = \exp[im(\phi+\theta)/k],$$

در قانون ضرب گروه صدق می‌کند، در این جا k هر عدد صحیحی می‌تواند باشد. عموماً $X^m(\phi) = \exp(im\phi/k)$ یک نمایش k مقداری $SO(2)$ را می‌دهد. لیکن، ملاحظه می‌کنیم که در ساختن مدل‌های ریاضی سیستم‌های فیزیکی واقعی، تنها نمایش‌های تک مقداری و دو مقداری، رخ می‌دهند. بحث بیشتری دربارهٔ چنین نمایش‌هایی را می‌توان در انتهای بخش ۴-۵-۳ یافت.

۴-۲-۱ مولدهای $SO(2)$

چون $SO(2)$ یک گروه یک پارامتری است، فقط یک مولد دارد. این مولد به این بستگی خواهد داشت که چه گروه ایزومرفیک با $SO(2)$ در نظر گرفته شود. این مطلب را با ذکر چهار مثال روشن می‌کنیم.

مثال ۱ - گروه اعداد مختلط $\{\exp(im\phi)\}$ را به ازای $0 \leq \phi < 2\pi$ و m ثابت

در نظر می‌گیریم. واضح است که این گروه با $SO(2)$ ایزومرفیک است. بنابه (۴-۱۶)، مولد گروه توسط رابطه زیر داده می‌شود:

$$I = \lim_{\phi \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{i\phi} [\exp(im\phi) - 1] \right\} = m. \quad (27-4)$$

بر طبق (۴-۱۸) هر عنصر گروه را می‌توان به صورت $\exp(im\phi)$ نوشت، که بطور بدیهی در این مورد درست است.

مثال ۲- گروه کلیه ماتریسهای متعامد مرتبه ۲ با دترمینان ۱ +. دیدیم که یک عنصر

نوعی از این گروه می‌تواند به صورت
$$\begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix}$$
 نوشته شود. لذا مولد گروه عبارت است از:

$$I = \lim_{\phi \rightarrow 0} \left[\frac{1}{i\phi} \left\{ \begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \right\} \right] = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}. \quad (28-4)$$

که یکی از ماتریسهای اسپینی پاولی است که معمولاً با σ_y نمایش داده می‌شود. هر ماتریس متعامد 2×2 با دترمینان ۱ + می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$\begin{bmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{bmatrix} = \exp(i\phi \sigma_y), \quad (29-4)$$

مثال ۳- یک دایره به شعاع a در نظر بگیرید و فرض کنید x معرف فاصله در امتداد

محیط دایره باشد. فرض کنید $f \equiv f(x)$ و $T(\phi)$ معرف دوران تابع f به اندازه زاویه ϕ حول محوری که از مرکز دایره بر آن عمود می‌شود باشد. چون f تنها روی دایره تعریف شده است، اثر $T(\phi)$ این است که آن را به اندازه $a\phi$ انتقال بدهد، یعنی، $T(\phi) f(x) = f(x + a\phi)$ ، در این صورت، مولد I عملگری است که اثر آن روی $f(x)$ به صورت زیر باشد:

$$\begin{aligned}
 If(x) &= \lim_{\phi \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{i\phi} [T(\phi)f(x) - ef(x)] \right\} \\
 &= \lim_{\phi \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{i\phi} [f(x+a\phi) - f(x)] \right\} \\
 &= -ia \partial f / \partial x.
 \end{aligned}
 \tag{۳۰-۴}$$

بنابراین، این عملگر با عملگر اندازه حرکت مکانیک کوانتومی $P_x = -i\hbar \partial / \partial x$ متناسب است و به صورت زیر داده می شود:

$$I = ap_x / \hbar. \tag{۳۱-۴}$$

در این صورت یک عملگر گروه می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$T(\phi) = \exp(i\phi ap_x / \hbar). \tag{۳۲-۴}$$

مثال ۴- فرض کنید $f \equiv f(x, y)$ و $T(\phi)$ معرف تبدیل متعامد دستگاه مختصات

از نوع آمده در (۲۳-۴) باشد. در این صورت عمل $T(\phi)$ روی f عبارت است از:

$$T(\phi)f(x, y) = f(x \cos \phi + y \sin \phi, -x \sin \phi + y \cos \phi). \tag{۳۳-۴}$$

مولد را می توان به صورت زیر به دست آورد:

$$\begin{aligned}
 If(x, y) &= \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{1}{i\phi} \times [f(x \cos \phi + y \sin \phi, -x \sin \phi + y \cos \phi) - f(x, y)] \\
 &= \lim_{\phi \rightarrow 0} \left\{ \frac{1}{i\phi} [y \phi \partial f / \partial x - x \phi \partial f / \partial y] \right\} \\
 &= -i(y \partial / \partial x - x \partial / \partial y) f(x, y).
 \end{aligned}
 \tag{۳۴-۴}$$

بنابراین:

$$I = -L_z / \hbar, \tag{۳۵-۴}$$

که در آن L_z مؤلفه عملگر اندازه حرکت زاویه ای در راستای عمود بر صفحه (x, y) است:

$$L_z = i\hbar (y \partial / \partial x - x \partial / \partial y) = xp_y - yp_x = -i\hbar \partial / \partial \phi. \tag{۳۶-۴}$$

در این صورت یک تبدیل متعامد مختصات در صفحه دو بعدی (x, y) عبارت است از:

$$T(\phi) = \exp(-i\phi L_z / \hbar). \tag{۳۷-۴}$$

۳-۴ گروه دوران سه بعدی $SO(3)$

مجموعه تمام تبدیلات متعامد در فضای برداری حقیقی سه بعدی (یعنی فضایی که روی میدان اعداد حقیقی تعریف شده است) را در نظر بگیرید. این مجموعه یک گروه است که آن را با $O(3)$ نمایش می‌دهیم. آن را می‌توان همچنین به عنوان گروه ماتریسهای متعامد 3×3 نیز تعریف کرد. این دو گروه با یکدیگر ایزومرفیک اند. اگر R یک ماتریس متعامد باشد، در معادله زیر صدق می‌کند:

$$R \tilde{R} = \tilde{R} R = E, \quad (38-4)$$

که در آن E ماتریس یکه و \tilde{R} ماتریس ترانواده R است. با در نظر گرفتن دترمینانهای دو طرف (۲۸-۴) و توجه به این نکته که $\det \tilde{R} = \det R$ داریم:

$$(\det R)^2 = 1 \Rightarrow \det R = \pm 1. \quad (39-4)$$

بنابراین، ماتریسهای گروه $O(3)$ به دو دسته تقسیم می‌شوند. یک مجموعه آنهايي که دترمینان آنها $+1$ است و مجموعه دیگر ماتریسهای که دارای دترمینان -1 می‌باشند. بسادگی می‌توان تحقیق کرد که مجموعه اول یک گروه تشکیل می‌دهد. این گروه یعنی، گروه ماتریسهای متعامد حقیقی مرتبه 3 با دترمینان $+1$ را با $SO(3)$ نشان می‌دهیم.

ایزومرفیزم ماتریسهای متعامد با تبدیلات متعامد را در نظر بگیرید، ملاحظه می‌کنیم که یک ماتریس متعامد با دترمینان $+1$ با یک دوران محض یا دوران ویژه دستگاه مختصات متناظر است. یک ماتریس متعامد با دترمینان -1 - متناظر است با یک تبدیل متعامد که می‌تواند به صورت حاصلضرب یک دوران خاص در وارونی بیان شود. چنین تبدیلاتی را دورانهای ناویژه می‌نامیم. ماتریس متناظر با عمل وارونی همان منفی ماتریس یکه است:

$$J = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \quad (40-4)$$

وارونی و همانی یک گروه مرتبه 2 تشکیل می‌دهند. چون وارونی با تمام دورانها

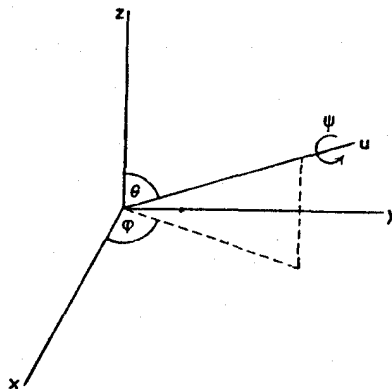
۵- در گروه ماتریس، J یک ماتریس ثابت است. لذا با تمام ماتریسهای مربعی مرتبه 3 جابجاپذیر

جابجایی پذیر است رابطه مهم زیر را داریم:

$$O(3) = SO(3) \otimes (E, J). \quad (4-41)$$

گروه (E, J) تنها دو نمایش کاهش ناپذیر یک بعدی دارد، بنابراین، نمایش‌های $O(3)$ می‌تواند به آسانی توسط تئوری ضرب مستقیم گروه‌ها، از نمایش‌های $SO(3)$ به دست آید. از این رو در آنچه به دنبال می‌آید فقط نمایش‌های کاهش ناپذیر $SO(3)$ را در نظر خواهیم گرفت. گروه $O(3)$ ، گروه دوران-وارونی سه بعدی نامیده می‌شود.

پارامترهای $SO(3)$ می‌تواند به طرق مختلف انتخاب شود. یک دستگاه مختصات دکارتی (x, y, z) در فضای مورد نظر انتخاب کنید. یک دوران به اندازه زاویه ψ حول محور U را با $R_U(\psi)$ نمایش می‌دهیم. برای مشخص کردن یک راستا نسبت به یک دستگاه مختصات به دو پارامتر نیاز داریم. می‌توانیم این دو پارامتر را به عنوان مثال، مختصات قطبی زاویه ای (θ, ϕ) ی یک نقطه روی محور z انتخاب کنیم. سه پارامتر گروه θ, ϕ, ψ در شکل (4-6) نشان داده شده است.



شکل 4-6 سه پارامتر θ, ϕ, ψ در $SO(3)$.

یک روش دیگر این است که، دورانها را برحسب زوایای اولر بیان کنیم. برای تعمیم بیشتر تئوری، این روش مناسبتر است. یک دوران به اندازه زوایای اولر (α, β, γ) که توسط $R(\alpha, \beta, \gamma)$ نمایش داده می‌شود از سه دوران متوالی زیر تشکیل شده است:

(i) یک دوران به اندازه α حول محور x ها، سپس (ii) یک دوران به اندازه β حول محور y های جدید و به دنبال آن (iii) یک دوران به اندازه γ حول محور z ها تبدیل یافته.

بنابراین:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = R_z(\gamma) R_y(\beta) R_x(\alpha). \quad (4-42)$$

ماتریس تبدیل متناظر با عنصر $R(\alpha, \beta, \gamma)$ را می‌توان به آسانی پیدا کرد. ابتدا عنصر $R_x(\alpha)$ را در نظر بگیرید؛ واضح است که ماتریس تبدیل آن عبارت است از:

$$\begin{bmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

با نوشتن ماتریسهای مشابه برای $R_y(\beta)$ و $R_z(\gamma)$ و ضرب این سه ماتریس بر طبق (4-42) به دست می‌آوریم:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{bmatrix} \cos\alpha \cos\beta \cos\gamma - \sin\alpha \sin\gamma & \sin\alpha \cos\beta \cos\gamma + \cos\alpha \sin\gamma & \sin\beta \cos\gamma \\ -\cos\alpha \cos\beta \sin\gamma - \sin\alpha \cos\gamma & -\sin\alpha \cos\beta \sin\gamma + \cos\alpha \cos\gamma & -\sin\beta \sin\gamma \\ -\cos\alpha \sin\beta & -\sin\alpha \sin\beta & -\cos\beta \end{bmatrix} \quad (4-43)$$

این یک ماتریس متعامد با دترمینان ۱+ است و یک عنصر عمومی گروه ماتریسی $SO(3)$ را می‌دهد.

مولدهای $SO(3)$ می‌تواند با در نظر گرفتن یک دوران بی‌نهایت کوچک به اندازه زاویه ϵ حول یک محور \hat{u} ، به دست آیند. گروه دوران $R_{\hat{u}}(\phi)$ به ازای $0 \leq \phi \leq 2\pi$ ، که یک زیرگروه $SO(3)$ می‌باشد، با $SO(2)$ ایزومرفیک است و لذا، به روشی که (4-35) را به دست آوردیم، داریم:

$$I_{\hat{u}} = -L_{\hat{u}}/\hbar, \quad (4-44)$$

که در آن $\vec{L} \hat{u} = L \hat{u}$ مولفه عملگر اندازه حرکت زاویه ای \vec{L} در راستای \hat{u} است، \hat{u} بردار یکه

در راستای \vec{L}_z می باشد. چون هر دوران می تواند به عنوان حاصلضرب سه دوران حول محورهای دستگاه مختصات دکارتی بیان شود. ملاحظه می کنیم که سه عملگر زیر را نیاز داریم:

$$I_x = -L_x/\hbar, I_y = -L_y/\hbar, I_z = -L_z/\hbar. \quad (۴۵-۴)$$

سپس هر عملگر دوران می تواند به صورت زیر نوشته شود:

$$R_{\vec{u}}(\phi) = \exp[-i\phi(\vec{L} \cdot \hat{u})/\hbar]. \quad (۴۶-۴)$$

در هنگام بسط دادن باید به خاطر داشته باشیم که مؤلفه های عملگر اندازه حرکت زاویه ای \vec{L} با یکدیگر جابجاپذیر نیستند.

گروه کامل دوران- وارونی $O(3)$ دارای چهار پارامتر است که می توان آنها را $(\alpha, \beta, \gamma, d)$ فرض کرد، که در آن α, β, γ و d پارامترهای $SO(3)$ می باشند و d معرف درمیان هر عنصر است که می تواند مقادیر ± 1 بگیرد. بدین ترتیب فضای پارامتر $O(3)$ از دو ناحیه مجزا تشکیل شده است. از این رو، یک گروه چهار پارامتری است، که سه تای آن پیوسته اند. این گروه، یک گروه لی، پیوسته، فشرده است که درعین حال همبند نیست.

۴-۳-۱ نمایشهای کاهش ناپذیر $SO(3)$

مطابق معمول، یافتن مشخصه های گروه از یافتن ماتریسهای واقعی نمایشهای کاهش ناپذیر $SO(3)$ آسانتر است. همان طوری که در پایان بخش ۳-۶-۲ بحث شد، مسأله عبارت است از یافتن یک مجموعه مناسب از توابع پایه که در اثر عمل عناصر $SO(3)$ به ترکیبات خطی از خودشان تبدیل شوند. می دانیم که مجموعه $(2l+1)$ هارمونیک کروی $Y_l^m(\theta, \phi)$ است، که در آن $l = 0, 1, 2, \dots$ و $-l \leq m \leq l$ در اثر دوران دستگاه مختصات به صورت ترکیبات خطی از خودشان تبدیل می شوند. اگر خواص تبدیلی Y_l^m تحت دوران معلوم باشد، در این صورت، مسلماً می توانیم بلافاصله ماتریسهای نمایشهای کاهش ناپذیری را که توسط $(2l+1)$ تابع Y_l^m ایجاد می شوند، داشته باشیم. بعداً به این مطلب خواهیم پرداخت و به ذکر یک روش برای تعیین مشخصه های نمایشهای

کاهش ناپذیری که توسط Y_1^m ایجاد می‌شوند اکتفا می‌کنیم.

ابتدا ساختار ردای گروه $SO(3)$ را بررسی می‌کنیم. دو عمل $R_{\vec{v}}(\alpha)$ و $R_{\vec{u}}(\alpha)$ را که معرف دوران به اندازه α حول دو محور متمایز \vec{u} و \vec{v} می‌باشند (هر دو از مبدأ می‌گذرند)، در نظر بگیرید. چون در $SO(3)$ عملی وجود دارد که می‌تواند محور \vec{u} را به \vec{v} برساند، بنابراین قاعده (iii) بخش ۱-۳ برای یافتن ردها، ملاحظه می‌کنیم که $R_{\vec{u}}(\alpha)$ و $R_{\vec{v}}(\alpha)$ باید متعلق به یک رده باشند. به عبارت دیگر اگر، مثلاً $R_{\vec{w}}(\beta)$ دورانی باشد که محور \vec{u} را به \vec{v} می‌رساند، در این صورت $R_{\vec{v}}(\alpha)$ و $R_{\vec{w}}(\alpha)$ از طریق تبدیل تشابه زیر به هم مربوطند:

$$R_{\vec{u}}(\alpha) = [R_{\vec{w}}(\beta)]^{-1} R_{\vec{v}}(\alpha) R_{\vec{w}}(\beta). \quad (47-4)$$

واضح است که β زاویه بین \vec{u} و \vec{v} است و \vec{w} بر هر دو عمود است. بدین ترتیب نتیجه مهم زیر را به دست می‌آوریم: در گروه $SO(3)$ دورانهای به اندازه یک زاویه معین حول تمام محورها متعلق به یک رده می‌باشند. از این رو در هر نمایش، مشخصه‌های عناصر $SO(3)$ تنها به زاویه دوران بستگی دارند و از محور دوران مستقلند.

بنابراین لازم نیست خواص تبدیلی پیچیده هارمونیکهای کروی تحت تمام دورانها را بدانیم. می‌توانیم محور دوران را محور Z ها انتخاب کنیم در این صورت عمل $R_Z(\alpha)$ روی یک هارمونیک کروی $Y_1^m(\theta, \phi)$ عبارت است از:

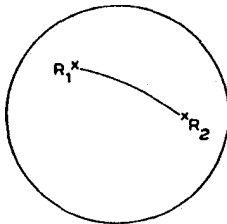
$$R_Z(\alpha) Y_1^m(\theta, \phi) = Y_1^m(\theta, \phi - \alpha) = \exp(-im\alpha) Y_1^m(\theta, \phi). \quad (48-4)$$

بنابراین، ماتریس نمایش $R_Z(\alpha)$ در پایه $\{Y_1^m(\theta, \phi)\}$ (به ازای $-1 \leq m \leq 1$) یک ماتریس قطری به صورت زیر است:^۷

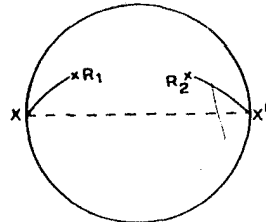
۷- هر چند عملگر $R_Z(\alpha)$ در $(49-4)$ دارای یک نمایش قطری است، نباید تصور کرد که این، یک نمایش کاهش پذیر است. هر دوران حول هر محوری بجز محور Z ها به خاطر اختلاط هارمونیکهای کروی توسط یک ماتریس غیر قطری نمایش داده می‌شود.

چنین بردارهایی، در داخل کره‌ای به شعاع π قرار دارند. به هر عنصر $SO(3)$ ، بجز آنهایی که معرف دوران به اندازه π هستند، یک نقطه منحصر بفرد، در داخل کره وابسته است. اما چون دوران π و دوران π - حول یک محور یک عنصر را مشخص می‌کند، باید نقاطی را که در دو انتهای هر قطر قرار دارند یکی دانست. یعنی، باید دو نقطه طرفین هر قطر را به عنوان یک نقطه تصور کرد. این امر، خواص همبندی توپولوژیکی مهمی در گروه $SO(3)$ وارد می‌کند.

دو عنصر R_1 و R_2 از $SO(3)$ را در نظر بگیرید، همان طوری که در شکل (۴-۷) نشان داده شده است، دو مسیر متمایز وجود دارد که تصاویر R_1 و R_2 در فضای پارامتر را بهم متصل می‌کند؛ یک مسیر مستقیم (الف) از R_1 به R_2 و یک مسیر (ب) که ابتدا تا نقطه x روی سطح کره می‌رود، سپس یک جهش به نقطه x' که در نقطه مقابل x قرار دارد،



(الف)



(ب)

شکل ۴-۷ دو مسیر متمایز که نقاط تصویری R_1 و R_2 را بهم متصل می‌کنند.

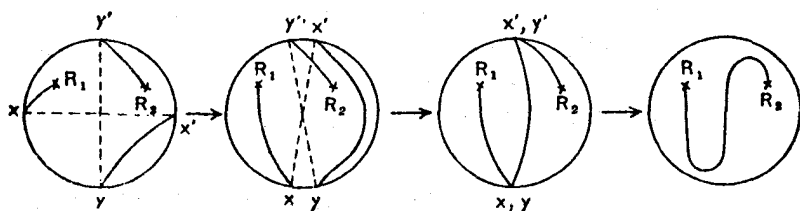
(الف) یک مسیر مستقیم (ب) مسیری که یک پرش به نقاط مقابل انجام می‌دهد.

انجام می‌دهد و بالاخره به R_2 می‌رود. مسیر (ب) را نمی‌توان با یک تغییر شکل پیوسته بر مسیر (الف) منطبق کرد، زیرا همان طوری که نقطه x روی سطح کره را جابجا می‌کنیم، نقطه هم‌ارز x' آن نیز حرکت می‌کند بطوری که همواره در نقطه مقابل x قرار داشته باشد.

اکنون می‌توانیم نشان دهیم که هر مسیر دیگری که R_1 و R_2 را بهم متصل می‌کند، می‌تواند با یک تغییر شکل پیوسته بر یکی از دو مسیر شکل (۴-۷) منطبق کرد. بنابراین مسیر $R_2' yy' xx' R_1$ را که دو پرش روی سطح کره انجام می‌دهد، [شکل (۴-۸)] را

در نظر بگیرید. در این شکل نشان داده شده است که این مسیر را می توان با تغییر شکل پیوسته بر مسیری از نوع (الف) منطبق کرد. وقتی x در روی سطح کره به y نزدیک می-شود، x' به y' نزدیک می گردد. بالاخره وقتی x و y برهم منطبق می شوند. x' و y' برهم منطبق خواهند شد و واضح است که مسیر از نوع (الف) است. بطور مشابه، می توان نشان داد که یک مسیر که n پرش روی سطح انجام می دهد، بسته به این که n زوج یا فرد باشد، از نوع (الف) یا از نوع (ب) خواهد بود.

از این رو گروه $SO(3)$ همبند مضاعف است.



شکل ۴-۸ تغییر شکل پیوسته که روی سطح کره دو پرش انجام می دهد به مسیری از نوع (الف).

۴-۳-۳ گروه $O(n)$

بدیهی است که تمام ماتریسهای متعامد حقیقی مرتبه n یک گروه تشکیل می دهند. این گروه با $O(n)$ نمایش داده می شود و یک گروه لی پیوسته فشرده است که در عین حال همبند نیست. همچنین می توان آن را به عنوان مجموعه ای از تبدیلات متعامد در یک فضای برداری حقیقی n بعدی تصور کرد. اگر x_i ها بردارهای پایه در این فضا باشند، یک تبدیل $O(n)$ شکل مربعی $\sum_{i=1}^n x_i^2$ را تغییر ناپذیر می گذارد. فضای پارامتر $O(n)$ از دو قسمت مجزا (ناهمبند) تشکیل شده است، یکی متناظر با ماتریسهای با دترمینان $+1$ (دورانهای خاص) و دیگر ماتریسهای با دترمینان -1 (انعکاسها). زیرگروهی که شامل دورانهای خاص است یک گروه لی همبند $\frac{n(n-1)}{2}$ پارامتری^۸ است که با $SO(n)$ نمایش می دهیم.

۸- یک ماتریس متعامد از مرتبه n دارای $\frac{n(n-1)}{2}$ عنصر مستقل است.

$O(n)$ علاوه بر $\frac{n(n-1)}{2}$ پارامتر پیوسته $SO(n)$ دارای یک پارامتر گسسته است.

به عنوان مثال $O(4)$ یک گروه از تمام تبدیلات متعامدی است که شکل مربعی $x^2+y^2+z^2+u^2$ را تغییر ناپذیر می‌گذارد. اگر u, z, y, x را به عنوان محورهای مختصات دکارتی در یک فضای چهار بعدی اقلیدسی بدانیم شش پارامتر $SO(4)$ را می‌توان به عنوان معرف دورانها در شش صفحه مختصات تصور کرد. از نظریه $SO(2)$ و $SO(3)$ [معادلات (۴-۳۴) و (۴-۴۵)]، می‌توان دید که شش مولد $SO(4)$ می‌تواند بطور مناسبی به صورت زیر در نظر گرفته شود:

$$\begin{aligned} A_1 &= -i(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y), & A_2 &= -i(z\partial/\partial x - x\partial/\partial z), \\ A_3 &= -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x), & & (52-4) \\ B_1 &= -i(x\partial/\partial u - u\partial/\partial x), & B_2 &= -i(y\partial/\partial u - u\partial/\partial y), \\ B_3 &= -i(z\partial/\partial u - u\partial/\partial z). \end{aligned}$$

جابجایی این مولدها با یکدیگر به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned} [A_1, A_2] &= iA_3, [B_1, B_2] = iA_3, \\ [A_1, B_1] &= 0, [A_1, B_2] = iB_3, [A_1, B_3] = -iB_3, \end{aligned} \quad (53-4)$$

که سایر روابط از جایگشتهای دوره ای نمادها در هریک از روابط فوق به دست می‌آیند. با تغییر به مجموعه جدید از ترکیبات خطی مولدها که به صورت زیر تعریف می‌شوند:

$$J_l = \frac{1}{2}(A_l + B_l), K_l = \frac{1}{2}(A_l - B_l), l=1, 2, 3, \quad (54-4)$$

ملاحظه می‌کنیم که جابجاییهای فوق به صورت زیر درمی‌آیند:

$$[J_1, J_2] = iJ_3, [K_1, K_2] = iK_3, \quad (55-4 \text{ الف})$$

$$[J_l, K_j] = 0, \quad l, j=1, 2, 3, \quad (55-4 \text{ ب})$$

که جایگشتهای نمادها در (۴-۵۵-الف) را هم باید منظور کنیم. این روابط نشان می‌دهند که هریک از مجموعه های (J_1, J_2, J_3) و (K_1, K_2, K_3) ، گروه $SO(3)$ را ایجاد می‌کند. بنابراین $SO(4)$ با ضرب مستقیم $SO(3)$ در خودش، ایزومرفیک است. یک کاربرد

فیزیکی این گروه در بخش ۵-۸-۱ مورد بحث قرار گرفته است.

۴-۴ گروه لورنتز

می‌خواهیم گروهی از تبدیلات را در نظر بگیریم که شکل مربعی $x_1^2 + x_2^2 + \dots + x_p^2 - x_{p+1}^2 - \dots - x_n^2$ ($0 < p < n$) را تغییر ناپذیر بگذارد. این گروه‌ها را گروه‌های شبه‌دوران می‌نامیم^۹. با وجودی که بعضی از مولفان^{۱۰} به تمام چنین تبدیلاتی گروه لورنتز می‌گویند، ولی معمول است که، این عبارت گروه لورنتز را به موردی که در آن $p=3$ ، $n=4$ ، یعنی $x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 + x_4^2$ اطلاق کنیم. این به خاطر اهمیتی است که این مورد در نظر نسبت خاص دارد که در آن پیوستار فضا-زمان چهار بعدی توسط متریک زیر توصیف می‌شود:

$$ds^2 = dx^2 + dy^2 + dz^2 - c^2 dt^2. \quad (۴-۵۶)$$

گروه شبه‌دوران توسط نشانه $O_{p, n-p}$ نمایش داده می‌شود و با انتخاب $p \geq n-p$ هیچ از کلیت مسأله کاسته نمی‌شود. ساده‌ترین گروه شبه‌دوران به ازای $p=1$ و $n=2$ واقع می‌شوند، یعنی، $O_{1, 1}$ که شکل مربعی $x^2 - y^2$ را تغییر ناپذیر می‌گذارد. یک تبدیل عمومی $O_{1, 1}$ به شکل زیر است:

$$\begin{aligned} x' &= x \cosh \theta + y \sinh \theta, \\ y' &= x \sinh \theta + y \cosh \theta, \end{aligned} \quad (۴-۵۷)$$

که در آن θ حقیقی است و $-\infty < \theta < \infty$ ، بنابراین:

$$x'^2 - y'^2 = x^2 - y^2. \quad (۴-۵۸)$$

هر عنصر گروه را می‌توان بر حسب یک پارامتر حقیقی θ مشخص کرد و مجموعه ماتریسهای

$$\begin{bmatrix} \cosh \theta & \sinh \theta \\ \sinh \theta & \cosh \theta \end{bmatrix}, \quad -\infty < \theta < \infty. \quad (۴-۵۹)$$

۹- انگلفیلد (۱۹۷۲)، بخش ۱-۹.

۱۰- همرش (۱۹۶۲)، صفحه ۳۰۷.

یک نمایش ۲ بعدی گروه را می دهند. گروه $O_{1,1}$ ، علاوه بر این، شامل انعکاسها (تظیر $x \rightarrow -x$ و $y \rightarrow y$) نیز می باشد که دترمینان ماتریسهای متناظر با آنها برابر ۱- است. از این رو یک گروه لی، پیوسته، یک پارامتری است که غیر فشرده است زیرا، فضای پارامتری بی کران است و همبند نمی باشد و این بدان علت است که فضای پارامتر به دو زیر فضای مجزا تقسیم شده است، همچنین توجه کنید که تبدیلات گروه شبه دوران متعامد نیستند.

بامشابهت با مثال ۴ از بخش ۴-۲-۱ تنها مولد گروه را می توان به صورت زیر

یافت:

$$B = -i(x\partial/\partial y + y\partial/\partial x). \quad (60-4)$$

اگر قرار دهیم $y = iv$ ، بطوری که $x^2 - y^2 = x^2 + v^2$ باشد، تبدیلی که $x^2 - y^2$ را بدون تغییر بگذارد $x^2 + v^2$ را نیز تغییر نمی دهد. اما گروه شکل مربعی $x^2 + v^2$ همان گروه $SO(2)$ است، با تبدیلات

$$x' = x \cos \theta + v \sin \theta, \quad (61-4)$$

$$v' = -x \sin \theta + v \cos \theta.$$

اگر قرار دهیم $\alpha = i\theta$ ، در این صورت (۶۱-۴) به (۵۷-۴) تبدیل می شود. بنابراین گروه شبه دوران را می توان به عنوان یک گروه دوران به اندازه زوایای موهومی تصور کرد یا یک گروه از دورانهای محورهای مختصاتی که یکی از مختصات آن موهومی است، در نظر گرفت.

حال به شکل مربعی $x^2 + y^2 - z^2$ برمی گردیم، ملاحظه می کنیم که این کمیت تحت دورانهای معمولی [از نوع (۶۱-۴)] در صفحه xy ، و تحت دورانهای لورنتز [از نوع (۵۷-۴)] در صفحات xz و yz تغییر ناپذیر است. بدین ترتیب، گروه شکل $x^2 + y^2 - z^2$ ، یعنی گروه $O_{2,1}$ یک گروه لی سه پارامتری، پیوسته غیر فشرده است. سه مولد گروه را می توان به صورت زیر انتخاب کرد:

$$B_1 = -i(y\partial/\partial z + z\partial/\partial y), \quad B_2 = -i(x\partial/\partial z + z\partial/\partial x), \quad (62-4)$$

$$A_3 = -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x).$$

جابجایی این مولدها را می توان بسادگی محاسبه کرد:

$$[B_1, B_2] = iA_3, [B_2, A_3] = -iB_1, [A_3, B_1] = -iB_2. \quad (۶۳-۴)$$

علامت منفی در رابطه جابجایی آخر در (۶۳-۴) مشخصه این واقعیت است که B_2 و B_1 دورانهای موهومی ایجاد می‌کنند.

بالاخره، گروهی را در نظر بگیرید که شکل مربعی $x^2 + y^2 + z^2 - u^2$ را تغییر ناپذیر می‌گذارد. واضح است که این گروه لورنتز، گروه $O(3)$ تبدیلات متعامد حقیقی در فضای سه بعدی (x, y, z) را به عنوان یک زیرگروه شامل می‌شود. علاوه بر این، این گروه شامل دورانهای موهومی در صفحات xu ، yu و zu است. بنابراین، یک گروه لی شش پارامتری، پیوسته غیر فشرده است. شش مولدرامی توان A_j و B_k ، $k = 1, 2, 3$ ، انتخاب کرد بطوری که:

$$\begin{aligned} A_1 &= -i(y\partial/\partial z - z\partial/\partial y), & A_2 &= -i(z\partial/\partial x - x\partial/\partial z), \\ A_3 &= -i(x\partial/\partial y - y\partial/\partial x), & & (۶۴-۴) \\ B_1 &= -i(x\partial/\partial u + u\partial/\partial x), & B_2 &= -i(y\partial/\partial u + u\partial/\partial y), \\ B_3 &= -i(z\partial/\partial u + u\partial/\partial z). \end{aligned}$$

مشاهده می‌کنیم که روابط جابجایی این مولدها با روابط (۵۳-۴) یکسان است، به استثناء این که معادله دوم (۵۳-۴) در یک علامت تفاوت دارد، این روابط عبارتند از:

$$\begin{aligned} [A_1, A_2] &= iA_3, [B_1, B_2] = -iA_3, \\ [A_1, B_1] &= 0, [A_1, B_2] = iB_3, [A_1, B_3] = -iB_2, \end{aligned} \quad (۶۵-۴)$$

سایر روابط از جایگشت دوری اندیسه‌ها در هریک از روابط فوق حاصل می‌شود. برای مطالعه بیشتر می‌توانید به کتب مربوطه مراجعه کنید^{۱۱}.

۵-۴ گروه یکانی خاص $SU(2)$

فرض کنید u و v یک زوج بردار در فضای برداری دو بعدی که روی میدان اعداد مختلط تعریف شده است، باشند. یک دوران در این فضا، u و v را به ترکیبات خطی شان

تبدیل می کنیم:

$$u' = au + bv, \quad v' = cu + dv; \quad (۴-۶۶-الف)$$

یا:

$$[u', v'] = [u, v] \begin{bmatrix} a & c \\ b & d \end{bmatrix}, \quad (۴-۶۶-ب)$$

که در آن a, b, c, d اعداد مختلط اند و لذا ماتریس تبدیل شامل ۸ پارامتر است. اگر تنها دورانهای رادرنظر بگیریم که شکل مربعی $uu^* + vv^* = |u|^2 + |v|^2$ را تغییرناپذیر بگذارد، ملاحظه می کنیم که ماتریس تبدیل در (۴-۶۶) باید یک ماتریس یکانی باشد. به عبارت دیگر اگر بخواهیم که داشته باشیم، $|u'|^2 + |v'|^2 = |u|^2 + |v|^2$ در این صورت از (۴-۶۶) شرایط زیر به دست می آید:

$$aa^* + cc^* = 1, \quad bb^* + dd^* = 1, \quad ab^* + cd^* = 0. \quad (۴-۶۷)$$

چون اسکالرها مختلطند، معادله آخری در (۴-۶۷) معادل با ۲ شرط است. بنابراین، این شرایط تعداد پارامترها در (۴-۶۶) را از ۸ به ۴ کاهش می دهد. با استفاده از (۴-۶۷)، می توان چنین نتیجه گیری کرد که کلی ترین ماتریس یکانی مرتبه ۲ که شامل چهار پارامتر حقیقی است می تواند به صورت زیر نوشته شود^{۱۲}:

$$\begin{bmatrix} \cos\theta e^{i\alpha} & \sin\theta e^{i\gamma} \\ -\sin\theta e^{i(\beta-\gamma)} & \cos\theta e^{i(\beta-\alpha)} \end{bmatrix}, \quad (۴-۶۸)$$

که درمیان آن $\exp(i\beta)$ است. در این جا $\alpha, \beta, \gamma, \theta$ چهار پارامتر حقیقی می باشند.

مجموعه کلیه چنین تبدیلاتی گروه $U(2)$ را تشکیل می دهد، که با گروه ماتریسهای یکانی مرتبه ۲ ایزومرفیک است. این گروه یک گروه لی، ۴ پارامتری، پیوسته، همبند، فشرده است.

زیرگروهی از $U(2)$ که شامل کلیه ماتریسهای یکانی مرتبه ۲ با درمیان ۱ + است

۱۲ - معادله (۵-۵۰) از جوشی (۱۹۷۵) را ببینید.

مورد توجه خاص در فیزیک می‌باشد. این گروه، مجموعه ماتریس‌هایی است که عنصر عمومی آن عبارت است از:

$$\begin{bmatrix} a & -b^* \\ b & a^* \end{bmatrix} \text{ with } aa^* + bb^* = 1. \quad (69-4)$$

و به گروه یکانی تک مدولی یا گروه یکانی خاص موسوم است و با $SU(2)$ نمایش داده می‌شود. به خاطر شرط اضافی روی دترمینان، $SU(2)$ یک گروه سه پارامتری است. در آنچه به دنبال می‌آید، عنصر عمومی $(69-4)$ این گروه را با $R(a, b)$ نمایش خواهیم داد.

۴-۵-۱ نمایش‌های کاهش ناپذیر $SU(2)$

ماتریس‌های $(69-4)$ ، خودشان یک نمایش $SU(2)$ را تشکیل می‌دهند. می‌توان با در نظر گرفتن تبدیلات $(2j+1)$ حاصلضرب متقارن u و v از درجه $2j$:

$$f_j^m = \frac{u^{j+m} v^{j-m}}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}}, \quad (70-4)$$

سایر نمایش‌ها را به دست آورد، که در آن $j, j-1, \dots, -j+1, -j$ ، $m = -j$ و j یک عدد صحیح یا نیمه صحیح است. چون u و v با توجه به $(69-4)$ به تبدیلات خطی شان تبدیل می‌شوند، واضح است که تعداد $2j+1$ تابع $(70-4)$ نیز تحت تبدیلات $SU(2)$ به ترکیبات خطی خودشان تبدیل خواهند شد. این یک نمایش $(2j+1)$ بعدی $SU(2)$ را به ما می‌دهد که ماتریس‌های آن می‌توانند با اعمال $R(a, b)$ روی f_j^m و استفاده از $(69-4)$ به دست آیند.

$$R(a, b)f_j^m = \frac{1}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} (au + bv)^{j+m} (-b^*u + a^*v)^{j-m}. \quad (71-4)$$

با بسط پوانته‌ها، داریم:

$$R(a, b)f_j^m = \sum_{k,l} \frac{1}{[(j+m)!(j-m)!]^{1/2}} \frac{(j+m)!}{k!(j+m-k)!} \times (au)^{j+m-k} (bv)^k \frac{(j-m)!}{l!(j-m-l)!} (-b^*u)^{j-m-l} (a^*v)^l \quad (72-4)$$

$$= \sum_{k,l} \frac{[(j+m)! (j-m)!]^{1/2}}{k! (j+m-k)! l! (j-m-l)!} a^{j+m-k} (a^*)^l \\ \times b^k (-b^*)^{j-m-l} u^{2j-k-l} v^{k+l}.$$

با وجودی که حدهای بالای k و l در جمع بندی به ترتیب $j+m$ و $j-m$ و حد پایین برای هردو صفر است، لازم نیست این نکته را صریحاً ذکر کنیم، تنها با گفتن این که k و l آن اعداد صحیح را می گیرند که آرگومانهای تمام فاکتوریلها در منخرج را غیر صفر کنند، مطلب فوق رعایت می شود.

اکنون می توانیم طرف راست (۴-۷۲) را به صورت ترکیب خطی f_j^m ها بیان کنیم. اگر با تعریف $m' = j-k-l$ تغییر متغیر بدهیم، داریم $2j-k-l = j+m'$ و $k+l = j-m'$ و (۴-۷۲) به صورت زیر درمی آید:

$$R(a, b) f_j^m = \sum_{m'=-j}^j f_j^{m'} D_{m'm}^{(j)}(a, b), \quad (4-73 \text{ الف})$$

$$D_{m'm}^{(j)}(a, b) = \sum_k \frac{[(j+m)! (j-m)! (j+m')! (j-m')!]^{1/2}}{(j+m-k)! k! (j-m'-k)! (m'-m+k)!} \\ \times a^{j+m-k} (a^*)^{j-m'-k} b^k (-b^*)^{m'-m+k}.$$

که در آن (۴-۷۳ ب)

در این جا هم k آن اعداد صحیح را اختیار می کند که هیچ کدام از فاکتوریلهای منخرج، آرگومان منفی نداشته باشند (به ازای مقادیر داده شده j ، m و m'). بنابراین حد k ممکن است برای مقادیر مختلف m و m' متفاوت باشد. اگر درحین تغییر متغیر، مقادیر حد را دنبال می کردیم به همین نتیجه می رسیدیم. بنابراین حد پایینی k توسط مقدار $m-m'$ تعیین می شود. به ازای $0 < m' - m < k$ برابر k است درحالی که به ازای $m' - m \geq 0$ حد پایینی k برابر صفر می شود. همین طور، حد بالایی k توسط دو عامل $j+m-k$ و $j-m'-k$ تعیین می شود و برابر است با کوچکترین عدد صحیح از دو عدد $j+m$ و $j-m'$. واضح است که توابع f_j^m که در (۴-۷۰) تعریف شد، یک مجموعه از $(2j+1)$ تابع مستقل در فضای هیلبرت $(2j+1)$ بعدی L_2 است، که فضای نمایش $D^{(j)}$ (۴-۷۳) است، تشکیل می دهند، توجه کنیم که:

$$\sum_{m=-j}^j |f_j^m|^2 = \sum_m \frac{|u|^{j+m} |v|^{j-m}}{(j+m)! (j-m)!}$$

اما طرف راست بسط دو جمله‌ای $(|u|^2 + |v|^2)^{2j} / (2j)!$ است، لذا داریم:

$$\sum_m |f_j^m|^2 = \frac{1}{(2j)!} (|u|^2 + |v|^2)^{2j}. \quad (۷۴-۴)$$

چون $|u|^2 + |v|^2$ تحت تبدیلات $SU(2)$ تغییرناپذیر است، $\sum_m |f_j^m|^2$ نیز تغییرناپذیر است، که نشان می‌دهد نمایش‌های $D^{(j)}$ ، یکانی هستند.

می‌توانیم نشان دهیم که نمایش‌های $D^{(j)}$ کاهش‌ناپذیرند. برای اثبات این مطلب از عکس لم شور استفاده خواهیم کرد، یعنی، نشان خواهیم داد که اگر یک ماتریس P به ازای تمام a ها و b ها ($aa^* + bb^* = 1$) با $D^{(j)}(a, b)$ جابجاپذیر باشد، در این صورت P باید یک ماتریس ثابت باشد. برای این منظور، ماتریس‌های $D^{(j)}$ را برای دو مورد خاص به دست می‌آوریم. ابتدا با انتخاب $b=0$ ، $a = e^{i\alpha/2}$ با α ی حقیقی، ملاحظه می‌کنیم که تنها جمله به ازای $k=0$ در $(۷۳-۴)$ باقی می‌ماند و لذا:

$$D_{m'm}^{(j)}(e^{i\alpha/2}, 0) = \delta_{m'm} e^{im\alpha}. \quad (۷۵-۴)$$

ثانیاً، اگر در ماتریس کلی $(۷۳-۴)$ قرار دهیم $j=m'$ ، باز هم ملاحظه می‌کنیم که تنها مقدار مجاز k ، صفر است و لذا:

$$D_{j'm}^{(j)}(a, b) = \left[\frac{(2j)!}{(j+m)! (j-m)!} \right]^{1/2} a^{j+m} (-b^*)^{j-m}. \quad (۷۶-۴)$$

حال، اگر P با تمام ماتریس‌های $D^{(j)}$ از نوع $(۷۵-۴)$ که همگی قطری هستند و عناصر قطری اصلی آنها از یکدیگر متمایزند، جابجاپذیر باشد، P نیز باید یک ماتریس قطری باشد، یعنی، $P_{ik} = p_i \delta_{ik}$. بادر نظر گرفتن عنصر (j, m) از معادله ماتریسی $PD^{(j)}(a, b) = D^{(j)}(a, b)P$ و با استفاده از $(۷۶-۴)$ ، نتیجه می‌گیریم که $p_j D_{jm}^{(j)} = D_{jm}^{(j)} p_m$ چون

$D_{jm}^{(j)}(a, b)$ متحد با صفر نیست، نتیجه می‌شود که $p_j = p_m$ ، یعنی P باید یک ماتریس ثابت باشد. بنابراین هیچ ماتریسی بجز یک ماتریس ثابت نمی‌تواند با تمام ماتریسهای $D^{(j)}(a, b)$ جابجاپذیر باشد. لذا، نتیجه می‌گیریم که $D^{(j)}$ یک نمایش کاهش ناپذیر است. معلوم می‌شود که $D^{(j)}$ تنها نمایش کاهش ناپذیر $SU(2)$ با بعد $(2j+1)$ می‌باشد. به علاوه، چون ابعاد نمایشهای $D^{(j)}$ برای مقادیر مختلف j متفاوت است، این نمایشها نمی‌توانند هم‌ارز یکدیگر باشند. به عبارت دیگر، گروه $SU(2)$ برای هر مرتبه عدد صحیح فقط و فقط یک نمایش کاهش ناپذیر غیر هم‌ارز دارد.

اکنون مشخصه‌های $D^{(j)}$ را بسادگی می‌توانیم پیدا کنیم. برای این منظور، ابتدا ساختار ردای $SU(2)$ را تعیین می‌کنیم. در واقع نشان خواهیم داد که تمام آن عناصری از $SU(2)$ که به شکل $(4-69)$ بوده و قسمت حقیقی پارامتر a برای آنها یکسان است، به یک رد $SU(2)$ تعلق دارند. این کار را می‌توان با به دست آوردن ویژه مقادیرهای یک عنصر عمومی $SU(2)$ ، انجام داد. اگر λ یک ویژه مقدار ماتریس یکانی $(4-69)$ باشد، می‌توان نتیجه‌گیری کرد که λ در معادله زیر صدق می‌کند:

$$\lambda^2 - (a + a^*)\lambda + 1 = 0.$$

بنابراین، دو ویژه مقدار عبارتند از:

$$\lambda_1 = [\beta + (\beta^2 - 4)^{1/2}] / 2, \lambda_2 = [\beta - (\beta^2 - 4)^{1/2}] / 2, \quad (4-77)$$

که در آن $\beta = a + a^*$ یک عدد حقیقی است. اما از شرط $aa^* + bb^* = 1$ ، روشن است که $-1 \leq \text{Re}(a) \leq 1$ ، که در آن $\text{Re}(a)$ قسمت حقیقی a است بنابراین $2 \geq \beta \geq -2$. سپس معادله $(4-77)$ نشان می‌دهد که $\lambda_2 = \lambda_1^*$. به علاوه از $(4-77)$ نیز نتیجه

می‌گیریم که $1 = \lambda_1 \lambda_2$. بنابراین $|\lambda_1| = |\lambda_2| = 1$. از این رو با تعریف α توسط رابطه

$$\cos(\alpha/2) = \beta/2, \sin(\alpha/2) = (1 - \beta^2/4)^{1/2}, \quad (4-78)$$

چون $2 \geq \beta \geq -2$ است، داریم $1 < \cos(\alpha/2) < 1$ و $0 < \sin(\alpha/2) \leq 1$ که از آن نتیجه می‌شود $0 \leq \alpha \leq 2\pi$. چون ویژه مقادیرها فقط به قسمت حقیقی a بستگی دارند، کلیه عناصری از $SU(2)$ که دارای یک مقدار $\text{Re}(a)$ باشند ویژه مقادیرهای یکسانی

خواهند داشت و لذا مزدوج یکدیگر خواهند بود. بدین ترتیب هر مقدار حقیقی α در فاصله $[0, 2\pi]$ یک رد $SU(2)$ را تعیین می‌کند.

حال می‌توانیم مشخصه یک رد (که توسط α مشخص می‌شود) در نمایش کاهش ناپذیر $D^{(j)}$ را به دست آوریم. چون همه عناصر یک رد دارای یک مشخصه هستند، واضح است که می‌توانیم ساده‌ترین عنصر در رد مورد نظر را انتخاب کنیم و از آن مشخصه‌ها را به دست آوریم. عنصر $R(a, b)$ از $SU(2)$ را در نظر بگیرید که برای آن $b = 0$ و $a = \exp(i\alpha/2)$. ماتریس نمایش این عنصر در $D^{(j)}$ ، را قبلاً در (۴-۷۵) پیدا کرده‌ایم. رد این ماتریس مشخصه عنصر مورد نظر را می‌دهد. بنابراین:

$$\begin{aligned} \chi^{(j)}(e^{i\alpha/2}, 0) &= \sum_{m=-j}^j D_{mm}^{(j)}(e^{i\alpha/2}, 0) \\ &= \sum_{m=-j}^j e^{im\alpha} \\ &= \frac{\sin(j+\frac{1}{2})\alpha}{\sin(\alpha/2)}. \end{aligned} \quad (۴-۷۹)$$

این، مشابه مشخصه‌های (۴-۵۰) از گروه دوران $SO(3)$ ، با این اختلاف مهم که برای $SU(2)$ ، j می‌تواند اعداد صحیح غیر منفی و همین‌طور اعداد نیمه صحیح را بگیرد در حالی که برای $SO(3)$ ، l فقط می‌توانست مقادیر صحیح غیر منفی را بگیرد.

۴-۵-۲ همومرفیزم $SU(2)$ روی $SO(3)$

توابع (۴-۷۰) را به ازای مورد خاص $j=1$ در نظر بگیرید. سه تابع داریم:

$$x_1 \equiv f_1^1 = u^2/\sqrt{2}, \quad x_2 \equiv f_1^0 = uv, \quad x_3 \equiv f_1^{-1} = v^2/\sqrt{2}. \quad (۴-۸۰)$$

تبدیلات آنها توسط یک عنصر عمومی $R(a, b)$ از $SU(2)$ می‌دهد:

$$\begin{aligned} x_1' &= R(a, b) x_1 = a^2 x_1 + ab x_2 + b^2 x_3, \\ x_2' &= R(a, b) x_2 = -2ab^* x_1 + (aa^* - bb^*) x_2 + 2a^* b x_3, \\ x_3' &= R(a, b) x_3 = b^{*2} x_1 - a^* b^* x_2 + a^{*2} x_3. \end{aligned} \quad (۴-۸۱)$$

با تعریف سه متغیر جدید:

$$x = x_1 - x_3, y = -i(x_1 + x_3), z = x_2, \quad (۸۲-۴) \text{ الف}$$

و تبدیلات معکوس آنها:

$$x_1 = (x + iy)/2, x_2 = z, x_3 = (-x + iy)/2, \quad (۸۲-۴) \text{ ب}$$

با عبارتهای مشابهی برای متغیرهای پریم دار، ملاحظه می‌کنیم که (۴-۸۱) به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned} x' &= \frac{1}{2} (a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2}) x + \frac{i}{2} (a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2}) y \\ &\quad + (ab + a^* b^*) z, \\ y' &= -\frac{i}{2} (a^2 - a^{*2} - b^2 + b^{*2}) x + \frac{1}{2} (a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2}) y \\ &\quad - i (ab - a^* b^*) z, \\ z' &= -(a^* b + ab^*) x + i (a^* b - a b^*) y + (aa^* - bb^*) z. \end{aligned} \quad (۸۳-۴)$$

توجه کنید که تمام ضرایب در (۴-۸۳) حقیقی‌اند. به علاوه، با توجه به $aa^* + bb^* = 1$ ، می‌توان نشان داد که $x'^2 + y'^2 + z'^2 = x^2 + y^2 + z^2$. بدین ترتیب، با شروع از یک ماتریس یکانی $R(a, b)$ از مرتبه ۲ و با دترمینان ۱، +، توانسته‌ایم به آن یک ماتریس حقیقی متعامد از مرتبه ۳ و با دترمینان ۱ + متسب کنیم که با یک دوران محض در فضای برداری حقیقی سه بعدی (x, y, z) متناظر است و لذا عنصری از $SO(3)$ می‌باشد.

اکنون عکس مطلب فوق را نشان می‌دهیم، یعنی این که تمام دورانه‌های $SO(3)$ به یک (یاچند؟) عنصر از $SU(2)$ وابسته‌اند. هر دوران عمومی تحت زوایای اولر (α, β, γ) می‌تواند به صورت حاصلضرب سه دوران، مطابق با (۴-۴۲)، بیان شود. ابتدا یک تبدیل یکانی با $a = \exp(i\alpha/2)$ و $b = 0$ انتخاب می‌کنیم، در این صورت معادله (۴-۸۳) می‌دهد:

$$x' = x \cos \alpha - y \sin \alpha, y' = x \sin \alpha + y \cos \alpha, z' = z, \quad (۸۴-۴)$$

عنصر $(e^{i\alpha/2}, 0)$ از R از $SU(2)$ متناظر است با دوران به اندازه α حول محور z ها از گروه $SO(3)$ ، یا:

$$R(e^{i\alpha/2}, 0) = \begin{bmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (۸۵-۴)$$

همین طور با انتخاب $a = \cos(\beta/2)$ و $b = \sin(\beta/2)$ ، ملاحظه می‌کنیم که:

$$R\left(\cos \frac{\beta}{2}, \sin \frac{\beta}{2}\right) = \begin{bmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{bmatrix} \quad (۸۶-۴)$$

سپس با استفاده از (۸۵-۴) و (۸۶-۴) در (۴۲-۴) ملاحظه می‌کنیم که تبدیل یکانی:

$$\begin{bmatrix} e^{i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\gamma/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{bmatrix}$$

با دوران $R(\alpha, \beta, \gamma)$ ی $SO(3)$ متناظر است، یا:

$$\begin{bmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{i(\gamma-\alpha)/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} \end{bmatrix} \rightarrow R(\alpha, \beta, \gamma). \quad (۸۷-۴)$$

اکنون باید تحقیق کنیم که آیا تناظر بین $SU(2)$ و $SO(3)$ یک ایزومرفیسم است یا یک همومرفیسم. قبلاً در (۸۳-۴) دیدیم که هر ماتریس یکانی $SU(2)$ با یک دوران منحصر بفرد $SO(3)$ متناظر است. اکنون باید تعیین کنیم چندماتریس از $SU(2)$ به هر دوران $SO(3)$ وابسته است. از (۸۷-۴) مشاهده می‌کنیم که به دو دوران $R(0, 0, 0)$ و $R(0, 2\pi, 0)$ که هر دو معرف عنصر همانی در $SO(3)$ می‌باشند دو ماتریس یکانی زیر وابسته است.

$$E = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ and } -E = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

در حقیقت توجه کنید که عملهای $R(\alpha, \beta, \gamma)$ و $R(\alpha, \beta + 2\pi, \gamma)$ که معرف یک عنصر از $SO(3)$ می‌باشند با دو ماتریس یکانی متمایز از $SU(2)$ متناظرند، که یکی قرینه

دیگری است. از این رو یک همومرفیزم ۲ به ۱ از $SU(2)$ به $SO(3)$ وجود دارد.

۳-۵-۴ نمایشهای $SO(3)$ از روی نمایشهای $SU(2)$

وقتی نمایشهای کاهش ناپذیر $SO(3)$ را در بخش ۴-۳-۱ مورد بحث قرار دادیم، درحقیقت تنها مشخصه‌های آنها را در (۴-۵۰) به دست آوردیم، و کل ماتریسهای $D^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma)$ را برای نمایشهای کاهش ناپذیر که در (۴-۵۱) آمدند، به دست نیاوردیم. می‌توانیم این ماتریسها را از روی نمایشهای کاهش ناپذیر $D^{(l)}$ ی $SU(2)$ که در (۴-۷۳) ایجاد کردیم، به دست آوریم. چون در بالا ثابت کردیم که $SU(2)$ با $SO(3)$ همومرفیک است می‌توانیم با شروع از یک نمایش $SU(2)$ و انتخاب آن ماتریسهایی که با عناصر $SO(3)$ متناظرند، یک نمایش $SO(3)$ را بیابیم. معادله (۴-۸۷) نشان می‌دهد که ماتریس یکانی مرتبه ۲ی $SU(2)$ که برای آن

$$a = \cos(\beta/2) e^{i(x+\gamma)/2}, \quad b = \sin(\beta/2) e^{i(x-\gamma)/2},$$

است، با عنصر $R(\alpha, \beta, \gamma)$ از $SO(3)$ متناظر است. بنابراین می‌توانیم با وابسته کردن ماتریسی که معرف عنصر $R(a, b)$ از $SU(2)$ است، یعنی ماتریس $D^{(j)}(a, b)$ با عنصر $R(\alpha, \beta, \gamma)$ از $SO(3)$ یک نمایش از $SO(3)$ را به دست آوریم. بنابراین ماتریس مورد نظر عبارت است از:

$$\begin{aligned} D_{m'm}^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma) &\equiv D_{m'm}^{(j)} \left(\cos \frac{\beta}{2} e^{i(x+\gamma)/2}, \sin \frac{\beta}{2} e^{i(x-\gamma)/2} \right) \\ &= \sum_k (-1)^{m'-m+k} \frac{[(j+m)!(j-m)!(j+m')!(j-m')!]^{1/2}}{(j+m-k)!(j-m'-k)!k!(m'-m+k)!} \\ &\quad \times e^{i\alpha m} e^{i\gamma m'} \left(\cos \frac{\beta}{2} \right)^{2j+m-m'-2k} \left(\sin \frac{\beta}{2} \right)^{m'-m+2k} \end{aligned} \quad (4-88)$$

از (۴-۸۵) مشاهده می‌کنیم که عنصر $R(e^{i\alpha/2}, 0)$ از $SU(2)$ با عنصر $R(\alpha, 0, 0)$ از $SO(3)$ متناظر است. از این رو، مشخصه‌های عناصر گروه دوران $SO(3)$ می‌توانند از شکل خاص (۴-۷۹) با $\beta = \gamma = 0$ ، به دست آیند:

$$\chi^{(j)}(\alpha) = \frac{\sin(j + \frac{1}{2})\alpha}{\sin(\alpha/2)}. \quad (۸۹-۴)$$

بدین ترتیب ملاحظه می‌کنیم که به ازای مقادیر صحیح j ، این مشخصه‌ها بر مشخصه‌های $D^{(j)}$ به دست آمده در (۴-۵۰) مطابقتند. به عبارت دیگر، نمایش‌های $D^{(j)}$ برای z ‌های صحیح با نمایش‌های $D^{(l)}$ یکسانند. لیکن برای مقادیر نیمه صحیح j ، به خاطر تناظر ۲ به ۱ که در انتهای زیربخش گذشته به آن توجه کردیم، هر دوران $SO(3)$ تصویر دو ماتریس $\pm D^{(j)}(\alpha, \beta, \gamma)$ است.

بنابراین، به عنوان مثال عنصر هماتی E تصویر دو ماتریس زیر است.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ و } \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}.$$

یک عنصر دیگر، مثلاً دوران به اندازه π حول محور y ها ($\alpha = \gamma = 0$ ، $\beta = \pi/2$)، $R(0, \pi, 0)$ ، تصویر دو ماتریس $\begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ و $\begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix}$ است زیرا $R(0, 3\pi, 0)$ با $R(0, \pi, 0)$ یکسان است. فعلاً $R(0, \pi, 0)$ را با C_2 نمایش می‌دهیم. اگر ماتریس‌های مربوطه را

$$D(E) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \text{ و } D(C_2) = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$

انتخاب کنیم، در این صورت ملاحظه می‌کنیم که:

$$D(E)D(C_2) = \begin{bmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} = D(C_2)D(E) = D(C_2),$$

اما

$$D(C_2)D(C_2) = \begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} = -D(C_2^2) = -D(E). \quad (۹۰-۴)$$

بطور کلی، اگر R و S دو دوران از $SO(3)$ باشند، به ازای مقادیر نیمه صحیح j ، خواهیم داشت:

$$D^{(j)}(R)D^{(j)}(S) = \pm D^{(j)}(RS) \quad (۹۱-۴)$$

یک چنین نمایش‌هایی را نمایش‌های دو مقداری می‌نامیم.

سادگی می‌توانیم منشأ این ابهام در علامت را ردیابی کنیم. دو عنصر $R(a, b)$ و $R(-a, -b)$ از $SU(2)$ را در نظر بگیرید. از شکل عناصر ماتریسی $(4-73)$ ب) سادگی می‌بینیم که:

$$D_{m'm}^{(j)}(-a, -b) = (-1)^{2j} D_{m'm}^{(j)}(a, b),$$

بنابراین:

$$D^{(j)}(-a, -b) = \begin{cases} D^{(j)}(a, b) & \text{به ازای زهای صحیح} \\ -D^{(j)}(a, b) & \text{به ازای زهای نیمه صحیح} \end{cases}$$

بدین ترتیب، در نمایشهای کاهش ناپذیر با زهای صحیح، عناصر $R(a, b)$ و $R(-a, -b)$ توسط یک ماتریس نمایش داده می‌شوند، درحالی که در نمایشهای کاهش ناپذیر با زهای نیمه صحیح، این دو عنصر توسط دو ماتریس که یکی منفی دیگری است نمایش داده می‌شوند. بویژه، وقتی $j=1/2$ باشد گروه ماتریسی $SU(2)$ با عناصر زیر را داریم:

$$R(a, b) = \begin{bmatrix} a & -b^* \\ b & a^* \end{bmatrix}, \quad R(-a, -b) = \begin{bmatrix} -a & b^* \\ -b & -a^* \end{bmatrix}$$

وقتی همومرفیسم $SU(2)$ روی $SO(3)$ را در نظر می‌گیریم، مانند $(4-91)$ یک ابهام در علامت خواهیم داشت. می‌توانیم چنین نتیجه‌گیری کنیم که نمایشهای $D^{(j)}$ ی $SU(2)$ با زهای صحیح نمایشهای تک مقداری $SO(3)$ هستند که با $D^{(l)}$ که قبلاً بررسی کردیم، یکسانند، درحالی که نمایشهای $D^{(j)}$ از $SU(2)$ با زهای نیمه صحیح نمایشهای دو مقداری $SO(3)$ می‌باشند.

این ابهام در علامت را می‌توان، با در نظر گرفتن گروهی که تعداد عناصر آن دو برابر عناصر $SO(3)$ است، برطرف کرد. در گروه جدید، یک دوران به اندازه 2π حول هر محور با عنصر همانی یکسان نیست بلکه تنها دوران به اندازه 4π عنصر همانی است. بنابراین، یک عنصر جدید \vec{E} تعریف می‌کنیم که به معنای دوران به اندازه 2π حول، مثلاً محور z ها باشد. در این صورت گروهی که ساخته‌ایم شامل تمام دورانهای $SO(3)$ به اضافه حاصلضربهای \vec{E} در تمام عناصر $SO(3)$ ، می‌باشد. باید روشن شده باشد که نمایش $D^{(j)}$ به ازای مقادیر نیمه صحیح j نمایشهای تک مقداری گروه جدیدی می‌باشند.

گروه جدید را گروه دوگانه $SO(3)$ می‌نامیم و اغلب آن را با $SO'(3)$ مشخص می‌کنیم. این گروه با $SU(2)$ ایزومرفیک است. اما توجه کنید که $SO(3)$ زیرگروه $SO'(3)$ نیست، در واقع اکنون عناصر $SO(3)$ تشکیل گروه نمی‌دهند، زیرا این عناصر تحت ضرب بسته نیستند. به عنوان مثال، یک عنصر C_n از $SO(3)$ را که معرّف دوران به اندازه $2\pi/n$ (n یک عدد صحیح مثبت است) حول یک محور است در نظر بگیرید. در این صورت توان n ام این عنصر با عنصر همانی یکسان نیست، این توان با عنصر \bar{E} که در بالا تعریف کردیم برابر است و متعلق به $SO(3)$ نیست. تنها $(C_n)^{2n}$ با عنصر همانی گروه $SO'(3)$ برابر است.

باید متذکر شویم که هرگاه با ذرات یا سیستمی از ذرات که دارای اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی هستند سر و کار داشته باشیم، به چنین مواردی برخورد می‌کنیم. به عنوان مثال، اندازه حرکت زاویه‌ای مداری یک الکترون مضرب صحیحی از \hbar است در حالی که اندازه حرکت زاویه‌ای اسپینی $\frac{1}{2}\hbar$ است. بنابراین اگر، با یک سیستم متشکل از تعداد فردی الکترون سر و کار داشته باشیم، اندازه حرکت زاویه‌ای کل مضرب نیمه صحیحی از \hbar است. می‌دانیم که در این مورد تابع موج سیستم پس از دوران سیستم به اندازه 2π به مقدار اولیه‌اش بر نمی‌گردد بلکه منهای مقدار اولیه‌اش می‌شود و تنها پس از دوران به اندازه 4π ، تابع موج مقدار اولیه‌اش را می‌گیرد. در نظریه گروه این بدان معنی است که تقارن تابع موج از نمایش‌های کاهش‌ناپذیر گروه دوگانه مربوط تبعیت می‌کند و نه از نمایش‌های گروه تقارنی اولیه. بعداً در فصل هفتم به گروه‌های دوگانه بیشتری خواهیم پرداخت.

باید بدانیم که وجود نمایش‌های دو مقدراری $SO(3)$ نتیجه این است که همبند مضاعف است، بطور کلی اگر G یک گروه لی پیوسته همبند مرتبه k باشد، دارای نمایش‌های تک مقدراری، دو مقدراری، سه مقدراری و ... و k مقدراری است. اگر C_n نماینده n بار دوران حول یک محور و عنصری از G باشد، $(C_n)^n$ عنصر همانی E در گروه G خواهد بود. حال، یک گروه G' می‌سازیم که در آن به جای دوران به اندازه 2π ، دوران به اندازه $2k\pi$ حول هر محور، عنصر همانی آن باشد. دوران به اندازه 2π را با E_1 دوران به اندازه 4π را با E_2 و ... دوران به اندازه $\pi(k-1)$ را با E_{k-1} و بالاخره دوران به اندازه $2k\pi$ را که عنصر همانی G' است با E_0 نمایش می‌دهیم. در این صورت واضح

است که:

$$G' = G \cup E_1 G \cup E_2 G \cup \dots \cup E_{k-1} G.$$

مجموعه G ، که یک زیرمجموعه G' است، اکنون تحت ضرب بسته نیست زیرا $E_1 \in (C_n)^n$ عنصر همانی نیست و به G تعلق ندارد. گروه G' با G همومرفیسم است با تناظر k به 1 . از این رو هر نمایش G' یک نمایش G را می‌دهد. لیکن بعضی از اینها نمایشهای تک مقداری، بعضی نمایشهای دو مقداری و ... و بعضی نمایشهای k مقداری G خواهند بود. گروه G' را گروه دربرگیرنده جامع G می‌نامیم. هرچند چنین گروههایی به خودی خود از نظر تریولوژیکی جالب توجه اند، ولی تاکنون هیچ وضعیت فیزیکی یافت نشده است که با استفاده از گروههای بالاتر از همبند مضاعف نیاز داشته باشد.

۴-۵-۴ ضرب مستقیم نمایشهای $SU(2)$

به دست آوردن ضربهای مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر $SU(2)$ و نشان دادن آنها را به صورت ترکیبات خطی از نمایشهای کاهش ناپذیر جالب توجه است. حاصلضرب مستقیم درنمایش کاهش ناپذیر $SU(2)$ ، $D = D^{(j)} \otimes D^{(j')}$ ، را در نظر بگیرید. فرض کنید مشخصه های D با X نشان داده شود. در این صورت این مشخصه ها حاصلضرب مشخصه های متناظر $D^{(j)}$ و $D^{(j')}$ هستند. لذا:

$$\begin{aligned} \chi(\alpha) &= \chi^{(j)}(\alpha) \chi^{(j')}(\alpha) = \sum_{m=-j}^j e^{im\alpha} \sum_{m'=-j'}^{j'} e^{im'\alpha} \\ &= \sum_{m=-j}^j \sum_{m'=-j'}^{j'} e^{i(m+m')\alpha} \\ &= \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} \sum_{M=-J}^J e^{iM\alpha} = \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} \chi^{(j)}(\alpha). \end{aligned} \quad (92-4)$$

که از آن فرمول بسیار ساده‌ای برای ضرب مستقیم دو نمایش کاهش ناپذیر به دست می‌آید:

$$D^{(j)} \otimes D^{(j')} = \sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} D^{(j)}. \quad (93-4)$$

و نشان می‌دهد، در کاهش ضرب مستقیم، هر نمایش حداکثر یکبار وارد می‌شود. به علاوه، تنها آن نمایشهای کاهش ناپذیری در کاهش دخالت دارند که مقدار «J» در نامساوی مثلثی $|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2$ معادله (۴-۹۳) به نام سری کلبش - گردن موسوم است.

۴-۶ مولدهای $U(n)$ و $SU(n)$

گروه ماتریسهای یکانی از مرتبه n را $U(n)$ ، و گروه ماتریسهای یکانی از مرتبه n با دترمینان $+1$ را با $SU(n)$ نمایش می‌دهیم (SU نماینده یکانی خاص است). واضح است که $SU(n)$ یک زیرگروه $U(n)$ است. چون یک ماتریس یکانی از مرتبه n دارای n^2 عنصر مستقل می‌باشد، $U(n)$ یک گروه لی فشرده، n^2 پارامتری همبند پیوسته است. عناصر گروه $SU(n)$ در یک شرط اضافی دیگر (و آن این که دترمینان آنها $+1$ باشد) صدق می‌کنند. بنابراین $SU(n)$ یک گروه لی فشرده $(n^2 - 1)$ پارامتری همبند، پیوسته است. بطور نسبتاً ساده ای می‌توان n^2 مولد $U(n)$ را به دست آورد. برای این منظور، توجه کنید که اگر H یک ماتریس هرمیتی باشد $\exp(iH)$ یک ماتریس یکانی است. عکس این مطلب نیز صادق است، یعنی اگر U یک ماتریس یکانی باشد، می‌توان آن را به صورت زیر بیان کرد:

$$U = \exp(iH), \quad (۴-۹۴)$$

که در آن H یک ماتریس هرمیتی است. اما هر ترکیب خطی از ماتریسهای هرمیتی با ضرایب حقیقی نیز یک ماتریس هرمیتی است^{۱۴}. لذا حداکثر n^2 ماتریس هرمیتی مستقل از مرتبه n وجود دارد. فرض کنید H_1, H_2, \dots, H_N یک مجموعه از n^2 ماتریس هرمیتی مستقل از مرتبه n باشند، که برای سهولت قرار داده ایم $N \equiv n^2$. فرض کنید a_j ها $(1 \leq j \leq N)$ ، n^2 پارامتر حقیقی مستقل باشند. در این صورت واضح است که هر ماتریس یکانی از مرتبه n می‌تواند به صورت زیر نوشته شود:

۱۴ - توجه کنید که مجموعه تمام ماتریسهای هرمیتی از مرتبه n یک فضای برداری n^2 بعدی حقیقی

$$U = \exp \left[i \sum_{j=1}^N a_j H_j \right], \quad (95-4)$$

به عبارت دیگر، با نسبت دادن تمام مقادیر ممکن به N پارامتر a_j ، می‌توان کلیه عناصر $U(n)$ را از طرف راست (۹۵-۴) به دست آورد. بدین ترتیب N ماتریس هرمیتی مستقل H_j مولدهای $U(n)$ می‌باشند. واضح است که این مولدها منحصر بفرد نیستند و هر N ترکیب خطی مستقل آنها می‌توانند مولدهای $U(n)$ باشند.

اگر A یک ماتریس مربعی باشد به آسانی می‌توان دید که^{۱۵}:

$$\det(e^A) = e^{\text{trace} A}. \quad (96-4)$$

از این رو با استفاده از (۹۴-۴)، ملاحظه می‌کنیم که:

$$\det U = \det(e^{iH}) = \exp(i \text{trace } H). \quad (97-4)$$

تمام عناصر قطری یک ماتریس هرمیتی حقیقی اند و لذا $\text{trace } H \equiv \alpha$ یک عدد حقیقی است. این نشان می‌دهد که $(\det U = \exp(i\alpha))$ یک عدد با قدر مطلق واحد است.

به $SU(n)$ برمی‌گردیم، از این واقعیت استفاده می‌کنیم که عناصر آن دارای دترمینان $+1$ می‌باشند. لذا اگر یک عنصر $SU(n)$ را توسط $U_0 = \exp(iH_0)$ نمایش دهیم، از شرط $\det U_0 = 1$ نتیجه می‌گیریم که $\text{trace } H_0 = 0$. حال، مانند قبل^{۱۶} می‌تواند حداکثر $n^2 - 1$ ماتریس هرمیتی بدون رد مستقل مرتبه n وجود داشته باشد، و اینها را می‌توان بطور مناسب مولدهای $SU(n)$ همراه با $(n^2 - 1)$ پارامتر حقیقی مستقل انتخاب کرد.

برای به دست آوردن تعداد n مولد $U(n)$ ، بهتر است ابتدا $(n^2 - 1)$ مولد $SU(n)$ را انتخاب کنیم و سپس ماتریس واحد مرتبه n را به آنها بیفزاییم.

به عنوان مثال، سه مولد $SU(2)$ را می‌توان ماتریسهای پاولی انتخاب کرد.

۱۵ - رك: جوشي (۱۹۷۵)، مثال ۱۲-۱۲، صفحه ۱۳۳.

۱۶ - مجموعه کلیه ماتریسهای هرمیتی بدون رد مرتبه n یک فضای برداری حقیقی $(n^2 - 1)$ بعدی

$$\sigma_x = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \sigma_y = \begin{bmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{bmatrix}, \sigma_z = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}, \quad (۹۸-۴)$$

که یک مجموعه سه ماتریس هرمیتی بدون رد مستقل مرتبه ۲ می باشند. سپس برای مولدهای $U(2)$ می توانیم مجموعه $(E, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ را انتخاب کنیم، که در آن E ماتریس واحد مرتبه ۲ است.

۷-۴ جبر لی و نمایش‌های یک گروه لی

یک گروه لی با r پارامتر پیوسته a_k ، با r مولد I_1, I_2, \dots, I_r را در نظر بگیرید. دیدیم که هر عنصر گروه لی می تواند به صورت زیر بیان شود:

$$x(a_1, a_2, \dots, a_r) = \exp\left(i \sum_{k=1}^r a_k I_k\right). \quad (۱۹-۴)$$

در مورد یک گروه محدود، دیدیم کلیه خواص گروه می تواند از ساختار جدول ضرب آن به دست آید. هم ارز جدول ضرب برای یک گروه پیوسته چیست؟ می توانیم نشان دهیم که برای یک گروه لی، جابجاپذیریهای مولدهایش ساختار گروه را تعیین می کند. بنابراین، دو عنصر بخصوص زیر از گروه لی را در نظر بگیرید:

$$x(0, 0, \dots, a_k, \dots, 0) = \exp(i a_k I_k), \\ x(0, 0, \dots, a_l, \dots, 0) = \exp(i a_l I_l).$$

حاصلضرب این دو عنصر $\exp(i a_l I_l)$ و $\exp(i a_k I_k)$ ، باید به گروه تعلق داشته باشد و از این رو باید بتواند به ازای بعضی مقادیر a_k به صورت (۱۹-۴) نوشته شود، اما چون مولدهای یک گروه لی عموماً، با یکدیگر جابجاپذیر نیستند^{۱۷}، راه ساده ای برای نوشتن این عنصر وجود ندارد. اما می توانیم از این واقعیت که یک چنین حاصلضربی شامل جابجاپذیریهای I_1 و I_k می باشد، استفاده کنیم. برای این که حاصلضرب $\exp(i a_l I_l)$ و $\exp(i a_k I_k)$ به گروه تعلق داشته باشد، باید جابجاپذیری $[I_k, I_l]$ یک ترکیب خطی از

۱۷ - تنها وقتی که گروه لی مورد نظر آبلی باشد، مولدها با یکدیگر جابجاپذیرند.

مولدها باشد، یعنی:

$$[I_k, I_l] = \sum_{j=1}^r c_{kl}^j I_j, \quad 1 \leq k, l \leq r; \quad (4-99)$$

که در آن C_{kl}^j ضرایب معینی هستند. جابجاپذیریهای دودویی مولدهای یک گروه لی، همانند جدول ضرب برای یک گروه محدود، بطور کامل ساختار گروه لی را تعیین می‌کند. از این رو ضرایب C_{kl}^j را ثابتهای ساختار گروه لی می‌نامیم. این ثابتهای ساختار، یک ویژگی مشخصه گروه لی می‌باشند و به نمایش بخصوصی از مولدها بستگی ندارند. لیکن منحصر بفرد نیستند، زیرا مولدهای یک گروه لی خودشان منحصر بفرد نمی‌باشند.

همان طوری که قبلاً تذکر دادیم، هر ترکیب خطی از مولدها با ضرایب حقیقی نیز می‌تواند به عنوان یک مولد گروه در نظر گرفته شود. در این صورت واضح است که Γ مولد یک گروه لی پایه‌های یک فضای برداری خطی حقیقی Γ بعدی را تشکیل می‌دهند.

معادله (4-99) ما را یک گام به جلوتر می‌برد. این معادله یک قانون ترکیب بین هر دو عنصر فضای برداری فراهم می‌آورد، بطوری که بردار حاصل نیز یک عنصر از فضای برداری باشد. مجموعه ترکیبات خطی حقیقی مولدهای یک گروه لی، در واقع، یک جبر لی است (زیرنویس ۲ از فصل دوم را ببینید).

بطور کاملاً عام، یک جبر لی عبارت است از یک فضای برداری Γ بعدی حقیقی L با عناصر (x, y, z, \dots) که دارای یک قانون ترکیب برای هر دو عنصر L می‌باشد که با $[x, y]$ نمایش داده می‌شود، بطوری که به ازای تمام $x, y, z \in L$:

- (i) $[x, y] \in L$,
- (ii) $[x, y] = -[y, x]$,
- (iii) $[x, [y, z]] + [y, [z, x]] + [z, [x, y]] = 0$,

قانون ترکیب $[x, y]$ به جابجاپذیری x و y موسوم است. مجموعه Γ بردار مستقل L ، یک پایه جبر لی نامیده می‌شود.

چون جابجاپذیریهای مولدهای یک گروه لی که در (4-99) تعریف شده، در

خواص فوق صدق می‌کند، روابط زیر را بین ثابتهای ساختار به دست می‌آوریم:

$$c_{kl}^j = -c_{lk}^j,$$

$$\sum_{m=1}^r [c_{kl}^m c_{jm}^s + c_{lj}^m c_{km}^s + c_{jk}^m c_{lm}^s] = 0. \quad (100-4)$$

به علاوه چون مولدهای I_k هرمیتی هستند، (۴-۹۹) نشان می دهد که ثابتهای ساختار C_{kl}^j موهومی محض می باشند.

اهمیت جبر لی در این واقعیت نهفته است که می توانیم با در نظر گرفتن یک نمایش ماتریسی جبر لی، یک نمایش گروه لی را ایجاد کنیم. بنابراین، اگر بتوانیم یک مجموعه Γ ماتریس مربعی که همه آنها از مرتبه، مثلاً p هستند، پیدا کنیم بطوری که با ثابتهای ساختار معین، در روابط جابجایی (۴-۹۹) صدق کنند، در این صورت با به کار بردن این ماتریسها به عنوان I_k ها در (۴-۱۹) یک نمایش p بعدی گروه لی را ایجاد خواهیم کرد. از این رو می توانیم این را به عنوان یک قاعده کلی در نظر بگیریم که، یک نمایش جبر لی می تواند برای ایجاد یک نمایش گروه لی وابسته به آن مورد استفاده قرار گیرد.

به عنوان مثال، بحث قرار را در مورد $SU(2)$ به کار می بندیم. مولدهای این گروه که در (۴-۹۸) داده شده اند روابط جابجایی زیر صدق می کند:

$$[\sigma_j, \sigma_k] = 2i \sum_i \epsilon_{jki} \sigma_i. \quad (101-4)$$

که در آن ϵ_{jkl} تانسور کاملاً ضدمتقارن درجه ۳ است که تنها عناصر زیر صفر آن عبارتند از:

$$\epsilon_{123} = \epsilon_{321} = \epsilon_{312} = -\epsilon_{213} = -\epsilon_{132} = -\epsilon_{231} = 1. \quad (102-4)$$

اندیسهای j, k و l بجای x, y, z یا بجای $1, 2, 3$ قرار گرفته اند. از این به بعد شش معادله (۴-۱۰۲) را در یک معادله خلاصه خواهیم کرد و آن را به صورت $\epsilon_{123} = 1$ و کلیه جایگشتها با علامتهای مناسب خواهیم نوشت. بدیهی است که مؤلفه های تانسور ϵ_{jkl} وقتی در $2i$ ضرب شود ثابتهای ساختار $SU(2)$ می باشند. بدین ترتیب، جبر لی $SU(2)$ ، مجموعه کلیه ترکیبات خطی حقیقی $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ می باشد.

حال به سه ماتریس زیر توجه کنید:

$$\lambda_1 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \lambda_2 = \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \lambda_3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (۱۰۳-۴)$$

می‌توان بسادگی اثبات کنیم که این ماتریسها در همان روابط جابجایی مولدهای σ ها، صدق می‌کنند، یعنی:

$$[\lambda_j, \lambda_k] = 2i \sum_l \epsilon_{jkl} \lambda_l. \quad (۱۰۴-۴)$$

بدین ترتیب λ ها یک نمایش جبر لی $SU(2)$ را ایجاد می‌کنند و از این رو می‌توانند برای ایجاد یک نمایش سه بعدی خود $SU(2)$ به کار روند.

بیشترین تعداد مولدهایی از یک گروه لی که دوی دو جابجاپذیر باشند، درجه گروه نامیده می‌شود. بنابراین درجه $SO(3)$ یک است، زیرا هیچ یک از مولدهای L_x ، L_y و L_z با دیگری جابجاپذیر نیست. درجه $SU(2)$ نیز یک است.

عملگری که با تمام مولدهای یک گروه لی جابجاپذیر باشد، یک عملگر کاسمیر آن گروه لی نامیده می‌شود. بر طبق قضیه ای منسوب به راکا تعداد عملگرهای کاسمیر مستقل یک گروه لی با درجه گروه برابر است. این نکته که همواره می‌توان با در نظر گرفتن یک ترکیب دوخطی مناسب از مولدها، یک چنین عملگری ساخت، توسط خود کاسمیر تشخیص داده شده بود.

بنابراین، تنها عملگر کاسمیر $SO(3)$ عبارت است از: $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ ، که با هر یک از مولدهای L_x ، L_y و L_z جابجاپذیر است. همین طور تنها عملگر کاسمیر $SU(2)$ عبارت است از: $\sigma^2 = \sigma_x^2 + \sigma_y^2 + \sigma_z^2$.

چون عملگرهای کاسمیر یک گروه لی می‌توانند بطور همزمان با مولدهایشان قطری شوند، می‌توان از ویژه مقدارهای عملگرهای کاسمیر برای برچسب زدن نمایشهای کاهش ناپذیر گروه لی استفاده کرد. بدین ترتیب عملگر کاسمیر L^2 ی $SO(3)$ دارای ویژه مقدار $l(l+1)$ است، که l تمام اعداد صحیح غیر منفی را می‌تواند بگیرد، و لذا نمایشهای کاهش ناپذیر $SO(3)$ را می‌توان همان طوری که در بخش ۴-۳ انجام دادیم، توسط نماد l برچسب بزنیم. دیدیم که ابعاد یک نمایش $D^{(l)}$ برابر است با $2l+1$. بطور مشابه، عملگر

کاسمیر σ^2 ی $SU(2)$ ، عموماً دارای ویژه مقادیرهای $(j+1)z$ است که z می تواند اعداد صحیح و نیمه صحیح غیر منفی را بگیرد (نمایش $(4-98)$ برای مولدها، یک مورد خاص با $z=1/2$ است). از این رو، نمایش‌های کاهش ناپذیر $SU(2)$ را می تواند توسط z برحسب زد. اینها نمایش‌های $D^{(j)}$ می باشند که قبلاً بررسی کردیم و دارای ابعاد $2j+1$ می باشند.

۸-۴ گروه یکانی خاص $SU(3)$

همان طوری که از اسمش روشن است $SU(3)$ گروه تمام ماتریس‌های یکانی مرتبه ۳ با دترمینان ۱ + است. این گروه دارای $8 = 3^2 - 1$ مولداست که معمولاً با $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_8$ مشخص می کنیم. با وجودی که می توان اینها را به طرق بسیاری انتخاب کرد، متداول شده است که از ماتریس‌های بدون ردزیر به عنوان مولدهای $SU(3)$ ، استفاده کنیم:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \lambda_2 &= \begin{bmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \lambda_3 &= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \\ \lambda_4 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \lambda_5 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 \end{bmatrix}, & \lambda_6 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} & (105-4) \\ \lambda_7 &= \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{bmatrix}, & \lambda_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

جایجاپذیری آنها را می توان محاسبه کرد و نتیجه زیر را به دست آورد:

$$[\lambda_j, \lambda_k] = 2i \sum_l f_{jkl} \lambda_l, \quad (106-4)$$

که در آن مولفه های غیر صفر f_{jkl} عبارتند از:

$$\begin{aligned} f_{123} &= 1, \\ f_{147} &= f_{516} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{637} = \frac{1}{2}, \\ f_{458} &= f_{678} = \sqrt{3}/2, \end{aligned} \quad (107-4)$$

باید مشخص شده باشد که این ثابت‌های ساختار یک ویژگی مشخصه $SU(3)$ است و به نمایش بخصوص انتخاب شده در $(105-4)$ بستگی ندارد.

از (۴-۱۰۵) می بینیم که λ_3 و λ_8 قطری هستند و لذا با یکدیگر جابجاپذیرند. می توانیم ثابت کنیم (از ثابتهای ساختار (۴-۱۰۷)) که هیچ ماتریس دیگری از (۴-۱۰۵) با λ_3 و λ_8 ، هر دو جابجاپذیر نیست، بنابراین درجه $SU(3)$ برابر ۲ است. بنابراین گروه $SU(3)$ دارای دو عملگر کاسمیر است، یکی از آنها ترکیب مربعات مولدهاست:

$$C_1 = \sum_{i=1}^8 \lambda_i^2. \quad (۴-۱۰۸)$$

می توان براحتی نشان داد که C_1 با تمام مولدها جابجاپذیر است، یعنی، $[C_1, \lambda_i] = 0$ ، $1 \leq i \leq 8$ ، (مسأله ۴-۷ را ببینید). عملگر کاسمیر دوم یک ترکیب سه خطی پیچیده ای از مولدهاست.

ویژه مقدارهای دو عملگر کاسمیر $SU(3)$ را می توانیم توسط دو اندیس متحرك p و q برحسب بزنیم، و سپس یک نمایش کاهش ناپذیر $SU(3)$ را توسط (p, q) مشخص کنیم، که در آن p و q تمام مقادیر صحیح غیر منفی را می گیرند. ابعاد این نمایش کاهش ناپذیر به صورت زیر به دست می آید^{۱۸}:

$$d = (1+p)(1+q)(2+p+q)/2. \quad (۴-۱۰۹)$$

به عنوان یک قرارداد متداول یک نمایش کاهش ناپذیر را صرفاً توسط ابعاد آن مشخص می کنیم. یعنی، به جای مشخص کردن آن توسط (p, q) ، آن را بسته به این که $p < q$ یا $p > q$ ، با d یا d^* مشخص می کنیم. اگر $q=p$ باشد، تنها یک نمایش کاهش ناپذیر با ابعاد مربوطه وجود دارد که با d نمایش داده می شود.

بنابراین، نمایش کاهش ناپذیر $SU(3)$ پایتترین مرتبه نمایشی است که برای آن داریم: $p=q=0$ یا $1 \equiv (0, 0)$. چند نمایش کاهش ناپذیر دیگر عبارتند از: $3 \equiv (0, 1)$ ، $3^* \equiv (1, 0)$ ، $6 \equiv (0, 2)$ ، $6^* \equiv (2, 0)$ ، $8 \equiv (1, 1)$ ، $10 \equiv (0, 3)$ و غیره. ضربهای مستقیم این نمایشهای کاهش ناپذیر را می توان تشکیل داد و آنها را برحسب

نمایش‌های کاهش ناپذیر کاهش داد. بدون وارد شدن به جزئیات^{۱۹}، در زیر چند مورد مخصوص از این تجزیه را می‌آوریم:

$$\begin{aligned} 3 \otimes 3 &= 6 \oplus 3^*, \\ 3 \otimes 3^* &= 8 \oplus 1, \\ 3 \otimes 3 \otimes 3 &= 10 \oplus 8 \oplus 8 \oplus 1. \end{aligned} \quad (۱۱۰-۴)$$

۴-۸-۱ کاربردهای فیزیکی SU(2) و SU(3)

درست همان طوری که توابع موج مداری یک الکترون (هارمونیک‌های کروی)، بر طبق (۴-۵۱) نمایش‌های کاهش ناپذیر $D^{(i)}$ از $SO(3)$ را ایجاد می‌کنند یا مطابق آن تبدیل می‌شوند، می‌توانیم مشاهده کنیم که توابع اسپینی یک الکترون نیز نمایش‌های $SU(2)$ را ایجاد می‌کنند. یک الکترون منفرد با اندازه حرکت زاویه ای اسپینی $\sigma = \hbar/2$ را در نظر بگیرید که در آن $(\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ و $\sigma \equiv \sigma_z$ ماتریس‌های پاولی هستند. دو تابع اسپینی راست هنجار که ویژه تابع‌های همزمان S^2 و S_z می‌باشند می‌توان به صورت $X^{(1/2)}$ و $X^{(-1/2)}$ نمایش داد. تحت تبدیل تعامد مختصات، این توابع اسپینی در فضای هیلبرت دو بعدی مختلط $X^{(1/2)}$ و $X^{(-1/2)}$ یک تبدیل یکانی پیدا می‌کنند. این فضا را فضای اسپینوری می‌نامیم و هر بردار این فضا (که یک ترکیب خطی از دو تابع پایه است) یک اسپینور نامیده می‌شود. بدین ترتیب توابع اسپینی $X^{(1/2)}$ و $X^{(-1/2)}$ یک نمایش دوبعدی $SU(2)$ را ایجاد می‌کنند که آن را با $D^{(1/2)}$ نمایش می‌دهیم.

حال مورد دو الکترون را در نظر بگیریم. چون توابع اسپینی هر الکترون بر طبق $D^{(1/2)}$ تبدیل می‌شود، توابع اسپینی سیستم مرکب بر طبق نمایش حاصلضرب مستقیم $D^{(1/2)} \otimes D^{(1/2)}$ تبدیل خواهد شد. این یک نمایش چهاربعدی $SU(2)$ است. از قانون تجزیه (۴-۹۳) برای حاصلضرب‌های مستقیم نمایش‌های کاهش ناپذیر $SU(2)$ ملاحظه می‌کنیم که:

۱۹- برای مطالعه قواعد کاهش دادن ضرب‌های مستقیم نمایش‌های کاهش ناپذیر $SU(3)$ ، به عنوان

$$D(\frac{1}{2}) \otimes D(\frac{1}{2}) = D^{(1)} \oplus D^{(0)}. \quad (111-4)$$

اگر توابع اسپینی الکترون اول را توسط $X_1(+)$ و $X_1(-)$ و توابع اسپینی الکترون دوم را توسط $X_2(+)$ و $X_2(-)$ نمایش دهیم، در این صورت واضح است که توابع پایه برای نمایشهای حاصل ضرب مستقیم (۱۱۱-۴) چهار تابع $[X_1(+), X_2(+), X_1(+), X_2(-), X_1(-), X_2(-)]$ خواهند بود. با استفاده از روشهای متداول، می توانیم چهار ترکیب خطی متقارن شده این تابع را به دست آوریم، بطوری که یکی از آنها نمایش $D^{(0)}$ و سه تای باقیمانده $D^{(1)}$ را ایجاد کنند. این توابع، پس از بهنجار کردن به صورت زیر درمی آیند:

$$D^{(0)}: \psi_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} [X_1(+) X_2(-) - X_1(-) X_2(+)];$$

$$D^{(1)}: \begin{cases} \psi_{1,1} = X_1(+) X_2(+), \\ \psi_{1,0} = \frac{1}{\sqrt{2}} [X_1(+) X_2(-) + X_1(-) X_2(+)], \\ \psi_{1,-1} = X_1(-) X_2(-). \end{cases} \quad (112-4)$$

اسپین کل سیستم در حالت $\psi_{0,0}$ (یک حالت یگانه) صفر است، در حالی که در هر یک از سه حالت $\psi_{1,0}$ ، $\psi_{1,1}$ ، و $\psi_{1,-1}$ برابر \hbar است (حالت سه گانه).

$SU(2)$ کاربرد مهم دیگری در فرمول بندی اسپین ایزوتوپی ذرات بنیادی دارد. فهرست طویل ذرات بنیادی می توانیم ببینیم که زوج ذرات زیادی وجود دارند که دو عضو آنها عملاً بجز از نظر بار الکتریکی دارای خواص یکسانی می باشند. یک مثال بارز پرتون و نوترون می باشند که بجز از نظر خواص الکترومغناطیسی، خواص تقریباً یکسانی دارند. این صورت می توانیم پرتون و نوترون را به عنوان دو حالت یک میدان نوکلئونی منفرد در نظر بگیریم، این دو حالت را با $|p\rangle$ و $|n\rangle$ مشخص می کنیم، یک عملگر τ_3 طوری تعریف می کنیم که این دو حالت ویژه حالت های آن باشند و ویژه مقدارهای متناظرشان به ترتیب $1/2$ و $-1/2$ باشد، یعنی:

$$\tau_3 |p\rangle = \frac{1}{2} |p\rangle, \quad \tau_3 |n\rangle = -\frac{1}{2} |n\rangle. \quad (113-4)$$

حالت های $|p\rangle$ و $|n\rangle$ یک فضای هیلبرت دوبعدی ایجاد می کنند که در آن عملگر τ_3 همان

نمایش σ_3 داده شده در (۴-۹۸) را دارد. مشابه با مسأله اسپین الکترون، فرض می‌کنیم یک عملگر τ وجود دارد که آن را عملگر اسپین ایزوتوپی می‌نامیم، و توسط رابطه زیر داده

$$\tau^2 = \tau_1^2 + \tau_2^2 + \tau_3^2, \quad \text{می‌شود:}$$

که در آن τ_1 ، τ_2 و τ_3 مؤلفه‌های عملگر برداری τ می‌باشد. تمام حالت‌های مشاهده پذیر فیزیکی باید ویژه تابعهای همزمان τ^2 و τ_3 باشند. بنابراین، حالت‌های $|p\rangle$ و $|\ln\rangle$ یک نمایش کاهش ناپذیر دو بعدی $D^{(1/2)}$ ، از $SU(2)$ را ایجاد می‌کنند. بار نوکلئون در هر ویژه حالت برابر است با $Q = 1/2 + \tau_3$.

این فرمول بندی، از نظر ریاضی دقیقاً مشابه مسأله اسپین الکترون است. همان طوری که یک الکترون با اسپین «بالا» و یک الکترون با اسپین «پایین» را به عنوان دو نوع ذره متفاوت در نظر نمی‌گیریم بلکه آنها صرفاً دو حالت یک موجود واحد به نام «الکترون» در نظر می‌گیریم. باید پرتون و نوترون را به عنوان دو حالت یک «نوکلئون» متعدد در نظر بگیریم. باید توجه داشته باشیم که این تطابق بین دو مورد فوق صرفاً یک تصادف نیست. این امر، از این واقعیت ناشی می‌شود که برخلاف مکانیک کلاسیک، در مکانیک کوانتومی، اندازه حرکت زاویه ای یک عملگر تعریف شده کاملاً ریاضی است که با مشاهده پذیرهای فیزیکی متناظر است^{۲۰}. بنابراین، اپراتور اسپین ایزوتوپی، همان قدر یک اندازه حرکت زاویه ای است که عملگر اندازه حرکت زاویه ای مداری یا اسپینی الکترون.

مطالعه ذرات بنیادی نشان داده است که گروه‌هایی از ذرات وجود دارند که می‌توان علاوه بر اندازه حرکت زاویه ای اسپین ایزوتوپی، اعداد کوانتومی بیشتری - نظیر عدد باریونی، شگفتی، ابربار و غیره به آنها نسبت داد. از این رو پیشنهاد می‌شود که گروه تقارنی این ذرات ممکن است بزرگتر از $SU(2)$ باشد، و ممکن است، در واقع $SU(3)$ باشد. بنابراین، گروه‌هایی از ذرات وجود دارند که حالت‌های شان مطابق نمایش‌های کاهش ناپذیر $SU(3)$ تبدیل می‌شوند، یعنی، از نظر اندرکنش‌های قوی با یکدیگر تبهگن اند ولی توسط بارهای الکتریکی و شگفتی شان از یکدیگر متمایز می‌شوند. سه گانه بنیادی که

۲۰ - برای تعریف مکانیک کوانتومی اندازه حرکت زاویه ای، بخش ۶-۴-۱ را ببینید.

مطابق نمایش کاهش ناپذیر ۳ی $SU(3)$ تبدیل می‌شود عبارتست از: (p, n, Λ) ، که در آن Λ یک هایپرون است. امروزه تثبیت شده است که گروه‌هایی از هشت و ده ذرات بنیادی وجود دارند که با نمایش‌های کاهش ناپذیر ۸ و ۱۰ی $SU(3)$ متناظرند. در واقع وقتی «گل‌مان»^{۲۱}، طرح $SU(3)$ را پیشنهاد کرد، تنها نه تا از ذرات بنیادی شناخته شده در آن زمان در ده حالت نمایش ۱۰ جای می‌گرفتند ولی یک جای خالی وجود داشت. بزودی پس از پیشنهاد فوق، ذره‌ای با خواص پیش‌بینی شده «گل‌مان» در آزمایشگاه مشاهده شد و Ω^- نامگذاری گردید. داستان اساساً به موازات جدول تناوبی مندلیف پیش می‌رود، که در آن جاهای خالی جدول بعداً با کشف اتم‌های جدید پر شدند.

مسائل فصل چهارم

۱-۴. باتوجه به شکل (۴-۲ ب)، پیوستگی وارونی را برای یک گروه تورپولوزیکی

تعریف کنید.

۲-۴. نشان دهید که مجموعه‌های زیر تشکیل گروه می‌دهند.

(الف) مجموعه ماتریس‌های $\begin{bmatrix} 1 & \alpha \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ به ازای $-\infty < \alpha < \infty$;

(ب) مجموعه ماتریس‌های

$$A(u) = \begin{bmatrix} (1-u^2/c^2)^{-1/2} & -u(1-u^2/c^2)^{-1/2} \\ -uc^{-2}(1-u^2/c^2)^{-1/2} & (1-u^2/c^2)^{-1/2} \end{bmatrix}$$

به ازای $-c \leq u \leq c$ ، که در آن c یک ثابت حقیقی مثبت است. از قانون نسبیتی جمع

سرعتها، $w = \frac{u+v}{1+uv/c^2}$ ، استفاده کنید.

۳-۴. نشان دهید که هریک از مجموعه تبدیلات زیر، یک گروه لی می‌باشد و

سپس مولدهای بی‌نهایت کوچک آنها را پیدا کنید:

(الف) $x' = ax$ ، $y' = ay$ ، $x' = ax$ ، $y' = \frac{y}{a}$ (ب) $x' = ax$ ، $y' = \frac{y}{a}$ به ازای $a \neq 0$.

۴-۴. معادله (۴-۲۹) را ثابت کنید. [راهنمایی: طرف راست را بسط دهید و از

این خاصیت ماتریسهای پاولی که: $\sigma_y^2 = E$ ، استفاده کنید.]

۵-۴. گروه $U(1)$ چیست؟ نشان دهید که $U(n) \otimes U(1) = SU(n)$.

۶-۴. نشان دهید که در فضا برداری حقیقی با بُعد زوج، وارونی با دوران ویژه

هم ارز است.

۷-۴. نشان دهید که عملگر (۴-۱۰۸) یک عملگر کاسیمیر برای $SU(3)$ است،

یعنی به ازای $1 \leq i \leq 8$ ، داریم $[C_1, \lambda_i] = 0$.

۸-۴. فرض کنید H یک ماتریس هرمیتی از مرتبه n و $U = e^{iH}$ باشد. حال، با

افزودن تعداد مناسبی سطر و ستون صفر به H ، آن را به یک ماتریس هرمیتی از مرتبه m

تبدیل می کنیم:

$$H' = \begin{bmatrix} H & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

(الف) نشان دهید که: $\exp(iH') = \begin{bmatrix} U & 0 \\ 0 & E \end{bmatrix}$ ، که در آن E ماتریس واحد از

مرتبه $(m-n)$ است.

(ب) نشان دهید که مجموعه ماتریسهای $\begin{bmatrix} U & 0 \\ 0 & E \end{bmatrix}$ ، که در آن U می تواند هر

ماتریس یکانی باشد، تشکیل یک گروه ایزومرفیک با $U(n)$ می دهند. [از این نظر، اغلب

به ازای $n < m$ ، $U(n)$ را زیرگروه $U(m)$ می نامند.]

(ج) نشان دهید که، به ازای $n < m$ ، $SU(n)$ زیرگروه $SU(m)$ است.

۹-۴. فرض کنید a_i^+ و a_i به ترتیب معرف عملگرهای خلی و نابودی یک نوکلئون

باشند، اندیس i معرف p (پروتون) یا n (نوترون) است. این عملگرها در روابط جابجایی

بوزونی زیر صدق می کنند:

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}, [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0.$$

(الف) نشان دهید که عملگرهای $\tau_x = a_p^+ + a_n^+ + a_p + a_n$ ، $\tau_y = -i(a_p^+ a_n - a_n^+ a_p)$ ،

و $\tau_z = a_p^+ a_p - a_n^+ a_n$ در روابط جابجایی (۴-۱۰) صدق می کنند. [از این رو،

این عملگرها جبر $SU(2)$ را ایجاد می‌کنند. این جبر را جبر ایزواسپینی نوترون-پروتون می‌نامیم. [

(ب) نشان دهید که عملگر $E = a_p^+ a_p + a_n^+ a_n$ با همه τ ها جابجاپذیر است.

[بدین ترتیب عملگرهای τ_x, τ_y, τ_z و E جبر $U(2)$ را ایجاد می‌کنند.]

۴-۱۰. یک سیستم متشکل از سه الکترون با اسپینهای $\frac{1}{2} \hbar$ داریم. نشان دهید که

این سیستم می‌تواند در یک حالت چهارگانه (با اسپین $\frac{3}{2} \hbar$) و در حالت متمایز دوگانه (هرکدام با اسپین $\frac{1}{2} \hbar$) وجود داشته باشد. توابع اسپینی متقارن شده این حالتها را پیدا کنید.

۴-۱۱. تبدیل بردار $\vec{r} = (x, y, z)$ تحت دوران توسط ماتریس $R(\alpha, \beta, \gamma)$ که

در (۴-۲۳) آمده است، تعیین می‌شود. اگر مولفه‌های کروی یا استاندارد \vec{r} را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$r_1 = -(x+iy)/\sqrt{2}, \quad r_0 = z, \quad r_{-1} = (x-iy)/\sqrt{2},$$

نشان دهید که این مولفه‌ها بر طبق روابط زیر تبدیل می‌شوند:

$$r_n' = \sum_{m=-1}^{+1} r_m D_{mn}^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad n = -1, 0, 1,$$

که در آن $D_{mn}^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma)$ به وسیله رابطه (۴-۸۸) تعریف شده‌اند. [برای مورد $j=1$ ، (۶-۷۷) را نیز ببینید.]

کتاب شناسی فصل چهارم

Carruthers (1966); Edmonds (1968); Englefield (1972); Falicov (1967); Fonda and Ghirardi (1970); Gelfand, Minlos and Shapiro (1963); Gottfried (1966); Gourdin (1968); Hamermesh (1964); Heine (1960); Hermann (1966); Kahan (1965); Lipkin (1965); Loebel (1968); Meijer and Bauer (1962); Messiah (1965), Chapter 13; Naimark (1964); Rose (1967); Schiff (1968), Chapter 7; Sudarshan and Mukunda (1974); Tinkham (1964); Wigner (1959); Wybourne (1974).

نظریهٔ گروهها در مکانیک کوانتومی (الف)

مسئلهٔ اساسی در فیزیک کوانتومی بررسی معادلهٔ شرودینگر زیر است

$$\mathcal{H}\psi = E\psi, \quad (1-5)$$

که در آن \mathcal{H} یک عملگر هرمیتی خطی مناسب مسئله است و ψ و E به ترتیب ویژه تابع و ویژه مقدار آن می باشند. عملگر \mathcal{H} می تواند متناظر با هر مشاهده پذیر فیزیکی، نظیر: مکان، اندازه حرکت، اندازه حرکت زاویه ای (اسپینی یا مداری)، انرژی و مانند آن باشد. عموماً چندین جواب وجود دارد که در (1-5) صدق می کنند و ما آنها را با ψ_i و ویژه مقدارهای متناظرشان را با E_i نمایش می دهیم. در واقع در اغلب مسائل مکانیک کوانتومی تعداد ویژه تابعهای \mathcal{H} بی نهایت است. بر طبق یک اصل در مکانیک کوانتومی مجموعهٔ ویژه تابعهای یک عملگر هرمیتی یک مجموعهٔ کامل تشکیل می دهند. این ویژه تابعها یک فضای هیلبرت را تعریف می کنند که عملگر روی آن عمل می کند.

در حالت کلی یافتن دقیق ویژه تابعها و ویژه مقدارهای یک عملگر، بجز در چند مورد ساده «دقیقاً» قابل حل، بسیار مشکل است. لیکن می توان با استفاده از روشهای نظریهٔ گروهها مسأله را تا حد قابل ملاحظه ای ساده کرد. در این فصل با نشان دادن این که چگونه استفاده از نظریهٔ گروهها در (الف) ساده کردن مسأله ویژه مداری، (ب) طبقه بندی کردن ویژه تابعهای مختلف یک عملگر توسط نمایشهای کاهش ناپذیر گروه تقارنی عملگر مربوطه، و (ج) توصیف خواص عمومی آنها با در نظر گرفتن خواص تقارنی آن عملگر کمک می کند، ارتباط بین نظریهٔ گروهها و مکانیک کوانتومی را برقرار خواهیم کرد.

۵-۱ فضاهای هیلبرت در مکانیک کوانتومی

قبل از شروع کاربرد نظریه گروه‌ها، در این بخش نشان می‌دهیم که به هر عملگر هرمیتی متناظر با یک مشاهده پذیر فیزیکی، یک فضای هیلبرت وابسته است که عملگر روی آن عمل می‌کند. این مطلب را با بررسی چند مثال نمونه انجام خواهیم داد.

۵-۱-۱ چاه پتانسیل مربعی یک بعدی با دیواره‌های کاملاً صلب

پتانسیل به شکل $V(x) = +\infty$ به ازای $|x| > a$ و $V(x) = 0$ به ازای $|x| < a$ می‌باشد که در آن a یک ثابت مثبت محدود است. می‌دانیم که ویژه تابع‌های این مسأله عبارتند از: $\psi_n(x) = \sin \frac{n\pi x}{2a}$ به ازای n های زوج و $\psi_n(x) = \cos \frac{n\pi x}{2a}$ به ازای n های فرد، که در آن n تمام اعداد صحیح مثبت را می‌گیرد و x در فاصله $[-a, a]$ تغییر می‌کند. واضح است که این ویژه تابعها تشکیل یک مجموعه کامل در $[-a, a]$ می‌دهند و لذا می‌توانند به عنوان توابع پایه فضای هیلبرت هامیلتونین مسأله انتخاب شوند. این فضا را L_2 نمایش می‌دهیم.

ممکن است بلافاصله به این نتیجه برسیم که این فضا از جمع مستقیم فضاهای L_2 و L_0 حاصل می‌شود که در بخش ۲-۳-۲ مورد بحث قرار گرفت. لیکن قدری توجه نشان می‌دهد که چنین نیست، زیرا برای توابع سینوسی و کسینوسی تنها مقدارهای یک در میان n مجاز می‌باشد. در این صورت چگونه این فضا را توصیف می‌کنیم؟ این فضا، فضای تمام توابع متناوب با پریود $4a$ نمی‌باشد. با قدری تفکر درمی‌یابیم که این فضا، فضای تمام توابع پیوسته مجذوراً انتگرال پذیری است که در مرزهای $l \times l = a^2$ صفر می‌شوند. هر تابع در این فضای L_2 می‌تواند به صورت یک ترکیب خطی از مجموعه کامل توابع پایه به صورت زیر بسط داده شود:

$$\psi(x) = \sum_{n=1}^{\infty} c_n \psi_n(x)$$

$$= \sum_{n=1}^{\infty} a_n \sin(n\pi x/a) + \sum_{n=0}^{\infty} b_n \cos[(2n+1)\pi x/2a].$$

حال موردی را در نظر بگیرید که در آن پتانسیل در محدوده $a < |x|$ ثابت نیست ولی در عین حال در $|x| = a$ دارای دیواره‌های کاملاً سخت می‌باشد. در این مورد ویژه تابعها، دیگر توابع ساده سینوسی و کسینوسی نیستند ولی باید در همان شرایط مرزی صدق کنند^۳. یعنی باید در $|x| = a$ صفر شوند. این می‌رساند که ویژه تابعهای مسأله جدید نیز باید به فضای هیلبرت L مسأله اولیه تعلق داشته باشند و از این رو می‌توانند مانند (۵-۲) بسط داده شوند^۴. همان طوری که می‌دانیم، یک تابع نظیر $\psi(x)$ در (۵-۲) معرف یک بسته موج است (که گسترش فضایی آن به اندازه‌های نسبی ضرایب a_n و b_n بستگی دارد) و این همان چیزی است که انتظار داریم برای مسأله مورد نظر به دست آوریم.

۵-۱-۲ اتم هیدروژن مانند

هامیلتونین یک الکترون در یک اتم هیدروژن مانند در مختصات مرکز جرم عبارت

است از:

$$\mathcal{H} = -\hbar^2 \nabla^2 / 2\mu + V(r), \quad (۳-۵)$$

که در آن $V(r) = -\frac{Ze^2}{r}$ ، Z بار هسته، e بار الکترون، r فاصله شعاعی از هسته و μ جرم موثر است. ویژه تابعهای این مسأله را می‌دانیم^۵:

$$\psi_{nlm}(r) = R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi), \quad (۴-۵)$$

که در آن $R_{nl}(r)$ جواب معادله شرودینگر شعاعی، $Y_l^m(\theta, \phi)$ هارمونیکهای کروی و $\vec{r} = (r, \theta, \phi)$ در مختصات قطبی کروی بیان شده است. اگر توابع R_{nl} بهنجار شده

۳-رک: شیف (۱۹۶۸) بخش ۸.

۴- از این جهت است که در نظریه اغتشاش ویژه تابعهای مسأله مغشوش می‌تواند بر حسب ترکیبات

خطی ویژه تابعهای مسأله غیر مغشوش بسط داده شود، بشرطی که شرایط مرزی دو مسأله یکسان باشند.

۵- اسپین الکترون را در نظر نگرفته ایم و خود را به ترازهای انرژی مقید محدود کرده ایم.

باشند، این توابع راست هنجارند، بنابراین:

$$\int \psi_{nlm}(\mathbf{r}) \psi_{n'l'm'}^*(\mathbf{r}) d^3r = \delta_{nn'} \delta_{ll'} \delta_{mm'} \quad (5-5)$$

از این رو، این ویژه تابعها، توابع پایه برای یک فضای هیلبرت بی نهایت بعدی را تشکیل می دهند. شرایط مرزی در این جا عبارت است از این که در حد $\infty \rightarrow r$ هر ویژه تابع به سمت صفر میل می کند، $\psi_{nlm}(\mathbf{r}) \rightarrow 0$. هر تابع (پیوسته و مجذوراً انتگرال پذیر) که در این شرایط مرزی صدق کند، می تواند به صورت یک ترکیب خطی از ویژه تابعهای حالت مقید (۴-۵) بسط داده شود. لیکن باید در نظر داشت که این کل فضای هیلبرت هامیلتونین (۳-۵) نیست؛ فضای هیلبرت کامل علاوه بر ویژه تابعهای (۴-۵) شامل ویژه تابعهای متناظر با ویژه مقدارهای پیوسته نیز هست.

۳-۱-۵ اندازه حرکت زاویه ای

می دانیم که اگر \vec{J} معرف عملگر اندازه حرکت زاویه ای یک سیستم فیزیکی باشد، مؤلفه هایش با یکدیگر جابجاپذیر نیستند ولی J^2 با تمام مؤلفه های \vec{J} جابجاپذیر است. از این رو، مسأله عبارت است از ساختن ویژه تابعهای همزمان J^2 و مثلاً J_z . لازم نیست که ویژه تابعها را صریحاً به دست آوریم. ویژه تابعها را می توان با دو نماد j و μ مشخص کرد و بنابراین یک ویژه تابع در نمادگذاری دیراک توسط $|j, \mu\rangle$ نشان داده می شود. مجموعه کلیه ویژه تابعهایی که به ازای $j = 0, 1/2, 3/2, \dots$ و $z = -j, -j+1, \dots, j$ به دست می آیند یک مجموعه کامل در فضای هیلبرت بی نهایت بعدی اندازه حرکت زاویه ای را تشکیل می دهند. عمل مؤلفه های این عملگر روی یک تابع پایه به صورت زیر داده می شود:

$$\begin{aligned} J^2 |j, \mu\rangle &= j(j+1) \hbar^2 |j, \mu\rangle, \\ J_z |j, \mu\rangle &= \mu \hbar |j, \mu\rangle, \\ (J_x + iJ_y) |j, \mu\rangle &= [j(j+1) - \mu(\mu+1)]^{1/2} \hbar |j, \mu+1\rangle, \\ (J_x - iJ_y) |j, \mu\rangle &= [j(j+1) - \mu(\mu-1)]^{1/2} \hbar |j, \mu-1\rangle \end{aligned} \quad (6-5)$$

معادلات (۵-۶) نشان می دهند که فضای هیلبرت بی نهایت بعدی L به مجموع مستقیم بی نهایت فضای هیلبرت با ابعاد محدود، تجزیه می شود. ابعاد یک زیر فضای متناظر با یک مقدار مجاز z ، $(2z+1)$ است و توابع پایه متناظر عبارتند از: $\langle z | \mu \rangle$ ، به ازای $z \leq \mu \leq z$. این همان فضای اسپینی سیستمی است که اندازه حرکت زاویه ای آن $\hbar z$ می باشد و همان فضایی است که در آن نمایش $D^{(i)}$ از $SU(2)$ تعریف شده است.

۴-۱-۵ الکترون در یک پتانسیل تناوبی

بالاخره یک الکترون در یک شبکه کریستالی را در نظر می گیریم. ویژه تابعهای هامیلتونین در این مورد را می توان به شکل بلاخ نوشت:

$$\psi_{nk}(r) = \exp(i k \cdot r) u_{nk}(r), \quad (۷-۵)$$

که در آن $U_{nk}(r)$ یک تابع متناوب با پرورد شبکه است. شرایط مرزی در این جا، شرایط مرزی تناوبی است. تعداد مقادیر مجاز بردار k با تعداد سلولهای واحد در کریستال برابر است و n که شاخص نوار می باشد تمام مقادیر صحیح مثبت را می تواند بگیرد [و همچنین حالتی در نوارها که از ترازهای مغزی حاصل می شود را نیز دربر دارد]. این ویژه تابعها، یک پایه برای فضای هیلبرت بی نهایت بعدی هامیلتونین بلور تشکیل می دهند و هر تابع با همان شرایط مرزی تناوبی می تواند به صورت ترکیب خطی از توابع این مجموعه کامل بیان شود.

مثالهای بخشهای ۵-۱-۱، ۵-۱-۲ و ۴-۱-۵ نشان می دهند که وقتی عملگر مورد نظر همان هامیلتونین باشد، فضای هیلبرت آن به جای این که توسط شکل واقعی پتانسیل تعیین شود، توسط شرایط مرزی تعیین می شود.

۲-۵ تبدیلات یک تابع

فرض کنید R عملگری باشد که دستگاه مختصات e_i را تبدیل می کند، یعنی:

$$R e_i = e'_i, \quad i=1, 2, 3, \dots, \quad (۸-۵)$$

که در آن e'_i محورهای دستگاه مختصات تبدیل یافته می باشند. معادله (۸-۵) را می توان

به صورت زیر نیز نوشت:

$$e_i' = \sum_j e_j R_{ji}, \quad i=1, 2, 3, \dots, \quad (9-5)$$

که در آن $[R_{ij}]$ نمایش عملگر R در پایه $\{e_i\}$ است.

آنچه مورد توجه ماست این است که بدانیم وقتی دستگاه مختصات دچار یک تبدیل می شود، شکل یک تابع (که در فضای $\{e_i\}$ تعریف شده است) چگونه تغییر می کند. برای این منظور، یک تابع ساده یک متغیره (فضای یک بعدی) نظیر $f(x) = \cos x$ را در نظر بگیرید. برای تبدیل مختصات، مبدأ مختصات را به نقطه $x = a$ انتقال می دهیم، اگر این تبدیل را با R نمایش دهیم، مختصات جدید را می توان به صورت زیر بیان کرد:

$$x \rightarrow x' \equiv Rx = x - a. \quad (10-5)$$

واضح است که تبدیل معکوس عبارت است از:

$$R^{-1}x = x + a$$

حال، تابع $f(x)$ در دستگاه مختصات جدید چگونه است؟ تابع تبدیل یافته را با $f_1(x')$ نشان می دهیم و عملگر متناظر با R را که روی توابع x عمل می کند با P_R نمایش می دهیم^۷. در این صورت می توان نوشت:

$$P_R f(x) \equiv f_1(x'). \quad (11-5)$$

در مورد حاضر، با فرض $f(x) = \cos x$ ، از روی شکل (۱-۵) روشن می شود که تابع تبدیل یافته به صورت $f_1(x') = \cos(x' + a)$ خواهد بود. با حذف پریمها می توان آن را به صورت $f_1(x) = \cos(x + a)$ نوشت. یا:

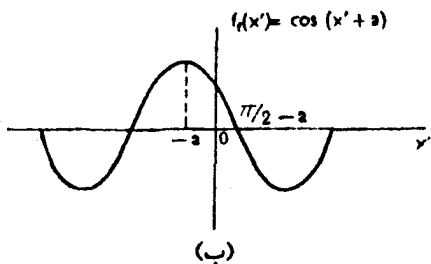
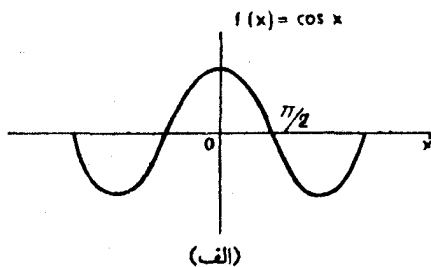
$$P_R f(x) = \cos(R^{-1}x). \quad (12-5)$$

اگر دستگاه مختصات را ثابت نگه داشتیم و تابع $f(x) = \cos x$ را به اندازه a به سمت چپ جابجا می کردیم (تبدیل فعال) همان نتیجه حاصل می شد. همان طوری که در فصل اول بحث شد، این نشان می دهد که بطور کلی تبدیل دستگاه مختصات e_i با تبدیل

۷- توجه کنید که عملگر R تنها روی مختصه x عمل می کند.

معکوس آن که به تابع f اعمال شود هم ارز است. با تعمیم این نتیجه به فضای سه بعدی بردارهای مکان نتیجه می گیریم که مقدار تابع تبدیل یافته f_i در نقطه \vec{r} با مقدار تابع اصلی f در نقطه $R^{-1} \vec{r}$ یکسان است. از این رو داریم:

$$f_i(\vec{r}) = P_R f(\vec{r}) = f(R^{-1} \vec{r}). \quad (۱۳-۵)$$



شکل ۵-۱ (الف) تابع $f(x) = \cos x$ ، (ب) تبدیل مختصاتی که در آن مبدأ به نقطه $x = a$ منتقل شده، بنابراین: $x' = x - a$ و $f_i(x') = \cos(x' + a)$

چون این تبدیل بسیار مهم است، بهتر است یک مثال دیگر در فضای سه بعدی مورد بررسی قرار گیرد. فرض کنید تابع به صورت زیر باشد:

$$f(\vec{r}) = \exp i (k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3), \quad (۱۴-۵)$$

که در آن (x_1, x_2, x_3) مولفه های \vec{r} در دستگاه مختصات راست هنجار $\{e_j\}$ و k_j اسکالرهایی با دیمانسیون $^{-1}$ (طول) می باشند. فرض کنید R یک دوران محورهای مختصات حول محور e_3 به اندازه 90° باشد، یعنی:

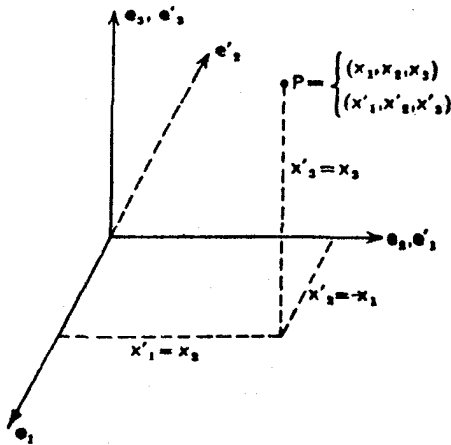
$$R(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) \equiv (\mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2, \mathbf{e}'_3) \\ = (\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3) \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (15-5)$$

تابع $f(\mathbf{r})$ در نقطه $P = (x_1, x_2, x_3)$ دارای همان مقدار داده شده در (۱۴-۵) است. در دستگاه پریم دار نقطه P [شکل (۲-۵) را ببینید] دارای مختصات (x'_1, x'_2, x'_3) است، که در آن $x'_1 = x_2$ ، $x'_2 = -x_1$ ، $x'_3 = x_3$ می باشد. چون مقدار تابع f در نقطه P در حین تبدیل تغییر نکرده است (یا به عبارت دیگر، مقدار تابع f در نقطه P مستقل از دستگاه مختصات می باشد) تابع تبدیل یافته باید به صورت زیر باشد:

$$f_i(\mathbf{r}') = \exp i(-k_1 x'_2 + k_2 x'_1 + k_3 x'_3). \quad (16-5)$$

چون T' تنها یک شاخص برای آرگومان f_i است، می توانیم پریم را برداریم و بنویسیم:

$$f_i(\mathbf{r}) = \exp i(-k_1 x_2 + k_2 x_1 + k_3 x_3). \quad (17-5)$$



شکل ۲-۵ تبدیل دستگاه مختصات \mathbf{e}_i به \mathbf{e}'_i .

واضح است که تابع تبدیل یافته می تواند توسط عمل زیر به دست آید:

$$R^{-1}(x_1, x_2, x_3) = (-x_3, x_1, x_2) \\ = (x_1, x_2, x_3) \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (18-5)$$

ماتریس معادله بالا معکوس ماتریس (۱۵-۵) است. لذا، بار دیگر داریم:

$$f_i(\mathbf{r}) = P_R f(\mathbf{r}) = f(R^{-1} \mathbf{r}),$$

که دقیقاً همان (۱۳-۵) است. در این جا باید تأکید کنیم که تابع f در (۱۴-۵) با تابع f_i در (۱۷-۵) یکسان است، تنها اختلاف در این است که در (۱۴-۵) مکان \mathbf{r} در دستگاه مختصات اولیه ولی در (۱۷-۵) در دستگاه مختصات تبدیل یافته اندازه گیری می شود.

حال اثر تبدیلات متوالی دستگاه مختصات را که از اعمال عملگرهای R و S حاصل می شود، در نظر بگیرید. فرض کنید P_R و P_S عملگرهایی باشند که روی توابعی از \mathbf{r} عمل می کنند و به ترتیب با R و S متناظرند. نتیجه عمل اول بر طبق (۱۳-۵)، عبارت است از:

$$P_R f(\mathbf{r}) = f(R^{-1} \mathbf{r}) \equiv F(\mathbf{r}), \quad (19-5)$$

که تابع $F(\mathbf{r})$ را می دهد. حال نتیجه عمل P_S روی $F(\mathbf{r})$ عبارت است از:

$$P_S F(\mathbf{r}) = F(S^{-1} \mathbf{r}). \quad (20-5)$$

با جایگزین کردن \mathbf{r} در (۱۹-۵) با $S^{-1} \mathbf{r}$ به دست می آید:

$$F(S^{-1} \mathbf{r}) = f(R^{-1} S^{-1} \mathbf{r}).$$

با استفاده از (۱۹-۵) و (۲۰-۵) در معادله بالا، داریم:

$$P_S P_R f(\mathbf{r}) = f(R^{-1} S^{-1} \mathbf{r}). \quad (21-5)$$

توجه کنید که در آرگومان تابع f در طرف راست معادله بالا، ترتیب عملگرهای معکوس عوض شده است.

۳-۵ جابجاییهای فضایی و زمانی

۱-۳-۵ جابجاییهای فضایی

یک سیستم فیزیکی را که توسط تابع موج $\psi(r)$ نمایش داده می شود، در نظر بگیرید. فرض کنید این سیستم فیزیکی به اندازه بردار \underline{p} جابجا شده باشد، چون این عمل معادل جابجا کردن دستگاه مختصات به اندازه بردار \underline{p} است، بر طبق بحث قبلی، تابع موج معرف سیستم فیزیکی عبارت خواهد بود از:

$$\psi'(r) = \psi(r - \underline{p}). \quad (22-5)$$

اگر عملگر انتقال مربوطه را با $P_r(\underline{p})$ نمایش دهیم (شاخص پایین r معرف جابجاییهای مکانی است). در این صورت داریم:

$$P_r(\underline{p}) \psi(r) \equiv \psi'(r) = \psi(r - \underline{p}). \quad (23-5)$$

اینک، هدف ما یافتن عبارتی برای عملگر جابجایی $P_r(\underline{p})$ است. ابتدا مورد خاصی را در نظر می گیریم که در آن جابجایی \underline{p} به موازات محور x ها باشد. چون تابع موج یک سیستم فیزیکی یک تابع پیوسته و مشتق پذیر در تمام نقاط فضا است، می توانیم $\psi(r - \underline{p})$ را به سری تیلور، بسط دهیم:

$$\begin{aligned} \psi(r - \underline{p}) &\equiv \psi(x - p, y, z) \\ &= \left\{ 1 - p \frac{\partial}{\partial x} + \frac{p^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} - \dots \right\} \psi(x, y, z) \\ &= \exp \left(-p \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi(x, y, z). \end{aligned} \quad (24-5)$$

با تعمیم این مورد به جابجایی کلی \underline{p} ، داریم:

$$\begin{aligned} \psi(r - \underline{p}) &= \exp(-\underline{p} \cdot \underline{\nabla}) \psi(r) \\ &= \exp(-i \underline{p} \cdot \underline{p} / \hbar) \psi(r). \end{aligned} \quad (25-5)$$

که در آن $\underline{p} = -i \hbar \underline{\nabla}$ عملگر مکانیک کوانتومی متناظر با اندازه حرکت خطی سیستم می باشد. با مقایسه این رابطه با (۲۳-۵)، داریم:

$$P_r(\underline{p}) = \exp(-i \underline{p} \cdot \underline{p} / \hbar). \quad (26-5)$$

چون \underline{p} حقیقی و \underline{p} یک عملگر هرمیتی است، $P_r(\underline{p})$ یک عملگر یکانی خواهد بود.

آنچه می ماند این است که ثابت کنیم تابع جابجا شده هم یک حالت ممکن سیستم را مشخص می کند. برای این منظور، ابتدا توجه می کنیم که تابع $\psi(\mathbf{r})$ که یک تابع موج سیستم است، در معادله وابسته به زمان شرودینگر

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}) = \mathcal{H} \psi(\mathbf{r}), \quad (27-5)$$

صدق می کند، که در آن \mathcal{H} هامیلتونین سیستم می باشد. اکنون مشتق زمانی تابع جابجا شده را محاسبه می کنیم:

$$\begin{aligned} i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi'(\mathbf{r}) &= i \hbar P_r(\underline{\rho}) \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}) = P_r(\underline{\rho}) \mathcal{H} \psi(\mathbf{r}) \\ &= P_r(\underline{\rho}) \mathcal{H} P_r^\dagger(\underline{\rho}) \psi'(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (28-5)$$

در این صورت واضح است که تابع $\psi'(\mathbf{r})$ در صورتی در معادله وابسته به زمان شرودینگر با همان هامیلتونین \mathcal{H} صدق می کند که داشته باشیم:

$$P_r(\underline{\rho}) \mathcal{H} P_r^\dagger(\underline{\rho}) = \mathcal{H}, \quad \text{or} \quad [P_r(\underline{\rho}), \mathcal{H}] = 0. \quad (29-5)$$

با توجه به شکل عملگر یکانی $P_r(\underline{\rho})$ که توسط (۲۶-۵) داده شده است ملاحظه می کنیم که اگر و فقط اگر p با \mathcal{H} جابجاپذیر باشد، معادله (۲۹-۵) به ازای تمام بردارهای $\underline{\rho}$ برقرار است. این می رساند که اگر سیستم فیزیکی تحت تمام انتقالات فضایی تغییرناپذیر باشد، اندازه حرکت خطی آن یک ثابت حرکت است یا بقاء دارد.

واضح است که مجموعه تمام عملگرهای انتقال $P_r(\underline{\rho})$ (به ازای تمام مقادیر $\underline{\rho}$) یک گروه، آبلی، پیوسته همبسته سه پارامتری غیرفشرده است. قانون ترکیب برای این گروه عبارت است از:

$$P_r(\underline{\rho}) P_r(\underline{\delta}) = P_r(\underline{\delta}) P_r(\underline{\rho}) = P_r(\underline{\rho} + \underline{\delta}).$$

این گروه تقارنی سیستم فیزیکی موردنظر است.

اگر دو مثال ساده از مفهومی که در فوق بحث شد مورد بررسی قرار گیرد آموزنده خواهد بود. ابتدا یک ذره آزاد را که هامیلتونی آن شامل تنها قسمت انرژی جنبشی است

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} \quad \text{در نظر بگیرید:}$$

تابع موج این ذره به صورت $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{r})$ می باشد، که در آن \vec{k} معرف بردار موجی ذره است. اگر سیستم را به اندازه بردار \underline{p} جابجا کنیم، تابع جدید $\exp[i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \underline{p})]$ نیز معرف یک حالت ممکن ذره آزاد خواهد بود. این امر باید برای هر بردار \underline{p} صادق باشد زیرا اندازه حرکت ذره با $\hbar k$ جابجا پذیر است و از این رو یک ثابت حرکت می باشد ($p = \hbar k$).

سپس مورد الکترون در اتم هیدروژن را در نظر بگیرید. تابع موج الکترون به صورت $R_{nl}(r) Y_l^m(\theta, \phi)$ می باشد. در این جا بردار مکان \vec{r} نسبت به دستگاه مختصاتی است که مبدأ آن بر روی هسته قرار دارد. اگر سیستم را به اندازه یک بردار جابجا کنیم در این صورت هسته دیگر در مبدأ مختصات نخواهد بود و تابع جابجا شده نمی تواند به شکل استاندارد نوشته شود و لذا، معرف یک حالت ممکن برای سیستم نیست. بنابراین اندازه حرکت خطی برای یک الکترون در داخل یک اتم هیدروژن یک ثابت حرکت نیست، که البته نتیجه دانسته شده ای است.

۳-۲-۵ جابجاییهای زمانی

مشابه با جابجایی فضایی یک سیستم فیزیکی که در بالا بررسی کردیم، می توانیم یک سیستم را از نظر زمان نیز جابجا کنیم و سعی کنیم دریابیم که آیا تابع جابجا شده معرف یک حالت ممکن سیستم است یا خیر.

بنابراین، فرض کنید $\psi(t)$ تابع موج^۸ یک سیستم فیزیکی باشد و فرض کنید $P_t(\tau)$ معرف عملگری باشد که توابع زمانی را به مقدار τ جابجا کند. در این صورت داریم:

$$P_t(\tau) \psi(t) \equiv \psi'(t) = \psi(t - \tau). \quad (30-5)$$

می توانیم تابع $\psi(t - \tau)$ را حول نقطه t بسط تیلور بدسیم:

$$P_t(\tau) \psi(t) = \exp(-\tau \partial / \partial t) \psi(t). \quad (31-5)$$

از این رو داریم:

۸- در این جا سایر متغیرهایی که ممکن است ψ به آنها بستگی داشته باشد مورد توجه ما نیستند و لذا

از آنها چشم پوشی کرده ایم.

$$P_t(\tau) = \exp(-\tau \partial/\partial t). \quad (۳۲-۵)$$

اما عملگر مکانیک کوانتومی انرژی عبارت است از: $\mathcal{H} = i \hbar \partial/\partial t$ اگر \mathcal{H} خود مستقل از زمان باشد، یعنی اگر انرژی یک ثابت حرکت باشد، در این صورت می توانیم در تابع نمایی (۳۲-۵)، $\frac{\partial}{\partial t}$ را با \mathcal{H} جایگزین کنیم و به دست آوریم:

$$P_t(\tau) = \exp(i\tau \mathcal{H}/\hbar), \quad (۳۳-۵)$$

که یک عملگر یکانی است، زیرا τ حقیقی و \mathcal{H} هرمیتی می باشد.

این همچنین نشان می دهد که اگر یک سیستم فیزیکی تحت تمام جابجاییهای زمانی تغییرناپذیر باشد، انرژی سیستم ثابت حرکت است. در این مورد تابع تبدیل یافته نیز از معادله شرودینگر تبعیت می کند. تمام عملگرهای انتقال زمانی $P_t(\tau)$ با هامیلتونی جابجاپذیرند، یعنی:

$$[P_t(\tau), \mathcal{H}] = 0 \quad \text{بازای تمام } \tau \text{ ها} \quad (۳۴-۵)$$

مجموعه تمام عملگرهای جابجایی زمانی نیز یک گروه آبلی، پیوسته، همبسته و یک پارامتری غیر فشرده تشکیل می دهند که گروه تقارنی سیستم فیزیکی است.

می توانیم یک بار دیگر مثال اتم هیدروژن را در نظر بگیریم. اگر یک اتم هیدروژن منزوی، بدون هیچ گونه اغتشاشی، داشته باشیم هامیلتونی آن تحت تمام جابجاییهای زمانی تغییرناپذیر خواهد بود. اگر این اتم در یک لحظه معین در یک حالت بخصوص قرار داشته باشد، برای تمام زمانها در همان حالت باقی خواهد ماند و انرژی کل سیستم تغییرناپذیر خواهد بود. از طرف دیگر اگر یک اغتشاش وابسته به زمان اعمال کنیم، هامیلتونی دیگر تحت جابجاییهای زمانی تغییرناپذیر نخواهد بود و اتم ممکن است گذارهایی از یک حالت به حالت دیگر انجام دهد و انرژی آن یک ثابت حرکت باقی نماند.

۴-۵ تقارن هامیلتونی

در بخش گذشته به کمک دو مثال دیدیم که وقتی یک سیستم دارای تقارن معینی باشد، یک مشاهده پذیر فیزیکی متناظری وجود دارد که ثابت حرکت باقی می ماند. در این جا این مفهوم را بطور کاملاً عام توسعه خواهیم داد. از این به بعد عملگر \mathcal{H} در (۵-۱)

را به عنوان هامیلتونی (عملگر انرژی) سیستم به کار خواهیم برد.

هامیلتونی \mathcal{H} خود تابعی از پارامترهای متعدد سیستم نظیر بردار مکان، زمان، اندازه حرکت، اندازه حرکت زاویه ای و غیره است و منعکس کننده تقارن سیستم مربوطه می باشد. شکل آشنای آن در تقریب تک ذره ای عبارت است از:

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V, \quad (35-5)$$

که در آن جمله اول عملگر انرژی جنبشی برای ذره می باشد و V شامل سایر جملات است. لاپلاسیان ∇^2 تحت کلیه تبدیلات متعامد دستگاه مختصات (یعنی، تحت گروه دوران وارونی $O(3)$) تغییرناپذیر است. از این رو، تقارن \mathcal{H} اساساً توسط تقارن تابع V تعیین می شود. بنابراین، اگر (35-5) مربوط به یک الکترون در اتم هیدروژن باشد، انرژی پتانسیل الکترون دارای تقارن کروی است، و \mathcal{H} تحت گروه $O(3)$ تغییرناپذیر خواهد بود، اگر مربوط به یک الکترون در یک بلور باشد، \mathcal{H} تحت تبدیلات تقارنی بلور (یعنی، عملهای گروه فضایی بلور که در فصل هفتم مورد بحث قرار خواهد گرفت) تغییرناپذیر خواهد بود.

عمل P_R ، را که با یک تبدیل مختصات R ، روی معادله شرودینگر (5-1) متناظر

است، در نظر بگیرید:

$$P_R \mathcal{H} \psi = P_R E \psi, \quad \text{یا:}$$

$$(P_R \mathcal{H} P_R^{-1}) (P_R \psi) = E P_R \psi, \quad \text{یا:}$$

$$\mathcal{H}' (P_R \psi) = E (P_R \psi), \quad (36-5)$$

که در آن:

$$\mathcal{H}' = P_R \mathcal{H} P_R^{-1} \quad (37-5)$$

عبارت از هامیلتونی در دستگاه مختصات تبدیل یافته است. اگر عملگر P_R به گونه ای باشد

که $\mathcal{H}' = \mathcal{H}$ یعنی شکل تابع هامیلتونی در دستگاه مختصات جدید با شکل هامیلتونی در

دستگاه مختصات اولیه یکسان باشد، در این صورت از (37-5)، داریم:

$$\mathcal{H} P_R = P_R \mathcal{H}. \quad (38-5)$$

این رابطه نشان می دهد که هامیلتونی با همه عملگرهایی که تحت آنها تغییرناپذیر است. جابجاپذیر می باشد.

مجموعه کلیه تبدیلات R که سیستم را تغییرناپذیر می گذارند، یک گروه تشکیل می دهند، مجموعه تبدیلات متناظر P_R هامیلتونی سیستم را تغییرناپذیر می گذارند و از این رو آنها نیز یک گروه تشکیل می دهند. این دو گروه، با یکدیگر ایزومرفیک هستند و هر دو را با یک علامت G نشان خواهیم داد. این گروه، گروه تقارنی هامیلتونی یا گروه معادله شرودینگر نامیده می شود (مسأله ۵-۷ را ببینید).

رابطه جابجایی (۵-۳۸)، وقتی به (۵-۳۶) اعمال شود، داریم:

$$\mathcal{H}(P_R \psi) = E(P_R \psi), \quad (۵-۳۹)$$

یعنی: $P_R \psi$ نیز یک ویژه بردار \mathcal{H} با همان ویژه مقدار E است. بنابراین تابع ψ با P_R با تبهگن است مگر این که، مضربی از ψ باشد.

۴-۱- تقارن و تبهگنی

می توانیم با شروع از یک ویژه تابع معین ψ_1 متعلق به \mathcal{H} با ویژه مقدار E و اعمال همه عناصر گروه G یک مجموعه از ویژه تابعهای مستقل $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n$ ($n \leq g$) مرتبه G است) را ایجاد کنیم. این توابع یک پایه برای یک نمایش G را تشکیل می دهند که ممکن است کاهش پذیر یا کاهش ناپذیر باشد. لیکن اگر تمام تبدیلات تقارنی ممکن که هامیلتونی را تغییرناپذیر می گذارند در گروه G وارد شده باشند، در این صورت نمایشی که توسط ویژه تابعهای تبهگن ایجاد شود باید همه در حالت کلی، یک نمایش کاهش ناپذیر باشد. برعکس، ویژه تابعهای متعلق به یک نمایش کاهش ناپذیر G (که برای یک زمان بخصوص اتفاق می افتد) می توانند با اعمال عناصر G به یکدیگر تبدیل شوند، و از این رو، همان طوری که از (۵-۳۹) برمی آید، باید تبهگن باشند.

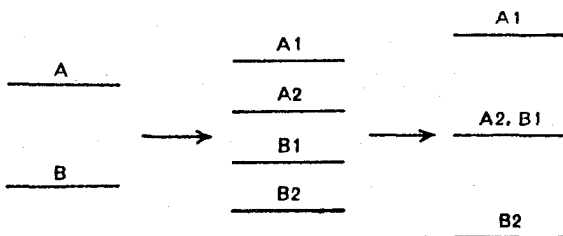
حال ممکن است سؤال کنیم: آیا ویژه تابعهایی که بر طبق نمایشهای مختلف G تبدیل می شوند همراه ویژه مقدارهای متفاوتی دارند؟ عموماً، باید این طور باشد. این امر ناشی از این واقعیت است که اگر به عنوان مثال، ψ و ϕ توابع متعلق به نمایشهای

کاهش ناپذیر مختلف G باشند، در این صورت عملی از G وجود ندارد که آنها را مخلوط کند. اما گاهی ممکن است نتوانسته باشیم تمام تبدیلات تقارنی هامیلتونی را در G بگنجانیم، که در این صورت نمایش ایجاد شده توسط ویژه تابعهای تبهگن ممکن است کاهش پذیر باشد. در این صورت توابع پایه متعلق به دو یا چند نمایش کاهش ناپذیر ممکن است تبهگن باشند، در این صورت، یعنی: اگر دریابیم که توابع پایه متعلق به دو یا چند نمایش کاهش ناپذیر G همواره تبهگن اند، ممکن است چنین نتیجه گیری کنیم که تقارنی از هامیلتونی را نادیده گرفته ایم. وقتی تمام تبدیلات تقارنی هامیلتونی را در نظر گرفته باشیم، توابع پایه متعلق به نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف G ، عموماً باید ویژه مقادیرهای متفاوتی داشته باشند.

اما بسختی می توانیم در عمل مطمئن باشیم که کلیه تفسیر ناپذیربهای یک سیستم فیزیکی را در نظر گرفته ایم. یک مثال جالب از این را در بخش هشتم این فصل، وقتی تقارن دینامیکی سیستمهای فیزیکی را بررسی کنیم خواهیم دید.

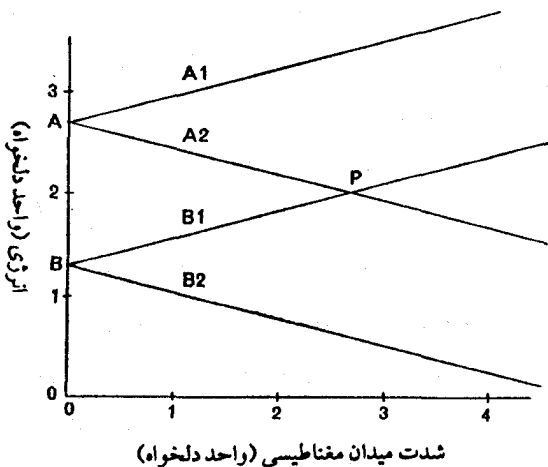
ممکن است باز هم اتفاق بیفتد که به ازای مقادیر معینی از پارامترها (نظیر بار هسته ای، جرم الکترونی، فواصل بین اتمی در مولکولها و بلورها و نظایر آنها، که ویژه توابع به آنها بستگی دارند) دو یا چند ویژه تابع متعلق به نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف دارای یک ویژه مقدار انرژی یکسان باشند. این تبهگنی را تقارن سیستم ایجاب نمی کند و نمی توان با بررسیهای نظریه گروه آن را نتیجه گیری کرد. این تبهگنی را در مقابل تبهگنی اساسی که به خاطر تقارن سیستم ایجاد می شود و تاکنون آن را مورد بحث قرار دادیم، تبهگنی تصادفی می نامیم. تبهگنی اساسی را می توان با پایین آوردن تقارن سیستم بر طرف کرد. از طرف دیگر، موقعیت تبهگنی تصادفی با تغییر پارامترها تغییر می کند و این عمل در تبهگنی اساسی اثری ندارد.

به عنوان مثال، یک سیستم فرمی دو ترازوی ساده را که در شکل (۵-۳) نشان داده شده است در نظر بگیرید. هر دو تراز A و B دو بار تبهگن اند، یعنی، هر تراز می تواند دو فرمیون را جای دهد، یکی با اسپین «بالا» و دیگری با اسپین «پایین». اگر یک میدان مغناطیسی اعمال کنیم هر تراز به دو تراز تجزیه می شود. فاصله بین دو تراز A_1 و A_2 و



شکل ۳-۵ شکاف ترازها تحت یک میدان مغناطیسی و تبهگنی تصادفی A2 و B1.

فاصله بین B1 و B2 بطور خطی با افزایش شدت میدان مغناطیسی افزایش می یابد. شکل (۴-۵) تغییرات انرژیهای چهار تراز را نسبت به شدت میدان مغناطیسی نشان می دهد. واضح است که به ازای مقدار معینی از میدان مغناطیسی انرژیهای دو تراز A2 و B1 برهم منطبق خواهند شد، نظیر نقطه P در شکل (۴-۵).



شکل ۴-۵ تبهگنی دوگانه در A و B تبهگنی اساسی است درحالی که تبهگنی دوگانه در P یک تبهگنی تصادفی می باشد.

تبهگنی دوگانه دو تراز A و B در غیاب میدان مغناطیسی ناشی از تقارن سیستم است. در غیاب میدان مغناطیسی اسپین «بالا» و اسپین «پایین» از یکدیگر قابل تمیز نیستند،

و از این رویک تبهگنی اساسی است. از طرف دیگر، تبهگنی دوگانه در نقطه P ، در شکل (۴-۵)، که به ازای یک مقدار بخصوص میدان مغناطیسی ایجاد می شود، یک تبهگنی تصادفی است، زیرا توسط بررسیهای تقارنی تضمین نمی شود. تبهگنی اساسی در A و B تنها با پایین آوردن تقارن سیستم بر طرف می شود، اما مکان تبهگنی تصادفی می تواند با تغییر بار یا جرم فرمیونها (یا حتی با تغییر سرعت نور، زیرا مگنتون بور به آن بستگی دارد) تغییر کند.

در قسمتهای باقیمانده کتاب وقتی مسائل مختلف را بررسی می کنیم به مثالهای دیگری از این دو نوع تبهگنی برخورد خواهیم کرد.

۴-۴-۵ اعداد کوانتومی خوب

حال به بحث مان پیرامون ارتباط بین ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر و تبهگنیهای ترازهای انرژی بر می گردیم. اهمیت این نتیجه، همان طوری که خواهیم دید، این است که از آن می توان استفاده کرد و ترازهای انرژی و ویژه تابعهای سیستم را توسط نمایشهای کاهش ناپذیر گروه تقارنی آن برجسب گذاری کرد و تبهگنیهای مختلف مورد انتظار را تعیین کرد.

بنابراین اگر ψ_{pm}^α یک ویژه تابع متعلق به ستون m ام نمایش کاهش ناپذیر شماره α باشد که برای مرتبه p -ام در طر حواره تراز انرژی ظاهر شده است، در این صورت α و p نمادهای مناسبی برای اندیس گذاری ویژه مقدارها که توسط $E_{\alpha p}$ نمایش داده می شوند، می باشد. به عنوان مثال، هامیلتونی یک الکترون در اتم هیدروژن دارای تغییر ناپذیری دورانی است. ویژه تابعهای این مسأله عبارتند از: $R_{nl} Y_l^m(0, \phi)$ و ترازهای انرژی الکترون را می توان توسط نمادهای n و l (در این جا n متناظر با p است) اندیس گذاری کرد.

با توجه به نتایج بحث بعدی خود، می توانیم مثال یک الکترون در یک شبکه کریستالی را در نظر بگیریم. نمایشهای کاهش ناپذیر گروه هامیلتونی در این مورد توسط یک بردار موجی k مشخص می شود، و از این رو می توانیم ویژه تابعهای را توسط $\psi_{nk}(r)$ و ویژه مقدارهای انرژی را توسط $E_n(k)$ نمایش دهیم، که در این جا n نماد نوار می باشد.

این در واقع توصیف نظریه گروهی اعداد کوانتومی خوب است. بنابراین برای یک الکترون در اتم هیدروژن n و l اعداد کوانتومی خوب می باشند، برای یک الکترون در یک بلور، n و k اعداد کوانتومی خوبند. یک عدد کوانتومی خوب آن مشخصه از ویژه تابع سیستم فیزیکی است که تحت تبدیلات تقارنی سیستم بدون تغییر می ماند و لذا مناسبترین متغیر برای اندیس گذاری ویژه تابعها و ویژه مقدارهای سیستم است.

در پرتو این بحث، معادله مستقل از زمان شرودینگر برای هر سیستم را می توان به عمومی ترین شکل زیر نوشت:

$$H\psi_{pm}^{\alpha} = E_{\alpha p} \psi_{pm}^{\alpha}, \quad (40-5)$$

که در آن α ، p و m اعداد کوانتومی خوب می باشند. درحالی که ویژه تابع توسط این سه پارامتر مشخص شده است، ویژه مقدار فقط به α و p بستگی دارد. بنابراین تبهگنی تراز $E_{\alpha p}$ عبارت است از تعداد مقادیری که m می گیرد، که ابعاد نمایش کاهش ناپذیر α ام است.

۵-۵ کاهش ناشی از تقارن

اگر یک انتخاب دلخواه از توابع پایه انجام شود، عموماً عناصر ماتریسی هامیلتونی بین هر دو زوج تابع پایه مخالف صفر خواهد بود. در این صورت ماتریس هامیلتونی علاوه بر عناصر قطر اصلی دارای عناصر غیر قطری نیز خواهد بود. ولی در این بخش خواهیم دید که با یک انتخاب مناسب از توابع پایه می توان ماتریس هامیلتونی را به صورت بلوکی قطری کرد، که بطور قابل ملاحظه ای مسأله یافتن ویژه مقدارها را ساده می کند.

۵-۵-۱ تعامد توابع پایه

به عنوان اولین گام برای رسیدن به هدفمان، نشان می دهیم که اگر عناصر یک گروه عملگرهای یکانی باشند، در این صورت توابع پایه متعلق به نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف گروه یا دو ستون از یک نمایش کاهش ناپذیر متعامدند.

فرض کنید ψ_{pm}^{α} یک تابع پایه باشد که بر طبق ستون m ام نمایش کاهش ناپذیر

$\Gamma^{(\alpha)}$ (از یک گروه تقارنی G) که برای مرتبه p ام در طرحواره تراز انرژی ظاهر شده است، تبدیل شود. همچنین فرض کنید ψ_{qn}^{β} تابع پایه دیگری باشد که مطابق ستون n -ام نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\beta)}$ که برای مرتبه q ام در طرحواره تراز انرژی ظاهر می شود، تبدیل شود. چون حاصلضرب اسکالر دو تابع پایه تحت یک تبدیل یکانی تغییرناپذیر است، داریم:

$$(\psi_{pm}^{\alpha}, \psi_{qn}^{\beta}) = (A \psi_{pm}^{\alpha}, A \psi_{qn}^{\beta}), \quad G \text{ به ازای تمام } A \text{ های متعلق به } G \quad (41-5)$$

با نوشتن صریح عمل A روی توابع پایه در طرف راست معادله فوق، داریم:

$$(\psi_{pm}^{\alpha}, \psi_{qn}^{\beta}) = \left(\sum_{k=1}^{I_{\alpha}} \psi_{pk}^{(\alpha)} \Gamma_{km}^{(\alpha)}(A), \sum_{l=1}^{I_{\beta}} \psi_{ql}^{\beta} \Gamma_{ln}^{(\beta)}(A) \right) \quad (42-5)$$

$$= \sum_{k=1}^{I_{\alpha}} \sum_{l=1}^{I_{\beta}} \Gamma_{km}^{(\alpha)*}(A) \Gamma_{ln}^{(\beta)}(A) (\psi_{pk}^{\alpha}, \psi_{ql}^{\beta}). \quad (43-5)$$

در حال حاضر، فقط گروههای محدود را بررسی می کنیم. چون طرف چپ معادله فوق مستقل از عضو A ی گروه است، می توانیم طرف راست را روی تمام اعضای گروه جمع بندی کرده و بر g ، مرتبه گروه G ، تقسیم کنیم. سپس با استفاده از رابطه تعامد بین نمایشهای کاهش ناپذیر، به دست می آوریم:

$$\begin{aligned} (\psi_{pm}^{\alpha}, \psi_{qn}^{\beta}) &= \frac{1}{g} \sum_{k=1}^{I_{\alpha}} \sum_{l=1}^{I_{\beta}} \sum_{A \in G} \Gamma_{km}^{(\alpha)*}(A) \Gamma_{ln}^{(\beta)}(A) (\psi_{pk}^{\alpha}, \psi_{ql}^{\beta}) \\ &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} (1/g) \sum_{k=1}^{I_{\alpha}} \sum_{l=1}^{I_{\beta}} \delta_{kl} (\psi_{pk}^{\alpha}, \psi_{ql}^{\beta}). \end{aligned} \quad (44-5)$$

این رابطه نشان می دهد که در صورتی توابع پایه ψ_{pm}^{α} و ψ_{qn}^{β} متعامدند که $\alpha \neq \beta$ یا $m \neq n$ ولی اگر $\alpha = \beta$ و $m = n$ ، از معادله بالا داریم:

$$(\psi_{pm}^{\alpha}, \psi_{qm}^{\alpha}) = \frac{1}{I_{\alpha}} \sum_{k=1}^{I_{\alpha}} (\psi_{pk}^{\alpha}, \psi_{qk}^{\alpha}). \quad (45-5 \text{ الف})$$

چون طرف راست مستقل از m است، نتیجه مهم زیر به دست می آید:

$$(\psi_{pm}^\alpha, \psi_{qm}^\alpha) = (\psi_{pk}^\alpha, \psi_{qk}^\alpha), \quad (ب) \quad (۴۵-۵)$$

یعنی، حاصلضرب اسکالر دو تابع پایه که هر دو مانند یک ستون از یک نمایش کاهش ناپذیر تبدیل می شوند، مستقل از نماد ستون است.

هرچند نتایج فوق را برای یک گروه محدود به دست آوردیم، کافی است بگیریم که این نتایج برای گروههای محدود فشرده نیز برقرارند.

بنابراین اگر چند تابع پایه داشته باشیم که مانند نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف یک گروه تبدیل شوند، تنها حاصلضربهای اسکالری که عملاً وجود دارند آنهایی هستند که بین توابع پایه ای قرار دارند که بر طبق یک ستون از یک نمایش کاهش ناپذیر تبدیل می شوند^۹.

نتیجه فوق را برای توابع پایه نمایشهای کاهش ناپذیر هر گروه بطور عام به دست آوردیم. اما اگر ویژه توابع هامیلتونی را در نظر بگیریم که در عین حال توابع پایه نمایشهای کاهش ناپذیر گروه تقارنی اش نیز باشند، در این صورت می توانیم یک مرحله جلوتر برویم. از مکانیک کوانتومی مقدماتی می دانیم که اگر ψ_{pm}^α و ψ_{qn}^β دو ویژه تابع \mathcal{H} با دو ویژه مقدار متفاوت $E_{\alpha p}$ و $E_{\beta q}$ باشند، این دو تابع باید متعامد باشند. با ترکیب این نتیجه با رابطه تعامد (۴۴-۵) در بالا ملاحظه می کنیم که مجموعه کلیه ویژه تابعهای هامیلتونی، اگر طوری انتخاب شده باشند که توابع پایه نمایشهای کاهش ناپذیر گروه تقارنی اش باشند، یک مجموعه متعامدند. به عبارت دیگر، ماتریس معرف \mathcal{H} با چنین ویژه تابعهایی به عنوان پایه، یک ماتریس قطری است.

۵-۵-۲ بلوکه قطری کردن هامیلتونی

وضعیتی که در بالا مورد بحث قرار گرفت و در آن هامیلتونی بطور کامل قطری شد، در واقع تنها یک مورد ایده آل است و وقتی حاصل می شود که ویژه تابعهای هامیلتونی را بدانیم. ولی در عمل ویژه تابعهای هامیلتونی را از قبل نمی دانیم. مع ذلک می توانیم یک دسته ویژه تابع تقریبی که نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف گروه تقارنی هامیلتونی را ایجاد

۹- حتی این عناصر می توانند، در حالتی خاص به خاطر دلایلی غیر از تقارن، صفر شوند.

می‌کنند، بسازیم و از آنها به عنوان نقطه شروع تعیین ویژه تابعهای مطلوب استفاده کنیم. می‌توانیم نشان دهیم که اگر با این توابع پایه ماتریس معرف هامیلتونی را بسازیم، اگرچه به شکل قطری کامل نیست، ولی بطور بلوک قطری خواهد بود.

بنابراین، مانند قبل فرض کنید ψ_{qn}^{β} و ψ_{pm}^{α} دو تابع پایه، آن گونه که در بخش گذشته تعریف کردیم، باشند. این توابع لزوماً ویژه تابعهای هامیلتونی نیستند. هدف ما این است که عنصر ماتریسی هامیلتونی بین این دو حالت یعنی $(\psi_{qn}^{\beta}, \mathcal{H} \psi_{pm}^{\alpha})$ را پیدا کنیم. چون \mathcal{H} تحت همه عملیات گروه تقارنی اش تغییرناپذیر است، بسادگی می‌توان دید که تابع ψ_{qn}^{β} \mathcal{H} دارای همان تقارنهای ψ_{qn}^{β} است زیرا فرض کنید A یک عضو تقارنی در گروه باشد، بطوری که:

$$A \psi_{qn}^{\beta} = \sum_i \psi_{qi}^{\beta} \Gamma_n^{(\beta)}(A) \quad \forall A \in G. \quad (46-5)$$

حال عمل A روی تابع ψ_{qn}^{β} را در نظر بگیرید. با استفاده از این واقعیت که A با \mathcal{H} جابجاپذیر است، داریم:

$$A (\mathcal{H} \psi_{qn}^{\beta}) = \mathcal{H} A \psi_{qn}^{\beta} = \sum_i (\mathcal{H} \psi_{qi}^{\beta}) \Gamma_n^{(\beta)}(A) \quad \forall A \in G. \quad (47-5)$$

این نشان می‌دهد که $\mathcal{H} \psi_{qn}^{\beta}$ نیز تحت گروه تقارنی مانند ستون n ام نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\beta)}$ تبدیل می‌شود. از این رو، حاصلضرب اسکالر ψ_{pm}^{α} و $\mathcal{H} \psi_{qn}^{\beta}$ برطبق (۴۴-۵) شامل ضرایب $\delta_{\alpha\beta}$ δ_{mn} خواهد بود. بنابراین تنها عناصر ماتریسی مخالف صفر \mathcal{H} عناصر بین توابعی به صورت ψ_{qn}^{β} و ψ_{pm}^{α} می‌باشد، یعنی:

$$(\psi_{pm}^{\alpha}, \mathcal{H} \psi_{qn}^{\beta}) = \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} (\psi_{pm}^{\alpha}, \mathcal{H} \psi_{qm}^{\alpha}). \quad (48-5)$$

بنابراین ماتریس هامیلتونی به شکل قطری شده بلوکی خواهد بود، و ابعاد بلوکها برابر با تعداد مقادیری است که نماد p می‌گیرد؛ با اینها همان اعداد a_{α} که در (۳-۸۷) تعریف شد می‌باشد تعداد ابعاد بزرگترین بلوک برابر است با تعداد بیشترین دفعاتی که یک نمایش کاهش ناپذیر در طر حواره تراز انرژی، یعنی با بزرگترین a_{α} ظاهر می‌شود. بدین ترتیب مسأله تا حد قابل ملاحظه ای ساده می‌شود زیرا اساساً به یافتن ویژه مقدارهای بلوکها بطور

جداگانه تبدیل شده است .

برای نشان دادن این مطلب با یک مثال ، مورد بسیار ساده ای را که در آن هامیلتونی تحت عملگر وارونی J تغییرناپذیر است در نظر می گیریم . فرض کنید U عملگر یکانی متناظر با J باشد که روی توابع از بردار مکان عمل می کند . در این صورت همان طوری که قبلاً دیده ایم ، عملگر U با \mathcal{H} جابجایی پذیر است :

$$U J \mathcal{H} = \mathcal{H} U J. \quad (۴۹-۵)$$

با اعمال U از سمت چپ به دو طرف معادله (۵-۴۹) (که در آن ψ یک ویژه تابع نامعلومی از \mathcal{H} است) ، و استفاده از (۴۹-۵) به دست می آوریم :

$$\mathcal{H} (U J \psi) = E (U J \psi). \quad (۵۰-۵)$$

فرض کنید ϕ یک ویژه تابع U باشد ، در این صورت :

$$U J \phi = c \phi, \quad (۵۱-۵)$$

که در آن c ویژه مقدار U متناظر با ϕ است . چون در اثر اعمال دوباره J دستگاه مختصات تغییرناپذیر می ماند ، داریم :

$$J (U J \phi) = c U J \phi = c^2 \phi \equiv \phi; \quad \text{لذا:}$$

$$c = \pm 1. \quad (۵۲-۵)$$

درواقع هر تابع قابل قبول فیزیکی که تحت وارونی دستگاه مختصات زوج یا فرد باشد ، یک ویژه تابع U است و ویژه مقدار آن به ترتیب $+1$ یا -1 خواهد بود .

فرض کنید ویژه تابع ψ ی \mathcal{H} به صورت مجموع یک تابع زوج و یک تابع فرد نوشته شده باشد .

بنابراین :

$$\psi = \phi_c + \phi_0, \quad (الف-۵۳-۵)$$

که در آن :

$$\phi_c = (\psi + U J \psi) / 2, \quad \phi_0 = (\psi - U J \psi) / 2. \quad (ب-۵۳-۵)$$

اگر ψ تحت وارونی نه زوج و نه فرد باشد ، U مستقل از ψ خواهد بود و هر دو تابع ویژه تابعهای تبهگن \mathcal{H} خواهند بود . در این صورت هر دو ترکیب خطی مستقل ψ و $U \psi$ ،

نظیر ϕ_e و ϕ_0 نیز ویژه تابع \mathcal{H} با همان ویژه مقدار E خواهند بود. به زبان نظریه گروه ملاحظه می‌کنیم که ϕ_e و ϕ_0 'توابع پایه' متقارن شده برای نمایشهای کاهش‌ناپذیر گروه وارونی (E, J) می‌باشند، واضح است که کار با ویژه تابعهای ϕ_e و ϕ_0 نسبت به ψ و $\psi \in \mathcal{U}$ راحت تر است زیرا عنصر ماتریس \mathcal{H} بین ϕ_e و ϕ_0 صفر است.

باید نتیجه فوق را تعمیم بدهیم تا کلیه ویژه تابعهای \mathcal{H} را دربر گیرد. فرض کنید $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$ ویژه تابعهای \mathcal{H} باشند که یک فضای هیلبرت L_n تعریف کنند، که در آن n ممکن است محدود یا بی‌نهایت باشد. از بحث بالا نتیجه می‌شود که هر ویژه تابع باید یا (i) زوج یا فرد باشد یا (ii) با ویژه تابع دیگر تبهگن باشد. در مورد تبهگنی، می‌توانیم دو ترکیب خطی مناسب انتخاب کنیم که زوج یا فرد باشد. لذا می‌توانیم کلیه ویژه تابعهای \mathcal{H} را طوری انتخاب کنیم که تحت وارونی دستگاه مختصات زوج یا فرد باشند، یعنی، ویژه تابعهای همزمان \mathcal{H} و \mathcal{U} باشند^{۱۰}. از این رو ملاحظه می‌کنیم که هر ویژه تابع هامیلتونی که نسبت به وارونی تقارن دارد، دارای یک پارته معینی است که بسته به عمل \mathcal{U} روی ویژه تابع زوج یا فرد می‌باشد.

بجز در مورد سیستمهای بسیار ساده، حل دقیق (۵-۱) بسیار مشکل است، یعنی بسختی می‌توان ویژه تابعهای دقیق \mathcal{H} را پیدا کرد. اما در حالت کلی می‌توانیم یک مجموعه n تابع پایه مناسب ψ_i انتخاب کنیم که یک زیر فضای تغییرناپذیری از فضای هیلبرت بی‌نهایت بعدی \mathcal{H} تشکیل دهند. این توابع پایه ψ_i لزوماً ویژه تابعهای \mathcal{H} نمی‌باشند، و از این رو عمل \mathcal{H} روی یک تابع ψ_i را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\mathcal{H}\psi_i = \sum_{j=1}^n \psi_j \mathcal{H}_{ji}. \quad (5-54)$$

همان طوری که در بخش ۲-۴-۲ بحث شد، هدف ما این است که با ساختن ترکیبات خطی

۱۰ - این مطلب با یک نتیجه مهم مکانیک کوانتومی که بر طبق آن می‌توان برای دو عملگر جابجاپذیر ویژه تابعهای همزمان یافت (یا در جبر ماتریسی، می‌توان برای دو ماتریس جابجاپذیر ویژه بردارهای همزمان یافت) مطابقت دارد.

ψ_i ها هرچه صحیح تر ویژه تابعهای \mathcal{H} را بیابیم. اگر بتوانیم، n ویژه تابع \mathcal{H} ، یعنی X_i ها را پیدا کنیم، در این صورت مانند (۲-۶۹)، داریم:

$$\mathcal{H}X_i = E_i X_i. \quad (55-5)$$

اما همان طوری که تذکر دادیم، یافتن ویژه تابعهای دقیق مشکل است. با وجود این می-توانیم با در نظر گرفتن ترکیبات خطی ψ_i ها بطوری که در معادله

$$\mathcal{H}X_i^{(0)} = \sum_{j=1}^n X_j^{(0)} \mathcal{H}_{ji}, \quad (56-5)$$

عناصر غیر قطری \mathcal{H}_{ij} ($i \neq j$) از عناصر قطر اصلی \mathcal{H}_{ii} به مراتب کوچکتر باشند، ویژه تابعهای $X_i^{(0)}$ «مرتبه صفر» را بسازیم. وقتی این کار انجام شد، می توانیم بگوییم که ویژه تابعها و ویژه مقدارهای \mathcal{H} را تا تقریب مرتبه معینی، که به میزان کوچکی به عناصر غیر قطری در مقایسه با عناصر قطر بستگی دارد، به دست آورده ایم. تا این مرتبه تقریب می توانیم معادله بالا را به صورت زیر بنویسیم:

$$\mathcal{H}X_i^{(0)} = E_i^{(0)} X_i^{(0)}, \quad E_i^{(0)} = \mathcal{H}_{ii}. \quad (57-5)$$

نظریه گروه در این فرایند کمک بسیار مهمی است. بنابراین، در مثالی که در این جا مورد بحث قرار گرفت، استفاده از تغییر ناپذیری \mathcal{H} تحت وارونی و انتخاب ویژه تابعهای تقریبی \mathcal{H} بطوری که ویژه تابعهای همزمان \mathcal{U} نیز باشند، مسأله را تا حد زیادی ساده می کند. فرض کنید این n تابع پایه به طریقی مرتب شده باشند که m تابع اول زوج و $n-m$ تابع باقیمانده فرد باشند. در این صورت ماتریس معرف \mathcal{H} با این توابع پایه به شکل زیر در می آید:

$$[\mathcal{H}_{ij}] = \left[\begin{array}{cc} \overbrace{\dots}^m & \overbrace{\dots}^{n-m} \\ \dots & \mathbf{0} \\ \dots & \dots \\ \mathbf{0} & \dots \end{array} \right] \left. \begin{array}{l} \} m \\ \} n-m \end{array} \right. \quad (58-5)$$

واضح است که با در نظر گرفتن تمام تبدیلات تقارنی \mathcal{H} ، می توانیم بازهم ماتریس معرف \mathcal{H} را بیشتر قطری کنیم. همان طوری که در بخش ۵-۷ خواهیم دید، نظریه گروهها

هر چند در مورد عناصر غیر صفر چیزی بیان نمی کند ولی بر اساس تقارن می تواند تعیین کند که چه عناصری از \mathcal{A} باید صفر باشند.

در این جا باید تذکر داده شود که رابطه (۵-۵۴) که در آن ψ_i را بر حسب n تابع پایه بسط داده ایم، خود یک تقریب است. در عمل n باید بی نهایت باشد، اما بنا به دلایل عملی آن را محدود در نظر می گیریم. معمولاً آنچه مورد نظر ماست چند ویژه مقدار پایین \mathcal{A} می باشد و اگر n به حد کافی بزرگ انتخاب شود و زیر فضای n بعدی مربوطه بطور مناسبی انتخاب شده باشد، تأثیر چندانی در این مقادیر نمی کند. در این صورت این تقریب که n را محدود فرض کنیم یک تقریب بسیار خوبی است.

۵-۶ اغتشاش و شکافتگی تراز

همان طوری که از مکانیک کوانتومی مقدماتی می دانیم، تنها چند مسأله بطور دقیق قابل حل می باشند. در حالت کلی، اگر بتوانیم هامیلتونی را به دو قسمت تجزیه کنیم:

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V, \quad (5-59)$$

بطوری که قسمت اول \mathcal{H}_0 ساده باشد، بدین معنی که ویژه مقدارهای آن بطور نسبتاً ساده ای قابل حصول باشد و قسمت دوم V اثر کوچکی روی ویژه مقدارهای \mathcal{H}_0 داشته باشد، در این صورت مسأله بطور قابل ملاحظه ای ساده تر می شود.

فرض کنید G گروه تقارنی تبدیلات \mathcal{H}_0 باشد. عموماً همه عملیات G ، V را تغییر ناپذیر نمی گذارد، یا به عبارت دیگر، گروه تبدیلات تقارنی V ، که آن را K می نامیم، از G کوچکتر است. فرض می کنیم گروه K یک زیر گروه G باشد، هامیلتون کلی \mathcal{H} تنها تحت تبدیلات تقارنی مشترک \mathcal{H}_0 و V تغییر ناپذیر خواهد بود. این می رساند که K نیز یک گروه تقارنی \mathcal{H} است.

بنا به فرض ویژه تابعهای \mathcal{H}_0 معلومند. همان طوری که قبلاً بحث شد، این ویژه تابعها می توانند (بر طبق تبهگنی شان) به زیر مجموعه های تغییر ناپذیر دسته بندی شوند، بطوری که هر زیر مجموعه یک پایه برای نمایش کاهش ناپذیر G تشکیل دهد. فرض کنید ویژه مقدارهای \mathcal{H}_0 را که l_α با l_α تبهگن اند. با $E_\alpha^{(0)}$ نشان دهیم. بنابراین تعداد l_α ویژه

تابع مستقل $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_{1x}\}$ وجود دارد که همه آنها دارای ویژه مقدار $E_\alpha^{(0)}$ می‌باشند. این ویژه تابع یک پایه برای یک نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\alpha)}$ ی G تشکیل می‌دهند. حال اگر تصور کنیم که اغتشاش V برقرار شود، گروه تقارنی سیستم به K تبدیل خواهد شد. چون K یک زیرگروه G است، توابع $\{\psi_i\}$ بازهم یک نمایش Γ_α بعدی K را ایجاد خواهند کرد ولی این نمایش عموماً یک کاهش ناپذیر خواهد بود. سپس می‌توانیم با روش استاندارد که در فصل سوم بحث شد، آن را کاهش دهیم. بدین ترتیب، از مجموعه توابع $\{\psi_i\}$ زیرمجموعه‌های جدیدی به دست می‌آوریم بطوری که یک تابع در یک زیرمجموعه تحت عملیات گروه K تنها با توابع همان زیرمجموعه مخلوط می‌شود. این زیرمجموعه‌ها، همگی باید بویژه مقدارهای مختلف متعلق باشند (بجز در مورد تبهگنی تصادفی) و از این رو تراز انرژی اولیه $E_\alpha^{(0)}$ به خاطر پایین آوردن تقارن به تعدادی تراز انرژی تجزیه می‌شود.

این مطلب را به کمک یک مثال روشن می‌کنیم. یک مولکول مربعی دو بعدی یا یک بلور که دارای شبکه مربعی است در نظر بگیرید. گروه تقارنی سیستم همان گروه C_{4v} است. فرض کنید بلور در امتداد یکی از اضلاعش فشرده شود. تقارن سیستم حاصله (یک شبکه مستطیلی اولیه) از تقارن مربع پایتتر است. در واقع گروه تقارنی شبکه فشرده عبارت است از: $K = \{E, C_4^2, m_x, m_y\}$ که آن را در بلورشناسی با C_{2v} نمایش می‌دهیم. خواهیم دید که در اثر اعمال اغتشاش چگونه ترازهای متناظر با نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف C_{4v} تجزیه می‌شوند.

گروه C_{2v} دارای چهار عنصر است و یک گروه آبلی می‌باشد. از این رو دارای چهار نمایش کاهش ناپذیر است که همگی یک بعدی اند. در جدول (۵-۱)، جدول مشخصه C_{2v} و مشخصه‌های عناصر C_{2v} را در نمایشهای کاهش ناپذیر گروه C_{4v} نشان داده ایم.

چون ترازهای متعلق به نمایشهای کاهش ناپذیر $\Gamma^{(i)}$ ی C_{4v} به ازای $1 \leq i \leq 4$ غیر تبهگن اند، نمی‌توان آنها را بیشتر تجزیه کرد. با بررسی جدول (۵-۱) ملاحظه می‌کنیم که تابع پایه‌ای که تحت C_{4v} مطابق $\Gamma^{(1)}$ یا $\Gamma^{(3)}$ تبدیل می‌شود، تحت عملیات C_{2v}

جدول ۵-۱ جدول مشخصه C_{2v} و مشخصه های عناصر C_{2v} در نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} .

		E	C_4^2	m_x	m_y
مشخصه های عناصر C_{2v}	D_1	1	1	1	1
	D_2	1	1	-1	-1
	D_3	1	-1	1	-1
	D_4	1	-1	-1	1
مشخصه های عناصر C_{2v} در نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v}	$\Gamma^{(1)}$	1	1	1	1
	$\Gamma^{(2)}$	1	1	-1	-1
	$\Gamma^{(3)}$	1	1	1	1
	$\Gamma^{(4)}$	1	1	-1	-1
	$\Gamma^{(5)}$	2	-2	0	0

برطبق D_1 تبدیل خواهد شد. همین طور تابع پایه ای که تحت C_{4v} مانند $\Gamma^{(2)}$ یا $\Gamma^{(4)}$ تبدیل می شود تحت عملیات C_{2v} مانند D_2 تبدیل خواهد شد. بالاخره، یک تراز متعلق به نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(5)}$ متعلق به C_{4v} باید در اثر تراکم بلور شکافته شود زیرا نمایش کاهش ناپذیر دو بعدی C_{2v} وجود ندارد. فرض کنید دو تابع تبهگن ψ_1^5 و ψ_2^5 توابع پایه $\Gamma^{(5)}$ باشند، این توابع اکنون نمایشی از C_{2v} را ایجاد می کنند که مشخصه های آن در سطر آخر جدول (۵-۱) آورده شده است. با دقت در مشخصه ها بسادگی می توان دید که تا جایی که به گروه C_{4v} مربوط است، می توانیم بطور نمادی بنویسیم:

$$\Gamma^{(5)} \rightarrow D_3 \oplus D_4. \quad (5-6)$$

توابع پایه برای D_3 و D_4 به ترتیب عبارتند از: ψ_1^5 و ψ_2^5 . این را می توان به آسانی با اعمال عناصر C_{2v} روی این توابع ثابت کرد. بدین ترتیب، هر تراز متعلق به $\Gamma^{(5)}$ در مولکول یا شبکه به دو تراز غیر تبهگن که به نمایشهای کاهش ناپذیر D_3 و D_4 ، در بلوری که دارای گروه تقارنی C_{2v} است، تجزیه می شود.

یکی از مهمترین و مشهورترین موارد- شکافتگی ترازهای انرژی یک اتم در میدان

بلور مکعبی - در جدول ۷-۶ مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۷-۵ قضیه عنصر ماتریسی و قواعد گزینش

فرض کنید هامیلتونی یک سیستم توسط $(5-59)$ داده شده باشد و فرض کنید در ابتدا اغتشاش V برقرار نباشد. فرض کنید ψ_{pm}^α معرف ویژه تابعهای \mathcal{H}_0 باشد؛ این توابع سیستم غیرمغشوش را توصیف می کنند. یعنی، اگر سیستم در یک لحظه معین در یک حالت ψ_{pm}^α باشد، به شرط آن که هیچ اغتشاشی در هامیلتونی \mathcal{H}_0 نباشد، در همان حالت خواهد ماند. اعمال یک اغتشاش با تقارن پایتتر نه تنها همان طوری که در بخش قبل بحث کردیم، ترازهای انرژی سیستم را می شکافد بلکه گذارهایی از یک ویژه حالت \mathcal{H}_0 به ویژه حالت دیگر رانیز باعث می شود. بنابراین برای یافتن سیستم در زمانهای بعدی در یک ویژه حالت دیگر \mathcal{H}_0 احتمال غیر صفر وجود دارد. قضیه عنصر ماتریسی نظریه گروهها به ما این امکان را می دهد تا صرفاً از روی تقارن ویژه تابعها و اغتشاش پیش بینی کنیم کدام گذارها ممنوعند. اینک به مطالعه این بحث می پردازیم.

۷-۵-۱ قضیه عنصر ماتریسی

فرض کنید ψ_{pm}^α و ψ_{qn}^β دو ویژه تابع \mathcal{H}_0 باشند که به توابع پایه مولد نمایشهای کاهش ناپذیر گروه \mathcal{H}_0 نیز متعلق می باشند، اکنون فرض کنید اغتشاش V به سیستم اعمال شود می توانیم از ویژه تابعهای \mathcal{H}_0 برای ایجاد یک نمایش عملگر V استفاده کنیم. این کار را می توان بسادگی با در نظر گرفتن عمل V روی یک ویژه تابع، مثلاً ψ_{pm}^α و بسط تابع حاصل بر حسب یک مجموعه کامل از ویژه تابعهای \mathcal{H}_0 ، انجام داد. بنابراین:

$$V\psi_{pm}^\alpha = \sum_{\beta, q, n} \psi_{qn}^\beta c(\alpha, p, m; \beta, q, n), \quad (61-5)$$

که در آن ضرایب $c(\alpha, p, m; \beta, q, n)$ کمیتهای اسکالر می باشند. برای تعیین این ضرایب حاصلضرب اسکالر $\psi_{pm}^\alpha V$ با یک ویژه تابع دیگر را می نویسیم و از تعامد بین ویژه تابعها استفاده می کنیم. نتیجه می شود:

$$c(\alpha, p, m; \beta, q, n) = (\psi_{qn}^\beta, V\psi_{pm}^\alpha), \quad (۶۲-۵)$$

که دقیقاً عنصر ماتریسی اغتشاش V بین حالت‌های پایه ψ_{qn}^β و ψ_{pm}^α است. با این ضرایب، رابطه (۶۱-۵) به صورت زیر درمی‌آید:

$$V\psi_{pm}^\alpha = \sum_{\beta, q, n} \psi_{qn}^\beta (\psi_{qn}^\beta, V\psi_{pm}^\alpha). \quad (۶۳-۵)$$

اگر عنصر ماتریسی V که توسط (۶۲-۵) داده می‌شود، صفر شود انتقال از حالت ψ_{pm}^α به حالت ψ_{qn}^β در اثر اغتشاش V ممنوع خواهد بود.

از معادله (۶۳-۵) دیده می‌شود که تابع $V\psi_{pm}^\alpha$ تابعی از یک تقارن «محض» نیست، بلکه یک ترکیب خطی از تعدادی تابع پایه می‌باشد. از این رو قضیه عنصر ماتریسی زیر را داریم: اگر تابع $V\psi_{pm}^\alpha$ شامل بخشی که مطابق ستون n ام نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma^{(\beta)}$ تبدیل شود، نباشد، عنصر ماتریسی (۶۲-۵) باید (به ازای تمام مقادیر q) صفر شود. سپس این بدان معنی است که در این مورد انتقال بین حالت‌های ψ_{qn}^β و ψ_{pm}^α تحت تأثیر اغتشاش V ممنوع است.

می‌توانیم از خود تابع $V\psi_{pm}^\alpha$ برای ایجاد یک نمایش از گروه تقارنی G از \mathcal{H}_0 استفاده کنیم. یک چنین نمایشی، مثلاً Γ ، عموماً یک نمایش کاهش پذیر خواهد بود، زیرا $V\psi_{pm}^\alpha$ یک ویژه تابع \mathcal{H}_0 نیست (مگر V با \mathcal{H}_0 جابجایی پذیر باشد).

اغتشاش V خود تابعی از مختصات است (یا روی مختصات عمل می‌کند) و از این رو می‌تواند برای ایجاد یک نمایش، مثلاً Γ_V ، از گروه G مورد استفاده قرار گیرد. بنابراین تابع $V\psi_{pm}^\alpha$ که به عنوان حاصلضرب دو تابع V و ψ_{pm}^α در نظر گرفته شده است نمایشی را ایجاد می‌کند که باید حاصلضرب مستقیم $\Gamma_V^{(1)}$ و $\Gamma^{(\alpha)}$ باشد، یعنی:

$$\Gamma = \Gamma_V \otimes \Gamma^{(\alpha)} \equiv \sum_{\gamma} a_{\gamma} \Gamma^{(\gamma)}, \quad (۶۴-۵)$$

که در آن Γ را به صورت جمع مستقیم نمایش‌های کاهش ناپذیر G بیان کرده ایم. سپس

۱۱- به عنوان یک مورد خاص می‌توانیم ببینیم که \mathcal{H}_0 تحت کلیه اعمال G تغییر ناپذیر است،

بنابراین نمایش همانی G را ایجاد می‌کند. لذا $\mathcal{H}_0\psi_{pm}^\alpha$ دارای همان تقارن ψ_{pm}^α است.

روشن است که اگر ضرب مستقیم $\Gamma_V \otimes \Gamma(\alpha)$ شامل نمایش کاهش ناپذیر $\Gamma(\beta)$ نباشد، عنصر ماتریسی (۵-۶۲) صفر خواهد شد.

توجه کنید که این شرط نسبت به شرطی که قبلاً در قضیه عنصر ماتریسی ذکر شد، شرط ضعیف تری است. بنابراین، برای آن که تعیین کنیم آیا یک عنصر ماتریسی معین نظیر (۵-۶۲) مخالف صفر است یا خیر، باید ابتدا شرط ضعیف تر ولی ساده تر را اعمال کنیم تا ببینیم آیا $\Gamma_V \otimes \Gamma(\alpha)$ شامل $\Gamma(\beta)$ است یا خیر. اگر نتیجه این کار منفی بود نیازی نیست که شرط دقیق تر را اعمال کنیم، ولی اگر نتیجه مثبت شد، باید جلو تر رفته و ببینیم آیا ψ_{pm}^α شامل بخشی که مطابق ستون n ام $\Gamma(\beta)$ تبدیل شود، هست یا خیر.

می توان با ضرب مستقیم Γ در $\Gamma(\beta)^*$ یک شرط هم ارز دیگر نیز به دست آورد. این شرط عبارت است از این که اگر نمایش $\Gamma(\alpha) \otimes \Gamma_V \otimes \Gamma(\beta)^*$ شامل نمایش همانی G نباشد^{۱۲}، عنصر ماتریسی V بین ψ_{qn}^β و ψ_{pm}^α صفر می شود.

بدین ترتیب مشاهده می کنیم که تقارن سیستم بعضی از انتقالها را قدغن می کند. لیکن نظریه گروهها هیچ اطلاعاتی درباره عناصر ماتریسی V که به خاطر تقارن صفر نمی شود، نمی دهد. باید تأکید کنیم که چنین عناصر ماتریسی ممکن است به خاطر دلایل دیگر یا صرفاً بطور تصادفی نیز صفر شوند.

۵-۷-۲ قواعد گزینش برای انتقالهای دوقطبی الکتریکی

برای نشان دادن کاربرد قضیه عنصر ماتریسی، قواعد گزینش برای انتقال دوقطبی الکتریکی یک الکترون در یک مولکول با گروه تقارنی C_{4v} را بررسی می کنیم. یک مثال دیگر در فصل بعد وقتی قواعد گزینش برای انتقالهای الکترونی در اتمها متزوی را به دست می آوریم، خواهیم دید. عملگر ممان دوقطبی الکتریکی عبارت است از: $\vec{\mu} = e\vec{r}$ ؛ که یک عملگر برداری با مولفه های $e(x, y, z)$ می باشد. این عملگر، همان عملگر V در نظریه بالاست و بسادگی می توان مشاهده کرد که نمایش $\Gamma_V = \Gamma(1) \oplus \Gamma(5)$ از C_{4v} را

ایجاد می‌کند (عملگر ez)، $\Gamma(1)$ را ایجاد می‌کند و مولفه‌های (x, y) ، e ، $\Gamma(5)$ را ایجاد می‌کنند. فرض کنید می‌خواهیم ببینیم آیا انتقال بین دو حالتی که به ترتیب به $\Gamma(1)$ و $\Gamma(2)$ متعلق می‌باشند مجاز است یا خیر. در این صورت ضرب مستقیم

$$\Gamma_V \otimes \Gamma(2) = (\Gamma(1) \oplus \Gamma(5)) \otimes \Gamma(5) = \Gamma(2) \oplus \Gamma(2)$$

را با استفاده از جدول (۳-۴) تشکیل می‌دهیم. چون این ضرب مستقیم شامل $\Gamma(1)$ نیست، نتیجه می‌گیریم که انتقال $\Gamma(2) \leftarrow \Gamma(1)$ تحت تأثیر تابش دو قطبی الکتریکی ممنوع است. با توجه به قواعد گزینش برای کلیه انتقالهای ممکن، به روش مشابه، ملاحظه

می‌کنیم که انتقالهای مجاز برای تابش الکترو مغناطیسی که در راستای z قطبی شده است (مولفه ez) عبارتند از: $\Gamma(i) \leftarrow \Gamma(i)$ به ازای $5 \geq i \geq 1$ انتقالهای باقیمانده، تحت تأثیر عملگر ممان دو قطبی الکتریکی ممنوع است، این انتقالها عبارتند از:

$$\Gamma(2), \Gamma(3), \Gamma(4) \leftarrow \Gamma(1); \Gamma(4), \Gamma(3), \Gamma(2) \leftarrow \Gamma(3); \Gamma(4), \Gamma(2) \leftarrow \Gamma(4); \Gamma(3) \leftarrow \Gamma(3).$$

حال قواعد گزینش برای عناصر ماتریسی عملگر ممان دو قطبی الکتریکی بین دو

حالت با تقارنهای معین را در نظر بگیرید. با اعمال شرط ضعیف تر به ضرب مستقیم

نمایشهای کاهش ناپذیر، در بالا دیدیم که انتقالهای $\Gamma(4) \leftarrow \Gamma(5)$ و $\Gamma(5) \leftarrow \Gamma(5)$

مجازند. اما فرض کنید می‌خواهیم ببینیم آیا انتقال از یک حالت $p_1^5 \psi$ به حالت $q_2^5 \psi$ یا

$p_1^4 \psi$ مجاز است یا خیر (نمادگذاری این جا روشن است). عناصر ماتریسی مورد نظر

عبارتند از: $(p_1^5 \psi, \underline{\mu}, q_2^5 \psi)$ و $(p_1^4 \psi, \underline{\mu}, p_1^5 \psi)$. اما $p_1^5 \psi$ مانند x و $\underline{\mu}$ مطابق با

ستون اول $\Gamma(5)$ تبدیل می‌شود و $\underline{\mu}$ دارای سه مولفه است که مطابق $\Gamma(1)$ و دو ستون $\Gamma(5)$

تبدیل می‌شوند. از این رو تابع حاصل ضرب $p_1^5 \psi, \underline{\mu}$ دارای سه قسمت است که می‌توان

آنها را توسط $p_1^5 \psi, x, y$ و $p_1^5 \psi, z$ نمایش داد. با اعمال به تمام عناصر C_{4v} ، به

آسانی مشاهده می‌کنیم، که تابع $p_1^5 \psi, z$ که مانند zx است طبق اولین ستون $\Gamma(5)$ تبدیل

می‌شود، تابع $p_1^5 \psi, y$ مانند xy طبق $\Gamma(2)$ تبدیل می‌گردد (جدول ۳-۳ را ببینید) و

$p_1^4 \psi, x$ مانند x^2 یکی از دو تابعی است که نمایش $\Gamma(1) \oplus \Gamma(3)$ را ایجاد می‌کند [مسأله

(۳-۱۷) را ببینید]. بدین ترتیب، تابع $p_1^5 \psi, \underline{\mu}$ شامل هیچ قسمتی که مطابق $\Gamma(4)$ یا ستون

دوم $\Gamma(5)$ تبدیل شود، نیست. از این رو هر دو عنصر ماتریسی مورد نظر باید صفر شوند و

انتقالات مربوطه ممنوعند. از طرف دیگر، باید روشن باشد که انتقال بین مثلاً ψp_1^5 و ψq_1^5 مجاز است زیرا ψp_1^5 شامل قسمتی است که مطابق اولین ستون $\Gamma(5)$ تبدیل می شود، و این نکته این امر را نیز روشن می سازد که وقتی تست ضعیف تر نتیجه مثبت داد، برای این که ببینیم آیا انتقال واقعاً مجاز است، قسمت قویتر را نیز باید اعمال کرد.

به دست آوردن قواعد گزینش برای انتقالهای ممان دوقطبی مغناطیسی در مسأله ۲-۵ به عهده خواننده گذاشته شده است. می توانیم فقط تذکر دهیم که ممان دوقطبی مغناطیسی یک بردار محوری است. از این رو، مؤلفه های x و y آن باز هم $\Gamma(5)$ را ایجاد می کنند ولی مؤلفه z ام آن $\Gamma(4)$ را ایجاد می کند ۱۳.

۵-۸ تقارن دینامیکی

تاکنون تقارنهایی از سیستمهای فیزیکی را مورد بحث قرار داده ایم که می توان آنها را تحت عنوان تقارنهای هندسی نام گذاری کرد (بجز تقارن انتقال زمانی) زیرا به ساختار هندسی خارجی سیستم مربوط می شوند. این تقارنها شامل: دورانها، انعکاسها و وارونی می شوند. در این بخش یک نوع دیگر از تقارن را بررسی می کنیم که به تقارن داخلی موسوم است و به شکل خاص قانون نیرو یا برهمکنش بین قسمت‌های مختلف سیستم مربوط می شود.

قبلاً در این فصل ارتباط بین تقارن و تبهگنی را مورد بحث قرار دادیم و دیدیم که اگر طیف ویژه مقدار برای مشاهده پذیرهای یک سیستم فیزیکی تبهگنی داشته باشد نوعی تقارن یا تغییرناپذیری به آن سیستم وابسته است. به عنوان مثال هامیلتونین یک الکترون در اتم هیدروژن تحت کلیه دورانها تغییرناپذیر است، بنابراین گروه تقارنی هندسی، گروه $O(3)$ می باشد. بحث فصل گذشته ما می گوید که نمایشهای کاهش ناپذیر $D(2l+1)$

۱۳- یک بردار محوری دارای همان خواص دورانی یک بردار قطبی است ولی تحت وارونی تغییرناپذیر است. یک انعکاس را می توان به صورت یک دوران به اندازه π حول خطی که عمود بر صفحه انعکاس است همراه با وارونی تصور کرد، لذا اثر m_x ، m_y ، σ_u و σ_v روی مؤلفه z ام یک بردار محوری این است که آن را در ۱- ضرب می کند.

بعد می‌باشند بطوری که این تعداد برابر است با تبهگنی ترازهای انرژی الکترون اما می‌دانیم که در واقع همه ترازهای با یک مقدار عدد کوانتومی اصلی n و تمام مقادیر l بین 0 و $n-1$ تبهگن می‌باشند. از این رو تبهگنی 14 واقعی عبارت است از:

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2. \quad (65-5)$$

همان طوری که بزودی خواهیم دید، این تبهگنیا از تقارنهای داخلی اتم هیدروژن سرچشمه می‌گیرد.

عملگرهای گروه تقارنی هندسی آنها می‌باشند که انرژی پتانسیل ذره تحت آنها تغییرناپذیر بماند. لیکن، عملیات دیگری وجود دارد که شامل تبدیل همزمان مختصات و اندازه حرکتها بوده و کل هامیلتون را تغییرناپذیر می‌گذارد. این تقارنها را معمولاً تقارنهای دینامیکی می‌نامیم. در این جا دو مورد نسبتاً ساده اتم هیدروژن و نوسان کننده هارمونیک یکروند، را بررسی خواهیم کرد و خواهیم دید که گروههای تقارنی دینامیکی آنها به ترتیب $O(4)$ و $SU(3)$ می‌باشند. مسلماً گروه تقارنی دینامیکی یک سیستم، گروه تقارنی هندسی را به عنوان یک زیرگروه دربر می‌گیرد.

۵-۸-۱ اتم هیدروژن

یک الکترون در یک اتم هیدروژن مانند، با بار هسته ای Ze دارای انرژی پتانسیل

$$V(r) = -Ze^2/r, \quad (66-5)$$

می‌باشد، که در آن e بار الکتریکی و r فاصله الکترون از هسته می‌باشد. چون انرژی پتانسیل دارای تقارن کروی است، تحت گروه تقارنی هندسی $O(3)$ تغییرناپذیر می‌باشد. هامیلتونین کل یک الکترون در یک اتم هیدروژن مانند عبارت است از:

$$A(r) = \frac{p^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \quad (۶۷-۵)$$

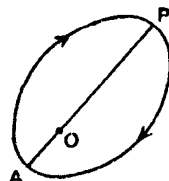
در مکانیک کلاسیک، این همان مسأله کپلر است و می‌دانیم که مسیر کلاسیکی برای ذره‌ای با انرژی پتانسیل (۵-۶۶) یک بیضی است که مرکز جاذبه در یکی از کانونهای آن قرار دارد. باید توجه داشته باشیم که تقارن کروی پتانسیل به تنهایی (صرفاً) برای این که مدار یک ذره بسته باشد کافی نیست، هرچند برای این که مدار در یک صفحه قرار داشته باشد کفایت می‌کند. تنها وقتی پتانسیل کولنی است مدار یک بیضی بسته است، شکل (۵-۵) را ببینید. از این رو در مورد پتانسیل کولن یک تغییر ناپذیر دیگر نظیر بردار OA یا OP داریم. در مکانیک کوانتومی، می‌دانیم که بردار:

$$M' = \frac{1}{2\mu} (p \times L - L \times p) - \frac{Ze^2 r}{r} \quad (۶۸-۵)$$

که به بردار رونج-لنز موسوم است ثابت حرکت می‌باشد، یعنی با هامیلتونین جابجاپذیر است، در این جا L عملگر اندازه حرکت زاویه‌ای است که بر صفحه مدار عمود است. از (۶۸-۵) به آسانی مشاهده می‌کنیم که:



(الف)



(ب)

شکل ۵-۵ مدار یک ذره کلاسیکی حول یک مرکز نیروی O با (الف) یک پتانسیل با تقارن کروی

دلخواه و (ب) یک پتانسیل کولنی به شکل $V(r) = \frac{1}{r}$.

$$M' \cdot L = 0 \quad (۶۹-۵)$$

بنابراین M' برداری است که در صفحه مدار قرار دارد. اندازه حرکت زاویه‌ای مداری با هامیلتونی نیز جابجاپذیر است و لذا یک ثابت حرکت است. از این رو داریم:

$$[M', \mathcal{H}] = 0, [L, \mathcal{H}] = 0. \quad (۷۰-۵)$$

با استفاده از روابط جابجایی بین عملگرهای Γ و p ، می‌توانیم، بعد از محاسبه نسبت طولانی، نشان دهیم که:

$$M'^2 = \frac{2\mathcal{H}}{\mu} (L^2 + \hbar^2) + Z^2 e^4. \quad (۷۱-۵)$$

اکنون شش عملگر داریم (سه مولفه L و سه مولفه M') که با تغییرناپذیریهای مسأله موردنظر متناظرند. می‌توانیم از این عملگرها برای ایجاد تبدیلات یکانی^{۱۵} [مانند (۴-۱۹)] استفاده کنیم که هامیلتونی به خاطر (۷۰-۵) تحت آنها تغییرناپذیر بماند. بدین جهت، بر طبق نظریه گروه‌های پیوسته که در فصل قبل شرح دادیم، روابط جابجایی بین مولفه‌های M' و L را پیدا می‌کنیم. تعداد پانزده رابطه جابجایی داریم که آنها را به صورت پنج معادله در زیر آورده‌ایم، هر یک معرف سه معادله است که از جایگشت‌های دوره‌ای x ، y و z حاصل می‌شود:

$$\begin{aligned} [L_x, L_y] &= i \hbar L_z, [M_x', L_x] = 0, [M_x', L_y] = i \hbar M_z', \\ [M_x', L_z] &= -i \hbar M_y', [M_x', M_y'] = -\frac{2i \hbar}{\mu} \mathcal{H} L_z. \end{aligned} \quad (۷۲-۵)$$

مولفه‌های L به تنهایی یک جبر بسته تشکیل می‌دهند و همان طوری که در فصل گذشته دیدیم، می‌توانند برای ایجاد گروه لی $O(3)$ به کار روند. اما همان‌گونه که معادلات (۷۲-۵) نشان می‌دهند شش عملگر L و M' یک جبر بسته تشکیل نمی‌دهند، زیرا یک عملگر جدید، عملگر هامیلتونی، در روابط جابجایی مولفه‌های M' ظاهر می‌شود. لیکن، بیابید یک تراز انرژی حالت مقید بخصوص ($E < 0$) اتم هیدروژن را در نظر بگیریم و خود را به زیرفضای تغییرناپذیری (از کل فضا) که با ویژه مقدار E متناظر است محدود کنیم. در این زیرفضا می‌توانیم \mathcal{H} را با E جایگزین کنیم و یک عملگر جدید به صورت^{۱۶}:

$$M = (-\mu/2E)^{1/2} M'. \quad (۷۳-۵)$$

۱۵ - این مطلب اولین بار توسط پارولی پیشنهاد شده است.

۱۶ - عملگر M تنها روی زیرفضای متناظر با ویژه مقدار E عمل می‌کند.

تعریف کنیم. در چهار رابطهٔ جابجایی (۵-۷۲) کافی است به جای مولفه‌های M مولفه‌های M' را قرار دهیم. اما رابطه جابجایی آخر به صورت زیر درمی‌آید:

$$[M_x, M_y] = i \hbar L_z. \quad (۷۴-۵)$$

در این صورت بدیهی است که جبر شش عملگر L و M یک جبر بسته است. بدین جهت می‌توان از این شش عملگر یک گروه لی شش پارامتری ساخت که گروه تقارنی دینامیکی اتم هیدروژن می‌باشد.

برای این که نشان دهیم این گروه، گروه $O(4)$ است شش عملگر جدید به صورت زیر معرفی می‌کنیم:

$$J_{ij} = \sum_k \epsilon_{ijk} L_k, \text{ for } i, j, k = x, y, z; \quad (۷۵-۵ \text{ الف})$$

$$J_{iw} = -J_{wi} = M_i. \quad (۷۵-۵ \text{ ب})$$

که در آن ϵ_{ijk} تانسور کاملاً ضدمتقارن از مرتبهٔ سه است. می‌توانیم روابط جابجایی این عملگرها را محاسبه کنیم، نتیجه عبارت است از:

$$\begin{aligned} [J_{xy}, J_{yz}] &= i \hbar J_{zx}, & [J_{xw}, J_{yz}] &= 0, \\ [J_{xw}, J_{zx}] &= i \hbar J_{zw}, & [J_{xw}, J_{yw}] &= i \hbar J_{xy}, \\ [J_{xw}, J_{yx}] &= i \hbar J_{yw}, \end{aligned} \quad (۷۶-۵)$$

که در این جا هم هر معادله معرف سه معادله است که از جایگشت دوره‌ای x ، y و z حاصل می‌شود. شش عملگر $J_{\rho\sigma}$ ($\rho, \sigma = x, y, z, w$) مولدهای بی‌نهایت کوچک یک گروه می‌باشند که شکل مربعی $x^2 + y^2 + z^2 + w^2$ را تغییرناپذیر می‌گذارند، یعنی گروه تبدیلات متعامد حقیقی در فضای برداری چهاربعدی، یا $O(4)$. برای ایجاد دوران در هریک از شش صفحه مختصات یک عملگر داریم.

بهتر است که ترکیبات خطی زیر از L و M را تشکیل دهیم:

$$A = \frac{1}{2} (L + M), \quad B = \frac{1}{2} (L - M), \quad (۷۷-۵)$$

بطوری که روابط جابجایی بین مولفه‌های A و B عبارتند از:

$$\begin{aligned} A \times A &= i \hbar A, & B \times B &= i \hbar B, \\ [A_i, B_j] &= 0 \text{ for } i, j = x, y, z. \end{aligned} \quad (۷۸-۵)$$

به علاوه، چون L و M هر دو با \mathfrak{K} جابجاپذیر هستند، نتیجه می‌شود که A و B نیز با \mathfrak{K} جابجاپذیرند. معادلات بالا نشان می‌دهد که جبرهای لی A و B بطور جداگانه بسته‌اند، بنابراین از هر کدام از آنها می‌توان برای ایجاد گروه $SU(2)$ استفاده کرد. از این جا نتیجه می‌گیریم که $O(4)$ با $SU(2) \otimes SU(2)$ همومورفیک است.

از رابطه (۷۲-۵) مشاهده می‌کنیم که مرتبه $O(4)$ ، بردار ۲ است؛ می‌توانیم هریک از مولفه‌های A و هریک از مولفه‌های B را به عنوان دو مولد جابجاپذیر انتخاب کنیم. بدین ترتیب دو عملگر کاسیمیر که با هر شش مولد جابجاپذیرند، وجود دارد. این دو عملگر A^2 و B^2 یا هر دو ترکیب خطی مستقل آنها می‌باشند. مشابه با نظریه $SU(2)$ ، ویژه مقادیرهای آنها را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$A^2 = a(a+1) \hbar^2, \quad B^2 = b(b+1) \hbar^2, \quad (۷۹-۵)$$

که در آن a و b تمام مقادیر صحیح یا نیمه صحیح غیرمنفی را می‌گیرند. A^2 و B^2 را یک بار با هم جمع و یک بار از هم کم می‌کنیم حاصل می‌شود:

$$C \equiv A^2 + B^2 = \frac{1}{2} (L^2 + M^2), \quad C' \equiv A^2 - B^2 = L \cdot M. \quad (۸۰-۵)$$

با استفاده از (۶۹-۵) و (۷۳-۵)، معادله دوم برابر صفر می‌شود؛ $C' = 0$ ، بنابراین سیستم فیزیکی ما (اتم هیدروژن) تنها با آن بخش از $O(4)$ متناظر است که برای آن $A^2 = B^2$ یا $a(a+1) = b(b+1)$. حل این معادله دو جواب زیر را می‌دهد $a = b$ و $a = -(b+1)$ ؛ لیکن جواب دوم قابل قبول نیست زیرا a و b منحصر به مقادیر غیرمنفی هستند. از این جا نتیجه می‌گیریم که تنها نمایشهایی از $O(4)$ معرف حالت‌های اتم هیدروژن هستند که برای آنها $a = b$ باشد، یعنی نمایشهایی به شکل (a, a) .

در این صورت ویژه مقادیرهای عملگر کاسیمیر C به صورت زیر درمی‌آیند:

$$C = 2a(a+1) \hbar^2. \quad (۸۱-۵)$$

با استفاده از معادلات (۷۱-۵)، (۷۳-۵) و (۸۰-۵)، داریم:

$$\begin{aligned} C &= \frac{1}{2} \left[L^2 - \frac{\mu}{2E} \left\{ \frac{2E}{\mu} (L^2 + \hbar^2) + Z^2 e^4 \right\} \right] \\ &= -\frac{1}{2} \left[\hbar^2 + \frac{\mu Z^2 e^4}{2E} \right]. \end{aligned} \quad (۸۲-۵)$$

و بالاخره استفاده از (۵-۸۱) در معادله بالا به مقدار زیر منجر می‌شود:

$$E = - \frac{\mu Z^2 e^4}{2 \hbar^2 (2a+1)^2} \quad (۵-۸۳)$$

اگر n را به صورت $n = 2a+1$ معرفی کنیم، بطوری که n تمام مقادیر صحیح مثبت را بگیرد، رابطه (۵-۸۳) با نتیجه مکانیک کوانتومی برای ترازهای انرژی الکترون در اتم هیدروژن مطابقت دارد. چون ابعاد نمایش کاهش ناپذیر (a, a) $O(4)$ برابر $(2a+1)^2 = n^2$ است، دلیل تبهگنی مرتبه n^2 ترازها نیز روشن می‌شود.

قبلاً در بخش (۵-۴-۱) این فصل خاطر نشان کردیم که تبهگنیهای طیف ویژه مقداری یک سیستم فیزیکی به ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر گروه تقارنی آن مربوط است. همچنین تذکر دادیم که هرگاه ویژه تابعهای متعلق به نمایشهای کاهش ناپذیر مختلف یک گروه همواره تبهگن باشند، می‌توانیم نتیجه گیری کنیم که بعضی از تقارنهای سیستم را نادیده گرفته ایم و گروه تقارنی سیستم باید از آنچه پیدا کرده ایم بزرگتر باشد. مورد حاضر یک مثال عالی از این وضعیت می‌باشد. بر مبنای گروه $O(3)$ تبهگنیهای مورد انتظار تنها $2l+1$ بودند. اما در واقع امر می‌بینیم که همه ترازهای یک الکترون با مقادیر مختلف l ولی n یکسان همواره تبهگن اند، یعنی، برای هر مقدار n ترازهای با مقادیر مجاز l تبهگن اند. این واقعیت خود پیشنهاد می‌کند که گروه تقارنی اتم هیدروژن بزرگتر از $O(3)$ است هم اکنون دیدیم که هامیلتون اتم هیدروژن تحت $O(4)$ تغییر ناپذیر است و سپس تبهگنیهای صحیح را برای ترازهای انرژی به دست آوردیم.

۵-۸-۲ نوسان کننده هارمونیک یکرند

می‌دانیم که ترازهای انرژی یک نوسان کننده هارمونیک سه بعدی یکرند خیلی تبهگن می‌باشند و تبهگنی هر تراز از آنچه گروه تقارنی هندسی $O(3)$ ایجاد می‌کند بیشتر است. یک بار دیگر خواهیم دید که این امر ناشی از این واقعیت است که گروه تقارنی دینامیکی یک نوسان کننده هارمونیک سه بعدی یکرند گروه $SU(3)$ است.

هامیلتونی یک نوسان کننده هارمونیک یکرند عبارت است از:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \frac{p^2}{2\mu} + \frac{k r^2}{2} \\ &= \frac{1}{2\mu} \sum_{j=1}^3 (p_j^2 + \mu^2 \omega^2 r_j^2), \end{aligned} \quad (۸۴-۵)$$

که در آن $\omega^2 = \frac{k}{\mu}$ و p_j و r_j به ترتیب مؤلفه‌های دکارتی \vec{p} و \vec{r} می‌باشند. برای ویژه مقادیرهای \mathcal{H} از عملگرهای بالا برنده و پایین آورنده که به صورت زیر تعریف می‌شوند استفاده خواهیم کرد:

$$\begin{aligned} a_j &= \frac{1}{(2\mu \hbar \omega)^{1/2}} (p_j - i\omega \mu r_j), \\ a_j^\dagger &= \frac{1}{(2\mu \hbar \omega)^{1/2}} (p_j + i\omega \mu r_j). \end{aligned} \quad (۸۵-۵)$$

با استفاده از روابط جابجایی بین p_i و r_j ، روابط جابجایی بین a_i و a_j^\dagger می‌توان به صورت زیر به دست آورد:

$$\begin{aligned} [a_i, a_j^\dagger] &= \delta_{ij}, \\ [a_i, a_j] &= [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0. \end{aligned} \quad (۸۶-۵)$$

اگر در (۸۴-۵) به جای p_i و r_i از (۸۵-۵) قرار دهیم، هامیلتونی به صورت زیر درمی‌آید:

$$\mathcal{H} = \hbar \omega \sum_j (a_j^\dagger a_j + \frac{1}{2}) = \frac{\hbar \omega}{2} \sum_j \{a_j^\dagger, a_j\}, \quad (۸۷-۵)$$

که در آن $\{A, B\} = AB + BA$ معرف رابطه ضد جابجایی A و B می‌باشد. سپس، روابط جابجایی عملگرهای بالا برنده و پایین آورنده با هامیلتونی به صورت زیر خواهد بود:

$$[\mathcal{H}, a_i^\dagger] = \hbar \omega a_i^\dagger, \quad [\mathcal{H}, a_i] = -\hbar \omega a_i. \quad (۸۸-۵)$$

عملگر عدد اشغال $a_i^\dagger a_i$ دارای ویژه مقادیرهای n_i است، که در آن n_i می‌تواند هر

عدد صحیح غیر منفی را بگیرد. از این رو ویژه مقادیرهای هامیلتونی (۸۷-۵) عبارتند از:

$$E_n = \left(n + \frac{3}{2}\right) \hbar \omega, \quad (۸۹-۵)$$

که در آن:

$$n = n_1 + n_2 + n_3; \quad n_1, n_2, n_3 = 0, 1, 2, \dots \quad (90-5)$$

در این صورت بسادگی می‌توان نشان داد که تبه‌گنی تراز E_n برابر است با 1^{ν} :

$$\frac{(n+1)(n+2)}{2}$$
 می‌توان با استفاده از روابط (۵-۸۵) عملگر اندازه حرکت زاویه‌ای را محاسبه کرد:

$$L_j = (\mathbf{r} \times \mathbf{p})_j = \frac{i\hbar}{2} \sum_{k,l=1}^3 \epsilon_{jkl} (a_k a_l^\dagger - a_k^\dagger a_l) \quad (91-5)$$

به علاوه می‌توان نشان داد که عملگرهای از نوع $a_i^\dagger + a_j$ با هامیلتونی جابجاپذیرند. عملگر $a_i^\dagger + a_j$ دارای این اثر است که یک کوانتوم را از راستای j به راستای i تبدیل می‌کند و لذا تعداد کل کوانتاها را بدون تغییر می‌گذارد. تعداد این عملگرها نه است و می‌توان نشان داد که این عملگرها جبر $U(3)$ را ایجاد می‌کنند. از رابطه (۵-۸۷) مشاهده می‌کنیم که عملگر تعداد کل کوانتومها به صورت زیر است:

$$\sum_{i=1}^3 a_i^\dagger a_i = \frac{\mathcal{H}}{\hbar\omega} - \frac{3}{2} \quad (92-5)$$

ولذا با عملگرهای $a_i^\dagger + a_j$ جابجاپذیر است. هشت ترکیب خطی مستقل دیگر از عملگرهای $a_i^\dagger + a_j$ می‌توان تشکیل داد. اینها جبر $SU(3)$ را ایجاد می‌کنند و عبارتند از:

$$\begin{aligned} \lambda_1 &= a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1, & \lambda_2 &= -i(a_1^\dagger a_2 - a_2^\dagger a_1), \\ \lambda_3 &= a_1^\dagger a_1 - a_2^\dagger a_2, & \lambda_4 &= a_1^\dagger a_3 + a_3^\dagger a_1, \\ \lambda_5 &= -i(a_1^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_1), & \lambda_6 &= a_2^\dagger a_3 + a_3^\dagger a_2, \\ \lambda_7 &= -i(a_2^\dagger a_3 - a_3^\dagger a_2), & \lambda_8 &= \frac{1}{\sqrt{3}}(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 - 2a_3^\dagger a_3) \end{aligned} \quad (93-5)$$

به عنوان تمرین نشان دهید که عملگرهای فوق در روابط جابجایی (۴-۱۰۶) صدق می‌کنند. از این رو گروه تقارنی دینامیکی یک نوسان کننده هارمونیک سه بعدی یکروند، 1^8 گروه $SU(3)$ است.

۱۷ - این تعداد عبارت است از تعداد طرق مختلفی که می‌توان یک عدد صحیح مثبت را به صورت مجموع سه عدد صحیح غیر منفی تجزیه کرد.

۱۸ - گروه تقارنی یک نوسان کننده هارمونیک n بعدی یکروند، گروه $SU(n)$ است.

۹-۵- تقارنهای وارونی زمانی و وارونی فضایی

در این فصل چند گروه پیوسته مهم نظیر گروههای انتقالهای فضایی و زمانی و دورانهای تعمیم یافته در فضای برداری n بعدی (حقیقی یا مختلط) را بررسی کرده ایم. در این بخش دو تقارن دیگر را که بسیاری از سیستمهای فیزیکی دارا می باشند بررسی می کنیم. این تقارنها، تقارن وارونی زمانی و تقارن وارونی فضایی^{۱۹} است این تقارنها چند پیامد بسیار جالب به همراه دارند.

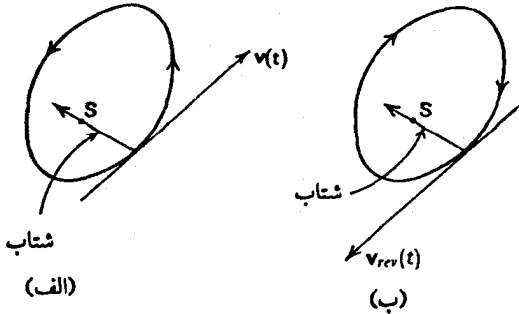
۹-۵-۱- تقارن وارونی زمانی

بسیاری از سیستمهای فیزیکی در اثر وارون کردن راستای زمان تغییرناپذیری مانند. این امر هم در مورد سیستمهای کلاسیکی و هم سیستمهای مکانیک کوانتومی صادق است. بنابراین، در مکانیک کلاسیک یک سیستم که در آن فقط نیروهای کنسرواتیو (مستقل از سرعت) وجود دارد تحت عمل وارونی زمانی تغییرناپذیرند. چون نیرو برابر است با جرم ضربدر شتاب و شتاب مشتق دوم بردار مکان نسبت به زمان می باشد، اگر t را به $-t$ تبدیل کنیم، نیرو تغییر نمی کند. لیکن اگر یک ذره در محیطی با اصطکاک یا چسبندگی حرکت کند، از طرف محیط به ذره نیروهای وابسته بسرعت وارد می شود؛ اگر این وابستگی شامل توانهای فردی از سرعت باشد، حرکت ذره تحت وارونی زمانی تغییرناپذیر نیست.

در یک سیستم با تقارن وارونی زمانی، پس از عمل وارونی زمان مسیر ذره همان مسیر اولیه است درحالی که راستای حرکت ذره معکوس می شود. چون سرعت مشتق اول بردار مکان نسبت به زمان است، وارون می شود. به عنوان مثال، در مسأله کپلر کلاسیک حرکت یک سیاره حول خورشید، اگر جهت زمان را معکوس کنیم مدار سیاره تغییر نمی کند ولی جهت حرکت سیاره معکوس می شود (شکل ۵-۶ را ببینید).

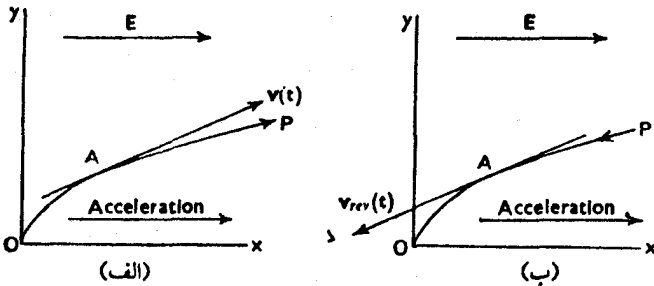
این امر در مورد یک ذره باردار در میدان الکتریکی نیز صادق است زیرا نیروی وارد

۱۹- بعضی از مؤلفین این تقارن را تقارن انعکاس فضایی نیز می نامند.

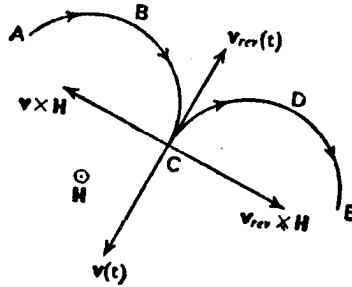


شکل ۵-۶ مسیر یک سیاره حول خورشید S . سرعت سیاره بعد از وارونی زمان در (ب) عبارت است از: $v_{rev}(t) = -v(t)$ که در آن $v(t)$ سرعت قبل از وارونی زمان در (الف) است. شتاب تحت وارونی زمانی تغییر ناپذیر است.

بر ذره باردار واقع در میدان الکتریکی \vec{E} $q\vec{E}$ می باشد (که در آن q بار الکتریکی و \vec{E} میدان الکتریکی است) که مستقل از سرعت ذره است (شکل ۵-۷). لیکن حرکت یک ذره باردار در میدان مغناطیسی تحت وارونی زمان تغییر ناپذیر نیست. علت این است که میدان مغناطیسی نیروی متناسب با $\vec{H} \times \vec{v}$ بر ذره وارد می کند (که \vec{v} سرعت ذره و \vec{H} میدان مغناطیسی است) که شامل توان اول سرعت است (شکل ۵-۸ را ببینید).



شکل ۵-۷ (الف) مسیر OAP یک ذره باردار در یک میدان الکتریکی \vec{E} که در راستای محور x هاست و مولفه سرعت ذره در راستای محور y ها ثابت است. (ب) وقتی وارونی زمانی در نقطه P اعمال شود، ذره مسیر PAO را برمی گردد.



شکل ۵-۸ یک ذره باردار در میدان مغناطیسی \vec{H} یک مسیر دایره ای ABC طی می کند (\vec{H} بر صفحه عمود است و توسط \cdot نمایش داده شده است). وقتی وارونی زمانی در نقطه C اعمال شود، سرعت لحظه ای معکوس می شود و جهت نیروی $\vec{v} \times \vec{H}$ عوض می شود. ذره مسیر اولیه اش را برنمی گردد و سیستم تحت وارونی زمان تغییرناپذیر نیست.

۵-۹-۲ عملگر وارونی زمانی برای ذرات بدون اسپین

یک ذره در پتانسیل استاتیک $V(r)$ را در نظر بگیرید. هامیلتونی کلاسیک آن عبارت است از:

$$\mathcal{H}(p, r) \equiv \frac{p^2}{2m} + V(r) = \mathcal{H}(-p, r). \quad (۹۴-۵)$$

چون هامیلتونی به صورت مربعی به اندازه حرکت بستگی دارد، لذا تابع درجه دومی از سرعت می باشد و در نتیجه تحت وارونی زمانی تغییرناپذیر است. در این صورت واضح است که اگر $\vec{r} = \vec{r}(t)$ یک جواب معادله حرکت ذره باشد، $\vec{r}_{rev}(t) = \vec{r}(-t)$ نیز یک جواب معادله است. مکان ذره در لحظه t در یک جواب، همان مکان ذره در لحظه $-t$ در جواب وارونی زمانی خواهد بود. سرعت و اندازه حرکت ذره در یک جواب مختلف علامت با جوابهای نظیر وارونی زمانی خواهند بود.

بدین ترتیب، تبدیلی از متغیرهای دینامیکی را تعریف می کنیم که تحت آن \vec{r} و \vec{p} به ترتیب به \vec{r} و $-\vec{p}$ تبدیل شوند. این تبدیل را که وارونی زمانی نامیده می شود با T نمایش می دهیم و دارای خواص زیر است:

$$T r T^{\dagger} = r, \quad T p T^{\dagger} = -p. \quad (۹۵-۵)$$

حال یک سیستم مکانیک کوانتومی در نظر بگیرید که توسط معادله شرودینگر وابسته به زمان زیر توصیف می‌شود:

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (96-5)$$

با جایگزین کردن t توسط $-t$ و مزدوج کردن طرفین معادله داریم:

$$i \hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(\mathbf{r}, -t) = \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \psi^*(\mathbf{r}, -t). \quad (97-5)$$

این معادله نشان می‌دهد که اگر $\psi(\vec{r}, t)$ یک جواب معادله شرودینگر باشد $\psi^*(\vec{r}, -t)$ نیز یک جواب معادله خواهد بود. بنابراین دقیقاً همان طوری که حالت $\psi(\vec{r}, t)$ در جهت $-t$ تحول می‌یابد، حالت $\psi^*(\vec{r}, -t)$ در جهت $+t$ تحول خواهد یافت.

بدین ترتیب ملاحظه می‌کنیم که، برای ذرات بدون اسپین، عملگر مزدوج مختلط، که آن را توسط K نمایش می‌دهیم، دارای این تأثیر است که جهت تحول زمان را وارون می‌سازد. این مطلب را از این واقعیت نیز می‌توان دریافت که در نمایش معمولی مکانیک موجی ماتریسهای \vec{r} و \vec{p} به ترتیب حقیقی و موهومی محضند، بنابراین عملگر مزدوج مختلط K دارای تأثیر زیر روی \vec{r} و \vec{p} است:

$$K \mathbf{r} K^\dagger = \mathbf{r}, \quad K \mathbf{p} K^\dagger = -\mathbf{p}. \quad (98-5)$$

بنابراین، برای ذرات بدون اسپین، عملگر وارونی زمانی بجز در یک ضریب فاز همان عملگر مزدوج مختلط است. اگر ضریب فاز را واحد انتخاب کنیم، داریم:

$$T = K. \quad (99-5)$$

عمل T روی یک تابع موج، مزدوج مختلط آن تابع را می‌دهد، لذا:

$$T \psi(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r}). \quad (100-5)$$

در این صورت تغییرناپذیری هامیلتونی تحت تبدیل $\vec{p} \rightarrow -\vec{p}$ معادل است با این که بگوییم هامیلتونی با T جابجاپذیر است، یعنی:

$$[T, \mathcal{H}] = 0. \quad (101-5)$$

باتوجه به این که $\vec{p} = -i \hbar \nabla$ ، مشاهده می‌کنیم که (۱۰۱-۵) وقتی برقرار است که \mathcal{H}

شامل توانهای فرد \vec{p} نباشد، یعنی، k حقیقی باشد، همان طور که برای سیستمهای فیزیکی پایدار این چنین است.

واضح است که عملگر وارونی زمانی یک عملگر خطی نیست. در واقع یک عملگر ضد یکانی است (که ترکیب یک عملگر ضد خطی و یک عملگر یکانی می باشد). بنابراین یک عملگر T که روی یک فضای برداری L عمل می کند ضد یکانی است اگر برای هر ψ و ϕ متعلق به L ($\psi, \phi \in L$) داشته باشیم:

$$(T\phi, T\psi) = (\psi, \phi) = (\phi, \psi)^*, \quad (5-102 \text{ الف})$$

$$T(a\phi + b\psi) = a^* T\phi + b^* T\psi, \quad (5-102 \text{ ب})$$

که در آن a و b اسکالر می باشند. عملگر مزدوج مختلط K نیز یک عملگر ضد یکانی است.

۵-۹-۳ عملگر وارونی زمانی برای ذرات با اسپین

اگر بخواهیم مفهوم وارونی زمانی را به عام ترین حالت ذرات که دارای اندازه حرکت زاویه ای هستند تعمیم دهیم، لازم است خواص تبدیلی اندازه حرکت زاویه ای تحت عملگر وارونی زمانی را بدانیم. از (۵-۹۲) می بینیم که اندازه حرکت زاویه ای مداری برطبق رابطه زیر تبدیل می شود:

$$T(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) T^\dagger = -(\mathbf{r} \times \mathbf{p}), \quad (5-103)$$

یعنی، اندازه حرکت زاویه ای مداری با عملگر وارونی ضد جابجاپذیر است. چون اسپین یک اندازه حرکت زاویه ای است انتظار داریم که آن نیز با T ضد جابجاپذیر باشد، بنابراین اگر S و J به ترتیب عملگرهای اندازه حرکت زاویه ای اسپینی و اندازه حرکت زاویه ای کل باشند، داریم:

$$T S T^\dagger = -S, \quad T J T^\dagger = -J. \quad (5-104)$$

در نمایش استاندارد (\vec{r}, S_z) که در آن مولفه z ام عملگر اندازه حرکت زاویه ای قطری است، ماتریسهای معرف S_x و S_y حقیقی اند درحالی که ماتریس معرف S_y موهومی محض

است^{۲۰}. از این رو عمل عملگر مزدوج مختلط به صورت زیر خواهد بود:

$$Ks_x K^\dagger = s_x, Ks_y K^\dagger = -s_y, Ks_z K^\dagger = s_z. \quad (105-5)$$

پس برای یک ذره با اسپین می‌توانیم بنویسیم:

$$T = UK, \quad (106-5)$$

و چون K^2 برابر همانی است، داریم:

$$TK = U, \quad (107-5)$$

که در آن U باید تعیین شود. باتوجه به معادلات (۹۵-۵)، (۹۸-۵)، (۱۰۴-۵) و

(۱۰۵-۵) اثر تبدیل یکانی U به صورت زیر می‌باشد:

$$U \mathbf{r} U^\dagger = \mathbf{r}, U \mathbf{p} U^\dagger = \mathbf{p}, \quad (108-5)$$

$$Us_x U^\dagger = -s_x, Us_y U^\dagger = s_y, Us_z U^\dagger = -s_z.$$

چون U هم با $\vec{\Gamma}$ و هم با \vec{p} جابجایی پذیر است، تنها روی متغیرهای اسپینی ذره اثر می‌گذارد.

درواقع سه معادله آخر (۱۰۵-۵) نشان می‌دهند که U متناظر است با یک دوران به اندازه π

حول محوری y در فضای اسپینی ذره عملگر با یک چنین دورانی را می‌توان برطبق (۴-۴۶)

به صورت زیر نوشت:

$$U = \exp(-i\pi s_y / \hbar), \quad (109-5)$$

که از آن جا داریم:

$$T = \exp(-i\pi s_y / \hbar) K. \quad (110-5)$$

در مورد خاص یک ذره با اسپین $\frac{1}{2}$ ، $s_y = \frac{1}{2} \hbar \sigma_y$ و از (۴-۲۹) نتیجه می‌شود

که:

$$\exp(-i\pi \sigma_y / 2) = -i\sigma_y, \quad (111-5)$$

بنابراین:

$$T = -i\sigma_y K. \quad (112-5)$$

نتیجه فوق را می‌توان به آسانی به یک سیستم n ذره‌ای با اندازه حرکت‌های زاویه‌ای

اسپینی دلخواه تعمیم داد. اگر s_i معرف اندازه حرکت زاویه ای اسپینی ذره i ام باشد، می توانیم T را به صورت حاصلضرب U های مربوط به هر ذره در K بنویسیم. بنابراین:

$$T = \exp(-i\pi s_{1y}/\hbar) \dots \exp(-i\pi s_{ny}/\hbar) K, \quad (113-5)$$

که در آن S_{iy} مؤلفه y ام S_i است. چون هریک از S_{iy} ها موهومی محض است، هرکدام از اکسپونانسیلها در (۱۱۳-۵) حقیقی است و لذا با K جابجاپذیر می باشد. به علاوه S_{iy} ها با یکدیگر نیز جابجاپذیرند، زیرا عملگر S_{iy} تنها روی متغیرهای اسپینی ذره i ام عمل می کند. لذا ترتیب جملات در (۱۱۳-۵) اهمیتی ندارد.

۵-۹-۴ قضیه کرامر

اگر عملگر (۱۱۳-۵) را مجذور کنیم، داریم:

$$T^2 = \exp(-2i\pi s_{1y}/\hbar) \dots \exp(-2i\pi s_{ny}/\hbar). \quad (114-5)$$

هر عامل در طرف راست معادله فوق معرف یک دوران به اندازه 2π است. عامل i ام بسته به این که اسپین ذره i ام مضرب صحیح یا نیمه صحیحی از \hbar باشد برابر 1 یا -1 خواهد بود. بدین ترتیب، بسته به این که تعداد ذرات با اسپین نیمه صحیح در سیستم زوج یا فرد باشد، T^2 برابر 1 یا -1 است.

همان طور که قبلاً در این بخش بحث شد، اگر ψ یک ویژه تابع سیستم (که دارای تقارن وارونی زمانی است) باشد، در این صورت $T\psi$ نیز یک ویژه تابع است. بنابراین با فرض این که ψ یک ویژه تابع غیرتبهگن باشد، $T\psi$ باید مضربی از ψ باشد.

$$T\psi = c\psi. \quad (115-5)$$

با اعمال مجدد T ، داریم:

$$T^2\psi = T[c\psi] = c^*T\psi = c^*c\psi. \quad (116-5)$$

بنابراین، اگر $T^2 = +1$ باشد در این صورت $|c|^2 = 1$ و لذا c یک ضریب فاز است. اما اگر $T^2 = -1$ باشد، در این صورت نمی توان عددی برای c یافت بطوری که داشته باشیم $|c|^2 = -1$ ، بنابراین ویژه تابع $T\psi$ باید مستقل خطی از ψ باشد. چون ψ و $T\psi$ دارای یک ویژه مقدارند، لااقل تبهگنی مرتبه ۲ داریم. چون ψ و $T\psi$ ویژه بردارهای

مستقلند و چون $\psi = -T^2 \psi$ مضربی از ویژه بردار اولیه ψ می باشد، تبهگنی تراز باید زوج باشد. بدین ترتیب به قضیه کرامر می رسیم. که بنا به آن درجه تبهگنی همه ترازهای انرژی یک سیستم با تعداد فردی الکترون در حضور یک میدان الکتریکی ولی در غیاب میدان مغناطیسی زوج است. این قضیه، به تبهگنی کرامر موسوم است.

به علاوه می توانیم نشان دهیم که وقتی $T^2 = -1$ باشد، ψ و $T\psi$ متعامدند. برای این منظور، در (۵-۱۰۲ الف) به جای ϕ ، $T\psi$ قرار می دهیم، داریم:

$$\begin{aligned} (T^2\psi, T\psi) &= (\psi, T\psi), \\ -(\psi, T\psi) &= (\psi, T\psi), \end{aligned} \quad \text{یا}$$

زیرا $T^2 = -1$ است. این رابطه نشان می دهد که $(\psi, T\psi) = 0$ و لذا ψ و $T\psi$ متعامدند.

باید تأکید کنیم که تبهگنی کرامر با اعمال یک میدان مغناطیسی خارجی بر طرف می شود. این کار جملاتی از نوع $\vec{\nabla} \times \vec{H}$ ، $\vec{L} \cdot \vec{H}$ یا $\vec{s} \cdot \vec{H}$ در هامیلتونی وارد می کند و این جملات تحت وارونی زمانی تغییرناپذیر نیستند. لذا میدان مغناطیسی خارجی تقارن وارونی زمانی را به هم می زند.

ممکن است سؤال شود که تأثیر میدانهای داخلی چیست؟ یک سیستم که شامل ذرات باردار متحرك است همواره میدان مغناطیسی داخلی دارد. آیا این میدانها تقارن وارونی زمانی سیستم را به هم می زنند؟ جواب منفی است. دلیل آن این است که وقتی وارونی زمانی به یک چنین سیستمی اعمال شود، سرعتهای تمام ذرات باردار معکوس می شود و جهت جریانها و در نتیجه جهت میدانهای مغناطیسی داخلی نیز عوض می شود. این امر باعث می شود که جملاتی نظیر $\vec{\nabla} \times \vec{H}$ ، $\vec{L} \cdot \vec{H}$ یا $\vec{s} \cdot \vec{H}$ (که در این جا \vec{H} میدان مغناطیسی داخلی است) تحت وارونی زمان تغییرناپذیر بمانند. بنابراین وقتی تقارن وارونی زمانی را مورد بررسی قرار می دهیم لزومی ندارد نگران میدانهای مغناطیسی داخلی باشیم. به همین دلیل است که جملات برهمکنشی نظیر برهمکنشهای اسپین-مدار و

۲۱- البته، این که یک میدان مغناطیسی را میدان داخلی یا خارجی در نظر بگیریم به نحوه تعریف

اسپین - اسپین تقارن وارونی زمانی هامیلتونی را به هم نمی‌زنند.

۵-۹-۵ تقارن وارونی فضایی

اثر عملگر وارونی فضایی این است که مختصات مکانی تمام ذرات سیستم را وارون می‌کند و اثری روی متغیرهای اندازه حرکت زاویه ای ذرات ندارد. این عملگر را قبلاً در بخش ۵-۵-۲ معرفی کردیم و آن را با J نمایش دادیم. در آن جا دیدیم که اگر هامیلتونی یک سیستم دارای تقارن وارونی باشد ویژه تابعها را می‌توان طوری انتخاب کرد که یا صرفاً زوج و یا صرفاً فرد باشند. به عبارت دیگر، ویژه تابعها دارای پاریته معین هستند.

فرض کنید $\psi(\vec{r})$ یک تابع دلخواه باشد و $\psi'(\vec{r})$ تابعی باشد که پس از اعمال وارونی فضایی روی $\psi(\vec{r})$ به دست آمده است. در این صورت:

$$\psi'(J\mathbf{r}) = w\psi(\mathbf{r}), \quad (۱۱۷-۵)$$

که در آن w عددی است که بزودی درباره آن بحث خواهیم کرد. این واقعیت که عدد w در (۱۱۷-۵) ظاهر می‌شود ولی در (۵-۲۲) یا (۵-۳۰) وجود ندارد نتیجه طبیعت گسسته تبدیل وارونی فضایی است. همچنین داریم:

$$U_J \psi(\mathbf{r}) = \psi'(\mathbf{r}) = w\psi(-\mathbf{r}), \quad (۱۱۸-۵)$$

که در آن در مرحله آخر از (۱۱۷-۵) استفاده کرده ایم و J عملگری است که در بخش ۵-۵-۲ تعریف شده است. اعمال مجدد J به (۱۱۸-۵) می‌دهد:

$$U_J^2 \psi(\mathbf{r}) = w U_J \psi(-\mathbf{r}) = w^2 \psi(\mathbf{r}). \quad (۱۱۹-۵)$$

دو عمل وارونی دستگاه مختصات اولیه را می‌دهد، بنابراین نرم تابع $\psi(\vec{r})$ نمی‌تواند در اثر اعمال J^2 تغییر کند؛ می‌تواند حداکثر در یک ضریب فاز با قدر مطلق واحد ضرب شود. لذا w^2 و از آن جا w باید یک عدد مختلط با قدر مطلق واحد باشد. اکنون نشان می‌دهیم که بسته به این که اسپین سیستم عدد صحیح یا نیمه صحیح باشد w^2 برابر $+۱$ یا -۱ است.

فرض کنید G گروه تقارنی سیستم (تقارن وارونی فضایی مستثنا شده است) و $\psi(\vec{r})$ یکی از توابع پایه برای ایجاد یک نمایش معین G باشد. اگر اسپین کل سیستم عدد صحیح

باشد، نمایشهای G تک مقداری اند و عنصر همانی E تنها با ماتریس واحد نمایش داده می‌شود. لذا $\psi = \psi = \psi = E \psi = U_j^2 \psi$ و از (۵-۱۱۹) نتیجه می‌شود که $w^2 = 1$ یا $w = \pm 1$. لیکن اگر اسپین کل سیستم عدد نیمه صحیحی باشد گروه G نمایشهای دو مقداری نیز دارد. در این مورد عنصر همانی متناظر با دو ماتریس، ماتریس واحد و منهای ماتریس واحد است. از این رو داریم: $\vec{r} \psi = \pm \vec{r} \psi = E \vec{r} \psi = U_j^2 \vec{r} \psi$ ، بنابراین $w^2 = \pm 1$ و $w = 1, -1, i, -i$.

انتظار داریم که هر نوع ذره یک مقدار معین w داشته باشد. توجه کنید که تمام نتایج بامعنی فیزیکی نظیر قواعد انتخاب و غیره به انتخاب w بستگی ندارند، زیرا تمام کمیت‌های قابل مشاهده فیزیکی شامل حاصلضربهایی نظیر $\psi_i^* \psi_j$ (که ψ_i و ψ_j حالت‌های مختلف ذره اند) می‌باشند که دارای ضریب $w = +1$ می‌باشند.

اگر در اثر وارونی فضایی یک تابع تغییرناپذیر بماند ($w = +1$)، گوییم این تابع دارای پاریته زوج است و ذره‌ای که توسط یک چنین تابعی نمایش داده شود یک ذره اسکالر نامیده می‌شود. برعکس اگر یک تابع در اثر وارونی فضایی تغییر علامت دهد ($w = -1$)، گوییم دارای پاریته فرد است و ذره‌ای که توسط آن نمایش داده می‌شود یک ذره شبه اسکالر نامیده می‌شود. براساس قرارداد جاری، به نوکلئون‌ها پاریته زوج و به پایونها پاریته فرد منتسب می‌کنیم.

مسائل فصل پنجم

۱-۵. مولدهای گروه جابجاییهای فضایی و گروه جابجاییهای زمانی چیست؟

۲-۵. اگر گروه تقارنی C_{4v} باشد قواعد انتخاب انتقال‌های دو قطبی مغناطیسی را

پیدا کنید.

۳-۵. اگر گروه تقارنی C_{3v} باشد، قواعد انتخاب انتقال‌های دو قطبی الکتریکی و

دو قطبی مغناطیسی را پیدا کنید.

۴-۵. (الف) روابط جابجایی (۵-۸۸) را ثابت کنید.

(ب) نشان دهید که a_i, a_j با هامیلتونی (۵-۸۷) جابجاپذیر است.

۵-۵. نشان دهید عملگرهای روابط (۵-۹۳) در قراعد جابجایی (۴-۱۰۶) از

$SU(3)$ با همان ثابتهای (۴-۱۰۷)، صدق می کنند.

۵-۶. نشان دهید گروه تقارنی دینامیکی یک نوسانگر هارمونیک یکروند دوبعدی،

گروه $SU(2)$ است.

۵-۷. فرض کنید $G = (R, S, T, \dots)$ گروه تبدیلاتی باشد که یک سیستم

فیزیکی را بدون تغییر می گذارد. همچنین فرض کنید P_R, P_S و ... عملگرهای متناظری

باشند که روی توابع عمل می کنند و هامیلتونی سیستم را بدون تغییر می گذارند. نشان

دهید، عملگرهای P_R, P_S و ... نیز تشکیل گروهی می دهند که با گروه G ایزومرفیک

است. [راهنمایی: با استفاده از (۵-۲۱) نشان دهید که اگر P_R متناظر با R و R_S متناظر

با S باشد، آنگاه $P_R P_S$ متناظر با R_S خواهد بود.]

کتابشناسی فصل پنجم

Bhagavantam and Venkatarayudu (1969); Englefield (1972); Eyring, Walter and Kimball (1944); Falicov (1967); Fonda and Ghirardi (1970); Gottfried (1966); Hamermesh (1964); Heine (1960); Kahan (1965); Lipkin (1965); Lyubarskii (1960); Meijer and Bauer (1962); Messiah (1965), Chapter 15; Schiff (1968) Chapter 7; Tinkham (1964); Wigner (1959).

نظریه گروهها در مکانیک کوانتومی (ب)

خواص تقارنی اتمها در مطالعه ساختار آنها نقش بسیار مهمی ایفا می کنند. چون در اتمها با تعدادی ذرات یکسان و الکترونها مواجهیم، یکی از عناصر تقارنی واضح تقارن جایگشت می باشد. همین مطلب در مورد هسته ها که در آن با چند نوکلئون یکسان مواجهیم نیز صادق است. می دانیم که این امر به این اصل موضوعه هایزبرگ و دیراک منجر شده است که بر طبق آن توابع موج یک سیستم شامل چند فرمیون یکسان باید نسبت به تعویض هر دو تای آنها ضد متقارن باشد و به ما امکان می دهد تا توابع موج را به شکل دترمینانهای اسلاتر نمایش دهیم. اتمها، علاوه بر تقارن جایگشت، تغییر ناپذیریهای دورانی نیز دارند؛ یعنی، تحت تمام عملیات گروه $SO(3)$ در مدل تک ذره ای تغییر ناپذیرند. با وجودی که بسیاری از مسائل اتمی را می توان بدون کمک نظریه گروهها حل کرد ولی وقتی با سیستمی که شامل تعداد زیادی اتم است نظیر مولکولها یا بلورها سروکار داریم استفاده از نظریه گروهها تقریباً اجتناب ناپذیر است. حتی در فیزیک اتمی، روشهای نظریه گروهها ظرافت و کلیتی را فراهم می آورند و نتایج مختلف را می توان در پرتو تعبیر نظریه گروهها بهتر فهمید. در این فصل عمده سه موضوع را مطالعه خواهیم کرد - تقارنهای سیستمهای اتمی، مسأله جمع دو اندازه حرکت زاویه ای و عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر.

۱-۶ تقارنهای اتمی

در این بخش گروههای تقارنی اتمی مهم را بررسی خواهیم کرد، که همان طوری که ذکر کردیم گروه وارونی - دوران سه بعدی و گروه متقارن می باشند. ما در مدل ذره منفرد

کار می‌کنیم که در آن فرض می‌شود هر الکترون در داخل اتم در پتانسیل میانگین هسته و سایر الکترونها حرکت می‌کند. سپس پتانسیل متقارن کروی فرض می‌شود بطوری که هامیلتونین یک الکترون در داخل اتم تحت گروه دوران-وارونی تغییر ناپذیر است.

۶-۱-۱ گروه دوران-وارونی

در فصل چهارم گروه دوران سه بعدی $SO(3)$ و گروه دوران وارونی $O(3)$ را مورد بحث قرار دادیم. در این جا نمایشهای کاهش ناپذیر $O(3)$ را بررسی می‌کنیم. دیدیم که:

$$O(3) = SO(3) \otimes (E, J), \quad (1-6)$$

که در آن J عملگر وارونی است. دو نمایش کاهش ناپذیر گروه (E, J) را با $\Gamma(+)$ و $\Gamma(-)$ نشان می‌دهیم، که در آن:

$$\begin{aligned} \Gamma(+)(X) &= +1, \quad X=E \text{ یا } J; \\ \Gamma(-)(E) &= +1, \quad \Gamma(-)(J) = -1. \end{aligned} \quad (2-6)$$

واضح است که $\Gamma(+)$ نمایش همانی گروه (E, J) است. در این صورت نمایشهای کاهش ناپذیر $O(3)$ عبارتند از: ضربهای مستقیم نمایش کاهش ناپذیر $SO(3)$ و نمایشهای کاهش ناپذیر (E, J) . اگر نمایشهای کاهش ناپذیر $O(3)$ را با $D^{(l, \sigma)}$ نشان دهیم، داریم:

$$D^{(l, \sigma)} = D^{(l)} \otimes \Gamma^{(\sigma)}, \quad (3-6)$$

که در آن σ معرف + یا - است. چون $\Gamma^{(\sigma)}$ ها نمایشهای یک بعدی هستند، ابعاد $D^{(l, \sigma)}$ با ابعاد $D^{(l)}$ یعنی $(2l+1)$ برابر است. بدین ترتیب گروه $O(3)$ از هر مرتبه فرد دارای دو نمایش کاهش ناپذیر متمایز است.

برای به دست آوردن ماتریسهای واقعی نمایش کاهش ناپذیر $D^{(l, \sigma)}$ ، توجه کنید که عناصر $O(3)$ را می‌توان به دو دسته $\{X\}$ و $\{JX\}$ تقسیم کرد، که تمام عناصر گروه $SO(3)$ را می‌گیرد. از این رو ماتریسهای $D^{(l, \sigma)}$ به صورت زیر داده می‌شوند:

$$D^{(l, \sigma)}(EX) = D^{(l)}(X) \otimes \Gamma^{(\sigma)}(E) = D^{(l)}(X), \quad (4-6 \text{ الف})$$

$$D^{(l, \sigma)}(JX) = D^{(l)}(X) \otimes \Gamma^{(\sigma)}(J), \quad (4-6 \text{ ب})$$

بنابراین به ازای تمام X های متعلق به $SO(3)$ ، $(X \in SO(3))$ ،

$$D^{(l,+)}(JX) = D^{(l)}(X), \quad D^{(l,-)}(JX) = -D^{(l)}(X), \quad (۴-۶)$$

رده های $O(3)$ به رده های $SO(3)$ مربوطند. در واقع هر رده $\{R_{\vec{u}}(\alpha)\}$ از $SO(3)$ دو رده از $\{R_{\vec{u}}(\alpha)\} - O(3)$ و $\{J R_{\vec{u}}(\alpha)\}$ را می دهد. مشخصه یک رده در نمایش کاهش ناپذیر $D^{(l, \sigma)}$ را می توان با استفاده از (۴-۶) به دست آورد. داریم:

$$\begin{aligned} \chi^{(l, \sigma)}(E\alpha) &= \chi^{(l)}(\alpha), \\ \chi^{(l, +)}(J\alpha) &= \chi^{(l)}(\alpha), \quad \chi^{(l, -)}(J\alpha) = -\chi^{(l)}(\alpha), \end{aligned} \quad (۵-۶)$$

که در آن $X^{(l)}(\alpha)$ توسط (۴-۵) داده می شود و برای اختصار رده های $O(3)$ را با $(E \alpha)$ و $(J \alpha)$ مشخص کرده ایم. رده $(E \alpha)$ شامل همه دورانها به اندازه α می باشد در حالی که $(J \alpha)$ شامل عناصری است که معرف دورانهای به اندازه α و سپس وارونی می باشند.

بنابراین ویژه تابعهای یک الکترون در اتم ممکن است متعلق به هریک از نمایشهای کاهش ناپذیر $D^{(l, \sigma)}$ باشد. اگر یک ویژه تابع به $D^{(l, +)}$ تعلق داشته باشد، تحت عمل وارونی تغییرناپذیر خواهد ماند و گوئیم که دارای پاریته زوج است، که در اصطلاح طیفی با مثبت یا زوج متناظر است. اگر یک ویژه تابع به $D^{(l, -)}$ تعلق داشته باشد تحت عمل J تغییر علامت می دهد و گوئیم که دارای پاریته فرد است و اصطلاح طیفی متناظر آن منفی یا فرد است. پاریته تابع موج یک سیستم از ذرات به مختصات فضایی ذرات بستگی داشته و به اسپین آنها بستگی ندارد. اندازه حرکت زاویه ای اسپینی (یا هر اندازه حرکت زاویه ای) تحت وارونی مختصات فضایی تغییرناپذیر است.

لیکن تمام نمایشهای کاهش ناپذیر $D^{(l, \sigma)}$ در یک اتم یک الکترونی اتفاق نمی افتد. این امر ناشی از این واقعیت است که توابع موج یک الکترونی چند جمله ایهای همگن درجه l از x, y, z می باشند، که در آن l عدد کوانتومی مداری است. مسلماً در وارونی مختصات که x به $-x$ ، y به $-y$ و z به $-z$ تبدیل می شود یک چنین چند جمله ای در $l(-1)$ ضرب می شود. لذا تنها نمایشهای کاهش ناپذیری که وجود دارند عبارتند از: $D^{(0, +)}$ ، $D^{(1, -)}$ ، $D^{(2, +)}$ ، $D^{(3, -)}$ و غیره، که اصطلاحات طیفی آنها s, p, d, f و غیره می باشند که از نظر پاریته یک در میان باهم برابرند. همان طوری که در زیر خواهیم دید این مطلب در مورد اتمهای چند الکترون صادق نیست. جدول (۶-۱) ترازهای الکترونی

مختلف یک اتم یک الکترونی را همراه با نمایشهای کاهش ناپذیری که ویژه تابعهای آن اتم به آنها تعلق دارند نشان می دهد.

در یک اتم چند الکترونی پاریته تابع موج مرکب همه الکترونها برابر است با $(-1)^k$ که در آن $k = \sum l_i$ و l_i عدد کوانتومی مداری الکترون i ام است. اعداد کوانتومی مداری کل واسپینی کل که با L و S نشان داده می شوند به ترتیب با جمع تک تک l_i های الکترونها باهم و تک تک s_i های الکترونها باهم باروش جمع برداری بدست می آید. در این صورت $M_S = \sum m_{s_i}$ و $M_L = \sum m_{l_i}$ ، در این جا m_{s_i} و m_{l_i} به ترتیب تصویرهای کوانتائی شده \vec{S}_i و \vec{L}_i می باشند، جملات طیفی اتم با مقدار L مشخص می شوند؛ مقادیر $L = 0, 1, 2, 3, \dots$ به ترتیب با نمادهای S, P, D, F, \dots متناظرند.

برخلاف اتم یک الکترونی، توابع S, P, D و غیره یک اتم چند الکترونی ممکن است هریک از پاریته ها را داشته باشند. به عنوان مثال، درحالی که توابع p ی اتم یک الکترونی حتماً باید دارای پاریته فرد باشد، توابع P ی یک اتم چند الکترونی بسته به این که $\sum l_i$ زوج یا فرد باشد می تواند پاریته زوج یا فرد داشته باشد. حال مورد دو الکترون را در نظر می گیریم. اگر هر دو الکترون در لایه p باشند توابع موج آنها برطبق $D^{(1,-)}$ تبدیل می شود. بنابراین تابع موج حاصلضرب برطبق نمایش ضرب مستقیم:

$$D^{(1,-)} \otimes D^{(1,-)} = D^{(0,+)} \oplus D^{(1,+)} \oplus D^{(2,+)} \quad (6-6)$$

تبدیل می شود. این نشان می دهد که اتم می تواند دارای $L = 0$ یا $L = 1$ یا $L = 2$ باشد و در هریک از این حالتها پاریته آن زوج خواهد بود. از طرف دیگر، یک الکترون در لایه p و یکی در لایه d باشد، تابع موج حاصلضرب برطبق رابطه زیر تبدیل خواهد شد:

$$D^{(1,-)} \otimes D^{(2,+)} = D^{(1,-)} \oplus D^{(2,-)} \oplus D^{(3,-)}, \quad (7-6)$$

یعنی، اتم می تواند دارای $L = 1$ ، $L = 2$ یا $L = 3$ باشد و در هر حالت پاریته آن فرد است. از این بررسیها قاعده بسیار مهمی نتیجه می گیریم: درحالی که پاریته تابع موج یک الکترونی به عدد کوانتومی مداری l آن وابسته است، پاریته تابع موج چندالکترونی از عدد کوانتومی مداری کل L مستقل است ولی به مقادیر L الکترونهاي تشکیل دهنده آن بستگی دارد. بعداً در این فصل خواهیم دید که این قاعده در یافتن قواعدگزینش بسیار مورد استفاده قرار می گیرد.

جدول ۱-۶ ترازهای الکترونی اتم یک الکترونی.

نماد	l	پارته	نمایش	تبهگنی ^۱
$1s$	0	زوج	$D(0, +)$	1
$2s$	0	زوج	$D(0, +)$	1
$2p$	1	فرد	$D(1, -)$	3
$3s$	0	زوج	$D(0, +)$	1
$3p$	1	فرد	$D(1, -)$	3
$3d$	2	زوج	$D(2, +)$	5
$4s$	0	زوج	$D(0, +)$	1
$4p$	1	فرد	$D(1, -)$	3
$4d$	2	زوج	$D(2, +)$	5
$4f$	3	فرد	$D(3, -)$	7
.				
.				
.				

۲-۱-۶ تقارن زاویه ای تابع موج و هارمونیکهای کروی

در فصل ۴ دیدیم که $(2l+1) Y_l^m$ هارمونیک کروی $Y_l^m(\theta, \phi)$ ($-l \leq m \leq l$) نمایش کاهش ناپذیر $D^{(l)}$ گروه $SO(3)$ را ایجاد می کنند. ویژه تابعهای یک اتم یک الکترونی به صورت $Y_l^m(\theta, \phi) R_{nl}(r)$ می باشند که $R_{nl}(r)$ مقارن کروی است. لذا وابستگی زاویه ای ویژه تابعها کلاً در هارمونیکهای کروی Y_l^m نهفته است. برای کامل بودن، در این جا چند هارمونیک اول و ویژه تابعهای اتمی مربوطه را می آوریم. جدول (۲-۶) تقارن ویژه تابعها به ازای $l = 0, 1, 2, 3$ و قسمتهای زاویه ای آنها را که با استفاده از تبدیل:

$$x = r \sin \theta \cos \phi, \quad y = r \sin \theta \sin \phi, \quad z = r \cos \theta. \quad (۸-۶)$$

به دست می آیند و روی سطح کره ای به شعاع r معتبرند، نشان می دهد. جدول (۳-۶)

۱- در این جا از اسپین الکترون صرف نظر کرده ایم. اگر اسپین را نیز به حساب آوریم، گروه تقارنی مربوطه به جای $O(3)$ گروه $SU(2)$ خواهد بود و به علاوه باید تبهگنیها را در ۲ ضرب کنیم.

جدول ۶-۲ تقارن زاویه ای ویژه تابعهای اتمی به ازای $l = 0, 1, 2, 3$.

قسمت زاویه ای ویژه تابع	تقارن ویژه تابع	l
constant	$s: 1$	0
$\sin \theta \cos \phi$ $\sin \theta \sin \phi$ $\cos \theta$	$p: \begin{cases} x \\ y \\ z \end{cases}$	1
$\sin^2 \theta \sin 2\phi$ $\sin \theta \cos \theta \sin \phi$ $\sin \theta \cos \theta \cos \phi$ $\sin^2 \theta \cos 2\phi$ $3 \cos^2 \theta - 1$	$d: \begin{cases} xy \\ yz \\ zx \\ x^2 - y^2 \\ 2z^2 - x^2 - y^2 \end{cases}$	2
$5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta$ $\sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) \cos \phi$ $\sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) \sin \phi$ $\sin^2 \theta \cos \theta \cos 2\phi$ $\sin^2 \theta \cos \theta \sin 2\phi$ $\sin^3 \theta \cos 3\phi$ $\sin^3 \theta \sin 3\phi$	$f: \begin{cases} 2z^3 - 3z(x^2 + y^2) \\ x(4z^2 - x^2 - y^2) \\ y(4z^2 - x^2 - y^2) \\ z(x^2 - y^2) \\ xyz \\ x^3 - 3xy^2 \\ 3x^2y - y^3 \end{cases}$	3

ترکیبات خطی این توابع را که با هارمونیکهای کروی درجه l و مرتبه m متناسبند^۲، نشان می دهد. Y_l^m ها یک مجموعه کامل راست هنجار از توابع مجذوراً انتگرال پذیر روی کره واحد، تشکیل می دهند.

۶-۱-۳ گروه متقارن

در بخش (۷-۱) گروه متقارن را معرفی کردیم. در این جا می خواهیم چند خاصیت دیگر این گروهها را بررسی کنیم.

ابتدا ساختار زده ای گروه متقارن S_n را مورد بحث قرار می دهیم. یک راه

جدول ۶-۳ ترکیبات متقارن شده استاندارد که نمایشهای $D^{(l)}$ از گروه $SO(3)$ را ایجاد می‌کنند.

متناسب با هارمونیک کروی	ترکیب خطی	$D^{(l)}$
$Y_0^0 = 1/\sqrt{4\pi}$	1	$D^{(0)}$
$Y_1^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \theta \exp(\pm i\phi)$	$\begin{cases} x \pm iy \\ z \end{cases}$	$D^{(1)}$
$Y_1^0 = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta$		
$Y_2^0 = \sqrt{\frac{5}{16\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$	$\begin{cases} 2z^2 - x^2 - y^2 \\ zx \pm iyz \\ (x^2 - y^2) \pm i(2xy) \end{cases}$	$D^{(2)}$
$Y_2^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \theta \cos \theta \exp(\pm i\phi)$		
$Y_2^{\pm 2} = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \theta \exp(\pm 2i\phi)$		
$Y_3^0 = \sqrt{\frac{7}{16\pi}} (5 \cos^3 \theta - 3 \cos \theta)$	$\begin{cases} 2z^3 - 3z(x^2 + y^2) \\ (x \pm iy)(4z^2 - x^2 - y^2) \\ z(x^2 - y^2) \pm 2ixyz \\ (x^3 - 3xy^2) \pm i(3x^2y - y^3) \end{cases}$	$D^{(3)}$
$Y_3^{\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{21}{64\pi}} \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) \times \exp(\pm i\phi)$		
$Y_3^{\pm 2} = \sqrt{\frac{105}{32\pi}} \sin^2 \theta \cos \theta \exp(\pm 2i\phi)$		
$Y_3^{\pm 3} = \mp \sqrt{\frac{35}{64\pi}} \sin^3 \theta \exp(\pm 3i\phi)$		

مخصوصاً برای یافتن تعداد رده های S_n وجود دارد؛ به این ترتیب که تعداد رده های S_n برابر است با تعداد طرقی که می توان عدد صحیح n را به صورت مجموع اعداد صحیح مثبت نوشت. هر یک از این راه ها بطور منحصر بفردی به یکی از رده های S_n مربوط است. بدین ترتیب، برای $n = 3$ می توانیم عدد ۳ را به صورتهای ۳، ۲+۱ و ۱+۱+۱ بنویسیم و بدین جهت تعداد رده های S_3 برابر ۳ است. رده متناظر با (۳) شامل عناصری است که در آن هر سه عضو را به صورت جایگشت دوره ای تغییر دهیم؛ این عناصر، A و B

که در (۱-۳۶) تعریف شده است می باشند. افزاز $۲+۱$ رده ای را می دهد که عناصر آن از جایگشت دوره ای ۲ عضو (ترانهاده) تشکیل شده درحالی که عضو سوم بدون تغییر بماند؛ با این عناصر S_3 عبارتند از: C, D, F . بالاخره افزاز $۱+۱+۱$ عنصری را می دهد که در آن همه اعضا بدون تغییر می مانند - عنصر همانی. از این رورده های S_3 عبارتند از: $(E), (A, B)$ و (C, D, F) .

برای $n = 4$ ، پنج طریق وجود دارد: $۴, ۳+۱, ۲+۲, ۲+۱+۱, ۱+۱+۱+۱$ افزاز آخر عنصر همانی را می دهد. رده متناظر با افزاز $۲+۱+۱$ شامل عنصری است که در آن یک ترانهاده وجود دارد درحالی که دو عضو باقیمانده بدون تغییرند؛ تعداد ۶ عنصر از این نوع وجود دارد. افزاز $۲+۲$ به معنی دو تعویض زوج می باشد، این رده شامل ۳ عنصر است. عناصر رده متناظر با افزاز $۳+۱$ از جایگشتهای دوره ای سه عضو تشکیل شده درحالی که عضو چهارم ثابت باقی می ماند، تعداد عناصر این رده ۸ می باشد. بالاخره رده متناظر با افزاز ۴ شامل ۶ عنصر باقیمانده است.

مثال - گروه S_4 را در نظر می گیریم و رده های آن را پیدا می کنیم. به جای نمادگذاری بخش $۱-۷$ از نمادگذاری ساده تری استفاده می کنیم، هرچند تعریف یک عملگر همان است که در بخش $۱-۷$ بود. بدین ترتیب یک عنصر از S_4 ، مثلاً (۲۴۳۱) بدین معنی است که عضو دوم در مکان اول، عضو چهارم در مکان دوم عضو سوم در همان محل سوم و عضو اول در مکان چهارم قرار گیرد. به عنوان مثال، جایگشت (۲۴۳۱) روی (۲۳۱۴) برطبق تعریف فوق عبارت است از:

$$(۲۴۳۱)(۲۳۱۴) = (۳۴۱۲)$$

اکنون می توانیم توسط قاعده بالا، رده های S_4 را مستقیماً بنویسیم، افزاز $۱+۱+۱+۱$ جایگشتی را می دهد که در آن هر عضو در محل خودش می ماند، یعنی، عنصر همانی $E = (۱۲۳۴)$ افزاز بعدی که $۲+۱+۱$ است یک رده با شش عنصر A_i می دهد $(1 \leq i \leq 6)$ ، که هر کدام از ترانهاده یک زوج تشکیل شده درحالی که بقیه اعضا بدون تغییرند. این شش ترانهاده که به صورت حاصلضریبهای مولدهای $(۱, ۲), (۱, ۳), (۱, ۴)$ بیان شده اند عبارتند از:

$$\begin{aligned} A_1 &= (1\ 2) \equiv (2\ 1\ 3\ 4), \\ A_2 &= (1\ 3) \equiv (3\ 2\ 1\ 4), \\ A_3 &= (1\ 4) \equiv (4\ 2\ 3\ 1), \\ A_4 &= (2\ 3) \equiv (1\ 3\ 2\ 4) = (1\ 2)(1\ 3)(1\ 2), \\ A_5 &= (2\ 4) \equiv (1\ 4\ 3\ 2) = (1\ 2)(1\ 4)(1\ 2), \\ A_6 &= (3\ 4) \equiv (1\ 2\ 4\ 3) = (1\ 3)(1\ 4)(1\ 3). \end{aligned}$$

افراز بعدی $2+2$ رده (B_1, B_2, B_3) را می‌دهد که هر عنصر آن از دو ترانهاده دو به دو تشکیل شده است که عناصر آن عبارتند از:

$$\begin{aligned} B_1 &= (1\ 2)(3\ 4) \equiv (2\ 1\ 4\ 3) = (1\ 2)(1\ 3)(1\ 4)(1\ 3), \\ B_2 &= (1\ 3)(2\ 4) \equiv (3\ 4\ 1\ 2) = (1\ 3)(1\ 2)(1\ 4)(1\ 2), \\ B_3 &= (1\ 4)(2\ 3) \equiv (4\ 3\ 2\ 1) = (1\ 4)(1\ 2)(1\ 3)(1\ 2). \end{aligned}$$

افراز $3+1$ هشت عنصر می‌دهد، که در هر کدام از آنها یک عضو ثابت می‌ماند و سه عضو دیگر بطور دوره‌ای جایگشت می‌یابند.

$$\begin{aligned} C_1 &= (1\ 3\ 4\ 2), C_2 = (1\ 4\ 2\ 3), C_3 = (3\ 2\ 4\ 1), C_4 = (4\ 2\ 1\ 3), \\ C_5 &= (2\ 4\ 3\ 1), C_6 = (4\ 1\ 3\ 2), C_7 = (2\ 3\ 1\ 4), C_8 = (3\ 1\ 2\ 4). \end{aligned}$$

بالاخره، افراز 4 جایگشتهایی را می‌دهد که دارای این ویژگی می‌باشند که هیچ عضوی در محل خود باقی نمی‌ماند و هیچ دو عضوی یک ترانهاده ساده انجام نمی‌دهند. این رده شش عنصر دارد.

$$\begin{aligned} D_1 &= (2\ 3\ 4\ 1), D_2 = (2\ 4\ 1\ 3), D_3 = (3\ 1\ 4\ 2), \\ D_4 &= (3\ 4\ 2\ 1), D_5 = (4\ 1\ 2\ 3), D_6 = (4\ 3\ 1\ 2). \end{aligned}$$

این را که عناصر رده‌های (C_i) و (D_i) به صورت حاصلضربهای مولدها نوشته شود به عنوان تمرین واگذار می‌کنیم. ملاحظه می‌کنیم که رده‌های (E) ، (B_i) و (C_i) از جایگشتهای زوج و رده‌های (A_i) و (D_i) از جایگشتهای فرد تشکیل شده‌اند.

بدین ترتیب می‌بینیم که گروه‌های S_3 و S_4 به ترتیب 3 و 5 رده دارند. این تعداد با تعداد نمایشهای کاهش ناپذیر متمایز آنها نیز برابر است. تعداد ابعاد آنها را می‌توان با استفاده از شرط $(3-79)$ به دست آورد. از این شرط تعداد ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر S_3

برابر ۱، ۱ و ۲ به دست می‌آید. برای S_4 ، تعداد ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر، ۱، ۱، ۲، ۳ و ۳ می‌باشد.

بطور کلی رده‌های S_n به ازای هر مقدار n را می‌توان با همین روش به دست آورد. ثابت می‌شود که به ازای هر مقدار n ، S_n دارای دو و فقط دو نمایش کاهش ناپذیر یک بعدی است. مسلماً یکی از آنها همان نمایش همانی است که در آن هر عنصر S_n متناظر با واحد است. در نمایش یک بعدی دیگر جایگشت‌های زوج متناظر با ۱ + و جایگشت‌های فرد متناظر با ۱ - می‌باشند. این نمایش کاهش ناپذیر S_n را با Γ_{odd} نشان خواهیم داد.

این یک نتیجه بسیار مهمی برای ماست زیرا می‌توانیم بلافاصله تشخیص دهیم که به ساختن تابع موج متقارن و ضدمتقارن یک سیستم متشکل از n ذره یکسان مرتبط است. بنابراین، فرض کنید $\Psi(1, 2, \dots, n)$ معرف یک حالت بخصوص سیستم باشد و تابع موج زیر را بسازیم:

$$\Psi_{\text{even}} = \sum_{A \in S_n} A \Psi(1, 2, \dots, n). \quad (9-6)$$

در این صورت واضح است که عمل هر عنصر S_n روی Ψ_{even} آن را بدون تغییر می‌گذارد، یعنی:

$$A \Psi_{\text{even}} = \Psi_{\text{even}} \quad \forall A \in S_n. \quad (10-6)$$

از این رو تابع موج Ψ_{even} نمایش همانی S_n را ایجاد می‌کند. از طرف دیگر اگر تابع موج زیر را بسازیم:

$$\Psi_{\text{odd}} = \sum_{A \in S_n} (-1)^a A \Psi(1, 2, \dots, n). \quad (11-6)$$

که در آن a تعداد ترانها‌ها در عنصر A است، در این صورت می‌بینیم که:

$$A \Psi_{\text{odd}} = (-1)^a \Psi_{\text{odd}}. \quad (12-6)$$

بنابراین تابع موج Ψ_{odd} تحت ترانها‌ها هر دو عنصر تغییر علامت می‌دهد.

اگر یک سیستم متشکل از n بوزون یکسان داشته باشیم، تابع موج آن باید به شکل Ψ_{even} باشد، که نمایش همانی S_n را ایجاد می‌کند. از طرف دیگر یک سیستم n فرمیون

یکسان باید توسط یک تابع موج به شکل Ψ_{odd} نمایش داده شود که نمایش Γ_{odd} گروه S_n را ایجاد می‌کند. اگر فرض کنیم هیچ برهمکنشی بین ذرات وجود ندارد، تابع $\psi(1, 2, \dots, n)$ می‌تواند به صورت حاصلضرب ویژه تابعهای تک ذره‌ای بیان شود:

$$\psi(p_1, p_2, \dots, p_n) = u_1(p_1) u_2(p_2) \dots u_n(p_n). \quad (13-6)$$

که در آن $u_i(p_j)$ تابع موج ذره j ام در مدار تک ذره‌ای i ام است. در این جا p_j معرف تمام مختصات (مکان و تصویر اسپین) ذره j ام می‌باشد. در این صورت تابع موج ضدمتقارن شده سیستم که برطبق Γ_{odd} تبدیل می‌شود دترمینان اسلاتر زیر است:

$$\Psi_{\text{odd}} = \frac{1}{\sqrt{n!}} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_1(2) & \dots & u_1(n) \\ u_2(1) & u_2(2) & \dots & u_2(n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ u_n(1) & u_n(2) & \dots & u_n(n) \end{vmatrix} \quad (14-6)$$

به عنوان مثال، اگر سه ذره یکسان داشته باشیم که مختصات و اسپینهای آنها توسط ۱، ۲ و ۳ و سه مدار اسپین مشخص شده باشد، در این صورت تابع موج یک حالت بخصوص سیستم را می‌توان به صورت زیر نوشت:

$$\psi(p_1, p_2, p_3) = u_1(p_1) u_2(p_2) u_3(p_3), \quad (15-6)$$

که در آن هر p_i می‌تواند مقادیر ۱، ۲ یا ۳ را بگیرد و هیچ دو p_i نمی‌توانند یک مقدار داشته باشند. در این صورت تابع پایه متقارن شده عبارت است از:

$$\begin{aligned} \Psi_{\text{odd}} &= \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{vmatrix} u_1(1) & u_1(2) & u_1(3) \\ u_2(1) & u_2(2) & u_2(3) \\ u_3(1) & u_3(2) & u_3(3) \end{vmatrix} \\ &= [\psi(1\ 2\ 3) - \psi(2\ 1\ 3) + \psi(2\ 3\ 1) - \psi(3\ 2\ 1) \\ &\quad + \psi(3\ 1\ 2) - \psi(1\ 3\ 2)] / \sqrt{6}. \end{aligned} \quad (16-6)$$

۲-۶ قواعد گزینش برای گذار اتمی

دیدیم که حالت‌های یک اتم چند الکترونی ممکن است به تمام نمایشهای کاهش ناپذیر

$O(3)$ متعلق داشته باشند، حال آنکه حالت‌های یک اتم یک الکترونی تنها به بعضی نمایش‌های کاهش ناپذیر $O(3)$ متعلق اند. بدین جهت طبیعی است که قواعد گزینش برای این دو نوع سیستم متفاوت باشند. این دو مورد را بطور جداگانه بررسی می‌کنیم.

۶-۲-۱ یک اتم چند الکترونی

ابتدا قواعد گزینش برای گذارهای دو قطبی الکتریکی یک اتم چند الکترونی را به دست می‌آوریم. عملگر ممان دو قطبی الکتریکی $\mu = \epsilon(x, y, z)$ یک بردار قطبی است (که تحت وارونی تغییر علامت می‌دهد) و واضح است که نمایش $D(1, -)$ از گروه $O(3)$ را ایجاد می‌کند. در این صورت گذار یک اتم چند الکترونی از یک حالت $D(L, \sigma)$ به حالت $D(L', \sigma')$ ، تحت تابش دو قطبی الکتریکی، زمانی مجاز است که نمایش حاصلضرب $D(1, -) \otimes D(L, \sigma)$ شامل $D(L', \sigma')$ باشد. اما داریم:

$$D(1, -) \otimes D(L, \sigma) = \begin{cases} D^{(L-1, -\sigma)} \oplus D^{(L, -\sigma)} \oplus D^{(L+1, -\sigma)} & L \neq 0. \\ D^{(L, -\sigma)} & L = 0. \end{cases} \quad (17-6)$$

قسمت دوم معادله بالا نشان می‌دهد که گذار بین دو حالت با $L = 0$ ممنوع است. نمایش $D(L', \sigma')$ وقتی در ضرب مستقیم ظاهر می‌شود که داشته باشیم:

$$L' = \begin{cases} L, L \pm 1 & L \neq 0, \\ 1 & L = 0; \end{cases} \quad \left. \begin{array}{l} \\ \sigma' = -\sigma. \end{array} \right\} \quad (6-18 \text{ الف})$$

اگر بنویسیم: $L' - L = \Delta L$ ، قواعد انتخاب برای گذارهای دو قطبی الکتریکی عبارتند از:

$$(6-18 \text{ ب}) \quad \Delta L = 0, \pm 1 \quad (0 \leftarrow \rightarrow 0) \text{ پاریته تغییر می‌کند؛}$$

چون عملگر ممان دو قطبی الکتریکی روی متغیرهای اسپینی اتم عمل نمی‌کند، قواعد انتخاب $\Delta S = 0$ را نیز داریم.

۶-۲-۲ اتم یک الکترونی

می دانیم که روابط طیفی اتمهای یک الکترونی نظیر اتم هیدروژن و اتمهای قلیائی ساده اند. یک بار دیگر ضرب مستقیم $D^{(1,0)} \otimes D^{(1,-)}$ را برای یافتن قواعد انتخاب برای گذارهای دوقطبی الکتریکی مورد بررسی قرار می دهیم. این ضرب، معادله ای شبیه به (۶-۱۷) می دهد که در آن L به l جایگزین شده است. لیکن باید این واقعیت را نیز در نظر داشته باشیم که پاریته تابع موج اتم یک الکترونی به مقدار l وابسته است. بدین ترتیب اگر حالتی از اتم وجود داشته باشد که به نمایش $D^{(l,0)}$ تعلق داشته باشد، نمی تواند حالتی وجود داشته باشد که به $D^{(l+1,-)}$ متعلق باشد ولی حالتی وجود دارند که به $D^{(l-1,-)}$ تعلق دارند. این گذارهایی را که برای آنها $l' = l + 1$ باشد ممنوع می کند و قاعده انتخاب زیر را می دهد:

$$\Delta l = \pm 1, \text{ پاریته تغییر می کند, (۶-۱۹)}$$

از طرف دیگر، عملگر ممان دوقطبی مغناطیسی نمایش $D^{(1,+)}$ را ایجاد می کند و به ازای $l \neq 0$ داریم:

$$D^{(l,+)} \otimes D^{(l,0)} = D^{(l-1,0)} \oplus D^{(l,0)} \oplus D^{(l+1,0)}, \text{ (۶-۲۰)}$$

از این رو تنها گذار مجاز بین اینها گذار $D^{(l,0)} \leftrightarrow D^{(l,0)}$ است و قاعده انتخاب زیر را داریم:

$$\Delta l = 0, \text{ تغییر در پاریته وجود ندارد, (۶-۲۱)}$$

بعلاوه، چون عملگر ممان دوقطبی مغناطیسی روی متغیرهای اسپینی نیز عمل نمی کند، داریم:

$$\Delta s = 0. \text{ (۶-۲۲)}$$

۶-۳ اثر زیمن

در این بخش اثر زیمن را که از شکافتگی ترازهای انرژی اتمی در یک میدان مغناطیسی حاصل می شود، مورد مطالعه قرار می دهیم. یک اتم را در حالت z که دارای تراز انرژی $(2j+1)$ بار تبهگن E_{nj} قرار دارد،

در نظر بگیرید. اگر اتم در یک میدان مغناطیسی یکنواخت پایدار \vec{H} که فرض می شود در راستای Z می باشد، قرار گیرد، تبهگنی تراز E_{nj} بطور کامل بر طرف شده و به $2j+1$ تراز غیر تبهگن شکافته می شود. این نتیجه را می توانیم به آسانی با استفاده از نظریه گروهها به دست آوریم.

فرض کنید ψ_j^m ها (به ازای $j \leq m \leq -j$) $(2j+1)$ ویژه تابع تبهگن برای تراز E_{nj} باشند. اگر Z عدد صحیح باشد گروه تقارنی اتم، $SO(3)$ و اگر Z عدد نیمه صحیح باشد گروه تقارنی آن $SU(2)$ خواهد بود. اگر گروه تقارنی، $SO(3)$ باشد، ψ_j^m شامل هارمونیک کروی (θ, ϕ) Y_j^m است، در حالی که اگر گروه تقارنی $SU(2)$ باشد، ψ_j^m دارای همان خواص تبدیلی توابع f_j^m که در بخش ۴-۵-۱ تعریف شد، می باشد. در هر مورد، دوران α حول محور Z ها دارای اثر زیر است:

$$R_z(\alpha)\psi_j^m = \exp(im\alpha)\psi_j^m. \quad (23-6)$$

فرض کنید V λ اغتشاشی باشد که از میدان مغناطیسی خارج حاصل شده باشد، که در آن λ یک پارامتر^۲ است. بنابراین اغتشاش V λ و لذا سیستم مغشوش (یعنی اتم + میدان مغناطیسی) تنها تحت دوران حول محور Z ها تغییرناپذیر است. بنابراین گروه تقارنی سیستم فیزیکی $SO(2)$ می باشد، که یک زیرگروه $SO(3)$ یا $SU(2)$ است. چون $SO(2)$ یک گروه آبله است، تنها نمایشهای کاهش ناپذیر یک بعدی دارد. این مطلب نشان می دهد که تابع Y_j^m نمی تواند به ازای تمام مقادیر m بین $-j$ و $+j$ تبهگن بماند. حال، تابع ψ_j^m به نمایش کاهش ناپذیر m ام گروه $SO(2)$ تعلق دارد و بنابراین $(2j+1)$ بار تبهگنی در اثر میدان مغناطیسی کاملاً بر طرف می شود.

بطور کلی عمل اغتشاش V روی یک ویژه تابع ψ_j^m از سیستم غیر مغشوش این است که، تمام ویژه تابعهای تبهگن را درهم بیامیزد. بدین جهت می توانیم بنویسیم:

$$V\psi_j^m = \sum_{m'=-j}^j \psi_j^{m'} v_{m'm} \quad (24-6)$$

۳- پارامتر λ برای این منظور در این جا به کار برده شده است تا جداسازی مرتبه های مختلف اغتشاش را ساده کند. این یک روش متداول و شناخته شده در نظریه اغتشاش است.

که در آن $v_{m'm} = (\psi_j^{m'}, V \psi_j^m)$ عنصر ماتریسی V بین دو ویژه تابع غیرمغشوش تبهگن است. عنصر ماتریسی V بین دو ویژه تابع غیرمغشوش $\psi_j^{m'}$ و ψ_j^m متحد با صفر است زیرا عمل V روی ψ_j^m هیچ تابعی با مقدار z ی متفاوت با آن را مخلوط نمی کند. چون V تحت $SO(2)$ تغییرناپذیر است، $V \psi_j^m$ تحت $SO(2)$ دارای همان خواص تبدیلی ψ_j^m خواهد بود، یعنی:

$$R_z(\alpha)(V \psi_j^m) = \exp(im\alpha)(V \psi_j^m). \quad (۲۵-۶)$$

بنابراین تابع $V \psi_j^m$ نیز به نمایش کاهش ناپذیر m ام $SO(2)$ تعلق دارد و بنابه قضیه عنصر ماتریسی، ملاحظه می کنیم که $(\psi_j^{m'}, V \psi_j^m)$ با $\delta_{m'm}$ متناسب است، یا:

$$v_{m'm} \equiv \delta_{m'm}. \quad (۲۶-۶)$$

که در آن $v_{m'm}$ را مقدار قابل انتظار V در یک حالت غیرمغشوش ψ_j^m تعریف کرده ایم. بنابراین ماتریس معرف V در پایه $\{\psi_j^m\}$ قطری است و $v_{m'm}$ ها ویژه مقادیرهای آن می باشند. در این صورت ترازهای انرژی جدید عبارتند از:

$$E_{njm} = E_{nj} + \lambda v_{m,m}, \quad -j \leq m \leq j. \quad (۲۷-۶)$$

این نتیجه ای است که می توانیم به کمک نظریه گروهها به آن برسیم. محاسبه واقعی $v_{m,m}$ ها به طبیعت دقیق اغتشاش و ویژه تابعهای اتمی دقیق بستگی دارد.

تعداد مؤلفه هایی که یک خط در اثر میدان مغناطیسی به آنها تجزیه می شود به ما کمک می کند تا مقدار z ی حالت غیرمغشوش را تعیین کنیم. با همین روش برد که سامرفلد پیشنهاد کرد که z باید مقادیر صحیح و نیمه صحیح بگیرد.

۴-۶ جمع اندازه حرکتهای زاویه ای

اغلب در بسیاری از مسائل مکانیک کوانتومی لازم است که دو یا چند اندازه حرکت زاویه ای را ترکیب کنیم و اندازه حرکت زاویه ای سیستم مرکب را به دست آوریم. ممکن است با یک ذره منفرد با اندازه حرکتهای زاویه ای مداری و ذاتی مواجه باشیم یا با یک سیستم دو ذره ای (نظیر دو الکترون در داخل یک اتم). هدف ما در این بخش این است که مقادیر ممکن برای اندازه حرکت زاویه ای کل و تصویر کوانتائی شده آن را به دست آوریم و

ویژه حالت‌های سیستم مرکب را به صورت ترکیبات خطی (متقارن شده) ویژه حالت‌های جداگانه دو اندازه حرکت زاویه‌ای، پیدا کنیم.

قبل از پرداختن به مسأله اساسی جمع اندازه حرکت‌های زاویه‌ای، ابتدا طبیعت مکانیک کوانتومی اندازه حرکت زاویه‌ای را مورد بحث قرار می‌دهیم. در واقع این قسمت صرفاً برای کامل شدن مطلب آورده شده است، هر چند نتایج آن قبلاً در این کتاب مورد استفاده قرار گرفته است.

۶-۴-۱ اندازه حرکت زاویه‌ای در مکانیک کوانتومی

در مکانیک کلاسیک، اندازه حرکت زاویه‌ای یک مفهومی است که به آسانی قابل درک است. این کمیت به صورت $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ تعریف می‌شود که در آن \vec{r} بردار مکان و \vec{p} اندازه حرکت خطی ذره است و توسط رابطه $\vec{p} = m \frac{d\vec{r}}{dt}$ و وابسته است، که در آن m جرم سیستم است. اندازه حرکت زاویه‌ای خواص دورانی سیستم را تشریح می‌کند. به عنوان مثال، اگر یک سیستم دارای تقارن دورانی حول یک محور باشد، مؤلفه اندازه حرکت زاویه‌ای حول آن محور یک ثابت حرکت است. اگر سیستم تحت تمام دورانه‌ها تغییرناپذیر باشد، اندازه حرکت زاویه‌ای \vec{L} دارای بقاء است.

با وجودی که این نتایج در مکانیک کوانتومی نیز برقرار است، نمی‌توان تعریف فوق را برای اندازه حرکت زاویه‌ای به مکانیک کوانتومی منتقل کرد. علتش این است که بر طبق اصول اساسی مکانیک کوانتومی، \vec{r} و \vec{p} کمیت‌های کلاسیک نیستند بلکه به ترتیب عملگر بردار مکان و عملگر اندازه حرکت خطی هستند که توسط روابط $\vec{p} = -i\hbar \nabla_r$ یا $\vec{p} = -i\hbar \nabla_p$ به هم مربوطند. البته هنوز می‌توانیم \vec{L} را به صورت $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ تعریف کنیم و آن را عملگر اندازه حرکت زاویه‌ای بنامیم. اگر سیستم تقارن دورانی کامل داشته باشد، عملگر \vec{L} با هامیلتونین جابجاپذیر است و لذا یک ثابت حرکت خواهد بود. لیکن، این تنها تغییرناپذیری یک سیستم یکرود مکانیک کوانتومی نیست. یک سیستم مکانیک کوانتومی درجات آزادی دیگری نیز دارد (اندازه حرکت زاویه‌ای اسپین ذاتی، اندازه حرکت زاویه‌ای اسپین ایزوتروپی و غیره) که اگر هامیلتونین تحت دوران در فضای هیلبرت آنها تغییرناپذیر

باشد، مشاهده پذیرهای متناظر با آنها تغییرناپذیر خواهند بود. این درجات آزادی اضافی مشابه کلاسیکی ندارند.

چون کل ساختار مکانیک کوانتومی بر عملگرهای متناظر با مشاهده پذیرها بنا شده است باید اندازه حرکت زاویه ای در مکانیک کوانتومی را به صورت مطلق و ریاضی معرفی کنیم. برای این منظور ابتدا عملگر اندازه حرکت زاویه ای را تعریف می کنیم.

یک عملگر \vec{A} با مولفه های دکارتی A_x ، A_y و A_z ، را یک عملگر اندازه حرکت زاویه ای می نامیم اگر:

(i) عملگرهای A_i ($i = x, y, z$) متناظر با مشاهده پذیرهای فیزیکی باشند.

(ii) تحت دوران مانند مولفه های یک بردار تبدیل شوند (یعنی ماتریس وابسته به تبدیل با (۴-۴۳) یکسان باشد) و

(iii) از روابط جابجائی زیر تبعیت کنند:

$$[A_x, A_y] = i\hbar A_z, [A_y, A_z] = i\hbar A_x, [A_z, A_x] = i\hbar A_y. \quad (۶-۲۸)$$

در این صورت مشاهده پذیر فیزیکی وابسته به \vec{A} را اندازه حرکت زاویه ای می نامیم.

عملگر $\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p}$ یک نمونه بخصوص از عملگر اندازه حرکت زاویه ای است، زیرا در سه اصل بالا صدق می کند. مشاهده پذیر وابسته به آن اندازه حرکت زاویه ای مداری نامیده می شود. عملگر اندازه حرکت زاویه ای اسپینی ذاتی S و عملگر اندازه حرکت زاویه اسپینی ایزوتوپی $\vec{\tau}$ نمونه های دیگری از عملگر اندازه حرکت زاویه ای می باشند. مشاهده پذیرهای وابسته به آنها به ترتیب اندازه حرکت زاویه ای اسپینی^۴ (یا اسپین) و بار نامیده می شوند.

از این به بعد، غالباً عملگر اندازه حرکت زاویه ای را اندازه حرکت زاویه ای خواهیم نامید و عموماً آن را با \vec{J} نمایش خواهیم داد.

۴- این که تصور کنیم ذره ای که دارای اندازه حرکت زاویه ای اسپینی است در واقع حول خودش می چرخد یک فرض محض است؛ اسپین صرفاً نامی است که به درجه آزادی اضافی ای که بسیاری از ذرات نظیر، الکترون، نوترون، ... و همچنین بسیاری از سیستمهای مرکب نظیر، هسته، اتم، مولکول و غیره دارند، داده می شود.

می توان به کمک (۶-۲۸) ثابت کرد، که مجذور اندازه حرکت زاویه ای: $J^2 = J_x^2 + J_y^2 + J_z^2$ با هریک از مؤلفه های \vec{J} جابجاپذیر است. لیکن (۶-۲۸) نشان می دهد که هیچ دو مؤلفه ای از \vec{J} با یکدیگر جابجاپذیر نیستند. از این رو در هر نمایش نمی توان بیش از یک مؤلفه \vec{J} را قطر کرد. بطور قراردادی حالتی را برای پایه نمایش انتخاب می کنیم که ویژه حالتی همزمان J^2 و J_z باشند. ثابت می شود که J^2 می تواند ویژه مقادیر $(j+1)\hbar^2$ با $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \dots$ را داشته باشد و J_z ویژه مقادیر $m\hbar$ که در آن $j, -j+1, \dots, -j, -j-1, \dots, m = -j$. یک ویژه حالت مشترک J^2 و J_z را با $|jm\rangle$ نمایش می دهیم:

$$J^2 |jm\rangle = j(j+1)\hbar^2 |jm\rangle, J_z |jm\rangle = m\hbar |jm\rangle. \quad (۶-۲۹)$$

معمولاً عملگرهای دیگری هم وجود دارند که با J^2 و J_z جابجاپذیر باشند. به همان نسبت سیستم اعداد کوانتومی خوبی غیر از j و m خواهد داشت. بطور دقیقتر باید ویژه حالتی مشترک همه عملگرهای جابجاپذیر را با $|Njm\rangle$ نمایش دهیم که در آن معرف N مجموعه سایر اعداد کوانتومی خوب است. لیکن این اعداد کوانتومی به خواص دورانی ویژه حالت $|Njm\rangle$ ربطی ندارند. این اعداد کوانتومی بر چیزهای دیگر از جمله، مثلاً وابستگی شعاعی ویژه حالتها، دلالت دارند. اغلب این اعداد را، بجز در مواقع لزوم، حذف خواهیم کرد و یک ویژه حالت را به صورت $|jm\rangle$ خواهیم نوشت هرچند بطور ضمنی وابستگی به سایر اعداد کوانتومی را دربر دارد.

دو عملگر $J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$ که مزدوج هرمیتی یکدیگرند دارای این اثر می باشند که مؤلفه Z ام اندازه حرکت زاویه ای را به ترتیب به اندازه واحد افزایش یا کاهش می دهند. بنابراین:

$$J_+ |jm\rangle = [j(j+1) - m(m+1)]^{1/2} \hbar |j, m+1\rangle, \\ J_- |jm\rangle = [j(j+1) - m(m-1)]^{1/2} \hbar |j, m-1\rangle. \quad (۶-۳۰)$$

ضرایب معادلات بالا عناصر ماتریسهای J_+ و J_- در پایه $\{|jm\rangle\}$ می باشند.

نمایش J^2 و مؤلفه هایش (J_x ، J_y و J_z یا $J_z \pm J_x$ و J_z) در این پایه نمایش استاندارد و اندازه حرکت زاویه ای نامیده می شود. واضح است که در این نمایش تنها ماتریس J_y موهومی محض است در حالی که سایر ماتریسها حقیقی می باشند. البته فقط ماتریسهای J^2 و J_z قطری هستند و ماتریسهای معرف J_x ، J_y ، J_z و $J_z \pm J_x$ به صورت بلوکه قطری می باشند و ابعاد بلوکها $(2j+1)$ است. حالت‌های $\{|j, m\rangle\}$ نمایش $D^{(j)}$ از گروه $SU(2)$ ، تحت دورانهای تعمیم یافته در فضای هیلبرت و عملگرهای J^2 و J_z ، را ایجاد می کنند، بطوری که داریم:

$$U_R |j, m\rangle = \sum_{m'} |j, m'\rangle D_{m'm}^{(j)}(R), \quad (۳۱-۶)$$

که در آن برای سهولت و راحتی یک دوران نظیر $R_{\hat{n}}(\theta)$ یا $R(\alpha, \beta, \gamma)$ از $SO(3)$ را با U_R نشان داده ایم.

در موارد بخصوص، لازم نیست که تمام مقادیر مجاز J_z رخ دهند. به عنوان مثال اگر اندازه حرکت زاویه ای مداری موردنظر باشد، ویژه مقدارهای مجاز آن عبارتند از: $l(l+1)$ که تنها اعداد صحیح غیرمنفی را می گیرد و همه اعداد نیمه صحیح مستثنا هستند. بعلاوه ممکن است به ازای یک مقدار معین J_z بیش از یک مجموعه $(2j+1)$ ویژه تابع مستقل خطی متناظر با آن وجود داشته باشد (به ازای مقادیر مختلف اعداد کوانتومی دیگر N).

۶-۴-۲ جمع دو اندازه حرکت زاویه ای و ترکیبات مقارن شده ویژه حالتها

فرض کنید \vec{J}_1 و \vec{J}_2 دو اندازه حرکت زاویه ای باشند. اگر هر مؤلفه \vec{J}_1 با همه مؤلفه های \vec{J}_2 جابجاپذیر باشد، در این صورت می توان نشان داد که $\vec{J}_1 + \vec{J}_2 = \vec{J}$ نیز یک اندازه حرکت زاویه ای است. رابطه جابجایی زیر را در نظر بگیرید:

$$\begin{aligned} [J_x, J_y] &\equiv [J_{1x} + J_{2x}, J_{1y} + J_{2y}] \\ &= [J_{1x}, J_{1y}] + [J_{2x}, J_{2y}] \\ &= i \hbar (J_{1z} + J_{2z}) \\ &= i \hbar J_z, \end{aligned} \quad (۳۲-۶)$$

می بینیم که با معادله اول از معادلات (۶-۲۸) یکسان است. بطور مشابه با جایگشت‌های دوره ای x ، y و z داریم: $[J_y, J_z] = i \hbar J_x$ و $[J_z, J_x] = i \hbar J_y$ ، بنابراین \vec{J} یک اندازه

حرکت زاویه ای است. روابط جابجایی \vec{J} با \vec{J}_1 یا \vec{J}_2 به صورت زیر به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} [J_x, J_{ix}] &= [J_{1x} + J_{2x}, J_{ix}] = 0, \\ [J_x, J_{iy}] &= [J_{1x} + J_{2x}, J_{iy}] = i \hbar J_{iz}, \\ [J_x, J_{iz}] &= [J_{1x} + J_{2x}, J_{iz}] = -i \hbar J_{iy}, \end{aligned} \quad (۳۳-۶)$$

که در آن i مقادیر ۱ و ۲ را می‌گیرد. با جایگشت‌های دوره‌ای x ، y و z ، معادلات مشابهی برای مؤلفه‌های دیگر \vec{J} به دست می‌آید.

فرض کنید $|j_1 m_1\rangle$ و ویژه حالت J_1^2 و J_{1z} باشد و $|j_2 m_2\rangle$ ویژه حالت J_2^2 و J_{2z} ویژه حالت‌های ترکیب یافته این چهار عملگر که دو بدو باهم جابجاپذیرند، حاصلضربهای تک تک ویژه حالت‌ها می‌باشند که آنها را به صورت $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \equiv |j_1 m_1\rangle |j_2 m_2\rangle$ نشان می‌دهیم. به ازای مقادیر معین j_1 و j_2 ، تعداد این ویژه حالتها $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ می‌باشد و دارای خواص زیر می‌باشند:

$$\begin{aligned} J_i^2 |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle &= j_i(j_i + 1) \hbar^2 |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle, \\ J_{iz} |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle &= m_i \hbar |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle. \end{aligned} \quad (۳۴-۶)$$

این تعداد $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ ویژه حالت بر طبق نمایش $D^{(j_1)} \otimes D^{(j_2)}$ از گروه $SU(2)$ تبدیل می‌شوند. می‌توان مانند (۴-۹۳) این نمایش را به مجموع نمایش‌های کاهش ناپذیر تبدیل کرد بطوری که به ازای مقادیر j بین $|j_1 - j_2|$ و $|j_1 + j_2|$ هر نمایش $D^{(j)}$ یکبار ظاهر شود. به هر نمایش $D^{(j)}$ تعداد $(2j + 1)$ حالت وابسته است که همان ترکیبات خطی $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$ می‌باشند. تعداد این حالتها برابر است با:

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) = (2j_1+1)(2j_2+1), \quad (۳۵-۶)$$

که همان است که باید باشد.

برای ساختن ویژه حالت‌های جدید، توجه کنید که مجذور اندازه حرکت زاویه ای کل J^2 و همچنین J_z با J_1^2 و J_2^2 جابجاپذیرند. برای یافتن این ویژه حالتها به جای مجموعه $(J_1^2, J_{1z}, J_2^2, J_{2z})$ مجموعه (J^2, J_z, J_1^2, J_2^2) را به عنوان یک مجموعه مستقل خطی

از عملگرهای جابجاپذیر انتخاب می کنیم. ویژه مقدارهای J^2 را می توان با $\hbar^2 j(j+1)$ نشان داد که در آن $j_1 + j_2 \leq j \leq j_1 - j_2$ و ویژه حالت مشترک این مجموعه را با $j_m >$ نشان می دهیم که در آن $m \hbar$ ویژه مقدار J_z در حالت $j_m >$ است. این حالت را به صورت یک ترکیب خطی از حالت های $j_1 m_1, j_2 m_2 >$ به شکل زیر بیان می کنیم:

$$|j m > = \sum_{m_1 = -j_1}^{j_1} \sum_{m_2 = -j_2}^{j_2} |j_1 m_1, j_2 m_2 > C(j_1 m_1, j_2 m_2; j m). \quad (36-6)$$

برای یافتن ضرایب بسط ρ کافی است طرفین معادله بالا را در، مثلاً $< j_1 m_1', j_2 m_2' |$ ضرب اسکالر کنیم و از راست هنجار بودن این مجموعه استفاده کنیم. نتیجه خواهد شد:

$$< j_1 m_1', j_2 m_2' | j m > = C(j_1 m_1', j_2 m_2'; j m) \quad (37-6)$$

در این صورت معادله (36-6) به صورت زیر درمی آید:

$$|j m > = \sum_{m_1, m_2} |j_1 m_1, j_2 m_2 > < j_1 m_1, j_2 m_2 | j m >. \quad (38-6)$$

اینها همان ویژه حالت های هستند که می خواستیم و دارای خواص زیرند:

$$\begin{aligned} J^2 |j m > &= j(j+1)\hbar^2 |j m >, \quad J_z |j m > = m\hbar |j m >, \\ J_i^2 |j m > &= j_i(j_i+1)\hbar^2 |j m >, \quad i=1, 2. \end{aligned} \quad (39-6)$$

ضرایب $< j_1 m_1, j_2 m_2 | j m >$ ، ضرایب کلبش گوردن یا ضرایب ویگنر یا ضرایب پیوند برداری نامیده می شوند. با اعمال $J_z = J_{1z} + J_{2z}$ به حالت (38-6)، داریم:

$$\begin{aligned} m\hbar |j m > &= \sum_{m_1, m_2} (m_1 + m_2)\hbar |j_1 m_1, j_2 m_2 > \\ &\times < j_1 m_1, j_2 m_2 | j m >. \end{aligned} \quad (40-6)$$

اگر باز هم در طرف چپ این معادله از (38-6) مقدار قرار دهیم، به دست می آوریم:

$$\sum_{m_1, m_2} (m - m_1 - m_2)\hbar |j_1 m_1, j_2 m_2 > < j_1 m_1, j_2 m_2 | j m > = 0. \quad (41-6)$$

ρ - می توان نشان داد که این ضرایب مستقل از سایر اعداد کوانتومی N می باشند، R_k : مسیا

چون حالت‌های $j_1 m_1, j_2 m_2 > j_1 m_1, j_2 m_2$ به ازای مقادیر مختلف m_1 و m_2 مستقل خطی هستند، معادله بالا تنها زمانی برقرار است که داشته باشیم:

$$(m - m_1 - m_2) \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle = 0. \quad (۴۲-۶)$$

این رابطه نشان می‌دهد که:

$$m = m_1 + m_2 \quad \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle = 0 \quad (۴۳-۶)$$

و این خود نشان می‌دهد که مولفه Z ام اندازه حرکت زاویه‌ای کل باید با مجموع مولفه‌های Z هر یک از اندازه حرکت‌های زاویه‌ای برابر باشد^۷. بطور خلاصه، شرایطی باید برقرار باشد تا ضریب C-G (کلبش گوردن)^۸ $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle$ مخالف صفر باشد و آنها عبارتند از:

$$|j_1 - j_2| \leq j \leq j_1 + j_2, \quad m = m_1 + m_2, \quad |m| \leq j. \quad (۴۴-۶)$$

ضرایب C-G (۳۸-۶) همان عناصر تبدیل از یک پایه به پایه دیگر در فضای هیلبرت $\{|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle\}$ بعدی می‌باشند. اگر مجموعه حالت‌های اولیه $\{|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle\}$ و مجموعه حالت‌های نهایی $\{|j m\rangle\}$ هر دو راست هنجار فرض شده باشند، ماتریس متشکل از این عناصر، یک ماتریس $(2j_1 + 1)(2j_2 + 1)$ بعدی یکانی است.

بیشترین مقدار m عبارت است از: $j_1 + j_2$ و این زمانی اتفاق می‌افتد که Z بیشترین مقدارش که $j_1 + j_2$ است بگیرد. بنابراین، اگر $m = j_1 + j_2$ باشد، می‌توان از قواعد (۴۴-۶) دید که تنها ضریب C-G که در (۳۸-۶) مخالف صفر است ضریبی است که برای آن $m_1 = j_1$ و $m_2 = j_2$ باشد، لذا:

$$\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 | j_1 j_1, j_2 j_2 \rangle = \langle j_1 j_1, j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle \quad (۴۵-۶)$$

اما چون هر دو حالت $\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle$ و $\langle j_1 j_1, j_2 j_2 \rangle$ نرمالیزه شده‌اند، ضریب C-G در معادله بالا حداکثر می‌تواند یک عدد مختلط با قدر مطلق واحد باشد. بطور قراردادی فاز این عدد را طوری انتخاب می‌کنیم که این ضریب برابر ۱ باشد.

۷- این قاعده کاملاً کلی است و برای جمع بیش از دو اندازه حرکت زاویه‌ای نیز برقرار است.

۸- برای سهولت به جای ذکر نام «ضرایب کلبش گوردن» از «ضرایب C-G» استفاده خواهیم کرد.

$$\langle j_1 j_1, j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 \rangle = 1 \quad (۴۶-۴)$$

خواهیم دید که با این قرارداد و قرارداد مشابهی که بعداً تشریح خواهیم کرد، تمام ضرایب C-G حقیقی می‌شوند و لذا ماتریس یکانی تبدیل به یک ماتریس متعامد تبدیل می‌شود.

۳-۴-۶ محاسبه ضرایب کلبش - گوردن

نشان خواهیم داد که ماتریس $(2j_2 + 1)(2j_1 + 1)$ بعدی ضرایب C-G به یک جمع مستقیم از ماتریسهایی تبدیل می‌شود که هر کدام دارای یک بلوک متناظر با هر مقدار مجاز $m = m_1 + m_2$ هستند.

چون ماتریس تبدیل (۳۸-۶) یکانی است و چون بنا به قرارداد تمام عناصر آن حقیقی اند داریم:

$$\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle^* = \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle, \quad (۴۷-۶ \text{ الف})$$

$$\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \sum_{m=-j}^j \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle \langle j_1 m_1', j_2 m_2' | j m \rangle = \delta_{m_1 m_1'} \delta_{m_2 m_2'}, \quad (۴۷-۶ \text{ ب})$$

$$\sum_{m_1=-j_1}^{j_1} \sum_{m_2=-j_2}^{j_2} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j' m' \rangle = \delta_{mm'}. \quad (۴۷-۶ \text{ ج})$$

توجه کنید که سطرها و ستونهای این ماتریس به صورتهای مختلف اندیس گذاری شده است. هر سطر توسط نماد دوگانه (m_1, m_2) مشخص شده است در حالی که هر ستون با نماد دوگانه (j, m) نمادگذاری شده است. به عنوان مثال برای مقادیر معین j_1 و j_2 ، سطر اول، سطر (j_1, j_2) نامیده می‌شود (زیرا $m_1 = j_1$ و $m_2 = j_2$) حال آن که ستون اول راستون $(j_1 + j_2, j_1 + j_2)$ می‌نامیم (زیرا $m_1 = j_1$ و $m_2 = j_2$). به همین دلیل نوشتن ترانهاد یک عنصر $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle$ ساده نیست. به عبارت دیگر عنصر $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle$ ترانهاد عنصر $\langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle$ نیست. بطور

قراردادی هر دوی اینها را معرف یک عنصر در نظر می‌گیریم، یعنی هر دو نماد:

$$\langle j m | j_1 m_1, j_2 m_2 \rangle \equiv \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle. \quad (۴۸-۶)$$

معرف یک عنصر در سطر (m_1, m_2) و ستون (j, m) می باشند.

قبلاً نشان دادیم که بیشترین مقدار m وقتی است که $j = m = j_1 + j_2$ و در این صورت تنها یک ضریب C-G مخالف صفر است. مقدار بعدی m عبارت است از: $j_1 + j_2 - 1$ که به دو طریق ممکن است به دست آید: وقتی $j = j_1 + j_2$ باشد و یا وقتی که $j = j_1 + j_2 - 1$. همچنین چون $m = m_1 + m_2$ است، یا باید $m_1 = j_1$ ، $m_2 = j_2 - 1$ باشد و یا $m_1 = j_1 - 1$ و $m_2 = j_2$. این، نشان می دهد که دو حالت نهایی $\langle j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle$ و $\langle j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_2 \rangle$ و $\langle j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_2 \rangle$ می توانیم بنویسیم:

$$\begin{aligned} & |j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle \\ &= |j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 \rangle \langle j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle \\ &+ |j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 \rangle \langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle, \quad (49-6) \\ & |j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle \\ &= |j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 \rangle \langle j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle \\ &+ |j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 \rangle \langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle. \end{aligned}$$

بدین ترتیب در سطرها و ستونهای دوم و سوم ماتریس C-G تنها دو ضریب مخالف صفر وجود دارند. می توانیم با ادامه کار ببینیم که اگر ستونها به ترتیب نزولی m مرتب شوند، ماتریس C-G به شکل قطری شده بلوکه درمی آید. ابعاد این بلوکها از یک شروع شده و افزایش می یابند و سپس کاهش پیدا کرده و به ازای کمترین مقدار m که به هنگام $j = j_1 + j_2 - m = -j_1$ و $m_1 = -j_1$ ، $m_2 = -j_2$ حاصل می شود، به یک می رسد.

برای به دست آوردن ضرایب C-G، ابتدا یک سری روابط بازگشتی پیدا می کنیم که یکی از آنها را به سایر ضرایب مربوط می سازد و از آنها می توانیم با دانستن یک ضریب، سایر ضرایب را به دست آوریم. برای این منظور عملگر بالا برنده $J_+ = J_{1+} + J_{2+}$ را به دو طرف معادله (۳۸-۶) اعمال می کنیم، سپس با استفاده از رابطه (۳۰-۶) و تقسیم طرفین بر $\sqrt{m(m+1)}$ داریم:

$$\begin{aligned} & [j(j+1) - m(m+1)]^\dagger |j, m+1 \rangle \\ &= \sum_{m_1, m_2} \{ [j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)]^\dagger |j_1 m_1 + 1, j_2 m_2 \rangle \\ &+ [j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)]^\dagger |j_1 m_1, j_2 m_2 + 1 \rangle \} \\ &\quad \times \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j m \rangle. \quad (50-6) \end{aligned}$$

در طرف چپ، مجدداً به جای $m+1 > j$ از (۶-۳۸) مقدار می گذاریم. در طرف راست، در جمله اول متغیر جمع بندی m_1 را به $m_1' = m_1 + 1$ تبدیل می کنیم و m_2 را تغییر نمی دهیم و در جمله دوم متغیر جمع بندی m_2 را به $m_2' = m_2 + 1$ تبدیل می کنیم و m_1 را تغییر نمی دهیم. در این صورت، به عنوان مثال، جمله اول به صورت زیر درمی آید:

$$\sum_{m_1' = -j_1 + 1}^{j_1 + 1} \sum_{m_2 = -j_2}^{j_2} [j_1(j_1 + 1) - (m_1' - 1)m_1']^{\dagger} |j_1 m_1', j_2 m_2\rangle \\ \times \langle j_1 m_1' - 1, j_2 m_2 | j m \rangle.$$

حال ملاحظه می کنیم که به ازای $m_1' = -j_1$ یا $m_1' = j_1 + 1$ زیر رادیکال صفر می شود. از این رو حدود جمع بندی m_1' را می توانیم از $-j_1$ تا j_1 بگیریم. با حذف پریم در m_1' بالاخره جمله اول به صورت زیر درمی آید:

$$\sum_{m_1 = -j_1}^{j_1} \sum_{m_2 = -j_2}^{j_2} [j_1(j_1 + 1) - m_1(m_1 - 1)]^{\dagger} |j_1 m_1, j_2 m_2\rangle \\ \times \langle j_1 m_1 - 1, j_2 m_2 | j m \rangle.$$

جمله دوم در (۶-۵۰) را می توان بطور مشابه ساده کرد. سپس با توجه به این که حالت های $|j_1 m_1, j_2 m_2\rangle$ متعامدند، ضرایب آنها در طرفین رابطه را با هم مساوی قرار می دهیم، به دست می آوریم:

$$[j(j+1) - m(m+1)]^{\dagger} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j, m+1 \rangle \\ = [j_1(j_1+1) - m_1(m_1-1)]^{\dagger} \langle j_1 m_1 - 1, j_2 m_2 | j m \rangle \\ + [j_2(j_2+1) - m_2(m_2-1)]^{\dagger} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 - 1 | j m \rangle. \quad (51-6)$$

بطور مشابه، با اعمال عملگر پایین آورنده $J_- = J_{1-} + J_{2-}$ به طرفین (۶-۳۸) و انجام مراحل بالا رابطه دیگری به دست می آوریم:

$$[j(j+1) - m(m-1)]^{\dagger} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 | j, m-1 \rangle \\ = [j_1(j_1+1) - m_1(m_1+1)]^{\dagger} \langle j_1 m_1 + 1, j_2 m_2 | j m \rangle \\ + [j_2(j_2+1) - m_2(m_2+1)]^{\dagger} \langle j_1 m_1, j_2 m_2 + 1 | j m \rangle. \quad (52-6)$$

این روابط بازگشتی کافی است تا با شروع از اولین ضریب (۴-۴۶) که تنها ضریب

جدول ۴-۶ محاسبه ضرایب کلبش-گوردن.

		j	$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2 - 1$	\dots	\dots
		m	$j_1 + j_2$	$j_1 + j_2 - 1$	$j_1 + j_2 - 1$	\dots	\dots
j_1	j_2						
j_1	$j_2 - 1$						
$j_1 - 1$	j_2						
\vdots	\vdots						
\vdots	\vdots						
\vdots	\vdots						

1	0	0	0	\dots	\dots
0	a	c	0	\dots	\dots
0	b	d	0	\dots	\dots
0	0	0	\dots	\dots	\dots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots
\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots	\vdots

با $m = j_1 + j_2$ است سایر ضرایب C-G را به دست آوریم.

فرض کنید، به عنوان مثال، بخواهیم تمام ضرایب C-G با $m = j_1 + j_2 - 1$ را به دست آوریم. با قرار دادن $m_2 = j_2 - 1$ ، $m_1 = j_1$ و $j = j_1 + j_2$ و استفاده از قواعد گزینش (۴۴-۶) همراه با (۴۴-۶)، به دست می‌آوریم:

$$\langle j_1 j_1, j_2 j_2 - 1 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle = [j_2 / (j_1 + j_2)]^{\frac{1}{2}} \quad (۵۳-۶)$$

همین طور اگر در (۵۲-۶) قرار دهیم $m_1 = j_1 - 1$ ، $m_2 = j_2$ و $j = m = j_1 + j_2$ به دست می‌آوریم:

$$\langle j_1 j_1 - 1, j_2 j_2 | j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1 \rangle = [j_1 / (j_1 + j_2)]^{\frac{1}{2}} \quad (۵۴-۶)$$

اینها، دو ضریب C-G با $j = j_1 + j_2$ و $m = j_1 + j_2 - 1$ می‌باشند. دو ضریب C-G دیگر $m = j_1 + j_2 - 1$ وجود دارد و هر دوی آنها دارای $m = j_1 + j_2 - 1$ می‌باشند. این ضرایب را می‌توان با استفاده از روابط تعامد (۴۷-۶) محاسبه کنیم. برای روشن ساختن روش، در جدول (۴-۶) عناصر ماتریس موردنظر را نشان داده‌ایم، در این جدول عناصر ماتریسی (۵۳-۶) و (۵۴-۶) به ترتیب با a و b نمایش داده شده‌اند. عناصری که باید محاسبه شوند با c و d نشان داده شده‌اند. از نرمالیزه بودن سطر $(j_1, j_2 - 1)$ داریم:

$a^2 + c^2 = 1$ که با استفاده از (۶-۵۳) برای a داریم:

$$c^2 = j_1 / (j_1 + j_2) \quad (۵۵-۶)$$

بطور مشابه از نرمالیزه بودن سطر $(j_2, j_1 - 1)$ همراه با مقدار (۶-۵۴) برای b داریم:

$$d^2 = j_2 / (j_1 + j_2) \quad (۵۶-۶)$$

تعامد دو ستون مورد نظر ایجاب می کند که $ac + bd = 0$ یا $\frac{1}{2} \left(\frac{j_1}{j_2} \right) ac + bd = 0$. این رابطه نشان می دهد که c و d هر دو حقیقی و مختلف العلامه اند. در این جا نیز یک انتخاب دلخواه برای علامت وجود دارد که بر طبق قرارداد طوری تعیین می شود که اولین عنصر، که برای آن $m = j_1 = j_2$ است و به شکل $\langle j_1, j_1 | j_1, j_1 \rangle < j_2, j_2 | j_2, j_2 \rangle$ می باشد حقیقی و مثبت باشد. با این قرارداد داریم:

$$c \equiv \langle j_1, j_1, j_2, j_2 - 1 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle = [j_1 / (j_1 + j_2)]^{1/2} \quad (۵۷-۶ \text{ الف})$$

$$d \equiv \langle j_1, j_1 - 1, j_2, j_2 | j_1 + j_2 - 1, j_1 + j_2 - 1 \rangle = -[j_2 / (j_1 + j_2)]^{1/2} \quad (۵۷-۶ \text{ ب})$$

سپس مقدار $m = j_1 + j_2 - 2$ را در نظر می گیریم. این، یک زیر ماتریس 3×3 از ضرایب C-G را می دهد که در آن $j_1 + j_2 - 2$ ، $j_1 + j_2 - 1$ ، $j = j_1 + j_2$ و $(j_2, j_1 - 2)$ ، $(j_1 - 1, j_2 - 1)$ ، $(j_1, j_2 - 2)$ ، (m_1, m_2) دو ستون اول (به ازای: $j = j_1 + j_2 - 1$ و $j = j_1 + j_2 - 1$) می توان با استفاده از (۶-۵۳)، (۶-۵۴) و (۶-۵۷) در (۶-۵۲) به دست آورد. ستون آخر (به ازای $m = j_1 + j_2 - 2$) از راست هنجاری سطرها به دست می آید. باز هم فرایند نرمالیزه کردن به دلخواه بودن یک علامت منجر می شود که بر طبق قرارداد طوری آن را تعیین می کنیم که اولین عنصر ستون آخر حقیقی و مثبت باشد.

با تکرار این روش کلیه بلوکهای باقیمانده ماتریس مورد نظر تعیین می شود. ماتریسهای ضرایب C-G برای چند مقدار کوچک j_1 و j_2 در جدول (۶-۵) آورده شده است.

نمادهای 3-جی و یگتر که با ضرایب C-G مرتبطند به صورت عددی برای موارد زیادی در مجلات علمی^۹ آمده است.

۵-۶ عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر

علاوه بر گذارهای یک سیستم فیزیکی که می تواند توسط تابش دو قطبی الکتریکی و مغناطیسی ایجاد شود، ممکن است گذارهای مرتبه بالاتر، به خاطر تابش چهار قطبی الکتریکی یا مغناطیسی، هشت قطبی الکتریکی یا مغناطیسی و غیره نیز ایجاد گردد. هر چند شدت این گذارها کوچک است ولی وقتی گذار دو قطبی الکتریکی ممنوع باشد اهمیت پیدا می کنند. می توان به آسانی از قضیه عنصر ماتریسی فصل پنجم استفاده کرد و قواعد گزینش برای گذارهای مرتبه های بالاتر را پیدا کرد. یک قضیه منسوب به ویگنر و اکارت، که در بخش بعدی به آن خواهیم پرداخت، بدون این که مجبور باشیم عناصر ماتریسی را صریحاً محاسبه کنیم، نسبتهای احتمالات گذار را نیز می دهد. این محاسبه با استفاده از مفهوم عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر، که موضوع این بخش ماست، به بهترین وجهی امکان پذیر است.

خواص دورانی یک عملگر توسط روابط جابجایی اش با عملگر اندازه حرکت زاویه ای کل J تعیین می شود. برای نشان دادن این امر، فرض کنید $R(\phi)$ معرف یک دوران محورهای مختصات باشد که در آن اندازه بردار ϕ ، زاویه دوران و جهتش، جهت محور دوران را نشان می دهد. فرض کنید $U_R(\phi)$ عملگر متناظری باشد که روی توابع عمل می کند. فرض کنید P یک عملگر قبل از تبدیل و P' همان عملگر بعد از دوران باشد. در این صورت:

$$P' = U_R(\phi)^\dagger P U_R(\phi) \quad (58-6)$$

عملگر دوران $U_R(\phi)$ دارای شکل زیر است:

$$U_R(\phi) = \exp(-i \phi \cdot J / \hbar) \quad (59-6)$$

برای دورانهایی بی نهایت کوچک، (۵۸-۶) تا مرتبه اول نسبت به ϕ عبارت است از:

$$\begin{aligned} P' &\simeq (1 + i \phi \cdot J / \hbar) P (1 - i \phi \cdot J / \hbar) \\ &\simeq P + \frac{i}{\hbar} [\phi \cdot J, P]. \end{aligned} \quad (60-6)$$

اکنون عملگرهای اسکالر و برداری و سپس عملگر تانسوری را بطور کلی تعریف می کنیم.

۶-۵-۱ عملگرهای اسکالر

یک کمیت را اسکالر گوییم اگر تحت همه دورانها تغییرناپذیر بماند. مثالهای بدیهی از کمیت‌های اسکالر عبارتند از: جرم، طول، انرژی و غیره. بطور مشابه یک عملگر S را عملگر اسکالر می‌نامیم اگر تحت همه دورانها تغییرناپذیر بماند. به عنوان مثال، هامیلتونین یک سیستم یکروند نظیر یک اتم، یک عملگر اسکالر می‌باشد.

عملگر برهمکنش اسپین-مدار $\vec{L} \cdot \vec{S}$ نیز یک عملگر اسکالر است. از این رو یک عملگر اسکالر نمایش $D^{(0)}$ گروه دوران را ایجاد می‌کند. سپس بر طبق قضیه عنصر ماتریسی، ملاحظه می‌کنیم که باید کلیه عناصر ماتریسی یک عملگر اسکالر بین حالت‌های متعلق به نمایشهای کاهش‌ناپذیر مختلف یا ستونهای مختلف یک نمایش $SO(3)$ صفر شوند. به علاوه می‌توان نشان داد که عنصر ماتریسی یک عملگر اسکالر بین هر دو حالتی که بر طبق یک ستون نمایش کاهش‌ناپذیر معینی از $SO(3)$ تبدیل شوند مستقل از نماد ستون می‌باشد.

بدین ترتیب اگر S یک عملگر اسکالر باشد، تحت تمام دورانها تغییرناپذیر است، بطوری که $S' = S$. اگر در $(6-60)$ ، P را با S جایگزین کنیم، می‌بینیم که این زمانی ممکن است که S با تمام مؤلفه‌های اندازه حرکت زاویه ای کل \vec{J} سیستم جابجاپذیر باشد، یا:

$$[J, S] = 0 \quad (6-61)$$

فرض کنید $|N, j, m\rangle$ مجموعه ویژه تابعهای مشترک J^2 و J_z باشند. هدف ما این است که عنصر ماتریسی S بین هر دو ویژه حالت از این مجموعه یعنی، $\langle N' j' m' | S | N j m \rangle$ را بررسی کنیم. چون S با \vec{J} جابجاپذیر است، اعمال J^2 و مؤلفه‌های \vec{J} به بردار $|N j m\rangle$ با اعمال آنها به $|N j m\rangle$ یکی است. بنابراین بردار $|N j m\rangle$ مانند ستون m ام نمایش کاهش‌ناپذیر J ام گروه دوران تبدیل می‌شود. در این صورت بشابر تعامد توابع پایه (بخش ۵-۵-۱ را ببینید) داریم:

$$\langle N' j' m' | S | N j m \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} \langle N' j m | S | N j m \rangle \quad (6-62)$$

در اولین معادله (۶-۳۰) به جای m ، $m-1$ قرار می‌دهیم، می‌توانیم بنویسیم:

$$|N j m\rangle = \{[j(j+1) - m(m-1)] \hbar^2\}^{-1/2} J_+ |N j m-1\rangle \quad (6-63)$$

با استفاده از این رابطه، عنصر ماتریسی طرف راست (۶-۶۲) به صورت زیر درمی آید:

$$\begin{aligned} & \langle N' j m | S | N j m \rangle \\ & = \{ [j(j+1) - m(m-1)] \hbar^2 \}^{-\frac{1}{2}} \langle N' j m | S J_+ | N j m-1 \rangle \quad (۶۴-۶) \\ & = \{ [j(j+1) - m(m-1)] \hbar^2 \}^{-\frac{1}{2}} \langle N' j m | J_+ S | N j m-1 \rangle \end{aligned}$$

اگر معادله دوم (۶-۳۰) را مزدوج کنیم، داریم:

$$\langle N j m | J_+ = \langle N j m-1 | [j(j+1) - m(m-1)]^{\frac{1}{2}} \hbar \quad (۶۵-۶)$$

با قرار دادن این رابطه در (۶-۶۴)، بالاخره به دست می آید:

$$\langle N' j m | S | N j m \rangle = \langle N' j m-1 | S | N j m-1 \rangle, \quad (۶۶-۶)$$

که نشان می دهد عنصر ماتریسی مستقل از m است و فقط به j و سایر اعداد کوانتومی بستگی دارد. بنابراین، کمیت زیر را که عنصر ماتریسی کاهش یافته عملگر اسکالر نامیده می شود، تعریف می کنیم:

$$S_{NN'}^{(j)} \equiv \langle N j m | S | N' j m \rangle, \quad (۶۷-۶)$$

در این صورت معادله (۶-۶۲) به صورت زیر درمی آید:

$$\langle N j m | S | N' j' m' \rangle = \delta_{j'j} \delta_{m'm} S_{NN'}^{(j)} \quad (۶۸-۶)$$

۶-۵-۲ عملگرهای برداری

مقتضی است که بار دیگر ببینیم از یک بردار چه می فهمیم. علاوه بر این که یک بردار دارای اندازه و جهت است، به وسیله تبدیلیش در اثر دوران مشخص می شود. اگر \vec{T} یک بردار و \vec{T}' همان بردار پس از دوران بی نهایت کوچک ϕ باشد، می توان به کمک جبر برداری نشان داد که:

$$\vec{T}' \simeq \vec{T} + \phi \times \vec{T} \quad (۶۹-۶)$$

یک عملگر برداری، دقیقاً به همان طریق با خواص تبدیلی اش تعریف می شود. یک عملگر \vec{V} با سه مؤلفه دکارتی (V_x, V_y, V_z) را یک عملگر برداری می گوئیم اگر پس از یک دوران بی نهایت کوچک ϕ ، عملگر تبدیل یافته \vec{V}' توسط رابطه زیر داده شده باشد:

$$U_R(\phi) \vec{V} U_R(\phi) \equiv \vec{V}' \simeq \vec{V} + \phi \times \vec{V} \quad (۷۰-۶)$$

مقایسه با (۶-۶۰) نشان می دهد که یک عملگر برداری \vec{V} باید در روابط جابجایی زیر صدق کند:

$$\frac{i}{\hbar}[\underline{\phi}, \underline{J}, \underline{V}] = \underline{\phi} \times \underline{V} \quad (۷۱-۶)$$

توجه کنید که اگر \vec{V} را با \vec{J} جایگزین کنیم، معادله بالا یک اتحاد می شود. اثبات این نکته به صورت مسأله (۶-۷۰) به عهده خواننده واگذار شده است. بدین ترتیب عملگر اندازه حرکت زاویه ای \vec{J} یک عملگر برداری است. نمونه های دیگری از عملگرهای برداری عبارتند از: عملگر مکانیک کوانتومی مکان، اندازه حرکت خطی، اندازه حرکت زاویه ای مداری، اندازه حرکت زاویه ای اسپینی، اندازه حرکت زاویه ای اسپینی ایزوتوپی، عملگرهای ممان دو قطبی الکتریکی و مغناطیسی و غیره.

بهتر است با مؤلفه های کروی (که مؤلفه های استاندارد نیز نامیده می شوند) یک عملگر برداری \vec{V} کار کنیم تا با مؤلفه های دکارتی آن. این مؤلفه ها به صورت زیر تعریف می شوند:

$$V_1 = -(V_x + iV_y)/\sqrt{2}, \quad V_0 = V_z, \quad V_{-1} = (V_x - iV_y)/\sqrt{2} \quad (۷۲-۶)$$

بالاخره با قرار دادن این مؤلفه ها در (۶-۷۱) نه رابطه جابجایی زیر بین مؤلفه های \vec{J} و مؤلفه های \vec{V} به دست می آید:

$$\begin{aligned} [J_+, V_1] &= 0, & [J_-, V_1] &= \sqrt{2} \hbar V_0, & [J_z, V_1] &= \hbar V_1, \\ [J_+, V_{-1}] &= \sqrt{2} \hbar V_0, & [J_-, V_{-1}] &= 0, & [J_z, V_{-1}] &= -\hbar V_{-1}, \\ [J_+, V_0] &= \sqrt{2} \hbar V_1, & [J_-, V_0] &= \sqrt{2} \hbar V_{-1}, & [J_z, V_0] &= 0. \end{aligned} \quad (۷۳-۶)$$

این روابط جابجایی را می توان به صورت فشرده تر زیر نوشت:

$$\begin{aligned} [J_{\pm}, V_q] &= [2 - q(q \pm 1)] \frac{1}{2} \hbar V_{q \pm 1}, \\ [J_z, V_q] &= q \hbar V_q; \quad q = 1, 0, -1. \end{aligned} \quad (۷۴-۶)$$

این معادلات به عنوان یک تعریف دیگر از عملگر برداری به کار می روند: \vec{V} را یک عملگر برداری گوئیم اگر بین مؤلفه های آن و مؤلفه های اندازه حرکت زاویه ای کل روابط جابجایی (۷۴-۶) برقرار باشد.

به عنوان شق سوم، می توانیم از این واقعیت استفاده کنیم که مؤلفه های کروی یک

بردار \vec{T} تحت دوران بی نهایت کوچک $R(\alpha, \beta, \gamma)$ بر طبق رابطه زیر تبدیل می شوند
(مسأله ۴-۸ را ببینید):

$$R(\alpha, \beta, \gamma) r_m \equiv r_{m'} = \sum_{m'=-1}^1 r_{m'} D_{m'm}^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma); \quad (75-6)$$

در این صورت گوئیم \vec{V} یک عملگر برداری است اگر مولفه های آن عملگرهایی باشند که به صورت زیر تبدیل شوند:

$$U_R(\underline{\phi})^\dagger V_m U_R(\underline{\phi}) \equiv V_{m'} = \sum_{m'=-1}^1 V_{m'} D_{m'm}^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma), \quad (76-6)$$

که در آن $U_R(\emptyset)$ متناظر است با دوران $R(\alpha, \beta, \gamma)$.
در این جا شکل صریح ماتریس $D^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma)$ را که با قرار دادن $j=1$ در
(۴-۸۸) به دست می آید، می آوریم:

$$D^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{bmatrix} \cos^2 \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta e^{i\gamma} & \sin^2 \frac{\beta}{2} e^{i(\gamma-\alpha)} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta e^{i\alpha} & \cos \beta & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta e^{-i\alpha} \\ \sin^2 \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)} & \frac{1}{\sqrt{2}} \sin \beta e^{-i\gamma} & \cos^2 \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)} \end{bmatrix} \quad (77-6)$$

می توان ثابت کرد که این یک ماتریس یکانی است.

قبلاً دو نوع بردار تعریف کردیم: بردار قطبی و بردار محوری. هر دو نوع بردار تحت دورانه های محض دارای خواص یکسانی هستند ولی یک بردار قطبی تحت وارونی تغییر علامت می دهد درحالی که یک بردار محوری تغییرناپذیر است. همین تعریف را برای عملگرهای برداری قطبی و محوری نیز انتخاب می کنیم. بدین ترتیب اگر U معرف عملگر وارونی باشد، داریم:

$$U_j^\dagger \mathbf{V} U_j = \begin{cases} -V & \text{برای یک عملگر برداری قطبی} \\ +V & \text{برای یک عملگر برداری محوری} \end{cases} \quad (78-6)$$

یک عملگر برداری قطبی به نمایش $D(1, -)$ و یک عملگر برداری محوری به نمایش $D(1, +)$ گروه $O(3)$ تعلق دارد. درین مثالهایی که در این قسمت آوردیم، عملگرهای مکان، اندازه حرکت خطی و دو قطبی الکتریکی، عملگرهای برداری قطبی می باشند درحالی که عملگر اندازه حرکت زاویه ای (مداری، اسپینی یا اسپین ایزوتوپی) و عملگر ممان دو قطبی مغناطیسی، عملگرهای برداری محوری هستند.

۳-۵-۶ تانسورها و عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر

اگر \vec{U} و \vec{V} دو بردار باشند، از جبر تانسوری مقدماتی می دانیم که نه کمیت $U_m V_q$ (که در آن m و q مقادیر $-1, 0, 1$ را می گیرند) مولفه های یک تانسور مرتبه دوم می باشند که تحت دوران به صورت زیر تبدیل می شوند:

$$R(\alpha, \beta, \gamma) U_m V_q \equiv U_m' V_q' = \sum_{n, l=-1}^{+1} U_n V_l D_{nm}^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma) D_{lq}^{(1)}(\alpha, \beta, \gamma). \quad (79-6)$$

بطور مشابه، نه عملگر $U_m V_q$ که در آن \vec{U} و \vec{V} عملگرهای برداری هستند، را مولفه های یک عملگر تانسوری مرتبه دوم $\vec{U}\vec{V}$ گوئیم اگر مولفه های تبدیل یافته

$$U_m' V_q' \equiv U_R^\dagger U_m V_q U_R \quad (80-6)$$

مانند (79-6) برحسب مولفه های $U_m V_q$ بیان شوند. عملگر تانسوری $\vec{U}\vec{V}$ حاصل ضرب مستقیم یا کرونکر عملگرهای برداری \vec{U} و \vec{V} می باشد.

واضح است که نه مولفه تانسور $\vec{U}\vec{V}$ یک نمایش نه بعدی $D(1) \otimes D(1)$ از گروه $SO(3)$ را ایجاد می کنند. این نمایش را می توان به صورت $D(0) \oplus D(1) \oplus D(2)$ کاهش داد. نتیجه می شود که می توان ترکیبات خطی مناسبی از این نه مولفه $\vec{U}\vec{V}$ طوری ساخت که یکی از آنها تحت تمام دورانه تغییر ناپذیر باشد، سه تای آنها $D(1)$ و پنج ترکیب باقیمانده $D(2)$ را ایجاد کنند. واضح است که ترکیب خطی تغییر ناپذیر، رد ماتریس $1^0 \vec{U}\vec{V}$ است بطوری که:

۱۰- یک ماتریس مرتبه ۲ نظیر $\vec{U}\vec{V}$ را می توان به صورت یک ماتریس مربعی با عناصر $U_i V_j$ (۱, ۲ = x, y, z) نوشت.

$$T_0^0 = U_x V_x + U_y V_y + U_z V_z = \sum_{m=-1}^1 (-1)^m U_m V_{-m}. \quad (۸۱-۶)$$

از این رو T_0^0 یک عملگر اسکالر است که نمایش $D^{(0)}$ را ایجاد می‌کند. بدیهی است که با \vec{U}, \vec{V} ، حاصلضرب اسکالر دو عملگر برداری \vec{U} و \vec{V} برابر است.

می‌توان نشان داد که سه ترکیب خطی که $D^{(1)}$ را ایجاد می‌کنند مؤلفه‌های حاصلضرب برداری $\vec{T}^{(1)} = \vec{U} \times \vec{V}$ می‌باشند. این حاصلضرب دارای مؤلفه‌های دکارتی:

$$\begin{aligned} T_x^{(1)} &= U_y V_z - U_z V_y, & T_y^{(1)} &= U_z V_x - U_x V_z, \\ T_z^{(1)} &= U_x V_y - U_y V_x, \end{aligned} \quad (۸۲-۶)$$

می‌باشد که تحت دوران مانند x, y و z تبدیل می‌شوند. با استفاده از (۶-۷۲) می‌توانیم مؤلفه‌های کروی $\vec{T}^{(1)}$ را که عبارتند از:

$$T_{\pm 1}^{(1)} = U_{\pm 1} V_0 - U_0 V_{\pm 1}, \quad T_0^{(1)} = U_1 V_{-1} - U_{-1} V_1, \quad (۸۳-۶)$$

و به ترتیب مانند $x \pm iy$ و z یا مانند نوسان‌کننده هارمونیک یک بعدی تبدیل می‌شوند، به دست آوریم.

بالاخره پنج ترکیب خطی که $D^{(2)}$ را ایجاد می‌کنند، بجز در ضرایب ثابت، به صورت زیر بر حسب مؤلفه‌های دکارتی U و V به دست می‌آیند:

$$\begin{aligned} T_{xy}^{(2)} &= U_x V_y + U_y V_x, & T_{yz}^{(2)} &= U_y V_z + U_z V_y, \\ T_{zx}^{(2)} &= U_z V_x + U_x V_z, & T_{x^2-y^2}^{(2)} &= U_x V_x - U_y V_y, \\ T_{2z^2-x^2-y^2}^{(2)} &= 2U_z V_z - U_x V_x - U_y V_y, \end{aligned} \quad (۸۴-۶)$$

این مؤلفه‌ها مانند پنج چند جمله‌ای مستقل درجه دو تبدیل می‌شوند، که با استفاده از نمادهای مناسب مشخص شده‌اند. بار دیگر با تبدیل این مؤلفه‌ها به مؤلفه‌های کروی مؤلفه‌های زیر را به دست می‌آوریم که با هارمونیک‌های کروی درجه دو متناسبند:

$$\begin{aligned} T_{\pm 2}^{(2)} &\sim T_{x^2-y^2}^{(2)} \pm 2iT_{xy}^{(2)} \sim U_{\pm 1} V_{\pm 1} \propto Y_2^{\pm 2}(\theta, \phi), \\ T_{\pm 1}^{(2)} &\sim \mp (T_{zx}^{(2)} \pm iT_{yz}^{(2)}) \sim U_{\pm 1} V_0 + U_0 V_{\pm 1} \propto Y_2^{\pm 1}(\theta, \phi), \\ T_0^{(2)} &\sim T_{2z^2-x^2-y^2}^{(2)} \sim 2U_0 V_0 + U_1 V_{-1} + U_{-1} V_1 \propto Y_2^0(\theta, \phi). \end{aligned} \quad (۸۵-۶)$$

علت این که به جای علامت تساوی از علامت \sim استفاده شده است این است که نشان دهیم ضرایب ثابت را حذف کرده ایم.

عملگرهای $\vec{T}(0)$ ، $\vec{T}(1)$ و $\vec{T}(2)$ که در بالا ساختیم، عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر نامیده می‌شوند. بطور کلی یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر (یا عملگر تانسور کروی) $\vec{T}(k)$ از درجه k را که در آن $k = 0, \frac{1}{3}, 1, \frac{3}{3}, \dots$ است به عنوان عملگری تعریف می‌کنیم که دارای $2k+1$ مؤلفه $T_q(k)$ می‌باشد که آنها را کروی یا استاندارد نامند ($q = -k, -k+1, \dots, k-1, k$) و در اثر دوران به صورت زیر تبدیل می‌شوند:

$$U_R^\dagger T_q(k) U_R = \sum_{m=-k}^k T_m^{(k)} D_{mq}^{(k)}(R). \quad (۸۶-۶)$$

به عبارت دیگر، $\vec{T}(k)$ یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر است اگر $(2k+1)$ مؤلفه نمایش کاهش ناپذیر $D^{(k)}$ ی $SU(2)$ را ایجاد کنند. تعداد $(2l+1)$ هارمونیک کروی $Y_l^m(\theta, \phi)$ اگر به عنوان عملگر در نظر گرفته شوند، مؤلفه‌های استاندارد عملگر تانسوری کاهش ناپذیر $\vec{Y}^{(l)}$ از درجه l می‌باشند. همچنین عملگر ممان چندقطبی الکتریکی یا مغناطیسی مرتبه 2^l یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر درجه l می‌باشد. به ازای $l = 0, 1, 2, 3, \dots$ عملگرهای ممان تک قطبی، دو قطبی، چهار قطبی، هشت قطبی، حاصل می‌شود.

کلیه عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیری که از نظر فیزیکی مورد توجه هستند، دارای مقادیر صحیح k می‌باشند. چون مؤلفه‌های یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر $\vec{T}(k)$ ، به ازای مقادیر صحیح k ، دارای همان خواص تبدیلی هارمونیکهای کروی درجه l می‌باشند، روابط جابجایی آنها با مؤلفه‌های عملگر اندازه حرکت زاویه ای کل \vec{J} همان روابط جابجایی هارمونیکهای کروی با مؤلفه‌های عملگر اندازه حرکت زاویه ای کل می‌باشد. این مطلب از رابطه (۶-۶) نتیجه می‌شود که بنابه آن تبدیل یک عملگر در اثر دوران، بطور منحصر بفردی توسط روابط جابجایی آن با \vec{J} مشخص می‌شود. با داشتن

۱۱ - بعضی از مؤلفین به جای درجه (degree)، مرتبه (rank) به کار می‌برند، ولی این کار امکان

دارد خواننده را به اشتباه بیندازد زیرا عملگر \vec{U}^\dagger یک تانسور مرتبه دو نیز هست.

روابط جابجایی^{۱۲} مؤلفه های \vec{T} با Y_k^m ، می توانیم بلافاصله روابط جابجایی زیر را بنویسیم:

$$\begin{aligned} [J_z, T_q^{(k)}] &= q \hbar T_q^{(k)}, \\ [J_{\pm}, T_q^{(k)}] &= [k(k+1) - q(q \pm 1)] \hbar T_{q \pm 1}^{(k)} \end{aligned} \quad (۸۷-۶)$$

این روابط تعریف دیگری از عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر را فراهم می آورند. بر طبق این تعریف که منسوب به راکا^{۱۳} می باشد، تعداد $(2k+1)$ عملگر $T_q^{(k)}$ را مؤلفه های استاندارد یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر $\vec{T}^{(k)}$ گوئیم اگر روابط جابجایی (۸۷-۶) بین آنها و مؤلفه های عملگر اندازه حرکت زاویه ای کل برقرار باشد. توجه کنید که در قسمت گذشته به ازای $k=1$ ، بطور صریح هم ارزی دو تعریف (۸۶-۶) و (۸۷-۶) را برای عملگرهای برداری نشان دادیم. در حالت کلی نیز، می توان بطور اصولی هر چند با زحمت، با مقایسه (۶۰-۶) و (۸۶-۶) روابط جابجایی (۸۷-۶) را به دست آورد.

۴-۵-۶ ضرب مستقیم عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر

در قسمت گذشته نشان دادیم که ضرب مستقیم دو عملگر برداری را می توان به صورت مجموع سه عملگر تانسوری کاهش ناپذیر کاهش داد. می توانیم این مفهوم را تعمیم داده و نشان دهیم که ضرب مستقیم هر دو عملگر تانسوری کاهش ناپذیر را می توان به صورت یک مجموع از عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر کاهش داد.

فرض کنید $\vec{S}^{(k)}$ ، $\vec{T}^{(k)}$ به ترتیب دو عملگر تانسوری کاهش ناپذیر از درجه k و p باشند. ضرب مستقیم این دو، یک عملگر تانسوری است که دارای $(2k+1)(2p+1)$ مؤلفه $T_r^{(p)} S_q^{(k)}$ می باشد، که در آن $k \leq q \leq k-k$ و $-p \leq r \leq p$. برای بررسی خواص تبدیلی این مؤلفه ها، اثر دوران R روی یکی از این مؤلفه ها را در نظر می گیریم. مؤلفه تبدیل یافته توسط رابطه زیر داده می شود:

۱۲- رك: شيف (۱۹۶۸)، معادلات (۱۶-۲۸) و (۱۷-۲۸).

۱۳- رك: فانو و راکا (۱۹۵۹).

$$\begin{aligned}
 U_R^\dagger S_q^{(k)} T_r^{(p)} U_R &= U_R^\dagger S_q^{(k)} U_R U_R^\dagger T_r^{(p)} U_R \\
 &= \sum_{l, n} S_l^{(k)} T_n^{(p)} D_{lq}^{(k)}(R) D_{nr}^{(p)}(R)
 \end{aligned} \quad (۸۸-۶)$$

این رابطه نشان می‌دهد که $(2k+1)(2p+1)$ عملگر $S_q^{(k)} T_r^{(p)}$ بر طبق نمایش ضرب مستقیم $D^{(k)} \otimes D^{(p)}$ تبدیل می‌شوند. ثابت می‌شود که می‌توان عملگر $S_q^{(k)} T_r^{(p)}$ را بر حسب یک ترکیب خطی از عملگرهای تانسوری کاهش ناپذیر $U_l^{(s)}$ (که در آن $0 < s < k+p$ یا $0 < s < k-p$ است) با ضرایب C-G به صورت زیر نوشت:

$$S_q^{(k)} T_r^{(p)} = \sum_s \sum_l U_l^{(s)} \langle k q, p r | s t \rangle \quad (۸۹-۶)$$

حال از معادله بالا $U_l^{(s)}$ را به دست می‌آوریم. برای این کار طرفین (۸۹-۶) را در $\langle k q, p r | s' t' \rangle$ ضرب می‌کنیم و روی q و r جمع بندی می‌کنیم، سپس با استفاده از رابطه متعامد (۶-۴۷ ج) به دست می‌آوریم:

$$U_l^{(s)} = \sum_{q=-k}^k \sum_{r=-p}^p S_q^{(k)} T_r^{(p)} \langle k q, p r | s t \rangle \quad (۹۰-۶)$$

می‌توان بطور صریح نشان داد که $U_l^{(s)}$ ها مولفه‌های یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر می‌باشند برای این منظور، روابط جابجایی $U_l^{(s)}$ را با عملگر اندازه حرکت زاویه‌ای به دست می‌آوریم. با استفاده از اتحاد عملگری $[A, BC] = [A, B]C + B[A, C]$ داریم:

$$\begin{aligned}
 [J_z, U_l^{(s)}] &= \sum_{q,r} \{ [J_z, S_q^{(k)}] T_r^{(p)} + S_q^{(k)} [J_z, T_r^{(p)}] \} \\
 &\quad \times \langle k q, p r | s t \rangle \quad (۹۱-۶) \\
 &= \sum_{q,r} (q+r) \hbar S_q^{(k)} T_r^{(p)} \langle k q, p r | s t \rangle \\
 &= t \hbar U_l^{(s)},
 \end{aligned}$$

که در آن از رابطه (۶-۸۷) و این واقعیت که ضرب کلبش گوردن $\langle k q, p r | s t \rangle$ فقط به ازای $q+r=t$ مخالف صفر است (رابطه ۶-۴۴ را ببینید) استفاده کرده‌ایم.

سپس رابطه جابجایی J_+ با $U_l^{(s)}$ را به دست می‌آوریم. با استفاده از (۶-۸۷)

$$\begin{aligned}
 [J_+, U_l^{(s)}] &= \sum_{q,r} \{ [k(k+1)-q(q+1)] \hbar S_{q+1}^{(k)} T_r^{(p)} \\
 &\quad + [p(p+1)-r(r+1)] \hbar S_q^{(k)} T_{r+1}^{(p)} \} \langle k q, p r | s t \rangle.
 \end{aligned} \quad \begin{array}{l} \text{داریم} \\ (۹۲-۶) \end{array}$$

حال مشابه آنچه در به دست آوردن (۶-۵۰) انجام دادیم، جمع بندی روی q در جمله اول را با جمع بندی روی $q' = q+1$ جایگزین می کنیم. حدود تغییرات q' همان حدود تغییرات q است (از $k-t$ تا k). همین طور در جمله دوم، جمع بندی روی r را با جمع بندی روی $r' = r+1$ جایگزین می کنیم. پس از مرتب کردن عبارت، بالاخره پریمهای q' و r' را حذف می کنیم، به دست می آید:

$$[J_{+}, U_i^{(s)}] = \sum_{q,r} \{ [k(k+1) - q(q-1)]^{\frac{1}{2}} \hbar \langle k, q-1, p, r | s, t \rangle + [p(p+1) - r(r-1)]^{\frac{1}{2}} \hbar \langle k, q, p, r-1 | s, t \rangle \} S_q^{(k)} T_r^{(p)} \quad (۹۳-۶)$$

با استفاده از رابطه بازگشتی (۶-۵۱)، رابطه بالا به صورت زیر درمی آید:

$$[J_{+}, U_i^{(s)}] = \sum_{q,r} [s(s+1) - t(t+1)]^{\frac{1}{2}} \hbar S_q^{(k)} T_r^{(p)} \times \langle k, q, p, r | s, t+1 \rangle. \quad (۹۴-۶)$$

بالاخره، با جایگزین کردن از تعریف (۶-۹۰)، داریم:

$$[J_{+}, U_i^{(s)}] = [s(s+1) - t(t+1)]^{\frac{1}{2}} \hbar T_{t+1}^{(s)} \quad (۹۵-۶)$$

با روش مشابه می توان نشان داد که:

$$[J_{-}, U_i^{(s)}] = [s(s+1) - t(t-1)]^{\frac{1}{2}} \hbar U_{t-1}^{(s)} \quad (۹۶-۶)$$

معادلات (۶-۹۱)، (۶-۹۵) و (۶-۹۶) نشان می دهند که $U^{(s)}$ یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر از درجه s است.

۶-۵-۵ عمل یک عملگر تانسوری روی ویژه حالت اندازه حرکت زاویه ای

در این جا نشان می دهیم که عمل یک مؤلفه عملگر تانسوری کاهش ناپذیر $\vec{T}^{(k)}$ روی یک ویژه حالت اندازه حرکت زاویه ای $|m\rangle$ یا حالتی را می دهد که می توان آن را برحسب یک ترکیب خطی از ویژه حالت های اندازه حرکت زاویه ای بسط داد. برای این منظور خواص دورانی حالت $|m\rangle$ یا $T_q^{(k)}$ را بررسی می کنیم. با اعمال U_R^{+} روی این حالت که متناظر است با دوران R و استفاده از (۶-۸۶) و (۶-۳۱)، داریم:

$$U_R^{+} T_q^{(k)} |j, m\rangle = U_R^{+} T_q^{(k)} U_R U_R^{+} |j, m\rangle = \sum_{q', m'} T_{q'}^{(k)} |j, m'\rangle D_{q'q}^{(k)}(R) D_{m'm}^{(j)}(R). \quad (۹۷-۶)$$

این رابطه نشان می دهد که $(2k+1)(2j+1)$ حالت $|j m\rangle$ از $T_q^{(k)}$ بر طبق نمایش ضرب مستقیم $D^{(k)} \otimes D^{(j)}$ تبدیل می شوند. بلافاصله نتیجه می گیریم که این حالتها را می توان به صورت ترکیبات خطی ویژه حالتهای اندازه حرکت زاویه ای $|j' m'\rangle$ نوشت که بر طبق نمایش کاهش ناپذیر $D^{(j')}$ ، به ازای $k+z \leq j \leq k-j$ تبدیل می شوند:

$$T_q^{(k)} |j m\rangle = \sum_{j', m'} |j' m'\rangle \langle j' m' | k q, j m\rangle \quad (۹۸-۶)$$

از رابطه بالا داریم:

$$|j' m'\rangle = \sum_{q, m} T_q^{(k)} |j m\rangle \langle k q, j m | j' m'\rangle \quad (۹۹-۶)$$

می توان بطور صریح نشان داد که حالتهای ساخته شده در (۹۹-۶) ویژه حالتهای اندازه حرکت زاویه ای با اعداد کوانتومی j' و m' می باشند. این عکس مسأله فوق است. برای این کار J_z را به طرفین (۹۹-۶) اعمال می کنیم و از اولین رابطه (۶-۸۷) استفاده می کنیم، به دست می آوریم:

$$\begin{aligned} J_z |j' m'\rangle &= \sum_{q, m} J_z T_q^{(k)} |j m\rangle \langle k q, j m | j' m'\rangle \\ &= \sum_{q, m} (T_q^{(k)} J_z + q \hbar T_q^{(k)}) |j m\rangle \langle k q, j m | j' m'\rangle \\ &= \sum_{q, m} (m+q) \hbar T_q^{(k)} |j m\rangle \langle k q, j m | j' m'\rangle \\ &= m' \hbar |j' m'\rangle. \end{aligned} \quad (۱۰۰-۶)$$

بطور مشابه می توانیم J_{\pm} را به طرفین (۹۹-۶) اعمال کنیم و از روابط جابجایی (۶-۸۷) استفاده کرده و مطابق قبل ادامه دهیم. تاکنون خواننده بایستی با این روش آشنا شده باشد. نتیجه نهایی عبارت است از:

$$J_{\pm} |j' m'\rangle = [j'(j'+1) - m'(m' \pm 1)]^{\frac{1}{2}} \hbar |j' m' \pm 1\rangle, \quad (۱۰۱-۶)$$

که همراه با (۱۰۰-۶) نشان می دهند، (۹۹-۶) یک ویژه حالت اندازه حرکت زاویه ای است.

۶-۶ عناصر ماتریسی عملگرهای تانسوری

خواص تبدیلی عملگرهای تانسوری و ویژه حالتها به خودی خود به اندازه عناصر

ماتریسی عملگرها بین ویژه حالتها از اهمیت برخوردار نیستند. قضیه ای منسوب به ویگنر و اکارت وجود دارد که نسبتهای عناصر ماتریسی یک عملگر تانسوری بین ویژه حالتهای اندازه حرکت زاویه ای را بر حسب ضرایب C-G می دهد. این قضیه، محاسبات را بطور قابل ملاحظه ای ساده می کند زیرا تمام عناصر ماتریسی یک عملگر تانسوری را می توان به یک عنصر بخصوص، که ساده ترین عنصر باشد و معمولاً بتواند بطور تجربی تعیین شود، مربوط ساخت.

۶-۶-۱ قضیه ویگنر-اکارت

باقرار دادن سایر اعداد کوانتومی، معادله (۶-۹۸) را می توان به صورت زیر نوشت:

$$T_q^{(k)} |N j m\rangle = \sum_{j', m'} |N j' m'\rangle \langle j' m' | k q, j m\rangle \quad (۱۰۲-۶)$$

فرض کنید $\vec{T}^{(k)}$ عملگر تانسوری باشد که می خواهیم عناصر ماتریسی آن را بدانیم. به خاطر حضور ضرایب C-G تنها یک جمله در جمع بندی روی m' در (۶-۱۰۲) باقی می ماند و آن جمله ای است که برای آن داریم $-m' = m + q$ اگر $|m + q\rangle$ باشد حتی همین جمله هم صفر می شود. به علاوه خود j' محدود به مقادیر $j + k \leq j' \leq j - k$ می باشد. با در نظر گرفتن ضمنی این قواعد گزینش در ضرایب C-G، معادله (۶-۱۰۲) بیان می کند که حالت $|N j m\rangle$ دارای قسمتهای مختلفی است که بر طبق ستون $(m + q)$ ام نمایش کاهش ناپذیر $D^{(j)}$ با ضرایب $\langle j' m' | k q | j m\rangle$ تبدیل می شوند. حاصلضرب اسکالر $\langle N j m | T_q^{(k)} | N j m\rangle$ بایک ویژه حالت اندازه حرکت زاویه ای $|N_1 j_1 m_1\rangle$ تنها وقتی مخالف صفر است که داشته باشیم: $m_1 = m + q$ ، $j_1 \leq j + k$ و $j_1 \leq |m + q|$. وقتی تمام این سه شرط برقرار باشد، رابطه (۶-۱۰۲) نشان می دهد که به خاطر تعامد حالتها $|N j m\rangle$ با j ها و m های مختلف، حاصلضرب اسکالر مورد نظر که در واقع عنصر ماتریسی $\langle N_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | N j m\rangle$ است، با $\langle j_1 m_1 | k q, j m\rangle$ متناسب است. اگر یکی از این سه شرط برقرار نباشد، ضریب C-G در نتیجه عنصر ماتریسی مورد نظر صفر خواهد شد. بنابراین در هر مورد می توانیم

عنصر ماتریسی $\langle N_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | N j m \rangle$ را به صورت حاصلضرب ضریب $\langle j_1 m_1 | k q, j m \rangle$ و یک کمیت دیگر بنویسیم:

$$\langle N_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | N j m \rangle = F(N_1 j_1 m_1, T_q^{(k)}, N j m) \langle j_1 m_1 | k q, j m \rangle \quad (۱۰۳-۶)$$

اکنون هدف ما این است که نشان دهیم ضریب $F(N_1 j_1 m_1, T_q^{(k)}, N j m)$ مستقل از m_1 و q است.

با ضرب اسکالر $\langle N_1 j_1 m_1 |$ در (۱۰۲-۶)، به دست می‌آوریم:

$$\langle N_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | N j m \rangle = \langle N_1 j_1 m + q | N' j_1 m + q \rangle \langle j_1 m_1 | k q, j m \rangle \quad (۱۰۴-۶)$$

همین طور اگر m_1 ، q و m را به ترتیب با m_1' ، q' و m' جایگزین کنیم به دست می‌آوریم:

$$\langle N_1 j_1 m_1' | T_{q'}^{(k)} | N j m' \rangle = \langle N_1 j_1 m' + q' | N' j_1 m' + q' \rangle \langle j_1 m_1' | k q', j m' \rangle \quad (۱۰۵-۶)$$

در بخش (۵-۵-۱) نشان دادیم که حاصلضرب اسکالر دو تابع پایه که هر دو مطابق یک ستون از یک نمایش کاهش ناپذیر تبدیل می‌شوند مستقل از نماد ستون است [معادله (۵-۴۵)ب]. بدین جهت داریم:

$$\langle N_1 j_1 m + q | N' j_1 m + q \rangle = \langle N_1 j_1 m' + q' | N' j_1 m' + q' \rangle \quad (۱۰۶-۶)$$

در این صورت معادله (۱۰۴-۶) نشان می‌دهد که کسر:

$$\langle N_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | N j m \rangle / \langle j_1 m_1 | k q, j m \rangle$$

مستقل از m و q و لذا مستقل از m_1 است. بنابراین می‌توانیم (۱۰۳-۶) را به صورت زیر بنویسیم:

$$\langle N_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | N j m \rangle = \langle N_1 j_1 || T^{(k)} || N j \rangle \langle j_1 m_1 | k q, j m \rangle, \quad (۱۰۷-۶)$$

که در آن $\langle N_1 j_1 || T^{(k)} || N j \rangle$ فقط به طبیعت عملگر تانسوری و اعداد کوانتومی N ، j ، N_1 و j_1 بستگی دارد و مستقل از m ، q و m_1 می‌باشد. این کمیت را عنصر

ماتریسی کاهش یافته یا عنصر ماتریسی (دو خط) می‌نامیم^{۱۴}.

معادله (۶-۱۰۷) قضیهٔ ویگنر اکارت را بیان می‌کند. بیان توصیفی این قضیه این است که عنصر ماتریسی مؤلفه q ام یک عملگر تانسوری $\vec{T}^{(k)}$ بین ویژه حالت‌های اندازهٔ حرکت زاویه‌ای $|N j m\rangle$ و $|N_1 j_1 m_1\rangle$ برابر است با حاصلضرب ضریب کلبش $\langle j_1 m_1 | k q, j m\rangle$ و یک عدد که مستقل از m ، q و m است.

عنصر ماتریسی (۶-۱۰۷) دارای همان قواعد گزینش ضریب C-G موجود در آن است، یعنی، بجز وقتی $k+j \leq j_1 \leq k-j$ ، $m_1 = m+q$ ، $|m_1| \leq j_1$ باشد، صفر می‌شود. هرگاه عنصر ماتریسی کاهش یافته $\langle N j m | \vec{T}^{(k)} | N_1 j_1 m_1\rangle$ به ازای مقادیر معین j ، j_1 ، N و N_1 تعیین شد، تمام $(2j_1+1)$ $(2k+1)$ $(2j+1)$ عنصر ماتریسی را می‌توان از روی جدول ضرایب C-G به دست آورد. به علاوه نسبت هر دو عنصر ماتریسی (از یک عملگر تانسوری) به شکل (۶-۱۰۷) برابر می‌شود با:

$$\frac{\langle N_1 j_1 m_1 | T_q^{(k)} | N j m\rangle}{\langle N_1 j_1 m_1' | T_{q'}^{(k)} | N j m'\rangle} = \frac{\langle j_1 m_1 | k q, j m\rangle}{\langle j_1 m_1' | k q', j m'\rangle}, \quad (۶-۱۰۸)$$

بنابراین نسبت‌های عناصر ماتریسی بدون هیچ اطلاع دیگری تعیین می‌شوند.

محاسبهٔ عنصر ماتریسی کاهش یافته بطور نظری کار ساده‌ای نیست. معمولاً با محاسبهٔ تجربی یک عنصر ماتریسی بخصوص تعیین می‌شود. این عنصر بخصوص، معمولاً ساده‌ترین عنصر انتخاب می‌شود، عنصری است که برای آن بسته به این‌که اندازهٔ حرکت زاویه‌ای سیستم عدد صحیح یا نیمه صحیح باشد، داشته باشیم $q=0$ ، $m = m_1 = 0$ یا $m = m_1 = \frac{1}{2}$. قضیهٔ ویگنر اکارت معمولاً در فیزیک اتمی و هسته‌ای کاربرد دارد.

۶-۶-۶ قواعد گزینش برای گذارهای چندقطبی

عملگر چندقطبی الکتریکی یا مغناطیسی مرتبهٔ 2^l ، یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر درجهٔ l با $(2l+1)$ مؤلفه است. عملگر چندقطبی الکتریکی دارای پاریته $(-1)^l$ است

۱۴- به مفهوم کوانتومی یک «عنصر ماتریسی» نیست و از این رو عنوان دوخط (double bars)

درحالی که عملگر چند قطبی مغناطیسی تحت وارونی دارای پارته $l+1$ (-1) می باشد. مورد $l=1$ (عملگرهای ممان دو قطبی) قبلاً در بخش ۶-۲ بررسی شد. اکنون قواعد گزینش برای گذارهای چهار قطبی الکتریکی در اتمهای چند الکترونی و تک الکترونی را به دست می آوریم.

عملگر ممان چهار قطبی الکتریکی یک عملگر تانسوری کاهش ناپذیر متناظر با $k=2$ است و تحت وارونی دارای پارته زوج است. باتوجه به (۶-۱۰۷)، مشاهده می کنیم که عنصر ماتریسی عملگر ممان چهار قطبی الکتریکی بین حالتیهای $|N L M\rangle$ و $|N' L' M'\rangle$ یک اتم چند الکترونی با ضریب کلبش گردن $\langle L' M' | 2 q, L M \rangle$ که در آن $2 \leq q \leq -2$ است، متناسب است. این امر بلافاصله به قواعد گزینش زیر منجر می شود:

$$\Delta L = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (0 \leftarrow / \rightarrow 0, 0 \leftarrow / \rightarrow 1); \quad (۶-۱۰۹)$$

$$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2.$$

برای گذارهای بین ویژه حالتیهای اندازه حرکت زاویه ای کل $|N J M\rangle$ و $|N' J' M'\rangle$ ، قواعد گزینش مشابهی داریم. باتوجه به این که J می تواند هم مقادیر صحیح و هم مقادیر نیمه صحیح بگیرد، قواعد گزینش زیر را داریم:

$$\Delta J = 0, \pm 1, \pm 2 \quad (0 \leftarrow / \rightarrow 0, \frac{1}{2} \leftarrow / \rightarrow \frac{1}{2}, 0 \leftarrow / \rightarrow 1); \quad (۶-۱۱۰)$$

$$\Delta M = 0, \pm 1, \pm 2.$$

در اتمهای تک الکترونی یک محدودیت دیگر، به خاطر پارته، وجود دارد. لذا اگر یک حالت اتم تک الکترونی متعلق به $D(l, \sigma)$ وجود داشته باشد، ممکن است حالتیهای متعلق به $D(l=2, \sigma)$ وجود داشته باشد ولی حالتیهای متعلق به $D(l=1, \sigma)$ نمی تواند وجود داشته باشد. چون عملگر ممان چهار قطبی الکتریکی دارای پارته زوج است، قواعد زیر را برای اتم تک الکترونی داریم:

$$\Delta l = 0, \pm 2 \quad (0 \leftarrow / \rightarrow 0). \quad (۶-۱۱۱)$$

به عنوان یک نتیجه از این قواعد گزینش، مقدار قابل انتظار عملگر ممان چند قطبی مرتبه 2^l (الکتریکی یا مغناطیسی) را در یک ویژه حالت اندازه حرکت زاویه ای در نظر می گیریم، این مقدار عبارت است از: $\langle N j m | T_q^{(l)} | N j m \rangle$. بجز وقتی

$1+z \leq |1-z|$ باشد، یعنی بجز وقتی $z \leq 2$ باشد، این عنصر ماتریسی صفر می‌شود. بنابراین برای یک ذره با اسپین صفر مقدار قابل انتظار ممان دو قطبی صفر است، یا به عبارت دیگر، یک ذره با اسپین صفر نمی‌تواند ممان دو قطبی داشته باشد. بطور مشابه یک ذره با اسپین صفر یا اسپین $\frac{1}{2}$ نمی‌تواند ممان چهار قطبی داشته باشد و غیره.

مسائل فصل ششم

۱-۶. نشان دهید که هر رده S_n بایستی شامل تمام جایگشت‌های زوج یا شامل تمام جایگشت‌های فرد باشد.

۲-۶. نشان دهید که تمام رده‌های S_n رده‌های خورد معکوسند.

۳-۶. برای یک سیستم متشکل از n شی' یکسان، نشان دهید:

$$(j k) (j m) (j k) = (j m) (j k) (j m) = (k m); \quad (\text{الف})$$

$$(j k) (j m) (j k) (j m) = (j m) (j k); \quad (\text{ب})$$

$$[(i j) (i k) (i m)] (i j) = (i m) [(i j) (i k) (i m)]; \quad (\text{ج})$$

$$[(i j) (i k) (i j)] (i m) = (i m) [(i j) (i k) (i j)]; \quad (\text{د})$$

که در آن $i, j, k, m < n$

۴-۶. از مولدهای $(1, 2)$ ، $(1, 3)$ ، $(1, 4)$ ، تمام جایگشت‌های S_4 را ایجاد کنید.

یعنی، با شروع از همانی، جایگشت‌های $(1, 2)$ ، $(1, 3)$ ، $(1, 4)$ ، حاصلضربهای دو مولد ... $(1, 2)(1, 3)$ ، $(1, 3)(1, 2)$ ، حاصلضربهای سه مولد و غیره را ایجاد کنید. نشان دهید که دقیقاً ۲۴ عنصر متمایز به دست می‌آورد [راهنمایی: از خواص مسأله (۳-۶) استفاده کنید].

۵-۶. فرض کنید \vec{J}_1 و \vec{J}_2 دو اندازه حرکت زاویه ای باشند.

(الف) نشان دهید که اگر \vec{J}_1 با \vec{J}_2 جابجاپذیر باشد، بردار $\vec{K} = \vec{J}_1 - \vec{J}_2$ (با مؤلفه‌های

$K_x = J_{1x} - J_{2x}$ و ...) یک اندازه حرکت زاویه ای نیست.

(ب) نشان دهید که $\vec{K} = \vec{J}_1 - \vec{J}_2$ در صورتی یک اندازه حرکت زاویه ای است که مؤلفه های \vec{J}_1 و \vec{J}_2 در روابط جابجایی زیر صدق کنند.

$$[J_{1x}, J_{2z}] = -i\hbar J_{2y}, [J_{1z}, J_{2y}] = i\hbar J_{2x}, [J_{1y}, J_{2x}] = 0$$

۶-۶. فرض کنید \vec{U} و \vec{V} دو عملگر برداری باشند.

(الف) نشان دهید که:

$$\sum_{m=-1}^{+1} (-1)^m U_m V_{-m} = U \cdot V = T_0^{(0)}$$

(ب) نشان دهید: عملگر $T_0^{(0)}$ که در بالا ساخته شده است یک عملگر

اسکالر است. [راهنمایی: با استفاده از (۶-۷۹) در طرف چپ معادله بالا ضرب می توانید نشان دهید که: $(-1)^m D_{1,-m}^{(1)} D_{1,-m}^{(1)} = (-1)^m D_{1,-m}^{(1)}$].
 می توانید نشان دهید که: $(-1)^m D_{1,-m}^{(1)} = (-1)^m D_{-1,m}^{(1)*}$. این عمل، ضرب با $(-1)^m D_{-1,m}^{(1)} D_{1,m}^{(1)}$ را می دهد که به خاطر یکنانی بودن $D^{(1)}$ ، برابر است با $[(-1)^m \delta_{n,-1}]$.

۷-۶. این مسأله، تعمیم مسأله بالاست. نشان دهید اگر $\vec{U}^{(k)}$ و $\vec{V}^{(k)}$ دو عملگر

تانسوری از درجه k باشند کمیت

$$\sum_{q=-k}^k (-1)^q U_q^{(k)} V_{-q}^{(k)}$$

یک عملگر اسکالر است. (این کمیت به حاصلضرب اسکالر دو عملگر تانسوری موسوم

است). [راهنمایی: باید از (۴-۷۳) ب نشان دهید که بطور کلی:

$$(-1)^q D_{m,-q}^{(k)} = (-1)^m D_{-m,q}^{(k)*}]$$

۸-۶. اگر یک اندازه حرکت زاویه ای برابر $\frac{1}{2} \hbar$ باشد، ضرایب کلیش گوردن

را برای j_1, j_2 و m, m_1 دلخواه به دست آورید. یک ماتریس 2×2 خواهید داشت که نماد

سطری آن $m_2 = \pm \frac{1}{2} \hbar$ و نماد ستونی آن $j_1 \pm \frac{1}{2} \hbar$ است.

۹-۶. نشان دهید که اگر در (۶-۷۱)، \vec{V} را با جایگزین \vec{J} جایگزین کنیم، تبدیل به

یک اتحاد می شود، یعنی:

$$[\phi \cdot J, J] = \hbar \phi \times J$$

کتاب شناسی فصل ششم

Edmonds (1968); Englefield (1972); Eyring, Walter and Kimball (1944); Fano and Racah (1959); Heine (1960); Judd (1969); Kuhn (1969); LoebI (1968); Mossiah (1965), Chapter 14; Rose (1967); Rotenberg, Bivins, Metropolis and Wooten (1959); Slater (1960); Slater (1963)

تقارنهای بلور شناختی و مولکولی

بلورها توسط ترتیب منظم اتمهای تشکیل دهنده شان در سه بعد مشخص می شوند. یک بلور را می توان ساخته شده از یک شبکه و یک پایه^۱ تصور کرد. یک شبکه صرفاً یک طرح منظم از نقاط در یک، دو یا سه بعد است. اگر به هر نقطه از شبکه (که نقطه شبکه نامیده می شود) یک پایه که شامل تعدادی اتم است وابسته کنیم، ساختار حاصل یک بلور خواهد بود. فرض می کنیم که شبکه از هر سه جهت تا بی نهایت ادامه دارد (که ممکن است توسط شرایط مرزی پرودی آن را منظور کرد).

تقارن بلور نقش فوق العاده مهمی در مطالعه خواص بلورها نظیر: تفرق امواج از بلورها، ساختار الکترونی بلورها و غیره ایفا می کند. پدیده های مختلف دیگری نظیر رنگهایی که توسط بلورهایی که ناخالصی و نقص دارند بروز می کند، تشدید پارامغناطیسی اتمهای ناخالصی و مطالعات اثر موسباتر یک یون ناخالص در بلور مادر نیز به تقارن محیط اطراف اتم ناخالص بستگی دارند. از این رو طبیعی است که نظریه گروهها در مطالعه پدیده های مختلف حالت جامد ابزار سودمندی باشد.

به خاطر فرض ابعاد نامحدود یک بلور در تمام جهات، محدودیتهای جذبی در تقارنهای دورانی ممکن یک بلور وجود دارد. به عنوان مثال، یک مولکول ممکن است تقارن مرتبه n داشته باشد که در آن n می تواند هر عدد صحیح مثبت از جمله بی نهایت باشد. لیکن در بلورها، تنها بعضی از مقادیر n مجازند.

تبدیلات تقارنی هندسی یک بلور از سه نوع است: (i) انتقالها، (ii) دورانها، انعکاسها و وارونی که به اعمال تقارنی نقطه‌ای موسومند و (iii) ترکیبی از دو نوع عمل بالا. وقتی گروه تبدیلات یک سیستم بخصوص از اعمالی تشکیل شده باشد که یک نقطه سیستم را از محلش جابجا نکند (یعنی از اعمال نوع (ii))، آن را گروه نقطه‌ای نامند. نمونه‌هایی از یک گروه نقطه‌ای عبارتند از: C_{4v} ، $O(2)$ ، $O(3)$ و غیره. گروههایی شامل انتقالات فضایی گروههای نقطه‌ای نیستند. از این رو گروههای تقارنی بلور می‌توانند به دو دسته تقسیم شوند: گروههای نقطه‌ای بلور شناختی که حداقل یک نقطه بلور را جابجا نشده باقی می‌گذارند و گروههای فضایی بلور شناختی که تقارن انتقالی بلورها را شامل می‌شوند. از طرف دیگر، مولکولها فقط تقارنهای نقطه‌ای دارند، بجز در مورد مولکولهای پلیمر زنجیره‌ای بسیار طویل که می‌توان برای آنها تقارن انتقالی متصور شد و در این جا مورد بحث ما قرار نمی‌گیرند.

در این فصل به مطالعه گروههای نقطه‌ای و فضایی بلور شناختی، گروههای نقطه‌ای مولکولی، گروههای دوگانه و نمایشهای کاهش ناپذیر آنها می‌پردازیم. نمایشهای کاهش ناپذیر گروههای فضایی در فصل بعدی مورد بررسی قرار خواهد گرفت.

۱-۷ گروههای نقطه‌ای بلور شناختی

شرط تقارن انتقالی در بلورها، در تعداد گروههای نقطه‌ای بلور شناختی محدودیت ایجاد می‌کند. این مطلب را می‌توان به آسانی به صورت زیر دید. اولاً توجه کنید که تمام نقاط شبکه در یک شبکه با یکدیگر هم‌ارزند، از این نظر که شبکه آن طور که از یک نقطه شبکه دیده می‌شود دقیقاً با این که از هر نقطه دیگر به آن نگاه شود یکسان است. این بدان معنی است که اگر شبکه تحت دوران $\frac{2\pi}{n}$ (که n یک عدد صحیح مثبت است) حول محوری که از یک نقطه شبکه می‌گذرد تغییر ناپذیر باشد، در این صورت دوران به اندازه $\frac{2\pi}{n}$ حول هر محور موازی دیگری که از هر نقطه شبکه دیگر بگذرد، نیز یک تبدیل تقارنی شبکه خواهد بود. این امر محدودیتهای جدی در تعداد گروههای نقطه‌ای ممکن به وجود می‌آورد. در واقع، نشان دادن این که تنها دورانهای n گانه سازگار با تقارن انتقالی به ازای n مساوی

۱، ۲، ۳ و ۴ و ۶ می باشد، یک مسأله مقدماتی فیزیک حالت جامد است^۲. مجموعاً فقط ۳۲ گروه نقطه ای بلور شناختی وجود دارد که در زیر آنها را برمی شمیریم.

اگر نقطه ای که تحت گروه نقطه ای تغییرناپذیر است به عنوان مبدأ مختصات یک دستگاه دکارتی انتخاب شود، در این صورت یک گروه نقطه ای فقط شامل عملیاتی از انواع زیر خواهد بود:

- (الف) دورانها حول هر محوری که از مبدأ می گذرند،
 (ب) انعکاسها نسبت به صفحاتی که از مبدأ می گذرند،
 (ج) وارونی.

باید توجه داشت که سه نوع عمل فوق از یکدیگر مستقل نیستند. هریک از این اعمال می تواند با ترکیب مناسبی از دو نوع عملیات دیگر ساخته می شود. مثلاً وارونی را می توان به صورت یک دوران به اندازه π حول یک محور دلخواه که از مبدأ می گذرد و سپس یک انعکاس در صفحه عمود بر آن محور که از مبدأ می گذرد، تصور کرد.

یک دوران که به دنبال آن یک انعکاس انجام شود، یا وارونی را دوران ناسره می نامیم در مقابل دوران سره که به یک دوران به تنهایی گفته می شود.

می توانیم به آسانی ثابت کنیم که حاصلضرب دو دوران سره یا دو دوران ناسره یک دوران سره است، درحالی که حاصلضرب یک دوران سره و یک دوران ناسره یک دوران ناسره می باشد^۳.

همچنین مقتضی است توجه کنیم که زوج اعمال گروه نقطه ای زیر با یکدیگر جابجاپذیرند: (الف) وارونی و هر عمل دیگر، (ب) دو دوران حول یک محور، (ج) دورانهای به اندازه π حول دو محور عمود برهم، (د) دوران و انعکاس در صفحه ای که عمود بر محور دوران است، (ه) دوران به اندازه π و انعکاس در صفحه ای که از محور دوران می گذرد و (و) دو انعکاس در صفحات عمود برهم. این موارد را می توان با انجام عملیات روی یک شیء مثل کتاب بسادگی نشان داد.

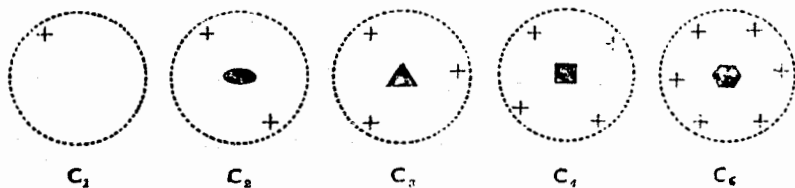
۲- رك: آزاروف (۱۹۶۰) صفحه ۱۶-۱۷.

۳- دقیقاً شبیه ضربهای +۱ و -۱ در خودشان و در یکدیگر.

۱-۱-۷ برشمردن سی و دو گروه نقطه‌ای

اکنون ۳۲ گروه نقطه‌ای بلورشناختی در سه بعد را برمی‌شمریم. در بخش ۱-۱ مفهوم گروه را با در نظر گرفتن یک مربع معرفی کردیم. بطور کلی اگر یک n ضلعی منظم داشته باشیم، دوران $\frac{2\pi}{n}$ حول محوری که در مرکز چند ضلعی بر صفحه آن عمود باشد یک عمل تقارنی برای آن است. گروه دوره‌ای متشکل از n دوران $(C_n^n = E, \dots, C_n^2, C_n)$ معمولاً با (همان علامت) C_n مشخص می‌شود^۴.

تنها گروه‌های دورانی سازگار با تقارن انتقالی در بلورها، گروه‌های C_3, C_2, C_1 و C_6 و C_4 می‌باشند. الگوهای هندسی که دارای این گروه‌های تقارنی هستند در شکل (۱-۷) نشان داده شده‌اند. یک چنین اشکالی که تصویر اتمها روی یک صفحه را نشان می‌دهند، تصویهای استروگرافیک نامیده می‌شوند. در این شکل و شکلهای بعدی در این فصل یک نقطه در بالای صفحه را با + و یک نقطه در زیر صفحه را با - مشخص می‌کنیم. ماهیت محور دوران توسط یک علامت در مرکز دایره مشخص می‌شود. به عنوان مثال یک بیضی توپر معرف یک محور دوگانه، یک مثلث توپر معرف یک محور سه گانه، یک مربع توپر معرف یک محور چهارگانه و یک شش ضلعی توپر معرف یک محور شش گانه دوران سره می‌باشند. نشانه‌های متناظر توخالی [شکلهای (۷-۴) و (۷-۷) را ببینید] معرف یک دوران n گانه ناسره می‌باشند.



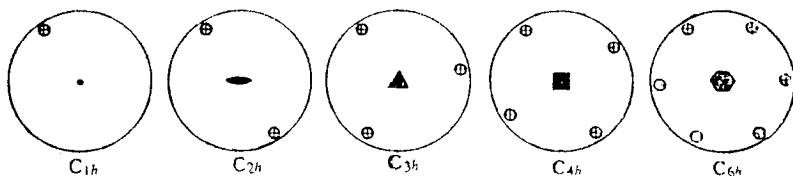
شکل ۱-۷ تصویهای استروگرافیک برای گروه‌های نقطه‌ای C_n .

می‌توانیم با معرفی یک عنصر تقارنی دیگر - انعکاس در صفحه افقی که با σ_h نمایش می‌دهیم، پنج گروه نقطه‌ای دیگر به دست آوریم. گروه مرتبه دو (E, σ_h) را با ۴- برای گروه‌های نقطه‌ای از نمادگذاری شونن فلائز استفاده خواهیم کرد. یک نمادگذاری دیگر که به نمادگذاری بین المللی موسوم است در آخر این بخش معرفی خواهد شد.

C_{1h} نمایش می‌دهیم. با توجه به این که σ_h با دوران حول محور قائم جابجاپذیر است، ملاحظه می‌کنیم که گروه‌های حاصل که با C_{nh} نمایش داده می‌شوند، ضربهای مستقیم C_n و گروه (E, σ_h) می‌باشند، یعنی:

$$C_{nh} = C_n \otimes C_{1h}. \quad (1-7)$$

گروه C_{nh} شامل $2n$ عضو است، الگوهای هندسی که دارای این گروه‌های تقارنی هستند در شکل (۷-۲) نشان داده شده است. حضور یک صفحه انعکاسی افقی با رسم دایره‌ی پر به جای دایره‌ی نقطه چین مشخص شده است.

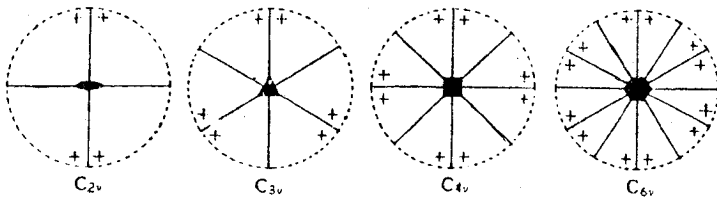


شکل ۷-۲ تصویرهای استروگرافیک برای گروه‌های نقطه‌ای C_{nh} .

می‌توان با افزودن یک صفحه انعکاسی قائم (که از محور n گانه می‌گذرد) به چهار گروه آخر شکل (۷-۱) چهار گروه نقطه‌ای دیگر به دست آورد. یک چنین صفحه انعکاسی که از محور تقارن دورانی n گانه می‌گذرد، دلالت بر وجود $(n-1)$ صفحه انعکاسی قائم دیگر دارد که همگی از محور دوران می‌گذرند. این گروه‌ها با C_{nv} نمایش داده می‌شوند و استروگرافهای آنها در شکل (۷-۳) نشان داده شده است. صفحات انعکاسی توسط خطوط پر نشان داده شده‌اند. هرچند این گروه‌ها نیز شامل $2n$ عضو می‌باشند، نمی‌توان آنها را به صورت ضربهای مستقیم دو گروه کوچکتر نوشت. دلیل آن این است که، همان طوری که می‌توان بسادگی دید، یک انعکاس با دوران حول یک محور در صفحه انعکاسی جابجاپذیر نیست.

در مورد بالا، چون «قائم» و «افقی» برای C_1 از یکدیگر قابل تمیز نیستند، گروه جدیدی مانند C_{1v} نداریم. به عبارت دیگر، گروه C_{1v} با C_{1h} یکسان است.

اکنون می‌توانیم تقارن وارونی J را به پنج گروه اول بیفزاییم. گروه مرتبه دوم (E, J)

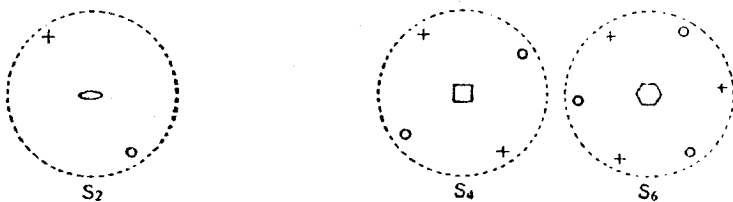


شکل ۳-۷ تصویرهای استروگرافیک برای گروههای نقطه‌ای C_{nv} .

را با نماد S_2 نمایش می‌دهیم. این گروه با گروه C_{1h} ایزومرفیک است. چون وارونی با تمام دورانه‌ها جابجاپذیر است، می‌توانستیم ۵ گروه ضرب مستقیم داشته باشیم که به صورت زیر نمایش دهیم:

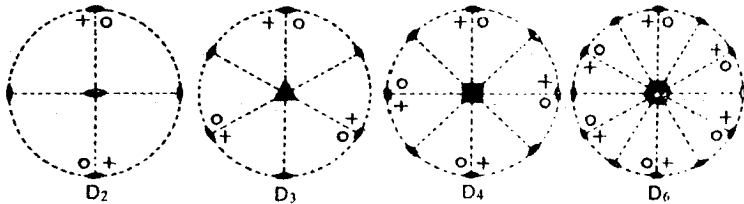
$$S_{2n} = C_n \otimes S_2. \quad (۲-۷)$$

ولی تمام این گروهها، گروههای جدید نیستند. در واقع اگر n زوج باشد ($n = 2, 4, 6$) در این صورت $C_n \otimes S_2$ با C_{nv} یکسان است. در دو مورد باقیمانده ($n = 1, 3$) گروه جدید S_2 و S_6 داریم. یک گروه سوم S_4 ، که از تمام گروههای نقطه‌ای که تاکنون بررسی کردیم متمایز است از چهار عضو تشکیل شده است که توانهای عضو $JC_4 = S_4$ می‌باشد، یعنی، $S_4 = (E, S_4, C_4^2, S_4^3)$. توجه کنید که $J^2 = E$ است. این گروهها در شکل (۴-۷) نشان داده شده‌اند. الگوهای مربوط به گروههای تقارنی S_2 و S_6 دارای تقارن وارونی‌اند در حالی که الگوی مربوط به S_4 چنین نیست. همان طوری که قبلاً بیان شد، گروههای S_2 و S_4 به ترتیب ضربهای مستقیم $C_1 \otimes S_2$ و $C_3 \otimes S_2$ می‌باشند، ولی S_4 ضرب مستقیم دو گروه کوچکتر نیست.



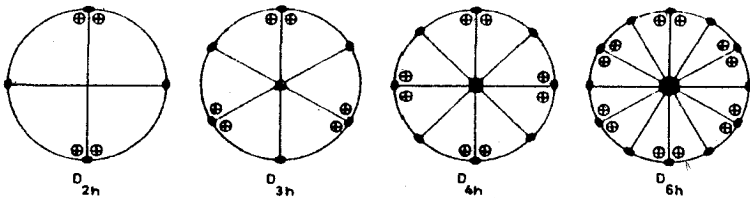
شکل ۴-۷ تصویرهای استروگرافیک برای گروههای نقطه‌ای S_n .

هدفه گروه بحث شده در بالا تنها یک محور تقارن n گانه دارند. می‌توانیم علاوه بر محور قائم با معرفی محورهای تقارن در صفحه افقی گروه‌های نقطه ای جدید به دست آوریم. یک محور افقی تقارن n گانه با محور قائم تقارن n گانه دلالت بر وجود $n-1$ محور افقی تقارن m گانه دیگر دارد. اگر $m = 2$ باشد، چهار گروه جدید که با D_n نمایش داده می‌شوند خواهیم داشت. این گروه‌ها در شکل (۵-۷) نشان داده شده‌اند.



شکل ۵-۷ تصویرهای استروگرافیک برای گروه‌های نقطه ای D_n .

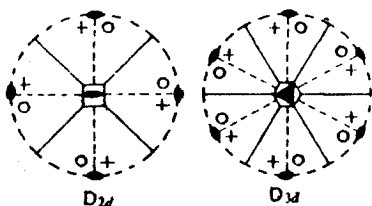
حال محورهای دو گانه افقی را به پنج گروه C_{nh} شکل (۲-۷) می‌افزاییم. در این صورت چهار گروه جدید به دست می‌آوریم که آنها را با D_{nh} نمایش می‌دهیم و در شکل (۶-۷) نشان داده شده‌اند. C_{1h} با محور دو گانه افقی با C_{2v} یکی است. همچنین می‌توان چنین تصور کرد که گره D_{nh} از گروه‌های D_n با افزودن یک صفحه آینه ای افقی حاصل شده‌اند. از مقایسه شکل (۵-۷) با شکل (۶-۷) این امر به آسانی دیده می‌شود. گروه‌های D_{nh} دارای $4n$ عضو بوده و به ازای n های زوج دارای تقارن وارونی می‌باشند.



شکل ۶-۷ تصویرهای استروگرافیک برای گروه‌های نقطه ای D_{nh} .

بالاخره با افزودن صفحات قطری که زوایای بین محورهای دو گانه افقی را نصف

می کنند به گروههای D_n ، دو گروه دیگر که با D_{nd} نشان داده می شوند و در آن n مقادیر ۲ و ۳ را اختیار می کند، می تواند به دست آید، که دو گروه جدید شکل (۷-۷) را به ما می دهد.



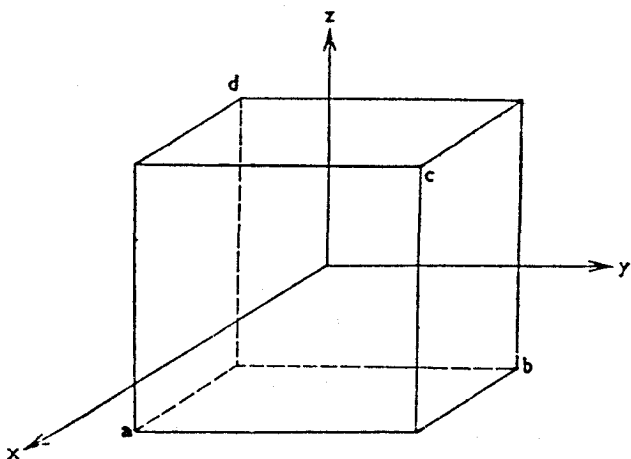
شکل ۷-۷ تصویرهای استروگرافیک برای گروههای نقطه ای D_{nd} .

۲۷ گروه نقطه ای بالا دارای یک محور n گانه اصلی هستند (که آن را به عنوان محور قائم انتخاب کرده ایم) و می توانند دارای n محور دوگانه در صفحه افق باشند. این گروهها به گروههای نقطه ای ساده موسومند و آنها را به ترتیب از ساده به مشکل مورد بحث قرار داده ایم. این گروهها همان گروههای نقطه ای هستند که در بلورهای دو بعدی نیز یافت می شوند. پنج گروه دیگر با تقارن بالاترند که در آنها بیش از یک محور با تقارن بالاتر از تقارن دوگانه ($m > 2$) وجود دارد، یعنی یک محور اصلی منحصر بفرد با تقارن بالاتر وجود ندارد.

این گروهها همچنین به وسیله چهار محور سه گانه (یعنی سه قطر یک مکعب) که با سه جهت متعامد برهم زوایای مساوی می سازند نیز مشخص می شوند. در واقع، به خاطر این خواص تقارنی است که این گروهها به سیستمهای مکعبی نسبت داده می شود. این گروهها را در زیر مورد بحث قرار می دهیم.

بزرگترین گروه نقطه ای که به O_h موسوم است، گروه تقارنی کامل یک مکعب است؛ شکل (۷-۸). این گروه دارای ۴۸ عضو است که در بین آنها ۲۴ عضو دورانه‌ای خاص (سره) و ۲۴ عضو دیگر دورانه‌ای ناسره می باشند.

۲۴ دوران سره، که خود یک زیرگروه از O_h تشکیل می دهند و با O نمایش داده می شود، را گروه دوره ای دورانه‌ای سره نامند که به صورت طبقه بندی شده در جدول (۷-۱) درج



شکل ۷-۸ برای نشان دادن تقارنهای یک مکعب به متن کتاب رجوع کنید.

شده اند. اثر آنها روی یک دستگاه مختصات دکارتی (x, y, z) نیز در ستون آخر جدول نشان داده شده است.

۲۴ عضو باقیمانده O_h را از ترکیب ۲۴ عضو O با عملگر وارونی J ، که اثر آن تبدیل (x, y, z) به $(-x, -y, -z)$ است، به دست می آوریم. عملیات مرکب توسط J C_3 ، C_4^2 و غیره نمایش داده می شوند. توجه کنید که J خود یک عمل تقارنی مکعب است. ۲۴ عضو اضافی پنج رده جدید می دهند. کلاً ۱۰ رده در O_h وجود دارد. باید روشن شده باشد که:

$$O_h = O \otimes (E, J) \quad (3-7)$$

توجه کنید که تعداد جایگشتهای (x, y, z) شش است، و می توان به هشت طریق مختلف به هر کدام یک علامت مثبت یا منفی وابسته کرد؛ بدین ترتیب تعداد کل ترتیبهای $\pm x$ ، $\pm y$ و $\pm z$ برابر ۴۸ است.

به عبارت دیگر، ۴۸ عبارت است از تعداد طرق مختلفی که می توانیم یک دستگاه مختصات دکارتی تشکیل دهیم که محورهای آن موازی یالهای یک مکعب باشند.

گروه تقارنی کل یک هشت وجهی منتظم با گروه تقارنی کل مکعب یکی است. این

جدول ۷-۱ عناصر گروه O که به صورت رده ای دسته بندی شده اند همراه با عملشان روی یک دستگاه مختصات (x, y, z) .

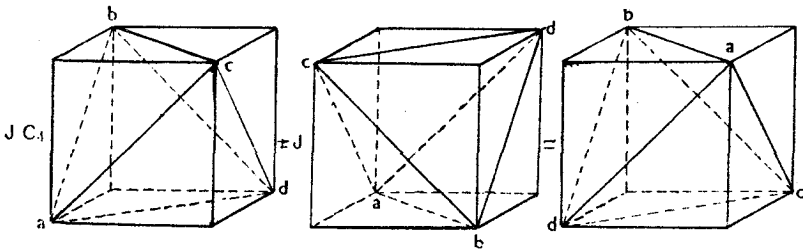
رده	عمل	(x, y, z) تبدیل می شود به
(E)	عمل همانی (۱ عضو)	(x, y, z)
$(3C_4, 3C_4^3)$	دورانهای به اندازه ۹۰ و ۲۷۰ حول محورهای x, y, z (۶ عضو)	$(y, -x, z)$ و غیره
$(3C_2)$	دورانهای ۱۸۰ حول x, y, z (۳ عضو)	$(-x, -y, z)$ و غیره
$(6C_2)$	دورانهای ۱۸۰ حول خطی که مرکزهای دو ضلع مقابل را بهم متصل می کند (۶ عضو)	$(y, x, -z)$ و غیره
$(4C_3^2, 4C_3)$	دورانهای ۱۲۰ یا ۲۴۰ حول چهار قطر مکعب (۸ عضو)	(y, z, x) و غیره

را می توان با ساختن یک هشت وجهی منتظم بطوری که رؤوس آن در مرکز هر وجه یک مکعب باشد، دید. از این رو، گروههای O_h و O معمولاً به ترتیب گروه هشت وجهی کامل و گروه هشت وجهی دورانهای سره نامیده می شوند.

یک گروه مهم دیگر، گروه تقارنی چهار وجهی منتظم است که معمولاً با T_d نمایش داده می شود. این گروه دارای ۲۴ عضو است و یک زیرگروه O_h نیز می باشد. یک چهار وجهی منتظم را می توان با وصل کردن نقاط a, b, c, d مشخص شده در شکل (۷-۸) به یکدیگر، در داخل یک مکعب محاط کرد. توجه کنید که نه وارونی یک عمل تقارنی برای چهار وجهی می باشد و نه دوران چهارگانه. اما اگر این دو عمل متوالیاً یکی پس از دیگری انجام شوند بجز برای علامت گذاری متفاوتی برای نقاط a, b, c, d چهار وجهی تغییرناپذیر می ماند. این را می توان از شکل (۷-۹)، که در آن C_4 رایک دوران حول محور z های شکل (۷-۸) گرفته ایم، دید. عناصر T_d را اگر به صورت رده

های جداگانه دسته بندی کنیم عبارتند از: (E) ، $(3 C_4^2)$ ، $(4 C_3, 4 C_3^2)$ ، $(3 J C_4)$ و $(6 J C_2)$. گروه T_d با گروه O ایزومرفیک است.

زیرگروه T_d که شامل ۱۲ دوران سره است $(E, 3 C_4^2, 4 C_3, 4 C_3^2)$ توسط T نمایش داده می شود. توجه کنید که برخلاف گروههای بزرگتر O ، O_h و T_d عناصر C_3 و C_4^2 در T به رده های مختلف تعلق دارند. ساختار رده ای T عبارت است از: $(4 C_3^2)$ و $(4 C_3)$ و $(3 C_4^2)$ و (E) . این بدان علت است که در T هیچ عملی وجود ندارد که جهت یک قطر مکعب را وارون کند. به بحث قاعده (ii) برای یافتن رده ها در بخش ۱-۳ مراجعه کنید].



شکل ۷-۹ دوران ناسره، $J C_4$ یک تبدیل تقارنی برای یک چهار وجهی منتظم است.

بالاخره، می توانیم با ضرب مستقیم T و گروه وارونی (E, J) یک گروه از مرتبه ۲۴ بسازیم. این گروه با T_h نمایش داده می شود و یک زیرگروه O_h نیز می باشد. لیکن گروه تقارنی یک چهار وجهی منتظم نیست. این گروه با O یا T_d نیز ایزومرفیک نمی باشد، زیرا T_h دارای هشت رده است.

بهتر است هر ۳۲ گروه نقطه ای بلور شناختی فوق را جدول بندی کنیم. هر چند در این جا نمادگذاری شوئن فلایز را که در بالا توصیف کردیم به کار می بریم، یک نمادگذاری دیگر موسوم به نمادگذاری بین المللی وجود دارد که بلورشناسان اغلب آن را مورد استفاده قرار می دهند. در این نمادگذاری، یک محور n گانه دورانه ای سره را با n و یک محور n گانه دورانه ای ناسره را با n نمایش می دهیم. یک صفحه انعکاسی را با m نمایش می دهیم.

وقتی همراه با n باشد آن را به صورت nm یا n/m می نویسیم. نماد اخیر برای صفحه انعکاسی افقی به کار می رود.

در فهرست زیر نمادگذاری بین المللی را در داخل پرانتز بعد از نمادگذاری شونن فلایز برای گروههای نقطه ای نشان داده ایم:

C_1 (1)	C_2 (2)	C_3 (3)	C_4 (4)	C_6 (6)
C_{1h} (m)	C_{2h} ($2/m$)	C_{3h} ($\bar{6}$)	C_{4h} ($4/m$)	C_{6h} ($6/m$)
	C_{2v} ($2mm$)	C_{3v} ($3m$)	C_{4v} ($4mm$)	C_{6v} ($6mm$)
	S_2 ($\bar{1}$)		S_4 ($\bar{4}$)	S_6 ($\bar{3}$)
	D_2 (222)	D_3 (32)	D_4 (422)	D_6 (622)
	D_{2h} ($\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}$)	D_{3h} ($\bar{6}m2$)	D_{4h} ($4/mmm$)	D_{6h} ($6/mmm$)
	D_{2d} ($\bar{4}2m$)	D_{3d} ($\bar{3}m$)		
T (23)	T_d ($\bar{4}3m$)	T_h ($m\bar{3}$)	O (432)	O_h ($m\bar{3}m$)

همان طوری که گاه گاه تذکر داده ایم، تعدادی از گروههای نقطه ای با یکدیگر ایزومرفیک اند. فهرست زیر از گروههای ایزومرفیک می تواند مفید واقع شود. عدد داخل پرانتز بعد از هر ردیف معرف مرتبه آن گروهها می باشد.

(۲)	S_2 و C_{1h} ، C_2	(الف)
(۴)	S_4 و C_4	(ب)
(۴)	D_2 و C_{2h} ، C_{2v}	(ج)
(۶)	D_3 و C_{3v}	(د)
(۸)	D_{2d} و D_4 ، C_{4v}	(ه)
(۱۲)	D_{3d} و D_{3h} ، D_6 ، C_{6v}	(و)
(۲۴)	T_d و O	(ز)

قبل از به پایان بردن این بخش، در جدول (۷-۲) گروههای نقطه ای را که در هفت سیستم شبکه ای سه بعدی وجود دارند به ترتیب افزایش تقارن درج می کنیم. یک سیستم می تواند گروههای نقطه ای سیستمهای قبل از خود در جدول (۷-۲) را نیز داشته باشد.

جدول ۷-۲ گروههای نقطه ای متناظر با هفت سیستم شبکه ای.

گروههای نقطه ای	سیستم
$C_1, S_2;$	سه میلی
$C_{1h}, C_2, C_{2h};$	تک میلی
$C_{2v}, D_2, D_{2h};$	راست گوشه
$C_3, S_6, C_{3v}, D_3, D_{3d};$	سه گوشه
$S_4, D_{2d}, C_4, C_{4h}, C_{4v}, D_4, D_{4h};$	چهار گوشه
$C_6, C_{3h}, D_{3h}, C_{6h}, C_{6v}, D_6, D_{6h};$	
$T, T_h, T_d, O, O_h.$	

آخرین درایه در هر سیستم گروه نقطه ای سیستم با بالاترین تقارن را نشان می دهد.

۷-۲ گروه انتقال و گروههای فضایی

یک شبکه خطی با N نقطه شبکه و فاصله شبکه ای a را در نظر بگیرید. از شرایط مرزی تناوبی استفاده می کنیم بطوری که $x - Na \equiv x$ که در آن x مختصات اندازه گیری شده در طول شبکه خطی است. یک چنین شبکه ای تحت انتقالهایی به اندازه مضارب صحیح a در طول شبکه، تغییرناپذیر است. فرض کنید T_1 معرف عملگر انتقال به اندازه a

و T_n معرف عملگر انتقال به اندازه na باشد، در این صورت:

$$T_1 x = x - a, \quad T_n x = (T_1)^n x = x - na \quad (۴-۷)$$

به خاطر شرایط مرزی تناوبی، داریم:

$$T_N x = (T_1)^N x = x - Na = x \quad (۵-۷)$$

واضح است که توانهای T_1 یک گروه دوره ای از مرتبه n ایجاد می کنند. این گروه را که گروه انتقال نامیده می شود به صورت زیر نمایش می دهیم:

$$T = \{T_N \equiv E, T_1, T_2, \dots, T_{N-1}\} \quad (6-7)$$

چون T یک گروه آبدلی است هر عنصر T به تنهایی یک رده است.

عملگرهای تقارنی انتقال یک شبکه سه بعدی نیز تشکیل یک گروه می دهند. فرض کنید شبکه توسط سه بردار انتقال اولیه a_1 ، a_2 و a_3 ایجاد شود. شرایط مرزی تناوبی زیر را به کار می بریم:

$$r - N_1 a_1 \equiv r, \quad r - N_2 a_2 \equiv r, \quad r - N_3 a_3 \equiv r, \quad (7-7)$$

که در آن \vec{r} بردار مکان یک نقطه در شبکه است و تعداد سلولهای اولیه $N_1 N_2 N_3$ می باشد. فرض کنید عملگر $T(n_1, n_2, n_3)$ معرف یک انتقال به اندازه بردار $t(n_1, n_2, n_3)$ باشد بطوری که:

$$T(n_1, n_2, n_3) r = r - n_1 a_1 - n_2 a_2 - n_3 a_3 = r - t(n_1, n_2, n_3), \quad (8-7)$$

که در آن $1 \leq n_i \leq N_i$. می توان نشان داد که اعمال متوالی دو عملگر انتقال معادل یک عملگر انتقال دیگر است. بنابراین:

$$T(m_1, m_2, m_3) T(n_1, n_2, n_3) r = T(m_1 + n_1, m_2 + n_2, m_3 + n_3) r \quad (9-7)$$

تمام این عملگرهای یک گروه تشکیل می دهند که از مرتبه $N_1 N_2 N_3$ است که کل گروه انتقال T برای یک شبکه سه بعدی است. عنصرهمانی عبارت است از: $T(0, 0, 0) \equiv T(N_1, N_2, N_3)$. تمام انتقالهای گروه T با یکدیگر جابجاپذیرند، لذا گروه باز هم آبدلی است هر چند دوره ای نمی باشد.

یک شبکه سه بعدی واقعی تحت تبدیلات گروه نقطه ای و همچنین تحت انتقالها تغییرناپذیر است. ممکن است در مورد بلورهای پیچیده با بیش از یک اتم بر سلول ابتدایی، چنین اتفاق بیفتد که بلور تحت یک عمل گروه نقطه ای که به دنبال آن یک انتقال صورت بگیرد، تغییرناپذیر باشد درحالی که هیچ کدام به تنهایی عمل تقارنی بلور نباشند. سیستمی که در شکل (۷-۱۰) نشان داده شده مثالی از یک چنین بلوری می باشد. در این جا یک شبکه یک بعدی با ثابت شبکه a داریم. به هر نقطه شبکه، که توسط یک نقطه نشان داده شده است دو اتم وابسته است که با $+$ یا o مشخص شده اند. بردارهای انتقال شبکه مضارب صحیحی از a می باشند. به علاوه این سیستم تحت انتقال به اندازه $\frac{a}{2}$ که به دنبال



شکل ۷-۱۰ یک سیستم یک بعدی با تقارن دورانی پیچشی دوگانه.

آن یک دوران دوگانه حول خط پر انجام شود، تغییرناپذیر است. یک چنین اعمالی را دورانهای پیچشی می‌نامیم. بنابراین سیستم شکل (۷-۱۰) دارای یک محور دوران پیچشی دوگانه به عنوان یک عنصر تقارنی می‌باشد.

بطور مشابه، یک بلور دارای یک صفحه انعکاسی لغزه یا یک صفحه لغزه است اگر تحت یک انعکاس از یک صفحه که به دنبال انتقال در امتداد یک بردار واقع در آن صفحه انجام شود، تغییرناپذیر باشد^۶. مانند مورد محور شبه دوران، لازم نیست که خود بردار یک بردار انتقال تقارنی شبکه باشد. توجه کنید که دو عمل تشکیل دهنده یک صفحه لغزه و همچنین دو عمل تشکیل دهنده یک محور پیچشی با یکدیگر جابجاپذیرند.

کل گروه تقارنی یک بلور را گروه فضایی آن بلور می‌نامند. از بحث بالا روشن است که عناصر گروه فضایی عبارتند از ترکیبهای اعمال گروه نقطه‌ای و انتقالها. از این رو یک عنصر عمومی یک گروه فضایی را می‌توان به صورت $\{A | \underline{r}\}$ نمایش داد که در آن A یک عمل گروه نقطه‌ای، و \underline{r} یک انتقال می‌باشد که لزوماً یک عنصر از گروه انتقال بلور نیست. عمل $\{A | \underline{r}\}$ روی بردار مکان عبارت است از:

$$\{A | \underline{r}\} \mathbf{r} = A\mathbf{r} - \underline{r} \quad (10-7)$$

عمل متوالی دو عضو را می‌توان به آسانی به صورت زیر به دست آورد:

$$\begin{aligned} \{B | \underline{r}_2\} \{A | \underline{r}_1\} \mathbf{r} &= \{B | \underline{r}_2\} \{A\mathbf{r} - \underline{r}_1\} \\ &= B A \mathbf{r} - B \underline{r}_1 - \underline{r}_2. \end{aligned}$$

۶- برای روشن شدن شبه دورانها و صفحات لغزه، رگ: آزاروف (۱۹۶۰) صفحات ۲۰-۲۳.

که از آن نتیجه می شود:

$$\{B \mid \underline{\tau}_2\} \{A \mid \underline{\tau}_1\} = \{BA \mid B\underline{\tau}_1 + \underline{\tau}_2\} \quad (11-7)$$

عنصر همانی گروه فضایی $\{E \mid 0\}$ و وارون یک عنصر عبارت است از:

$$\{A \mid \underline{\tau}\}^{-1} = \{A^{-1} \mid -A^{-1}\underline{\tau}\}, \quad (12-7)$$

که می توان به آسانی با استفاده از (۱۱-۷) آن را ثابت کرد.

در این فصل و فصلهای بعد، گروه فضایی یک بلور را با S نشان می دهیم. باید در نظر داشته باشیم که عموماً انتقالها با اعمال گروه نقطه ای جابجاپذیر نیستند. لذا استفاده از نمادگذاری ظاهراً پیچیده فوق اجتناب ناپذیر است.

بلورهای سه بعدی را می توان به هفت سیستم و چهارده نوع تقسیم کرد. تقارن انتقالی یک بلور بطور کامل توسط نوعی که به آن تعلق دارد تعیین می شود. به عبارت دیگر، هر نوع، گروه انتقال مخصوص بخود را دارد. معلوم شده است که جمعاً ۲۳۰ گروه فضایی بلور شناختی وجود دارد^۷. در این جا آنها را برنمی شمیریم. می توان در کتاب شناسی آخر این کتاب مراجع مناسبی برای این کار پیدا کرد.

در خلال بحث محورهای پیچشی و صفحات لغزه دیدیم که اگر $\{A \mid \underline{\tau}\}$ یک عضو از گروه فضایی باشد، لزوماً نمی توان از آن نتیجه گیری کرد که $\{A \mid 0\}$ نیز در گروه فضایی است. به عبارت دیگر، $\{A \mid 0\}$ لزوماً یک عمل تقارنی بلور نمی باشد. یک گروه فضایی S که در آن تمام اعمال $\{A \mid 0\}$ (به ازای تمام A های متعلق به گروه نقطه ای G ، $A \in G$) عناصر S نیز باشند یک گروه سیمورفیک نامیده می شود. از تمام گروههای فضایی ۷۳ گروه سیمورفیک و ۱۵۷ گروه غیر سیمورفیک می باشند. باید روشن شده باشد که یک گروه فضایی تنها وقتی سیمورفیک است که تمام $\underline{\tau}$ ها با \vec{A} ها، بردارهای انتقال شبکه، برابر باشند. بنابراین یک گروه فضایی سیمورفیک گروهی است که شامل هیچ محور پیچشی یا صفحه لغزه نباشد.

در یک گروه فضایی معین، به هر عمل A ی گروه نقطه ای یک کوچکترین بردار

انتقال مشخصه $\underline{\delta}$ به صورت $\underline{\delta} = \xi a_1 + \eta a_2 + \zeta a_3$ با $0 \leq \xi, \eta, \zeta < 1$ وابسته است. عنصر A ی گروه نقطه‌ای همواره به صورت $\{A | \underline{\delta} + \vec{t}\}$ در فضای گروه ظاهر می‌شود، که در آن \vec{t} بردار انتقال شبکه است. اگر $\underline{\delta}$ برای تمام عناصر گروه نقطه‌ای صفر باشد، یک گروه فضایی سیمورفیک خواهیم داشت، زیرا در این صورت اعمالی از نوع $\{A | 0\}$ به ازای تمام A های متعلق به G ، $(A \in G)$ عناصر گروه فضایی خواهند بود. لیکن، اگر $\underline{\delta}$ به ازای بعضی از عناصر گروه نقطه‌ای مخالف صفر باشد، یک گروه فضایی غیر سیمورفیک داریم. به عنوان مثال یک بلور الماس را در نظر بگیرید. شبکه به صورت مکعبی مرکز سطحی می‌باشد، بنابراین گروه نقطه‌ای، کل گروه هشت وجهی O_h می‌باشد. اما بلور دارای یک پایه دو اتم بر نقطه شبکه است، که برحسب بردارهای انتقال متعامد \vec{a}_1 ، \vec{a}_2 و \vec{a}_3 وابسته به شبکه مکعبی ساده، یکی در $(0, 0, 0)$ و دیگری در $(\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, \frac{1}{4})$ می‌باشد. اکنون باید بطور کامل روشن شده باشد که اگرچه شبکه تحت گروه هشت وجهی O_h تغییرناپذیر است ولی همه اعمال O_h بلور را تغییرناپذیر نمی‌گذارند. به عبارت دیگر، بلور الماس که دارای تقارن چهار وجهی است تنها تحت اعمال گروه چهار وجهی تغییرناپذیر است. این زیرگروه O_h دارای ۲۴ عضو است و تمام آنها در گروه فضایی به صورت $\{A | \vec{t}\}$ با $\underline{\delta} = 0$ ظاهر می‌شوند، که در آن $A \in T_d$. اما در مورد ۲۴ عضو باقیمانده، می‌توان با نگاه به ساختار بلوری نشان داد که عمل یکی از این اعضا که به دنبالش یک انتقال به اندازه یک چهارم قطر مکعب انجام شود بلور را تغییرناپذیر می‌گذارد. از این رو، این اعضا در گروه فضایی به صورت $\{B | \underline{\delta} + \vec{t}\}$ ظاهر می‌شوند که در آن برای تمام B های موجود در O_h و نه در T_d ، داریم $\underline{\delta} = \frac{\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3}{4}$. در هر مورد \vec{t} می‌تواند هر بردار انتقال شبکه مرکز سطحی باشد.

حتی در مورد گروه‌های سیمورفیک، گروه فضایی ضرب مستقیم گروه نقطه‌ای و گروه انتقال نیست، زیرا اعمال این گروه‌ها جابجاپذیر نیستند. اما می‌توان نشان داد که گروه انتقال T یک زیرگروه نرمال هر گروه فضایی (سیمورفیک یا غیر سیمورفیک) می‌باشد. مجموعه اعمالی را که در آنها بردار انتقال شبکه \vec{t} تمام مقادیر ممکن را بگیرد درحالی که A ثابت باشند، با $\{A | \underline{\delta} + \vec{t}\}$ نمایش می‌دهیم. سپس هم مجموعه

های راست و چپ گروه انتقال $T = \{ \{E | \vec{t}\} \}$ نسبت به یک عنصر بخصوص $\{A | \delta\}$ از S را در نظر بگیرد:

$$\{ \{E | \vec{t}\} \} \{A | \delta\} = \{ \{A | \delta + \vec{t}\} \}. \quad (13-7)$$

$$\{A | \delta\} \{ \{E | \vec{t}\} \} = \{ \{A | \delta + A\vec{t}\} \}.$$

به وضوح می بینیم که وقتی \vec{t} همه بردارهای انتقال شبکه را بگیرد، چه δ یک بردار انتقال باشد و چه نباشد، دو مجموعه طرف راست (۷-۱۳) یکسانند. بنابراین گروه انتقال یک زیرگروه تغییرناپذیر گروههای فضایی سیمورفیک و غیرسیمورفیک است. به علاوه می توان نشان داد که گروه عامل S/T با گروه نقطه ای G ایزومرفیک است.

۷-۳ گروههای نقطه ای مولکولی

مولکولها ممکن است هر یک از تقارنهای گروه نقطه ای برشمرده شده در بخش ۷-۱ را دارا باشند. علاوه بر این، ممکن است به گروههای تقارنی دیگر که به عنوان مثال، شامل تقارن دورانی پنجگانه یا تقارن دورانی کامل حول یک محور باشند، نیز تعلق داشته باشند. چون مولکولها هیچ محدودیت تقارنی انتقالی ندارند، می توانند در اصل، دارای یک محور n گانه تقارن باشند که n می تواند هر عدد صحیح مثبت یا بی نهایت باشد. در آنچه در زیر می آید، چند گروه تقارنی نقطه ای دیگر را که در مولکولها وجود دارد، مورد بحث قرار می دهیم.

C_{∞} ، $C_{\infty v}$. یک مولکول دو اتمی نظیر آنچه در شکل (۷-۱۱) نشان داده شده است، یا در واقع، هر مولکول خطی، دارای تقارن دورانی کامل حول خط و اصل بین اتمهای تشکیل دهنده آن است. نمونه هایی از این مولکولها عبارتند از: NH_3 ، LiH ، CO و غیره. بطور کلی MX_n ، که در آن M یک اتم قلیایی یا هیدروژن است و X یک اتم هالید می باشد. گروه دوران که در نمادگذاریها نیز با C_{∞} نشان داده می شود همان گروه دوران محوری است که در فصل چهارم با $SO(2)$ نمایش داده شد. به علاوه وقتی یک سیستم دارای تقارن دورانی محوری باشد، این سیستم، در هر صفحه قائمی که از AB

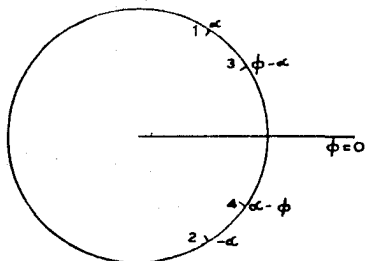
بگذرد، دارای تقارن انعکاسی نیز خواهد بود. این باعث می شود که گروه تقارنی کل مولکول AB به جای $C_{\infty v}$ ، C_{∞} باشد. باید توجه داشت که انعکاس در صفحه ای که از AB می گذرد با دوران حول خط AB جابجاپذیر نیست؛ از این رو $C_{\infty v}$ یک گروه آبلی نمی باشد.



شکل ۷-۱۱ یک مولکول دو اتمی شامل دو اتم متمایز A و B دارای گروه تقارنی $C_{\infty v}$ می باشد.

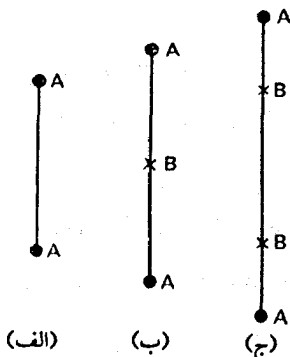
ساختار رده ای $C_{\infty v}$ طوری است که انعکاس در تمام صفحات قائم به یک رده تعلق داشته باشند. به علاوه دورانهای به اندازه ϕ و $\phi -$ حول AB به یک رده تعلق دارند. این نکته را می توان با نگاه کردن به شکل (۷-۱۲) به آسانی دید. با توجه به این شکل، فرض کنید $R(\phi)$ معرف یک دوران در خلاف جهت عقربه های ساعت حول محور قائمی که از مرکز دایره می گذرد باشد و فرض کنید σ_v معرف انعکاس در صفحه قائم $\phi = 0$ باشد. اعمال $\sigma_v^{-1} R(\phi) \sigma_v$ به اتمی که در مکان 1 با زاویه سمتی α قرار دارد، اتم را متوالیاً به مکانهای ۲، ۳ و ۴ نشان داده شده در شکل (۷-۱۲) خواهد برد. عمل مرکبی که اتم واقع در $\alpha - \phi$ به α برسد با دوران $R(-\phi)$ معادل است. لذا $\sigma_v^{-1} R(\phi) \sigma_v = R(-\phi)$ به یک رده تعلق دارند.

$D_{\infty h}$. اگر در مولکول دو اتمی شکل (۷-۱۱) هر دو اتم مانند شکل (۷-۱۳ الف) یکسان باشند، در این صورت عناصر تقارنی دیگری نیز خواهد داشت. این مطلب در مورد مولکولهای خطی نظیر AB_2A و AB_3A نشان داده شده در شکل‌های (۷-۱۳ ب) و (۷-۱۳ ج) نیز صادق است. ملاحظه می کنیم که علاوه بر تقارن دورانی محوری حول خط واصل بین اتمها، مولکول دارای تقارن انعکاسی در صفحه «افقی» که از مرکز مولکول



شکل ۷-۱۲ دورانهای $R(\phi)$ و $R(-\phi)$ در گروه $C_{\infty v}$ مزدوج یکدیگرند.

می‌گذرد و با σ_h نشان داده شده است، نیز می‌باشد. این مولکول دارای تقارن دورانی دوگانه C_2' حول هر محور افقی^۸ که از مرکز مولکول می‌گذرد می‌باشد. یک دوران به اندازه π حول محور قائم همراه با σ_h تقارن وارونی J را می‌دهد. وارونی همراه با C_2' ، انعکاس در یک صفحه قائم، σ_v ، را می‌دهد. از این رو، ساختاردهی $D_{\infty h}$ به شرح زیر است: دو دوران $R(\phi)$ و $R(-\phi)$ به یک رده تعلق دارند؛ $J R(\phi)$ و $J R(-\phi)$



شکل ۷-۱۳ مولکولهایی که دارای گروه تقارنی $C_{\infty v}$ می‌باشند. نمونه‌هایی از نوع (الف) عبارتند

از: H_2 ، N_2 ، O_2 ، Cl_2 و غیره. CO_2 نمونه‌ای از نوع (ب) و H_2 و C_2 مولکولی از نوع (ج) است.

۸- علامت پریم در C_2' برای این به کار رفته است که نشان دهد محور دوران در این جا با محور تقارن

اصلی که خط واصل بین اتمهاست، متفاوت است.

متعلق به یک رده می‌باشند، E و J رده‌های جداگانه‌ای تشکیل می‌دهند زیرا با سایر عناصر جابجایی پذیرند، تمام انعکاس‌های قائم σ_v به یک رده تعلق دارند. بالاخره تمام $J \sigma_v = C_2$ به یک رده تعلق دارند.

گروه $D_{\infty h}$ (بدون صفحه انعکاسی افقی) دلالت بر تقارن دورانی محوری حول خط واصل بین آنها و تقارن دوگانه حول هر محور افقی که از مرکز مولکول می‌گذرد، دارد. در این صورت واضح است که:

$$D_{\infty h} = D_{\infty} \otimes (E, J) \quad (14-7)$$

مولکول‌های پیچیده ممکن است تقارن‌های دیگری نظیر، تقارن‌های پنجگانه، هفت گانه و غیره نیز داشته باشند. بسادگی می‌توان تمام گروه‌های نقطه‌ای را که شامل یک محور اصلی با یک تقارن n گانه باشند به دست آورد. به عنوان مثال، جمعاً هفت گروه نقطه‌ای داریم که هریک دارای یک محور دوران پنجگانه است. این گروه‌ها عبارتند از: C_{5v} ، C_{5h} ، D_{5h} و D_{5d} . به دست آوردن تصاویر استروگرافیک آنها را به عنوان تمرین به عهده دانشجویان می‌گذاریم.

۷-۴ نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه‌های نقطه‌ای

روش عمومی یافتن جدول مشخصه و نمایش‌های کاهش ناپذیر گروه‌های نقطه‌ای را بطور نسبتاً مفصلی در بخش (۳-۶) با بررسی C_{4v} و C_{5v} مورد بحث قرار دادیم. از این رو جدول‌های مشخصه تمام گروه‌های نقطه‌ای را بطور جداگانه بررسی نمی‌کنیم. لیکن، به عنوان یک اصل کلی، توجه کنید که همان‌گونه که در بخش ۳-۱۱ بحث گردید، وقتی یک گروه بتواند به صورت ضرب مستقیم دو گروه کوچکتر بیان شود، جدول مشخصه آن را می‌توان از جدول‌های مشخصه گروه‌های کوچکتر به دست آورد. در این جا با بررسی دو مثال: یکی برای گروه‌های مکعبی O ، O_h و دیگری برای گروه‌های پیوسته $C_{\infty v}$ یا $D_{\infty h}$ این نکته را روشن می‌سازیم. جدول مشخصه O را در مثال زیر به دست می‌آوریم. مثال: در این جا جدول مشخصه گروه O را پیدا می‌کنیم. این گروه دارای پنج رده است که در جدول (۷-۱) داده شده است. این گروه دارای پنج نمایش کاهش ناپذیر

می باشد که ابعاد آنها از معادله

$$l_1^2 + l_2^2 + l_3^2 + l_4^2 + l_5^2 = 24, \quad (15-7)$$

به دست می آید، این ابعاد عبارتند از: $l_1 = l_2 = 1$ و $l_3 = 2$ و $l_4 = l_5 = 3$. بطور قراردادی نمایشهای یک بعدی را با Γ_1 و Γ_2 ، نمایش دو بعدی را با Γ_{12} و نمایشهای سه بعدی را با Γ'_{15} و Γ'_{25} نشان می دهیم. Γ_1 را نمایش همانی در نظر می گیریم. توجه کنید که تمام رده های O خود وارون هستند، بنابراین مشخصه های در تمام نمایشهای کاهش ناپذیر حقیقی خواهند بود.

در نمایش یک بعدی دوم Γ_2 ، رده $(6C_4)$ می تواند دارای مشخصه های ± 1 ، $\pm i$ ، رده های $(3C_4^2)$ و $(6C_2)$ دارای مشخصه های ± 1 و رده $(8C_3)$ دارای مشخصه های ۱، ω ، ω^2 باشد که در آن $\omega = \exp\left(\frac{2\pi i}{3}\right)$ است. اما همان طور که در بالا تذکر دادیم می توانیم اعداد مختلط را مستثنا کنیم، بنابراین رده $(8C_3)$ باید دارای مشخصه ۱ باشد، درحالی که سه رده دیگر می توانند دارای مشخصه های ± 1 باشند. برای این که Γ_2 بر Γ_1 متعامد باشد، تنها شق ممکن این است که رده $(3C_4^2)$ دارای مشخصه ۱ و رده های $(6C_4)$ و $(6C_2)$ دارای مشخصه های ۱ - باشند.

حال به نمایش کاهش ناپذیر دو بعدی Γ_{12} می پردازیم و مشخصه های پنج رده آن را با $(2 a b c d)$ نمایش می دهیم. تعامد Γ_{12} با Γ_1 و Γ_2 و نرمالیزاسیون Γ_{12} معادلات زیر را می دهد:

$$2 + 6a + 3b + 6c + 8d = 0, \quad (7-16 \text{ الف})$$

$$2 - 6a + 3b - 6c + 8d = 0, \quad (7-16 \text{ ب})$$

$$4 + 6a^2 + 3b^2 + 6c^2 + 8d^2 = 24. \quad (7-16 \text{ ج})$$

از دو معادله اول داریم:

$$2 + 3b + 8d = 0, \quad a + c = 0 \quad (7-17)$$

یک معادله دیگر لازم است تا چهار ثابت را به دست آوریم. به این منظور از (۳-۶۵) که شامل حاصلضربهای رده هاست استفاده می کنیم. ساده ترین رده در گروه حاضر $(3C_4^2)$ یا بطور صریح $(C^2_{4x}, C^2_{4y}, C^2_{4z})$ می باشد. حاصلضرب این رده با خودش را در نظر

می‌گیریم. باتوجه به این که $C^2_{4x} C^2_{4y} = C^2_{4y} C^2_{4x} = C^2_{4z}$ داریم:

$$(3C^2)(3C^2) = 3(E) + 2(3C^2) \quad (18-7)$$

با استفاده از (۳-۶۵) و قرار دادن $i=j=3$ و $a_{333} = 2$ ، $a_{331} = 3$

به دست می‌آوریم: $a_{332} = a_{334} = a_{335} = 0$

$$3b^2 = 4 + 4b \Rightarrow b = 2 \text{ یا } -2/3 \quad (19-7)$$

وقتی در (۷-۱۶ ج) و (۷-۱۷) قرار دهیم، انتخاب $b = \frac{-2}{3}$ جواب غیرقابل قبولی می‌دهد، درحالی که انتخاب $b = 2$ ، می‌دهد $a = c = 0$ و $d = -1$. بدین ترتیب مشخصه‌های Γ_{12} را داریم.

حال، دو نمایش کاهش ناپذیر سه بعدی Γ_{15} و Γ_{25} داریم. با فرض مشخصه‌های

آنها به صورت $(3 p q r s)$ ، تعامل آنها با سه نمایش اول و شرط نرمالیزاسیون، چهار معادله زیر را می‌دهد:

$$\begin{aligned} 3 + 6p + 3q + 6r + 8s &= 0, \\ 3 - 6p + 3q - 6r + 8s &= 0, \\ 6 + 6a - 8s &= 0, \\ 9 + 6p^2 + 3q^2 + 6r^2 + 8s^2 &= 24. \end{aligned} \quad (20-7)$$

جواب این معادلات عبارت است از: $r = \pm 1$ ، $p = \pm 1$ ، $s = 0$ و $q = -1$. ظاهر آ دو انتخاب دلخواه داریم، ولی این، با این واقعیت که دو نمایش کاهش ناپذیر سه بعدی داریم سازگار است. بدین ترتیب در یک مرحله با انتخاب $p = -r = 1$ و برای Γ_{15} $p = -r = -1$ برای Γ_{25} توانستیم هر دو مشخصه را به دست آوریم. جدول مشخصه کامل برای گروه O که در بالا به دست آمد، همراه با توابع پایه برای نمایشهای کاهش ناپذیر در جدول (۷-۳) داده شده است. نمادگذاریهای متعددی برای نمایشهای کاهش ناپذیر مرسوم است؛ نمادگذاری بکار رفته در جدول (۷-۳) و سرتاسر این کتاب متناسب به بوکارت، اسمالوچوفسکی و ویگنر^۹ است.

۹- ر.ک: بوکارت، اسمالوچوفسکی و ویگنر (۱۹۳۶).

جدول ۳-۷ جدول مشخصه گروه مکعبی O.

E	$6C_3$	$3C_4^2$	$6C_4$	$8C_3$	نمایش کاهش ناپذیر	توابع پایه
1	1	1	1	1	Γ_1	$x^n + y^n + z^n$ (n even)
1	-1	1	-1	1	Γ_2	xyz
2'	0	2	0	-1	Γ_{12}	$\{x^2 - y^2, 2z^2 - x^2 - y^2\}$
3	1	-1	-1	0	Γ_{15}'	{x, y, z}
3	-1	-1	1	0	Γ_{25}	{xy, yz, zx}

جدول ۴-۷ جدول مشخصه O_h .

	E	$6C_4$	$3C_4^2$	$6C_2$	$8C_3$	J	$6JC_4$	$3JC_4^2$	$6JC_2$	$8JC_3$
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1	1
Γ_{12}	2	0	2	0	-1	2	0	2	0	-1
Γ_{15}'	3	1	-1	-1	0	3	1	-1	-1	0
Γ_{25}'	3	-1	-1	1	0	3	-1	-1	1	0
Γ_1'	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ_2'	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1	1	-1
Γ_{12}'	2	0	2	0	-1	-2	0	-2	0	1
Γ_{15}	3	1	-1	-1	0	-3	-1	1	1	0
Γ_{25}	3	-1	-1	1	0	-3	1	1	-1	0

وقتی نمایشهای کاهش ناپذیر O را به دست آوردیم، یافتن نمایشهای کاهش ناپذیر O_h آسان است. چون $O_h = O \otimes (E, J)$ ، O_h دارای ده نمایش کاهش ناپذیر است که حاصلضربهای مستقیم نمایشهای کاهش ناپذیر O و نمایشهای کاهش ناپذیر گروه وارونی (E, J) می باشند. جدول مشخصه O_h در جدول (۴-۷) داده شده است. توجه کنید که هر نمایش کاهش ناپذیر O دو نمایش کاهش ناپذیر O_h را می دهد، که تحت وارونی یکی زوج

و دیگری فرد است.

به عنوان مثال دوم، مورد گروههای $C_{\infty v}$ یا D_{∞} را در نظر می گیریم. این گروهها، گروههای پیوسته غیر آبلی هستند و دارای رده های زیر می باشند:

$$C_{\infty v} = (E, 2R_{\phi}, \sigma_v) \text{ و } D_{\infty} = (E, 2R_{\phi}, C_2')$$

کاهش ناپذیر یک بعدی هستند؛ یکی از آنها نمایش همانی و دیگری بر نمایش همانی متعامد است. به علاوه هر گروه دارای بی نهایت نمایش کاهش ناپذیر دو بعدی است. برای همین، ملاحظه می کنیم که قسمتهای حقیقی و موهومی $(x + iy)^n$ به ازای هر عدد مثبت صحیح، یک نمایش کاهش ناپذیر دو بعدی برای $C_{\infty v}$ و D_{∞} ایجاد می کنند. جدول مشخصه کامل این دو گروه در جدول (۷-۵) داده شده است. این گروهها دارای نمایشهای کاهش ناپذیر با ابعاد بزرگتر از دو نمی باشند. نمادگذاری ای که برای نمایشهای کاهش ناپذیر در این جا و در جدول (۷-۶) به کار برده ایم همان نمادگذاری متداول است که توسط متخصصین فیزیک مولکولی و شیمیدانها مورد استفاده قرار می گیرد.

بالاخره، گروه $D_{\infty h}$ را در نظر می گیریم که می تواند به چند طریق به صورت یک ضرب مستقیم نوشته شود. بنابراین:

$$D_{\infty h} = D_{\infty} \otimes (E, \sigma_h) = C_{\infty v} \otimes (E, \sigma_h) = C_{\infty v} \otimes (E, J) \quad (21-7)$$

جدول ۷-۵ جدول مشخصه $C_{\infty v}$ و D_{∞} .

توابع پایه	E	2R ϕ	σ_v یا C_2'	نمایش کاهش ناپذیر	
				$C_{\infty v}$	D_{∞}
A_1	1	1	1	$x^2 + y^2$	
A_2	1	1	-1	— z	
E_1	2	2 cos ϕ	0	(x, y)	
E_2	2	2 cos 2 ϕ	0	($x^2 - y^2, 2xy$)	
E_3	2	2 cos 3 ϕ	0	($x^3 - 3xy^2, 3x^2y - y^3$)	
.
.

جدول ۶-۷ جدول مشخصه $D_{\infty h}$.

	E	$2R_{\phi}$	C_2'	I	$2JR_{\phi}$	$J C_2'$
A_{1g}	1	1	1	1	1	1
A_{1u}	1	1	1	-1	-1	-1
A_{2g}	1	1	-1	1	1	-1
A_{2u}	1	1	-1	-1	-1	1
E_{1g}	2	$2 \cos \phi$	0	2	$2 \cos \phi$	0
E_{1u}	2	$2 \cos \phi$	0	-2	$-2 \cos \phi$	0
E_{2g}	2	$2 \cos 2\phi$	0	2	$2 \cos 2\phi$	0
E_{2u}	2	$2 \cos 2\phi$	0	-2	$-2 \cos 2\phi$	0
.
.
.

جدول ۷-۷ جدولهای مشخصه بلور شناختی و چند گروه نقطه ای مولکولی.

C_1	E
	1

C_2	E	C_2
	1	1
	1	-1

C_3	E	C_3	C_3^2	
	1	1	1	$w = \exp(2\pi i/3)$
}	1	w	w^2	
	1	w^2	w	

دنباله جدول ۷-۷

C_4	E	C_4	C_4^2	C_4^3
}	1	1	1	1
	1	-1	1	-1
	1	-i	-1	i
	1	i	-1	-i

C_5	E	C_5	C_5^2	C_5^3	C_5^4
}	1	1	1	1	1
	1	w	w^2	w^3	w^4
	1	w^4	w^3	w^2	w
	1	w^2	w^4	w	w^3
	1	w^3	w	w^4	w^2

$w = \exp(2\pi i/5)$

D_6	E	$2C_6$	$2C_6^2$	C_6^3	$3C_2'$	$3C_2''$
1	1	1	1	1	1	1
1	1	1	1	1	-1	-1
1	-1	1	-1	-1	1	-1
1	-1	1	-1	-1	-1	1
2	1	-1	-2	0	0	0
2	-1	-1	2	0	0	0

D_{2d}	E	$2S_4$	C_2	$2C_2'$	$2\sigma_d$
W_1	1	1	1	1	1
W_1'	1	1	1	-1	-1
W_2	1	-1	1	1	-1
W_2'	1	-1	1	-1	1
W_3	2	0	-2	0	0

$$D_{3d} = D_3 \otimes S_2;$$

$$D_{nh} = D_n \otimes S_2, \quad n=2, 4, 6;$$

$$D_{nh} = D_n \otimes (E, \sigma_h), \quad n=3, 5.$$

T	E	$3C_2$	$4C_3$	$4C_3^2$	
{	1	1	1	1	$w = \exp(2\pi i/3)$
	1	1	w	w^2	
	1	1	w^2	w	
	3	-1	0	0	

$$T_h = T \otimes S_2;$$

C_{6v}	E	$2C_6$	$2C_3^2$	$5\sigma_v$	
	1	1	1	1	$x = 2\pi/5$
	1	1	1	-1	
	2	$2 \cos x$	$2 \cos 2x$	0	
	2	$2 \cos 2x$	$2 \cos 4x$	0	

C_{6v}	E	$2C_6$	$2C_6^2$	C_6^3	$3\sigma_d$	$3\sigma_v$
	1	1	1	1	1	1
	1	1	1	1	-1	-1
	1	-1	1	-1	-1	1
	1	-1	1	-1	1	-1
	2	1	-1	-2	0	0
	2	-1	-1	2	0	0

C_{1h}	E	σ_h	
Q_1	1	1	$Z_1 \Sigma_1 \Delta_1$
Q_2	1	-1	$Z_2 \Sigma_2 \Delta_2$

$$C_{nh} = C_n \otimes C_{1h}$$

S_2	E	J
	1	1
	1	-1

S_4	E	S_4	C_4^2	S_4^3
	1	1	1	1
	1	-1	1	-1
}	1	i	-1	$-i$
	1	$-i$	-1	i

$$S_6 = C_3 \otimes S_2.$$

D_2	E	C_{2x}	C_{2y}	C_{2z}
N_1	1	1	1	1
N_2	1	1	-1	-1
N_3	1	-1	1	-1
N_4	1	-1	-1	1

D_3	E	$2C_3$	$3C_2'$
L_1	1	1	1
L_2	1	1	-1
L_3	2	-1	0

D_4	E	$2C_4$	C_4^2	$2C_2'$	$2C_2''$
$X_1 M_1$	1	1	1	1	1
$X_2 M_2$	1	1	1	-1	-1
$X_3 M_3$	1	-1	1	1	-1
$X_4 M_4$	1	-1	1	-1	1
$X_5 M_5$	2	0	-2	0	0

D_5	E	$2C_5$	$2C_5^2$	$5C_2'$
	1	1	1	1
	1	1	1	1
	2	$2 \cos x$	$2 \cos 2x$	0
	2	$2 \cos 2x$	$2 \cos 4x$	0

$x = 2\pi/5$

دنباله جدول ۷-۷

C_6	E	C_6	C_6^2	C_6^3	C_6^4	C_6^5
$\left\{ \begin{array}{l} \\ \\ \\ \\ \\ \end{array} \right.$	1	1	1	1	1	1
	1	-1	1	-1	1	-1
	1	w	w^2	w^3	w^4	w^5
	1	w^5	w^4	w^3	w^2	w
	1	w^2	w^4	1	w^2	w^4
	1	w^4	w^2	1	w^4	w^2

$$w = \exp(2\pi i/6)$$

C_{2v}	E	C_2	σ_v	σ_v'	
$D_1 G_1 S_1 Z_1 \Sigma_1$	1	1	1	1	X_1
$D_2 G_2 S_2 Z_2 \Sigma_2$	1	1	-1	-1	X_2
$D_3 G_3 S_3 Z_3 \Sigma_3$	1	-1	1	-1	X_3
$D_4 G_4 S_4 Z_4 \Sigma_4$	1	-1	-1	1	X_4

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$F_1 \Lambda_1$	1	1	1
$F_2 \Lambda_2$	1	1	-1
$F_3 \Lambda_3$	2	-1	0

C_{4v}	E	$2C_4$	C_4^2	$2m$	2σ	
$W_1 T_1 \Delta_1$	1	1	1	1	1	$M_1 \Gamma_1$
$W_1' T_1' \Delta_1'$	1	1	1	-1	-1	$M_2 \Gamma_2$
$W_2 T_2 \Delta_2$	1	-1	1	1	-1	$M_3 \Gamma_3$
$W_2' T_2' \Delta_2'$	1	-1	1	-1	1	$M_4 \Gamma_4$
$W_3 T_3 \Delta_3$	2	0	-2	0	0	$M_5 \Gamma_5$

یک پراتز نشان داده‌ایم. گروه‌هایی که حاصلضربهای مستقیم گروه‌های کوچک‌ترند به همان صورت مشخص شده‌اند و جدول‌های مشخصه آنها آورده نشده است. برای گروه‌هایی که حاصلضربهای مستقیم گروه‌های کوچک‌تر در (E, J) یا (E, σ_h) می‌باشند، نمایشهای اضافه با پریم مشخص شده است. به عنوان مثال پنج نمایش کاهش ناپذیر D_4 به صورت M_i یا X_i مشخص شده است، و ده نمایش کاهش ناپذیر D_{4h} با M_i و M_i' یا با X_i و X_i' ($1 \leq i \leq 5$) نشان داده شده است. برای فهرست جامع نمادگذاریهای مختلف مورد استفاده، خواننده را به مراجع زیر ارجاع می‌دهیم^{۱۲}.

۷-۵ گروه دوگانه

در فصل چهارم در ارتباط با بحث $SO(2)$ و $SO(3)$ دیدیم که این گروه‌ها هم نمایشهای تک مقداری و هم نمایشهای دو مقداری دارند. تذکر دادیم که اگر، (وقتی سیستم دارای اندازه حرکت صحیح باشد) گروه تقارنی آن مثلاً $SO(2)$ یا $SO(3)$ باشد، در این صورت برای اندازه حرکت‌های زاویه‌ای نیمه صحیح، گروه تقارنی مربوطه گروه‌های دوگانه متناظر $SO'(2)$ یا $SO'(3)$ خواهند بود. مطلب فوق حتی برای سیستم‌هایی با تقارن کمتر از $SO(3)$ یا $SO(2)$ ، نظیر مولکول‌ها یا بلورها، نیز برقرار است. برای اندازه حرکت‌های صحیح، اگر گروه تقارنی سیستم یک گروه نقطه‌ای G باشد، در این صورت، گروه تقارنی برای اندازه حرکت‌های نیمه صحیح، گروه دوگانه متناظر G' خواهد بود.

مفهوم گروه دوگانه از این واقعیت ناشی می‌شود که بعضی از سیستم‌ها، پس از دوران 2π حول یک محور به حالت اولیه شان بر نمی‌گردند. این نیاز به معرفی عنصر \bar{E} (صفحه ۱۹۱ را ببینید) را که مشخص‌کننده دوران 2π حول هر یک محور می‌باشد، ایجاد کرد. در این جا لازم است که بین اثر یک دوران دستگاه مختصات به اندازه 2π و دوران تابع موج فیزیکی فرق بگذاریم. یک دستگاه مختصات پس از دوران 2π حول هر محوری که از مبدأ مختصات بگذرد، به حالت اولیه‌ای برمی‌گردد. ولی توابع موج اسپینوری ذرات

با اندازه حرکت زاویه ای اسپینی نیمه صحیح در اثر دوران 2π در ۱ - ضرب می شوند و تنها پس از دوران 4π به مقادیر اولیه شان برمی گردند. لذا اگر عمل روی توابع موج اسپینوری را در نظر بگیریم، \bar{E} عنصر همانی نیست.

۷-۵-۱ رده های یک گروه دوگانه

گروه دوگانه G' عموماً شامل تمام اعمال G است به اضافه اعمال G که با عنصر \bar{E} ترکیب شده باشد. \bar{E} معرف دوران 2π حول یک محور است با ویژگی $(\bar{E})^2 = E$ ، (عناصر همانی است). اگر A عنصری از G باشد، حاصلضرب $\bar{E}A = A\bar{E}$ را با \bar{A} نمایش می دهیم و آن را عمل باردار می نامیم. مرتبه G' دو برابر مرتبه G است ولی رده های G' الزاماً دو برابر رده های G نیست. عنصر \bar{E} با تمام اعمال گروه نقطه ای G جابجاپذیر است و از این رو در مورد خاصی که A و \bar{A} به ازای تمام A های متعلق به G ($A \in G$) به رده های مختلف تعلق داشته باشند، تعداد رده های G' محققاً دو برابر رده های G است. برای هر رده G نظیر (A, B, C, \dots) دوره در G' داریم، (A, B, C, \dots) و $(\bar{A}, \bar{B}, \bar{C}, \dots)$. از طرف دیگر، اگر گروه G طوری باشد که A و \bar{A} به ازای بعضی از A های متعلق به G ، به یک رده تعلق داشته باشند، در این صورت تعداد رده های G' از دو برابر رده های G کمتر است. برای تعیین این که آیا A و \bar{A} به یک رده تعلق دارند یا خیر^{۱۳}، قواعد زیر به دست آمده است.

- (i) عنصر همانی E و عملگر \bar{E} دو رده جداگانه تشکیل می دهند. در گروههایی که شامل تقارن وارونی می باشند، وارونی J و $\bar{J} = \bar{E}J$ نیز رده های جداگانه تشکیل می دهند.
- (ii) اگر A یک دوران دوگانه حول یک محور باشد، A و \bar{A} به یک رده تعلق دارند اگر و فقط اگر یک دوران دوگانه دیگر در G حول محوری عمود بر محور A وجود داشته باشد یا یک انعکاس در صفحه ای که از محور A می گذرد. به عنوان مثال، گروه D_2 شامل دورانه های دوگانه حول سه محور دو به دو متعامد می باشد، اینها را می توان با C_{2x} ، C_{2y}

و C_{2z} نمایش داد. در گروه دوگانه متناظر D_2' ، C_{2x} و \bar{C}_{2x} در یک رده قرار دارند، همینطور (C_{2y}, C_{2y}) و (C_{2x}, \bar{C}_{2x}) دو رده دیگر D_2' می باشند. گروه C_{4v} دارای صفحات انعکاسی است که از محور چهارگانه می گذرند. بنابراین C_4^2 و C_4^2 متعلق به یک رده در گروه دوگانه C_{4v}' می باشند. لیکن در گروههای دوگانه C_{2h}' ، C_{4h}' و C_{6h}' ، C_2 و \bar{C}_2 به دلایل کاملاً روشنی به رده های متفاوت تعلق دارند (در این جا C_2 معرف یک دوران دوگانه حول محور تقارن است).

(iii) برای همه دورانهای دیگر (یعنی، دورانهای $\frac{\gamma\pi}{n}$ ، که در آن $n > 2$ است) رده های عملگرهای باردار و بدون بار متفاوتند. بنابراین، در گروه C_{3v} ، دورانهای سه گانه در یک رده $(2C_3)$ قرار دارند. در گروه دو گانه C_{3v}' ، این به دو رده $(2C_3)$ و $(2\bar{C}_3)$ منجر می شود. تعداد رده های متناظر با این عناصر دو برابر شده است.

(iv) اگر A یک انعکاس در یک صفحه باشد، A و \bar{A} به یک رده تعلق دارند اگر و تنها اگر انعکاس دیگری در یک صفحه قائم بر صفحه اول وجود داشته باشد یا یک دوران دو گانه حول یک محور در صفحه A . به عنوان مثال، گروههای C_{2v} ، C_{4v} و C_{6v} دارای صفحات انعکاسی متعامد می باشند، لذا σ_v و $\bar{\sigma}_v$ به یک رده در گروههای دو گانه مربوطه تعلق دارند. ولی در گروه C_{3v} صفحات انعکاسی بر یکدیگر عمود نیستند، از این رو σ_v و $\bar{\sigma}_v$ به رده های جداگانه در گروه دو گانه C_{3v}' متعلق می باشند. به دلایل مشابه، انعکاس افقی σ_h و $\bar{\sigma}_h$ به یک رده در گروههای دو گانه D_{nh}' تعلق دارند ولی σ_v و $\bar{\sigma}_v$ به رده های مختلف در D_{3d}' متعلقند.

(v) بالاخره، اگر گروه G شامل دورانهای ناسره باشد، این دورانها که به شکل $J C_n$ می باشند، از همان قواعد (ii) و (iii) تبعیت می کنند. این قواعد به ما امکان می دهد تا با یافتن رده های یک گروه نقطه ای، هر گروه دو گانه متناظر را به رده هایش تجزیه کنیم. ما، ذیلاً برای آشنا نمودن خواننده با کاربرد این قواعد، با بررسی چند گروه دو گانه نحوه استفاده از این قواعد را نشان می دهیم.

C_n . این گروه دارای n عنصر $C_n, C_n^2, \dots, C_n^n = E$ می باشد که هر کدام به تنهایی در یک رده قرار دارند. گروههای دو گانه C_n' نیز گروههای دوره ای از مرتبه $2n$

می باشند با عناصر $(C_n, C_n^2, \dots, C_n^n = \bar{E}, \bar{C}_n, \bar{C}_n^2, \dots, \bar{C}_n^n = E)$.

C_{nv} . این گروهها، به ازای مقادیر زوج n ، دارای یک دوران دو گانه حول محور n گانه اصلی می باشند. چون صفحات انعکاسی وجود دارند که از این محور می گذرند، بر طبق قاعده (ii) دوران دو گانه $C_2 = C_n^{n/2}$ و \bar{C}_2 به یک رده در گروه دو گانه تعلق دارند. بر طبق قاعده (iv) یک انعکاس قائم σ_v و عمل باردار متناظر $\bar{\sigma}_v$ به یک رده تعلق دارند. به ازای مقادیر فرد n ، هیچ کدام از دو قاعده (ii) و (iv) قابل اعمال نمی باشند لذا در C_{nv} به ازای n های فرد، تمام اعمال باردار و اعمال بدون بار متناظر به رده های جداگانه تعلق دارند. تعداد رده ها در این مورد، دو برابر می شود. به عنوان مثال، رده های C_{3v} عبارتند از: (E) ، (\bar{E}) ، $(2C_3)$ ، $(2\bar{C}_3)$ ، $(3\sigma_v)$ و $(3\bar{\sigma}_v)$. رده های C_{4v} عبارتند از: (E) ، (\bar{E}) ، $(2C_4)$ ، $(2\bar{C}_4)$ ، (C_4^2, \bar{C}_4^2) ، $(2m, 2\bar{m})$ و $(2\sigma, 2\bar{\sigma})$. در این جا برای (C_4, C_4^3) از نمادگذاری $(2C_4)$ و برای (m_x, m_y) از $(2m)$ و غیره، استفاده کرده ایم.

C_{nh} . در تمام گروههای دو گانه مربوطه، تعداد رده ها دو برابر می شوند، هر رده C_{nh} به دو رده C_{nh}' منجر می شود. گروههای دو گانه به ازای تمام مقادیر n ، همانند گروههای C_{nh} آبی هستند.

D_2 . این گروه آبی دارای چهار عضو است $(E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z})$. سه عنصر آخر تحت قاعده (ii) می آیند. بنابراین گروه دو گانه D_2' که از مرتبه ۸ می باشد دارای پنج رده زیر است: (E) ، (\bar{E}) ، (C_{2x}, \bar{C}_{2x}) ، (C_{2y}, \bar{C}_{2y}) و (C_{2z}, \bar{C}_{2z}) .

در این صورت واضح است که می توان رده های گروههای دو گانه متناظر با تمام گروههای نقطه ای ساده را به آسانی به دست آورد. اکنون دو گروه نمونه ای از سیستمهای مکعبی و یک گروه پیوسته را در نظر می گیریم.

T . همان طوری که قبلاً بحث شد، این گروه مرتبه ۱۲ دارای ۴ رده است: (E) ، $(3C_4^2)$ ، $(4C_3)$ و $(4C_3^2)$. چون سه محور دو گانه متعامد وجود دارد، رده دوم تحت قاعده (ii) قرار می گیرد و در گروه دو گانه T' ، یک رده $(3C_4^2, 3\bar{C}_4^2)$ وجود خواهد داشت. دو رده آخر تحت قاعده (iii) قرار می گیرند و به چهار رده در T' منجر خواهند شد.

در این صورت رده های T' عبارتند از: (E) ، (\bar{E}) ، $(3C_4^2)$ ، $(3C_4^2)$ ، $(4C_3)$ ، $(4\bar{C}_3)$ ، $(4C_3^2)$ ، $(4\bar{C}_3^2)$.

O . این گروه با ۲۴ عنصر ۵ رده دارد (E) ، $(3C_4)$ ، $(3C_4^3)$ ، $(6C_2)$ و $(4C_3)$ ، $(4C_3^2)$. رده های سوم و چهارم تحت قاعده (ii) و رده های دوم و پنجم تحت قاعده (iii) قرار می گیرند. در این صورت نتیجه می گیریم که گروه دو گانه O' دارای رده های زیر است: (E) ، (\bar{E}) ، $(3C_4)$ ، $(3C_4^3)$ ، $(3\bar{C}_4)$ ، $(3\bar{C}_4^3)$ ، $(3C_4^2)$ ، $(3\bar{C}_4^2)$ ، $(6C_2)$ ، $(6\bar{C}_2)$ ، $(4C_3)$ ، $(4C_3^2)$ و $(4\bar{C}_3)$ ، $(4\bar{C}_3^2)$.

C_{2v} . این گروه دارای رده های (E) ، $(2R\phi)$ و (σ_v) می باشد. رده $(2R\phi)$ به ازای $\phi \neq \pi$ (بجز $\phi = 0$ ، که همانی است) دارای دو عنصر و به ازای $\phi = \pi$ تنها دارای یک عنصر C_2 است. گروه دو گانه متناظر C_{2v}' به ازای $\phi \neq 0$ یا $\phi = \pi$ دارای رده های زیر است: (E) ، (\bar{E}) ، $(2R\phi)$ ، $(2\bar{R}\phi)$ ، (C_2) ، (\bar{C}_2) و (σ_v) ، $(\bar{\sigma}_v)$.

۷-۵-۲ نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه دو گانه

یک گروه دو گانه G' با گروه G که گروه دو گانه اش می باشد همومورفیک است. این را می توان به آسانی با انتخاب نگاشت دو به یک مانند $A \rightarrow \bar{A}$ ، $B \rightarrow \bar{B}$ و غیره دید.

حال فرض کنید در گروه G داریم $A B = C$. سپس حاصلضرب عناصر مجموعه (A, \bar{A}) با عناصر مجموعه (B, \bar{B}) از G' ، مجموعه (C, \bar{C}) را می دهد که عناصرش به C از G نگاشت می شوند که همومورفیزم را اثبات می کند.

فرض کنید G یک گروه محدود با C رده باشد و فرض کنید گروه دو گانه متناظر G' دارای C' رده باشد. در این صورت گروه G' دارای C' نمایش کاهش ناپذیر است که همگی آنها تک مقداری می باشند. از اینها می توان برای یافتن نمایشهای کاهش ناپذیر G استفاده کرد. خواهیم دید که از این نمایشها، تعداد C نمایش یک مقداری و $C - C'$ نمایش دیگر نمایشهای دو مقداری G می باشند.

واضح است که اثر \bar{E} روی هر تابع پایه این است که بسته به این که سیستم دارای

اندازه حرکت زاویه ای صحیح یا نیمه صحیح باشد، خود تابع یا منفی آن تابع را می دهد. این نشان می دهد که نمایش ماتریسی E ماتریس واحد یا منهای ماتریس واحد است. از این رو مشخصه عبارت است از ± 1 ، که در آن 1 بعد نمایش است. بطور مشابه به ازای تمام A های متعلق به G ، $(A \in G)$ در هر نمایش داریم $X(\bar{A}) = \pm X(A)$. تعداد C نمایش کاهش ناپذیر اول G' را می توان با استفاده از $X(\bar{A}) = X(A)$ از نمایشهای کاهش ناپذیر گروه کوچکتر G نوشت. بسادگی می توان نشان داد که این C نمایش کاهش ناپذیر G' در روابط راست هنجاری برای سطرها صدق می کنند. برای تعداد $C - C'$ نمایش کاهش ناپذیر باقیمانده، می توانیم با انتخاب $X(\bar{A}) = -X(A)$ هر یک از آنها را بر هر یک از C سطر اول متعامد کنیم (زیرا نیمی از عناصر G' عملیات باردار هستند در حالی که نیمی دیگر عملیات بدون بار می باشند). اینها نمایشهای دو مقداری گروه G را می دهند. در مورد خاصی که در آن A و \bar{A} به ازای بعضی از مقادیر A به یک رده تعلق دارند، $X(\bar{A}) = X(A)$ ، و بنابراین در تمام نمایشهای دو مقداری باید داشته باشیم:

$$X(\bar{A}) = -X(A) = 0$$

حال به چند مثال بخصوص می پردازیم. ابتدا از مورد ساده C_2 با عناصر (E, C_2) در دو رده شروع می کنیم. این گروه، دو نمایش کاهش ناپذیر دارد. گروه دو گانه C_2' دارای چهار عنصر $(E, C_2, \bar{E}, \bar{C}_2)$ است و یک گروه دوره ای است. نمایشهای کاهش ناپذیر آن در جدول (۷-۸) نشان داده شده است. روشن است که دو نمایش اول، نمایشهای یک مقداری و دو نمایش آخر، نمایشهای دو مقداری C_2 می باشند.

جدول ۷-۸ جدول مشخصه C_2' .

C_2'	E	C_2	\bar{E}	\bar{C}_2
Γ_1	1	1	1	1
Γ_2	1	-1	1	-1
Γ_3	1	i	-1	$-i$
Γ_4	1	$-i$	-1	i

سپس گروه D_2 را در نظر می‌گیریم که دارای چهار رده و چهار نمایش کاهش ناپذیر است. گروه دو گانه D_2' دارای ۸ عنصر در ۵ رده است. بنابراین نمایش کاهش ناپذیر اضافی D_2' باید از مرتبه ۲ باشد. به علاوه چون C_{2x} و \bar{C}_{2x} به یک رده تعلق دارند، مشخصه هایشان در این نمایش پنجم باید صفر باشد. همین مطلب در مورد C_{2y} ، \bar{C}_{2y} ، C_{2z} و \bar{C}_{2z} نیز صادق است. جدول مشخصه D_2' در جدول (۷-۹) نشان داده شده است.

جدول ۷-۹ جدول مشخصه D_2' .

D_2'	E	\bar{E}	(C_{2x}, \bar{C}_{2x})	(C_{2y}, \bar{C}_{2y})	(C_{2z}, \bar{C}_{2z})
Γ_1	1	1	1	1	1
Γ_2	1	1	1	-1	-1
Γ_3	1	1	-1	1	-1
Γ_4	1	1	-1	-1	1
Γ_5	2	-2	0	0	0

می‌توان ثابت کرد که D_2' با C_{4v} یا D_4 ایزومرفیک نیست. اما این گروه با گروه هشت ماتریسی که در مسأله (۷-۱) آورده شده است و در آن تأکید کرده ایم دو گروه با تعداد عناصر مساوی و رده‌های مساوی الزاماً ایزومرفیک نیستند، ایزومرفیک است. در واقع اینها همان هشت ماتریس نمایش کاهش ناپذیر Γ_5 از D_2' می‌باشند.

گروه دو گانه C_{4v} دارای ۱۶ عنصر در ۷ رده است در حالی که C_{4v} دارای ۸ عنصر در ۵ رده می‌باشد. اگر نمایشهای کاهش ناپذیر اضافی C_{4v} با $\Gamma^{(6)}$ و $\Gamma^{(7)}$ نشان داده شوند، ابعاد آنها (۱۶ و ۱۷) در رابطه زیر صدق می‌کنند:

$$\sum_{i=1}^7 l_i^2 = 16$$

اما ابعاد پنج نمایش کاهش ناپذیر اول معلوم است زیرا در رابطه زیر صدق می کنند:

$$\sum_{i=1}^5 l_i^2 = 8.$$

لذا $1_6^2 + 1_7^2 = 8$ ، که جواب آن $1_6 = 1_7 = 1$ است. مشخصه های رده های (\bar{C}_4^2, C_4^2) ، $(2m, 2\bar{m})$ و $(2\sigma, 2\bar{\sigma})$ در هر دو نمایش کاهش ناپذیر اضافی باید صفر باشند، زیرا همان طوری که تذکر دادیم، عملیات باردار و بدون بار متعلق به یک رده می باشند. مشخصه های E در هر دو نمایش $\Gamma(6)$ و $\Gamma(7)$ باید ۲ باشد و مشخصه های \bar{E} برابر ۲- . بالاخره مشخصه های C_4 و \bar{C}_4 در هر دو نمایش باید منفی یکدیگر باشند. در این صورت یافتن مشخصه های کامل جدول C_{4v} کار نسبتاً ساده ای است. در جدول (۷-۱۰) دو مشخصه دیگر C_{4v} را نشان داده ایم.

بالاخره، گروه دو گانه O' از گروه مکعبی O را در نظر می گیریم. گروه O دارای ۲۴ عنصر در ۵ رده است، در حالی که O' دارای ۴۸ عنصر در ۸ رده است. اگر نمایشهای کاهش ناپذیر اضافی O' را با Γ_6 ، Γ_7 و Γ_8 نشان دهیم، مشاهده می کنیم که ابعادشان توسط رابطه $1_6^2 + 1_7^2 + 1_8^2 = 24$ داده می شود که دارای جواب $1_6 = 1_7 = 2$ ، $1_8 = 4$ است. در این جا هم، مشخصه های رده های $(3C_4^2, 3\bar{C}_4^2)$ و $(6C_2, 6\bar{C}_2)$ باید در هر سه نمایش اضافی صفر باشد. این مشخصه ها را می توانیم بدون هیچ مشکلی با روشهایی که قبلاً در فصل سوم ارائه کردیم، پیدا کنیم. مشخصه های دیگر O' در جدول (۷-۱۱) آورده شده است.

کاستر ۱۴ مشخصه های گروههای دو گانه متناظر با کلیه گروههای نقطه ای بلور شناختی را به صورت جدول آورده است.

۷-۶ شکافتگی میدان بلوری ترازهای اتمی

وقتی یک اتم در یک مولکول یا یک بلور قرار داده می شود، تقارن اتم کاهش

جدول ۷-۱۰. مشخصه‌های اضافی C_{4v}' .

	(E)	(\bar{E})	($2C_4$)	($2\bar{C}_4$)	(C_4^2, \bar{C}_4^2)	($2m, \bar{2m}$)	($2\sigma, \bar{2}\sigma$)
$\Gamma^{(6)}$	2	-2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	0
$\Gamma^{(7)}$	2	-2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	0

جدول ۷-۱۱. مشخصه‌های اضافی O' .

	(E)	(\bar{E})	($6C_4$)	($6\bar{C}_4$)	($3C_4^2, 3\bar{C}_4^2$)	($6C_2, 6\bar{C}_2$)	($8C_3$)	($8\bar{C}_3$)
Γ^6	2	-2	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0	0	1	-1
Γ^7	2	-2	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0	0	1	-1
Γ^8	4	-4	0	0	0	0	-1	1

می‌یابد. یک اتم متزوی دارای تقارن گروه دوران-وارونی کامل $O(3)$ می‌باشد، درحالی که در داخل یک مولکول یا یک بلور دارای تقارن گروه نقطه‌ای است که مولکول یا بلور به آن تعلق دارند. تمام گروه‌های نقطه‌ای زیر گروه‌های $O(3)$ می‌باشند. از این رو تبهگنی $(2l+1)$ بار ترازهای الکترونی یک اتم متزوی بر طبق نمایشهای کاهش ناپذیر گروه نقطه‌ای شکافته شوند. این یکی از مهمترین کاربردهای نظریه‌بخش ۵-۶ می‌باشد. شکافتگی ترازها در گروه‌های هشت وجهی O و O_h را ذیلاً بررسی می‌کنیم.

در ابتدا از اسپین الکترونها صرف‌نظر می‌کنیم و تنها اندازه حرکت‌های زاویه‌ای مداری (عدد صحیح) را در نظر می‌گیریم. شکافتگی ترازها در گروه‌های دو گانه را بعداً در این بخش بررسی خواهیم کرد.

ابتدا گروه هشت وجهی O را در نظر بگیرید. این گروه از دورانهای: دو گانه، سه گانه، و چهار گانه تشکیل شده است. می‌توانیم با استفاده از فرمول $(4-50)$ مشخصه‌های این عناصر در نمایش $D(L)$ از گروه $SO(3)$ را به دست آوریم. این مشخصه‌ها در جدول $(7-3)$ برای چند مقدار اول L آورده شده است. با مقایسه این جدول با جدول $(7-3)$

برای مشخصه های O ، ملاحظه می کنیم که ترازهای با $L = 0$ و $L = 1$ شکافته نمی شوند. در این جا، تابع S از $D^{(0)}$ نمایش همانی Γ_1 از O را ایجاد می کند، درحالی که سه تابع P $D^{(1)}$ نمایش Γ_{15}' از O را می دهد. ترازهای اتمی با $L > 1$ باید تحت میدان هشت وجهی شکافته شوند زیرا هیچ نمایش کاهش ناپذیری از O با ابعاد بزرگتر از ۳ وجود ندارد. بار دیگر، با مقایسه مشخصه های $D^{(2)}$ و $D^{(3)}$ با مشخصه های جدول (۷-۳)، طرح زیر را برای شکافتگی $D^{(2)}$ و $D^{(3)}$ به دست می آوریم:

$$D^{(2)} = \Gamma_{12} \oplus \Gamma_{25}', \quad D^{(3)} = \Gamma_8 \oplus \Gamma_{15}' \oplus \Gamma_{25}' \quad (22-7)$$

این طرح نشان می دهد که پنج تابع D اتمی تبهگن به دو تراز در تقارن مکعبی شکافته می شوند. یک تراز دوبار تبهگن که توابع پایه اش مانند $(x^2 - y^2, 2z^2 - x^2 - y^2)$ تبدیل می شوند و یک تراز سه بار تبهگن با توابع پایه ای که مانند (yz, zx, xy) تبدیل می شوند. بطور مشابه، تراز F که هفت بار تبهگن است به یک تراز غیر تبهگن و دو تراز سه بار تبهگن شکافته می شود. تراز غیر تبهگن دارای تابع پایه xyz می باشد، حال آن که دو تراز سه بار تبهگن دارای توابع پایه ای هستند که به ترتیب مانند (x, y, z) و (yz, zx, xy) تبدیل می شوند؛ هر هفت تابع ترکیبات خطی هارمونیکهای گروه Y_3^m از درجه ۳ می باشند. وقتی تجزیه و تحلیل فوق به موردی که در آن تقارن وارونی وجود دارد تعمیم داده شود، یعنی به گروه O_h ، هیچ مشکلی به وجود نمی آید. ترازهای $L = 0$ و $L = 1$ باز هم غیر شکافته اند ولی سه تابع P به ازای $L = 1$ اکنون به خاطر پارته فردشان تحت وارونی به Γ_{15} تعلق دارند [جدول (۷-۴) را ببینید]. شکافتگی تراز D باز هم مانند

جدول ۷-۱۲. مشخصه های عناصر گروه نقطه ای O در نمایش کاهش ناپذیر (χ) So.

	E	$6C_4$	$3C_4^2$	$6C_2$	$8C_3$
$D^{(0)}$	1	1	1	1	1
$D^{(1)}$	3	1	-1	-1	0
$D^{(2)}$	5	-1	1	1	-1
$D^{(3)}$	7	-1	-1	-1	1

(۷-۲۲) از پارته زوج توابع D ناشی می‌شود، درحالی که شکافتگی تراز F به صورت زیر می‌باشد:

$$D^{(3)} = \Gamma_2' \oplus \Gamma_{1g} \oplus \Gamma_{2g} \quad (۷-۲۳)$$

حال، اندازه حرکت‌های زاویه‌ای اسپینی الکترون‌ها را در نظر بگیرید. اگر تعداد الکترون‌های اتم در لایه ناکامل زوج باشد، اندازه حرکت زاویه‌ای کل یک عدد صحیح است. در این صورت ترازهای متعلق به $D^{(J)}$ دقیقاً بر طبق طرح‌هایی که در بالا به دست آوردیم شکافته می‌شوند. ولی اگر تعداد فردی الکترون وجود داشته باشد توابع متناظر، یک نمایش دو مقداری $D^{(J)}$ ، با مقادیر نیمه صحیح J ، ایجاد خواهند کرد. توابع پایه (که اکنون حاصلضرب‌های توابع مداری و اسپینی خواهند بود) در اثر دوران 2π در $1 -$ ضرب خواهند شد. از این رو با گروه دو گانه O' ، کار خواهیم کرد. اگر مشخصه‌های نمایش $(2J+1)$ بعدی O' را که توسط این توابع پایه ایجاد می‌شود، به دست آوریم، خواهیم دید که به ازای تمام A های متعلق به $O' = -X^{(J)}(A) = X^{(J)}(\bar{A})$. یک چنین نمایشی بر تمام نمایش‌های یک مقداری O' متعامد خواهد بود و لذا در اثر کاهش، خواهیم دید که تنها شامل نمایش‌های دو گانه O' است.

کاهش $D^{(J)}$ برای چند مقدار نیمه صحیح J را به دست می‌آوریم. با استفاده از (۴-۸۹) برای مشخصه‌های $D^{(J)}$ می‌توانیم مشخصه‌های عناصر O' در $D^{(J)}$ را به دست آوریم. این مشخصه‌ها بطور جامعی در جدول (۷-۱۳) آورده شده‌اند. با مقایسه این جدول با نمایش‌های دو مقداری O' در جدول (۷-۱۱) طرح زیر را برای شکافتگی ترازهای اندازه حرکت زاویه‌ای کل به دست می‌آوریم.

$$\begin{aligned} D^{(1/2)} &= \Gamma_8, \\ D^{(3/2)} &= \Gamma_8, \\ D^{(5/2)} &= \Gamma_7 \oplus \Gamma_8, \\ D^{(7/2)} &= \Gamma_8 \oplus \Gamma_7 \oplus \Gamma_8, \end{aligned} \quad (۷-۲۴)$$

توجه کنید که مرتبه تبهگنیهای تمام ترازهای تجزیه شده در (۷-۲۴) زوج است. این دقیقاً نتیجه قضیه کرامر است که در بخش (۵-۹-۴) مورد بحث قرار گرفت و بنا به آن برای

سیستمهای با اندازه حرکت‌های زاویه ای نیمه صحیح، درجه تبهگنی تمام ترازها باید به خاطر تقارن وارونی زمان، زوج باشد.

جدول ۷-۱۳ مشخصه های عناصر گروه دوگانه O' در نمایشهای کاهش ناپذیر $D^{(J)}$ برای اعداد نیمه صحیح J؛ π تمام مقادیر صحیح غیر منفی را اختیار می کند.

	(E)	(\bar{E})	($6C_4$)	($6\bar{C}_4$)	($3C_2', 3\bar{C}_2'$)	($6C_2, 6\bar{C}_2$)	($8C_2$)	($8\bar{C}_2$)
$D^{(J)}$	$2J+1$	$-(2J+1)$	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}(J=(8n+1)/2)$	0	0	-1	$-1\left(J=\frac{6n+1}{2}\right)$
			$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}(J=(8n+3)/2)$	0	0	1	$1\left(J=\frac{6n+3}{2}\right)$
							0	$0\left(J=\frac{6n+5}{2}\right)$

مسائل فصل هفتم

۷-۱. تصاویر استروگرافیک گروههای نقطه ای C_{5v} ، C_{5h} ، D_{5h} و D_5 را رسم کنید.

۷-۲. گروههای متقارن نقطه ای مولکولهای H_2O ، C_6H_6 ، CH_4 ، NH_3 و Na Cl کدام است؟

۷-۳. نشان دهید که سه تابع (x, y, z) نمایشهای Γ_{15}' ی O و Γ_{15} ی O_h را ایجاد می کنند.

۷-۴. جدول ضرب گروههای دوگانه C_2' ، C_2'' ، D_2 ، C_{3v} و D_3' را بنویسید.

۵-۷. مشخصه های جمعی گروههای دو گانه C'_{3v} ، D'_3 ، S'_4 ، D'_4 و C'_5 را به دست آورید.

۶-۷. یک لیگاند نظیر $Ni(CN)_4^{2-}$ را که دارای تقارن گروه نقطه ای D_{4h} است (Ni در مرکز قرار دارد) در نظر بگیرید. در Ni منفرد، پنج اریستال d وسیله این پنج تابع ایجاد می شود به دست آورید و آن را کاهش دهید. ترکیبات خطی متقارن شده ای از این اریستالهای d به دست آورید که بر طبق نمایشهای کاهش ناپذیر D_{4h} تبدیل شوند.

۷-۷. عبارت پایانی بخش ۷-۲ را مبنی بر این که گروه عامل $\frac{S}{T}$ با گروه نقطه ای G ایزومرفیک است، اثبات کنید.
۸-۷. نشان دهید:

$$\begin{aligned} \text{(الف)} \quad & \{A | \underline{\tau}\}^{-1} \{E | t\} \{A | \underline{\tau}\} = \{E | A^{-1}t\}, \\ \text{(ب)} \quad & \{A | \underline{\tau}\}^{-1} \{B | \underline{\sigma}\} \{A | \underline{\tau}\} = \{A^{-1}BA | A^{-1}(B\underline{\tau} + \underline{\sigma} - \underline{\tau})\}. \end{aligned}$$

۹-۷. شکافتگی ترازهای اتمی در گروه چهار وجهی T_d را به دست آورید.

۱۰-۷. گروه تقارن نقطه ای انواع شبکه های دوبعدی را تعیین کنید.

۱۱-۷. گروه نقطه ای شبکه و زیرگروه گروه نقطه ای ای که بلورهای زیر را بدون تغییر می گذارد، تعیین کنید: (الف) NaCl ، (ب) CsCl ، (ج) Zn (فاز شش وجهی)، (د) Cu_3Au (ساختار مکعبی که در آن اتمهای Au در رأس و اتمهای Cu در مراکز وجه ها قرار دارند) و (ه) $MgAl_2O_4$ (ساختار مکعبی اسپینلی).

۱۲-۷. اگر δ_A و δ_B به ترتیب انتقالهای غیرابتدایی مشخصه وابسته دو عنصر A و B از یک گروه نقطه ای در یک گروه فضایی معین باشند، نشان دهید که انتقال غیرابتدایی مشخصه وابسته به عنصر AB برابر $\delta_A + \delta_B$ است.

۱۳-۷. شکافتگی ترازهای D^4 و D^5 یک اتم منزوی را در گروه مکعبی O_h به دست آورید.

۱۴-۷. شکافتگی ترازهای $D^{9/2}$ و $D^{11/2}$ یک اتم منزوی در گروه دو گانه O' را به دست آورید.

کتاب شناسی فصل هفتم

Azaroff (1960); Ballhausen (1962); Bell (1954); Bhagavantam (1966); Bloss (1971); Bradley and Cracknell (1972); Buerger (1967); Cracknell (1968); Falicov (1967); Koster (1957); Koster, Dimmock and Wheeler (1963); Kovalev (1965); Loebel (1968); Nussbaum (1966); Phillips (1963); Slater (1965); Tinkham (1964); Zak, Casher, Gluck and Gur (1970).

نظریه گروهها در فیزیک حالت جامد

پس از بحث تفصیلی دربارهٔ سی و دو گروه نقطه ای بلور شناختی و مفاهیم بنیادی گروههای انتقال و گروههای فضایی، در این فصل به فیزیک حالت جامد می پردازیم. چون پرداختن به کاربردهای متعدد نظریهٔ گروهها به فیزیک جامدات از حوصلهٔ این کتاب خارج است، در واقع تنها به یک مسألهٔ عمده خواهیم پرداخت و آن عبارت است از ساختار الکترونی بلورها. انتظار داریم این امر به دانشجویان کمک کند تا روشهای نظریهٔ گروهی در فیزیک حالت جامد را درک کنند.

به علاوه با وجودی که بیش از چند کاربرد بطور مختصر در ضمیمه ها مورد بحث قرار نگرفته است، اعتقاد داریم که بحث مفصل مسألهٔ ساختار الکترونی، همراه با شکافتگی میدان بلوری ترازهای اتمی که در فصل قبل مورد بررسی قرار گرفت راه را برای هر کاربرد نظریهٔ گروهی دیگر در فیزیک حالت جامد، نظیر حالت های ناخالصی و مراکز رنگ، نظریهٔ میدانهای بلوری و تشدید پارامغناطیسی، دینامیک شبکه و غیره، هموار خواهد ساخت. به عنوان مثال، نقش نظریهٔ گروهها در دینامیک شبکه دقیقاً با نقش آن در مسألهٔ ساختار نوار یکسان است.

۱-۸ مسألهٔ ساختار الکترونی بلورها

انرژیها و توابع موج یک الکترون در یک بلور جرابهای معادلهٔ شرودینگر زیر

می باشند.

$$\mathcal{H}\phi(\mathbf{r}) = \left\{ -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} \phi(\mathbf{r}) = E \phi(\mathbf{r}), \quad 1-8$$

که در آن $V(r)$ پتانسیلی است که الکترون در شبکه تناوبی احساس می کند. گروه تقارنی کل هامیلتونین بلور همان گروه فضایی است که بلور به آن تعلق دارد. همان طور که در بخش بعدی نشان خواهیم داد، جوابهای این معادله به صورت توابع بلاخ $\phi_k(r)$ با ویژه مقدرهای انرژی مربوطه $E(k)$ ظاهر خواهند شد. رابطه اساسی $E = E(k)$ به عنوان ساختار نواری الکترونی یا ساختار الکترونی بلور نامیده می شود. دانستن $E(k)$ به ما امکان می دهد تا تعدادی از خواص قابل مشاهده بلور نظیر خواص انتقال و خواص اپتیکی را تعیین کنیم. ساده ترین نتیجه ای که می توانیم از ساختار الکترونی بگیریم، این است که مشخص می کند یک بلور آیا یک فلز است، یک نیمه فلز است، یک نیمه رساناست یا یک عایق.

باید در آغاز تأکید کنیم که در تقریب ذره منفرد، که قبلاً در فصل ششم مورد بحث قرار گرفت کار خواهیم کرد. از ارتعاشات هسته ها صرف نظر خواهیم کرد و فرض خواهیم کرد در محلهای خود در شبکه ثابت شده اند. همچنین از اندرکنشهای بین الکترونها صرف نظر خواهیم کرد و فرض خواهیم کرد که مانند یک گاز الکترونها آزاد رفتار می کنند. بعداً اختلالی را که توسط پتانسیل تناوبی ایجاد می شود مورد بحث قرار خواهیم داد. ویژه حالتی که با این تقریبات به دست می آیند، حالتی ذره منفرد نامیده می شوند و معرف حالتی ساکن الکترونها می باشند. الکترونها بر طبق اصل انحصار پاولی این حالتها را پر می کنند، هر حالت حداکثر دو الکترون را جای می دهد، یکی با اسپین بالا و دیگری با اسپین پایین.

غیر از فرضهای فوق، محدودیت دیگری برای پتانسیل $V(r)$ وجود ندارد بجز این که تناوبی باشد یا دوره تناوب شبکه. همان طور که باید تاکنون روشن شده باشد، نظریه گروهها در ساده سازی معادلات مفسر، در دسته بندی ویژه حالتی مسأله و برچسب زدن نوارهای انرژی کمک بسیار زیادی می کند. اما هیچ برآورد کمی از انرژیهای دخیل در مسأله نمی کند.

چون فقط جنبه نظریه گروهی ساختار الکترونی مورد نظر ماست، شکل تحلیلی دقیق پتانسیل $V(r)$ برای ما مهم نیست. برای سهولت اغلب مورد $V(r) = 0$ ، یعنی مورد

پتانسیل ثابت را در نظر خواهیم گرفت. این مسأله مقدماتی مکانیک کوانتومی الکترونها در یک جعبه می باشد و در این صورت جوابهای (۱-۸) امواج تخت:

$$\phi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) \quad (۲-۸ \text{ الف})$$

با انرژیهای

$$E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / 2m. \quad (۲-۸ \text{ ب})$$

می باشد. این کار تقریب الکترون آزاد نامیده می شود. این مورد ساده، بیش قابل ملاحظه ای از مسأله ساختار نواری الکترونی بلورها را فراهم می آورد.

۲-۸ گروه انتقال و شبکه معکوس

به خاطر تقارن انتقالی بلور، ویژه تابعهای هامیلتونین در (۱-۸) با یک پتانسیل تناوبی، دارای شکل مشخصی می باشند که توسط قضیه بلاخ داده می شود. بر طبق این قضیه، ویژه تابعها دارای خواص انتقالی معینی هستند که توسط بردار مرجع \vec{k} تعیین می شوند و مقادیر یک ویژه تابع در نقاط هم ارز در سلولهای واحد مختلف توسط یک ضرب فاز به هم مربوطند. با وجودی که اثبات قضیه بلاخ نسبتاً ساده است^۱، در این بخش اثبات آن را بر مبنای استدلالهای نظریه گروهی بررسی خواهیم کرد و سپس در مورد طبیعت بردار مرجع \vec{k} و شبکه معکوس بحث خواهیم کرد.

۱-۲-۸ قضیه بلاخ

عناصر گروه انتقال یک بلور با شرایط مرزی پریودی را می توان مانند بخش ۲-۷، توسط $T(n_1, n_2, n_3)$ نمایش داد. دیدیم که گروه انتقال یک گروه آبلی است. از این رو هر عضو گروه انتقال T به تنهایی یک رده است. نتیجه می شود که تمام نمایشهای کاهش ناپذیر T باید یک بعدی باشند.

فرض کنید $\phi(\vec{r})$ یک ویژه تابع هامیلتونین (۱-۸) باشد. چون هامیلتونین تحت

گروه انتقال تغییرناپذیر است، می توانیم از $\phi(\vec{r})$ برای ایجاد یک نمایش کاهش ناپذیر T استفاده کنیم. در این صورت عمل هر عنصر T روی $\phi(\vec{r})$ این است که آن را در یک اسکالر ضرب کند که نمایش آن عنصر با پایه $\phi(\vec{r})$ است. عملگر متناظر با انتقال $T(n_1, n_2, n_3)$ را که روی توابعی از \vec{r} عمل می کند به $P_{n_1 n_2 n_3}$ نمایش می دهیم. در این صورت با انتخاب یک عنصر عمومی از T (که یک عنصر از گروه فضایی S نیز می باشد)، داریم:

$$P_{n_1 n_2 n_3} \phi(\mathbf{r}) = c(n_1, n_2, n_3) \phi(\mathbf{r}), \quad (3-8)$$

که در آن $c(n_1, n_2, n_3)$ یک مقدار ثابتی است که باید تعیین کنیم. اما بنا به تعریف، عمل عملگر انتقال به صورت زیر است:

$$P_{n_1 n_2 n_3} \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r} + n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3), \quad (4-8)$$

که در آن، مانند بخش ۷-۲، \vec{a}_1 ، \vec{a}_2 و \vec{a}_3 بردارهای اساسی انتقال شبکه می باشند. بخصوص، باید داشته باشیم:

$$P_{100} \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r} + \mathbf{a}_1) = c(1, 0, 0) \phi(\mathbf{r}) \quad (5-8)$$

با اعمال P_{100} روی $\phi(\vec{r})$ به تعداد N مرتبه و استفاده از شرایط مرزی پریودی $\phi(\vec{r} + N_1 \vec{a}_1) = \phi(\vec{r})$ به دست می آوریم:

$$P_{N100} \phi(\mathbf{r}) = \phi(\mathbf{r}) = c(N_1, 0, 0) \phi(\mathbf{r}) = [c(1, 0, 0)]^{N_1} \phi(\mathbf{r}) \quad (6-8)$$

این رابطه نشان می دهد که:

$$c(1, 0, 0) = \exp(2\pi i m_1 / N_1), \quad -N_1/2 \leq m_1 \leq N_1/2, \quad (7-8 \text{ الف})$$

و

$$c(n_1, 0, 0) = \exp(2\pi i m_1 n_1 / N_1) \quad (7-8 \text{ ب})$$

می توانیم عبارتهای مشابهی برای $c(0, n_2, 0)$ و $c(0, 0, n_3)$ به دست آوریم. با ضرب این ضرایب داریم:

$$c(n_1, n_2, n_3) = \exp \left[2\pi i \left(\frac{m_1 n_1}{N_1} + \frac{m_2 n_2}{N_2} + \frac{m_3 n_3}{N_3} \right) \right] \quad (8-8)$$

حال بردارهای انتقال اساسی شبکه معکوس را به صورت زیر تعریف می کنیم:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3) / v_c, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1) / v_c, \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2) / v_c, \quad v_c = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3). \end{aligned} \quad (9-8)$$

می توان ثابت کرد که این بردارها دارای خواص زیر می باشند:

$$b_i \cdot a_j = 2\pi \delta_{ij}, \quad i, j = 1, 2, 3 \quad (10-8)$$

در این صورت یک بردار عمومی \vec{k} از فضای معکوس می تواند به صورت ترکیب خطی از $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ ، نوشته شود:

$$\vec{k} = (m_1/N_1) \vec{b}_1 + (m_2/N_2) \vec{b}_2 + (m_3/N_3) \vec{b}_3, \quad (11-8)$$

که در آن m_i های تو اندهر عدد صحیحی باشند. اگر همه m_i ها مضارب صحیحی از N_i های نظیر باشند، یک ترکیب خطی از $\vec{b}_1, \vec{b}_2, \vec{b}_3$ با ضرایب صحیح داریم. یک چنین بردارهایی را بردارهای شبکه معکوس می نامیم و آنها را به صورت زیر نمایش می دهیم:

$$\vec{G}(h, k, l) = h\vec{b}_1 + k\vec{b}_2 + l\vec{b}_3 \quad (12-8)$$

که در آن h, k, l اعداد صحیح اند. شبکه ای که توسط انتهای بردارهای شبکه معکوس ایجاد می شود شبکه معکوس نامیده می شود و نقاط انتهایی آنها نقاط شبکه معکوس نامیده می شوند. ضرب اسکالر یک بردار \vec{k} از فضای معکوس با یک بردار انتقال شبکه مستقیم $\vec{r}(n_1, n_2, n_3)$ را می توان با استفاده از (۱۰-۸) به دست آورد. نتیجه عبارت است از:

$$\vec{k} \cdot \vec{r}(n_1, n_2, n_3) = 2\pi \left(\frac{m_1 n_1}{N_1} + \frac{m_2 n_2}{N_2} + \frac{m_3 n_3}{N_3} \right). \quad (الف) \quad (13-8)$$

به عنوان یک مورد خاص، اگر \vec{k} را با \vec{G} جایگزین کنیم، با استفاده از (۱۲-۸)، داریم:

$$\vec{G} \cdot \vec{r} = 2\pi (hn_1 + kn_2 + ln_3) = 2\pi \times \text{integer} \quad (ب) \quad (13-8)$$

با استفاده از این رابطه در (۸-۸)، داریم:

$$c(n_1, n_2, n_3) = \exp[i\vec{k} \cdot \vec{r}(n_1, n_2, n_3)] \quad (14-8)$$

با ترکیب این رابطه با (۳-۸) و (۴-۸)، ملاحظه می کنیم که ویژه تابع $\phi(\vec{r})$ دارای خاصیت زیر است:

$$\phi(\vec{r} + \vec{t}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{t}) \phi(\vec{r}). \quad (15-8)$$

این رابطه برقرار است اگر و تنها اگر $\phi(\vec{r})$ به شکل زیر باشد:

$$\phi(\vec{r}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{r}) u_{\vec{k}}(\vec{r}), \quad (16-8)$$

که در آن تابع $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ نسبت به \vec{r} پریودی است با دوره تناوب شبکه، یعنی به ازای تمام

بردارهای انتقال شبکه مستقیم \vec{t} ، $u_{\vec{k}}(\vec{r}+\vec{t}) = u_{\vec{k}}(\vec{r})$ ، این، همان قضیه بلاخ است. ویژه تابعهای هامیلتونین یک الکترون در یک پتانسیل پریودی باید به شکل (۸-۱۶) بوده، یا دارای خاصیت (۸-۱۵) باشند. توجه کنید که دو بیان (۸-۱۵) و (۸-۱۶) از قضیه بلاخ هم ارز یکدیگرند.

بردار \vec{k} بردار موجی الکترون در حالت $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ نامیده می شود و توسط رفتار تابع $\phi_{\vec{k}}(\vec{r})$ تحت عملگرهای انتقال تعریف می شود، یعنی توسط (۸-۱۵). بدین ترتیب ملاحظه می کنیم که می توان ویژه تابعها و ویژه مقادیرهای معادله شرودینگر (۸-۱) را توسط بردار موجی \vec{k} برچسب زد. از بحث بخش (۵-۴) روشن می شود که مادامی که تقارن انتقالی هامیلتونین بهم نخورده باشد بردار موجی \vec{k} یک عدد کوانتومی خوب برای الکترون در بلور است. بردار موجی \vec{k} در پدیده های متعددی از پراکندگی الکترون با سایر پراکنجستگیهای بلور خود را نشان می دهد، کمیت $\hbar \vec{k}$ به عنوان اندازه حرکت خطی الکترون ظاهر می شود. لیکن، این اندازه حرکت خطی نباید به مفهوم کلاسیکی در نظر گرفته شود. زیرا الزاماً موازی سرعت گروه الکترون نیست.

معادله (۸-۱) را به صورت زیر می نویسیم.

$$\mathcal{H} \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k}) \phi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (17-8)$$

تابع $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ در (۸-۱۶) یک تابع دلخواه نیست. برای این که تابع بلاخ (۸-۱۶) در معادله شرودینگر (۸-۱) صدق کند، می توان با قرار دادن (۸-۱۶) در (۸-۱) نشان داد که لازم است $u_{\vec{k}}(\vec{r})$ جواب معادله ویژه مقدری زیر باشد:

$$\left\{ \frac{1}{2m} (-\hbar^2 \nabla^2 - i \hbar \vec{k} \cdot \nabla + k^2) + V(\vec{r}) \right\} u_{\vec{k}}(\vec{r}) = E(\vec{k}) u_{\vec{k}}(\vec{r}). \quad (18-8)$$

۸-۲-۲ تقارن شبکه معکوس

ابتدا نشان می دهیم که شبکه معکوس دارای همان گروه تقارنی نقطه ای شبکه مستقیم است، یعنی اگر شبکه مستقیم تحت یک عمل معین گروه نقطه ای که حول یکی از جایگاههای شبکه ای انجام می شود، تغییر ناپذیر باشد، در این صورت شبکه معکوس

متناظر نیز تحت همان عمل که حول یکی از نقاط شبکه اش انجام می‌گیرد تغییرناپذیر است و بالعکس.

فرض کنید A یک عضو از گروه نقطه‌ای شبکه مستقیم، و \vec{G} یک بردار شبکه معکوس باشد. برای هر بردار انتقال \vec{t} از شبکه مستقیم، $A\vec{t}$ نیز یک بردار انتقال است. در این صورت از (۸-۱۳ ب) داریم:

$$(۸-۱۹) \quad G \cdot A\vec{t} = 2\pi \times (\text{یک عدد صحیح}) \quad \text{به ازای تمام } \vec{t} \text{ ها،}$$

چون عملیات گروه نقطه‌ای، تبدیلات متعامدند، حاصلضرب اسکالر دو بردار تحت این عملیات تغییرناپذیر می‌ماند، یعنی، $A^{-1} \vec{G} \cdot A^{-1} (A\vec{t}) = \vec{G} \cdot A\vec{t}$ ، بنابراین رابطه (۸-۱۹) می‌دهد:

$$(۸-۲۰) \quad A^{-1} G \cdot \vec{t} = 2\pi \times (\text{یک عدد صحیح}) \quad \text{به ازای تمام } \vec{t} \text{ ها،}$$

چون این رابطه به ازای تمام بردارهای شبکه \vec{t} برقرار است، (۸-۲۰) نشان می‌دهد که $A^{-1} \vec{G}$ باید به شکل $q_1 \vec{b}_1 + q_2 \vec{b}_2 + q_3 \vec{b}_3$ باشد، که در آن q_i ها اعداد صحیحند. به عبارت دیگر $A^{-1} \vec{G}$ باید یک بردار شبکه معکوس باشد.

چون این مطلب برای هر عنصر A از گروه نقطه‌ای برقرار است، بدیهی است که هر عمل تقارنی شبکه مستقیم یک عمل تقارنی شبکه معکوس نیز هست. عکس این مطلب را نیز می‌توان با تعقیب همان روش استدلال فوق و یا با توجه به این نکته که شبکه مستقیم معکوس شبکه معکوس است، اثبات کرد. بنابراین شبکه معکوس دارای هیچ عنصر تقارنی دیگری علاوه بر عناصر تقارنی شبکه مستقیم نیست. از این جا نتیجه می‌شود که شبکه معکوس دارای همان گروه نقطه‌ای شبکه مستقیم است.

این نتیجه برحسب هفت سیستمی که شبکه‌ها به آنها تقسیم می‌شوند، پیامد مهمی به همراه دارد. نتیجه می‌شود که شبکه معکوس به همان سیستم شبکه مستقیم تعلق دارد، هرچند ممکن است به همان نوع تعلق نداشته باشد. به عنوان مثال، اگر شبکه مستقیم مکعبی است، شبکه معکوس نیز مکعبی خواهد بود. ولی در مورد نوع، شبکه معکوس یک شبکه میان حجمی، یک میان وجهی است و برعکس.

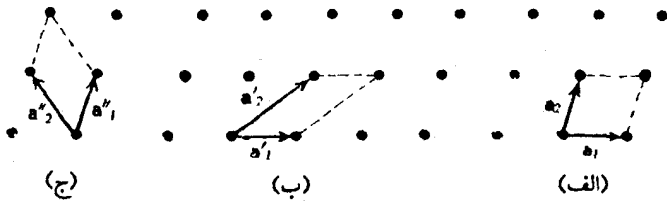
۸-۲-۳ منطقه بریلوئن

معادله (۸-۱۵) نشان می دهد که هر مقدار \vec{k} یک نمایش کاهش ناپذیر گروه انتقال را می دهد. اما همه اینها نمایشهای متمایز نیستند. زیرا، دو بردار \vec{k} را در نظر بگیرید که توسط یک بردار شبکه معکوس \vec{G} بهم مربوط باشند، بطوری که $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$. در این صورت با توجه به (۸-۱۳ ب) واضح است که به ازای تمام \vec{t} ما داریم $\exp(i\vec{k}' \cdot \vec{t}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{t})$. این نشان می دهد که یک مجموعه کامل از نقاط در فضای معکوس به شکل $\vec{k} + \vec{G}$ (که در آن \vec{k} ثابت است و \vec{G} تمام بردارهای شبکه معکوس را می گیرد) وجود دارد که متناظر با یک نمایش کاهش ناپذیر T است. به عبارت دیگر، بردار \vec{k} یک تابع بلاخ منحصر بفرد نیست؛ یک تابع بلاخ می تواند با هر یک از بردارهای $\vec{k} + \vec{G}$ مشخص شود.

برای اجتناب از این ابهام و برای این که بتوانیم هر تابع بلاخ و هر نمایش کاهش ناپذیر T را با یک بردار منحصر بفرد \vec{k} مشخص کنیم، یک سلول واحد در شبکه معکوس انتخاب می کنیم. از مجموعه نقاط هم ارز $\vec{k} + \vec{G}$ ، آن نقطه ای را انتخاب می کنیم که در سلول واحد انتخاب شده قرار داشته باشد.

هر نقطه از فضای معکوس را می توان به یک نقطه هم ارز در سلول واحد کاهش داد و ابهام بالا را برطرف ساخت. در این صورت هر مقدار مجاز \vec{k} در سلول واحد یک نمایش کاهش ناپذیر منحصر بفرد T را می دهد. همان طوری که در زیر خواهیم دید، تعداد این نمایشها با تعداد عناصر گروه انتقال T برابر است و این به نوبه خود با تعداد $N_1 N_2 N_3$ سلول ابتدائی شبکه مستقیم برابر است.

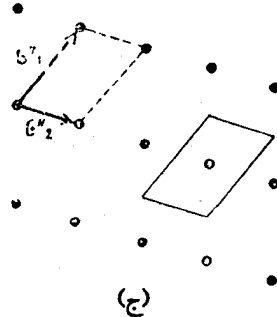
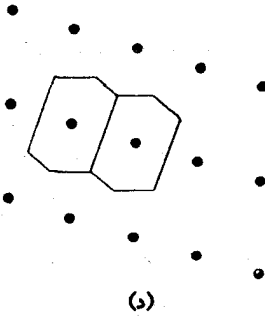
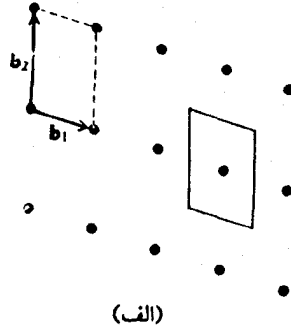
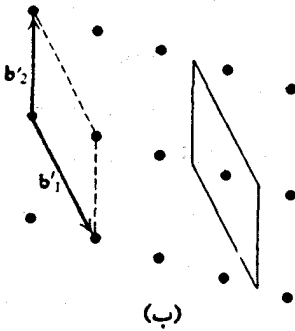
در یک سلول معین، چه مستقیم و چه معکوس، یک سلول واحد را می توان به بی نهایت راه انتخاب کرد. به عنوان یک مثال، در شکل (۸-۱) سه طریق مختلف برای انتخاب بردارهای انتقال اساسی و سلولهای واحد متناظر برای یک شبکه دو بعدی ارب را نشان داده ایم. شکل (۸-۲) سه مجموعه مختلف از بردارهای انتقال اساسی متناظر با بردارهای شکل (۸-۱) در شبکه معکوس شبکه ارب را نشان می دهد. در هر یک از شکلهای (۸-۲ الف)، (۸-۲ ب) و (۸-۲ ج) دو سلول واحد مختلف را نشان داده ایم. این سلولها تنها در انتخاب مقادیر مستقل k که در (۸-۱۱) تعریف شده اند، با هم اختلاف



شکل ۸-۱ (الف)، (ب) و (ج) سه طریق از بی نهایت طریقی را نشان می دهد که می توان یک سلول واحد در شبکه اریب دو بعدی را انتخاب کرد. سلول واحد در هر مورد عبارت است از متوازی الاضلاعی که بر بردارهای انتقال اساسی نشان داده شده ساخته می شود. تمام سلولهای واحد دارای مساحتی یکسانند.

دارند. اولین سلول واحد در هر یک از این سه شکل با انتخاب $0 \leq m_i \leq N_i$ متناظر است در حالی که سلول دوم با $\frac{-N_i}{Y} < m_i < \frac{N_i}{Y}$ متناظر می باشد. توجه کنید که برای یک شبکه دوبعدی، \vec{a}_3 بی نهایت است و در نتیجه $\vec{b}_3 = 0$ می باشد. شکل (۸-۲) یک طریق کلاً متفاوت برای ساختن یک سلول واحد را نشان می دهد. شش ضلعی نشان داده شده در شکل به سلول ویگنر - سیتز موسوم است. برای یک شبکه سه بعدی، عموماً به صورت زیر تعریف می شود. یک نقطه شبکه معین در شبکه (مستقیم یا معکوس) انتخاب می کنیم. در این صورت سلول ویگنر - سیتز عبارت است از: حجمی که شامل نقاطی است که از تمام نقاط شبکه به نقطه شبکه مورد نظر نزدیکترند، یا حداکثر متساوی الفاصله با آن می باشند. واضح است که این حجم عبارت است از حجم محصور به عمود منصفهای بردارهایی که از نقطه شبکه معین با سایر نقاط مجاورش متصل می شوند.

یک امتیاز ویژه در انتخاب یک چنین سلول واحدی وجود دارد، سلول ویگنر - سیتز تقارن کامل گروه نقطه ای شبکه را داراست، که بطور نسبتاً ساده ای می توان بر اساس تعریفش آن را اثبات کرد. بالاخره، سلول ویگنر - سیتز شبکه معکوس به منطقه بریلوئن به خاطر تقارن کامل گروه نقطه ای، در مطالعه ساختار الکترونی بلورها، یک انتخاب مخصوصاً مناسبی به عنوان یک سلول واحد در شبکه معکوس می باشد. باید روشن باشد که برای هر نقطه از مرز (وجه، ضلع یا رأس) منطقه بریلوئن، حداقل یک نقطه دیگر در مرز وجود دارد که اختلافش با نقطه اول به اندازه یک بردار شبکه معکوس است. از این رو تمام



شکل ۸-۲ (الف) بردارهای انتقال اولیه \vec{b}_1 و \vec{b}_2 از شبکه معکوس متناظر با بردارهای انتقال شبکه \vec{a}_1 و \vec{a}_2 در شکل (۸-۱ الف). برای این انتخاب \vec{b}_1 و \vec{b}_2 ، سلول واحد به دو طریق نشان داده شده است، توجه کنید که \vec{b}_1 بر \vec{a}_2 و \vec{b}_2 بر \vec{a}_1 عمود است. به علاوه طولهای \vec{b}_1 و \vec{b}_2 به ترتیب با عکس طولهای \vec{a}_1 و \vec{a}_2 متناسبند. (ب) و (ج) بطور مشابه به ترتیب با شکل‌های (۸-۱ ب) و (۸-۱ ج) متناظرند. (د) سلول دیگر-سیتییز یا منطقه بریلوئن به عنوان سلول واحد شبکه معکوس. این سلول از انتخاب بردارهای انتقال اولیه مستقل است. باز هم، همه سلولهای واحد در فضای معکوس دارای مساحت‌های یکسانند.

این نقاط روی مرز منطقه بریلوئن را باید هم ارز در نظر گرفت و می توان آنها را با یک بردار \vec{k} نشان داد.

۸-۳ نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فضایی

گروه معادله شرویدنگر (۸-۱) گروه فضایی است که بلور به آن تعلق دارد. از این

رو ترازهای انرژی الکترونی و تبهگنیهای آنها توسط نمایشهای کاهش ناپذیر گروه فضایی تعیین می‌شود و نه توسط نمایشهای گروه انتقال یا گروه نقطه‌ای به تنهایی. در بحث نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فضایی در زیر، روش کاستر^۲ را دنبال خواهیم کرد.

فرض کنید یک نمایش کاهش ناپذیر از گروه فضایی S توسط ماتریسهای $D(\{A | \underline{x}\})$ از مرتبه n داریم که در آن A یک عضو از گروه نقطه‌ای G است و \underline{x} به شکل $\underline{\delta} + \underline{t}$ می‌باشد که در بخش ۷-۲ بحث شد. به خاطر محدود بودن مرتبه گروه S می‌توانیم فرض کنیم که این ماتریسها یکانی اند.

برای هر گروه فضایی S ، گروه T ی انتقالهای محض $\{E | \underline{t}\}$ ، یک زیرگروه S است. حال، آن ماتریسهای از نمایش D را در نظر می‌گیریم که متناظر با انتقالهای محض باشند. چون T تنها دارای نمایشهای کاهش ناپذیر یک بعدی است، می‌توانیم یک تبدیل یکانی پیدا کنیم که تمام ماتریسهای به شکل $D(\{E | \underline{t}\})$ را به شکل کاملاً قطری درآورد. به عبارت دیگر، اگر یک نمایش کاهش ناپذیر از یک گروه فضایی S داشته باشیم، در این صورت یک نمایش هم ارز برای آن وجود دارد بطوری که در آن اعضای T توسط ماتریسهای کاملاً قطری نمایش داده شوند.

اما عناصر قطری یک ماتریس معرف $\{E | \underline{t}\}$ تنها می‌تواند به شکل $\exp(i\vec{k} \cdot \underline{t})$ باشد زیرا اینها تنها نمایشهای کاهش ناپذیر T می‌باشند. فرض کنید جمعاً q بردار موجی متمایز $\vec{k}_1, \vec{k}_2, \dots, \vec{k}_q$ در عناصر قطری $D(\{E | \underline{t}\})$ ظاهر شوند. همچنین می‌توانیم بدون از دست دادن کلیت مسأله، فرض کنیم که تمام عناصر قطری که حاوی \vec{k}_1 می‌باشند در یک دسته قرار داده شده باشند و الا آخر. در این صورت ماتریسهای این نمایش کاهش ناپذیر متناظر با اعضای T به صورت زیر خواهند بود:

$$D(\{E | \underline{t}\}) = \begin{bmatrix} \exp(i\vec{k}_1 \cdot \underline{t}) & & & & \\ & \exp(i\vec{k}_1 \cdot \underline{t}) & & & \\ & & & \exp(i\vec{k}_j \cdot \underline{t}) & \\ & & & & \exp(i\vec{k}_q \cdot \underline{t}) \\ & & & & & \exp(i\vec{k}_q \cdot \underline{t}) \end{bmatrix} \quad (21-8)$$

چون می‌دانیم که (مسأله ۷-۸ را ببینید): $\{A | \underline{\tau}\}^{-1} \{E | \underline{t}\} \{A | \underline{\tau}\} = \{E | A^{-1}\underline{t}\}$,

لذا ماتریسهای متناظر باید در رابطه زیر صدق کنند:

$$[D(\{A | \underline{\tau}\})]^{-1} D(\{E | \underline{t}\}) D(\{A | \underline{\tau}\}) = D(\{E | A^{-1}\underline{t}\}) \quad (22-8)$$

با استفاده از این واقعیت که $\vec{k} \cdot A^{-1} \vec{t} = A \vec{k} \cdot \vec{t}$ ، ملاحظه می‌کنیم که ماتریس معرف

با صورت زیر است:

$$D(\{E | A^{-1}\underline{t}\}) = \begin{bmatrix} \exp(iA k_1 \cdot t) & & & 0 \\ & \exp(iA k_1 \cdot t) & & \\ & & \exp(iA k_j \cdot t) & \\ 0 & & & \exp(iA k_q \cdot t) \end{bmatrix} \quad (23-8)$$

اگر دو ماتریس قطری، مانند (۲۲-۸)، توسط یک تبدیل یکانی بهم مرتبط باشند، باید دارای عناصر قطری یکسانی باشند، ولی احتمالاً ترتیب این عناصر در دو ماتریس متفاوت است. در نتیجه عناصر قطری (۲۱-۸) و (۲۳-۸) بجز احتمالاً از نظر ترتیب یکسانند. لذا اگر $\exp(i A \vec{k}_1 \cdot \vec{t})$ در (۲۳-۸) وجود داشته باشد، باید در (۲۱-۸) نیز وجود داشته باشد. به علاوه $\exp(i A \vec{k}_1 \cdot \vec{t})$ باید به همان تعداد دفعاتی که $\exp(i \vec{k}_1 \cdot \vec{t})$ در (۲۱-۸) آمده است، در (۲۳-۸) ظاهر شود. اما A دلخواه است و می‌توانستیم هر عنصری از گروه نقطه‌ای G را برای A انتخاب کنیم. این بدان معنی است که عناصری نظیر $\exp(i A k_1 t)$ به ازای تمام A های واقع در G باید در (۲۱-۸) وجود داشته باشند.

به علاوه می‌توانیم نشان دهیم که هیچ عنصری به شکل $\exp(i \vec{k}' \cdot \vec{t})$ ، که در آن برای هر عنصر \vec{G} ، \vec{k}' برابر $A k_1$ نباشد، نمی‌تواند در (۲۱-۸) ظاهر شود. زیرا نشان خواهیم داد که اگر این چنین باشد، نمایش گروه فضایی مورد نظر کاهش پذیر است. در این صورت می‌توانیم در ماتریس (۲۱-۸) اول تمام جملات از نوع $\exp(i A \vec{k}_1 \cdot \vec{t})$ را به ازای تمام A های متعلق به G و سپس جملات باقیمانده از نوع $\exp(i \vec{k}' \cdot \vec{t})$ را یکجا بنویسیم، و آن را به صورت زیر درآوریم:

$$D(\{E | t\}) = \left[\begin{array}{c|c} \text{جملات از نوع:} & \mathbf{0} \\ \hline \exp(iA\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{t}) & \\ \hline \mathbf{0} & \text{جملات باقیمانده نظیر:} \\ & \exp(i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{t}) \end{array} \right] \quad (24-8)$$

حال (۲۲-۸) را به صورت زیر می‌نویسیم:

$$D(\{A | \tau\}) D(\{E | A^{-1}t\}) = D(\{E | t\}) D(\{A | \tau\}), \quad (25-8)$$

و برای $D(\{A | \tau\})$ یک ماتریس به شکل زیر فرض می‌کنیم:

$$D(\{A | \tau\}) = \left[\begin{array}{c|c} \frac{D'(\{A | \tau\})}{Y} & \frac{X}{D''(\{A | \tau\})} \\ \hline & \end{array} \right]. \quad (26-8)$$

که در آن D' و D'' ماتریسهای مربعی می‌باشند که مرتبه‌های آنها به ترتیب با مرتبه‌های بلوکهای قطری اول و دوم (۲۴-۸) برابر است. سپس با استفاده از (۲۴-۸)، (۲۵-۸) و (۲۶-۸) می‌توان نشان داد که ماتریسهای بلوک X و Y باید متحد با ماتریس صفر باشند. اما، در این صورت (۲۶-۸) نشان می‌دهد که نمایش کاهش پذیر است، برخلاف فرضی که با یک نمایش کاهش ناپذیر شروع کرده‌ایم.

بحثی که تا این جا کردیم به این نتیجه منجر می‌شود که ماتریس (۲۱-۸) تنها دارای عناصر قطری است که به ازای تمام A های متعلق به G به صورت $\exp(i A \vec{k}_1 \cdot \vec{t})$ می‌باشند و تمام عناصر متمایز به تعداد مساوی ظاهر می‌شوند. اگر همان طور که فرض کرده‌ایم، در مجموعه $A \vec{k}_1$ به ازای تمام A های متعلق به G ، q بردار موجی متمایز وجود داشته باشد، و اگر هر کدام مثلاً d مرتبه ظاهر شوند، در این صورت (۲۱-۸) به صورت زیر درمی‌آید:

$$D(\{E | t\}) = \left[\begin{array}{c|c} \exp(i\mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{t}) E_d & \mathbf{0} \\ \hline \exp(iA_s \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{t}) E_d & \\ \hline \mathbf{0} & \exp(iA_q \mathbf{k}_1 \cdot \mathbf{t}) E_d \end{array} \right], \quad (27-8)$$

که در آن E_d ماتریس واحد از مرتبه d می باشد و ماتریس $n \times n$ را به q بلوک که هر کدام از مرتبه d می باشند، به طوری که $n = qd$ است، تقسیم کرده ایم. به علاوه $E) A_1 \equiv E$ (عنصر همانی است)، A_2, \dots, A_q عناصر متشعبی از گروه نقطه ای هستند که وقتی روی \vec{k}_1 عمل کنند q بردار موجی متمایز می دهند، یعنی:

$$A_i k_1 = k_i, \quad 1 \leq i \leq q \quad (28-8)$$

توجه کنید که هر \vec{k}_i متناظر با یک نمایش متمایز T است. در این مرحله بحث نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فضایی را به تعویق می اندازیم و در دو قسمت بعدی به آن باز خواهیم گشت.

۸-۳-۱ توابع بلاخ به عنوان نمایشهای کاهش ناپذیر

شکل ماتریس (۸-۲۷) که متناظر با یک انتقال محض است دلالت بر این دارد که توابع پایه برای نمایش D همان توابع بلاخ می باشد. این امر واضح است زیرا تنها یک تابع بلاخ دارای این ویژگی است که تحت انتقال به اندازه \vec{t} در $\exp(i \vec{k} \cdot \vec{t})$ ضرب می شود.

فرض کنید d تابع بلاخ متعامد ϕ_{1j} داریم ($1 \leq j \leq d$) که هر کدام متناظر با بردار موجی \vec{k} می باشند. حال n تابع زیر را از این توابع می سازیم:

$$\phi_{i1} = P(\{A_i | \delta_i\}) \phi_{1j}, \quad 1 \leq i \leq q, \quad (29-8)$$

که در آن δ_i مشخصه انتقال وابسته به عنصر A_i از گروه نقطه ای می باشد (بخش ۷-۲ را ببینید)، $P(\{A | \delta\})$ عملگر متناظر با عنصر $\{A | \delta\}$ می باشد که روی توابع عمل می کند، و A_j ها عناصر منتخب از گروه نقطه ای می باشند که قبلاً در این بخش تعریف شد. نشان خواهیم داد که توابع ϕ_{1j} توابع بلاخ با بردار موجی \vec{k} A_j می باشند.

می توانیم ϕ_{1j} را به شکل زیر بنویسیم:

$$\phi_{1j}(r) = \exp(ik \cdot r) u_k^j(r), \quad (30-8)$$

که در آن $u_k^j(\vec{r})$ دارای دوره تناوب شبکه می باشد. با اعمال عنصر گروه فضایی $\{A_i | \delta_i\}$

$$\begin{aligned} \phi_{1j}(r) &= P(\{A_i | \delta_i\}) [\exp(ik \cdot r) u_k^j(r)] \\ &= \exp[ik \cdot A_i^{-1}(r + \delta_i)] u_k^j(A_i^{-1}(r + \delta_i)) \\ &= \exp(ik \cdot A_i^{-1}r) [\exp(ik \cdot A_i^{-1}\delta_i) u_k^j(A_i^{-1}r + A_i^{-1}\delta_i)]. \end{aligned} \quad (31-8)$$

اکنون می‌توانیم نشان دهیم که تابع داخلی گروه در معادله بالا همان دوره تناوب شبکه را دارد. بنابراین با جایگزین کردن $\vec{r} + \vec{t}$ به جای \vec{r} ، به دست می‌آوریم:

$$u_{\mathbf{k}}^j(A_i^{-1}(\mathbf{r} + \mathbf{t}) + A_i^{-1}\delta_i) = u_{\mathbf{k}}^j(A_i^{-1}\mathbf{r} + A_i^{-1}\delta_i), \quad (32-8)$$

زیرا اگر \vec{t} یک بردار انتقال شبکه و $u_{\mathbf{k}}^j$ یک تابع پریودی باشد، $A_i^{-1}\vec{t}$ نیز یک بردار انتقال شبکه خواهد بود. از این رو با جایگزین کردن $\vec{r} + \vec{t}$ به جای \vec{r} در رابطه (۳۱-۸) داریم:

$$\phi_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{t}) = \exp(i\mathbf{k} \cdot A_i^{-1}\mathbf{t}) \phi_{ij}(\mathbf{r}) \quad (33-8)$$

اما، چون $A_i^{-1}\vec{t} = A_i \vec{k} \cdot \vec{t}$ ، بالاخره داریم:

$$\phi_{ij}(\mathbf{r} + \mathbf{t}) = \exp(iA_i \mathbf{k} \cdot \mathbf{t}) \phi_{ij}(\mathbf{r}), \quad (34-8)$$

که نشان می‌دهد ϕ_{ij} یک تابع بلاخ با بردار موجی $A_i \vec{k}$ می‌باشد. چون $\{A_i | \delta_i\}$ اعمال تقارنی برای هامیلتونین (۱-۸) می‌باشند، نتیجه می‌شود که تمام n تابع بلاخ (۲۹-۸) تبهگن اند. به عبارت دیگر، برای تمام A های متعلق به G داریم $E(A \vec{k}) = E(\vec{k})$ ، که نشان می‌دهد سطوح انرژی ثابت در فضای وارون دارای کل تقارن گروه نقطه‌ای شبکه می‌باشند.

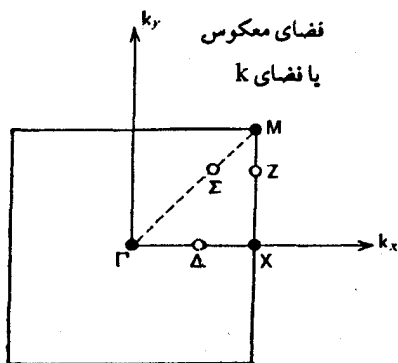
این n تابع بلاخ نمایش کاهش ناپذیر D ی گروه فضایی ای را که تاکنون مورد بحث قرار دادیم ایجاد می‌کنند زیرا انتقالهای محض، وقتی این توابع بلاخ به عنوان پایه انتخاب شوند، به شکل (۲۷-۸) خواهند بود. اهمیت عدد d تابع بلاخ متعامد به ازای یک مقدار معین بردار موجی \vec{k} بعداً در قسمت (۳-۳-۸) مورد بحث قرار خواهد گرفت.

۲-۳-۸ ستاره و گروه بردار موجی

یک بردار معین \vec{k} را در داخل یا روی منطقه بریلوئن شبکه در نظر بگیرید. حال تمام تبدیلات گروه نقطه‌ای شبکه را به \vec{k} اعمال کنید. عموماً این کار g بردار موجی می‌دهد که در آن g مرتبه گروه نقطه‌ای G است. لیکن همه این بردارها از هم متمایز نیستند، به یاد آورید که بردارهای موجی که تفاوتشان در بردارهای شبکه معکوس می‌باشد، یکسان در نظر گرفته می‌شوند. این امر باعث می‌شود که مثلاً q بردار موجی متمایز داشته باشیم، که q

یک مقسوم علیه g است. مجموعه این q بردار موجی ستاره بردار موجی نامیده می شود. اگر $q = g$ ، که بدین معنی است که هر عنصر گروه نقطه ای یک بردار \vec{k} متمایز می دهد، در این صورت می گوییم یک بردار \vec{k} ی عمومی داریم. از طرف دیگر اگر $q < g$ باشد، در این صورت نقطه انتهائی بردار \vec{k} باید روی یک صفحه تقارن یا روی خط تقارن قرار داشته باشد یا خودش یک نقطه خاص در منطقه بریلون باشد.

برای نشان دادن این وضعیت، در شکل (۸-۳) منطقه بریلون یک شبکه مربعی تخت با ثابت شبکه a را نشان داده ایم. منطقه بریلون یک مربع به ضلع $\frac{2\pi}{a}$ است. نقاط



شکل ۸-۳ نقاط خاص و خطوط تقارن برای یک شبکه مربعی تخت.

خاص و خطوط تقارن برای این ساختار توسط نمادهای خاصی که در طول سالها به صورت قراردادی تثبیت شده است نمادگذاری شده است. در واحدهای $\frac{2\pi}{a}$ سه نقطه خاص وجود دارد که توسط $\Gamma: \vec{k} = (0, 0)$ ، $X: \vec{k} = (\frac{1}{a}, 0)$ ، و $M: \vec{k} = (\frac{1}{a}, \frac{1}{a})$ مشخص شده اند. همچنین سه خط تقارن وجود دارد، که یک نقطه عمومی روی آنها به ترتیب با $\Delta: \vec{k} = (k_x, 0)$ ، $Z: \vec{k} = (k_x, \frac{1}{a})$ ، و $\Sigma: \vec{k} = (k_x, k_x)$ مشخص می شود، که در آن $0 < k_x < \frac{1}{a}$. شکل (۸-۴) ستاره های بردارهای \vec{k} مختلف برای همان مورد یک شبکه

۳- در این فصل واحد $\frac{2\pi}{a}$ را برای مولفه های دکارتی بردار \vec{k} برای شبکه های مربعی و مکعبی به کار

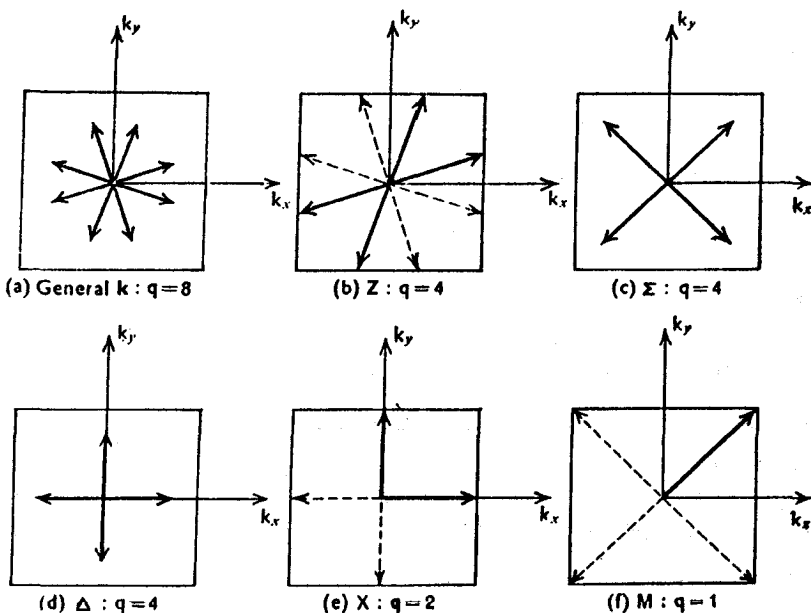
خواهیم برد.

مربعی تخت را نشان می‌دهد.

حال تقارن بردار \vec{k} را بررسی می‌کنیم. کلیه عناصر گروه نقطه‌ای را که یک بردار \vec{k} را تا محدوده یک بردار شبکه معکوس بدون تغییر می‌گذارند در نظر بگیرید، یعنی عناصری را که دارای خاصیت زیر می‌باشند:

$$B\vec{k} = \vec{k} + \vec{G}, \quad (35-8)$$

که در آن \vec{G} هر بردار شبکه معکوس، از جمله صفر، می‌باشد. بدیهی است که مجموعه چنین تبدیلاتی یک گروه تشکیل می‌دهند. زیرا اگر دو عملگر، بطور جداگانه \vec{k} را تغییر نپذیر بگذارند، حاصلضرب آنها نیز بردار \vec{k} را تغییر نپذیر خواهد گذاشت. معکوس یک عملگر و عملگرهمانی در همان مجموعه قرار دارند. این گروه، گروه بردارموجی نامیده می‌شود و در این فصل آن را با K نمایش می‌دهیم. واضح است که این گروه، یک زیرگروه گروه نقطه‌ای G است.



شکل ۴-۸ ستاره‌های بردارهای \vec{k} ی مختلف برای یک شبکه مربعی تخت. هر بردار خط چین توسط یک بردار شبکه معکوس به یک بردار خط پر مربوط است و از این رو جداگانه شمرده نمی‌شود، q معرف تعداد بردارهای متمایز در ستاره است.

برای یک بردار عمومی \vec{k} در منطقه بریلونین، گروه \vec{k} فقط شامل عنصر همسانی است. برای یک نقطه خاص یا یک نقطه روی یک خط یا یک صفحه تقارن، مرتبه K از یک بزرگتر خواهد بود. در واقع، به آسانی می توان قاعده زیر را ثابت کرد:

$$(۳۶-۸) \quad \text{مرتبه گروه نقطه ای} = \text{مرتبه گروه } k \times \text{تعداد بردارها در ستاره}$$

این قاعده را می توان به آسانی با مراجعه به شکل (۴-۸) تأیید کرد. نقطه Z در شکل (۳-۸) را در نظر بگیرید. با توجه به این که گروه نقطه ای برای یک شبکه مربعی C_{4v} است، ملاحظه می کنیم که عناصر C_{4v} که این بردار \vec{k} ی بخصوص را تغییر ناپذیر می گذارند، E و m_y می باشند. لذا گروه K برای نقطه Z عبارت است از: $(E, m_y) = C_{1h}$. بردار \vec{k} در نقطه X دارای چهار عنصر تقارن است، E, m_x, m_y, C_2 [شکل (۴-۸) د] را ببینید]. از این رو گروه K برای نقطه X ، C_{2v} می باشد. در جدول (۱-۸) نقاط خاص مختلف و خطوط تقارن را همراه با نمادگذارهایشان و گروه آورده ایم. توجه کنید که نقطه M کل تقارن گروه نقطه ای را دارد، زیرا تمام گوشه های منطقه بریلونین توسط بردارهای شبکه معکوس بهم مرتبطند [شکل (۴-۸) ه] را ببینید].

جدول ۱-۸ نقاط خاص و خطوط تقارن در منطقه بریلونین یک شبکه مربعی تخت. داریم:

$$k_x = k_y \text{ و } 0 < k_x, k_y < \frac{1}{4}$$

مرتبه K	\underline{K} ، گروه k	q	نماد	k
1	C_1	8	general	(k_x, k_y)
2	C_{1h}	4	Σ	(k_x, k_x)
2	C_{1h}	4	Z	$(k_x, \frac{1}{2})$
2	C_{1h}	4	Δ	$(k_x, 0)$
4	C_{2v}	2	X	$(\frac{1}{2}, 0)$
8	C_{4v}	1	M	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
8	C_{4v}	1	Γ	$(0, 0)$

تبعاً A_1, A_2, \dots, A_q را به عنوان عناصر برگزیده ای از گروه نقطه ای G تعریف

کردیم که وقتی روی \vec{k}_1 عمل کنند q بردار متمایز بدهند. این عناصر، همان q عنصر گروه نقطه ای می باشند که ستاره بردار \vec{k}_1 را ایجاد می کنند. چون K یک زیر گروه G است، می توانیم G را به هم مجموعه های K نسبت به عناصر A_i ، به صورت زیر تجزیه کنیم:

$$G = K \cup A_2 K \cup A_3 K \cup \dots \cup A_q K \quad (37-8)$$

می توان نشان داد که عناصر هم مجموعه K A_i ، \vec{k}_1 را به \vec{k}_i می برد.

۳-۳-۸ نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فضایی (ادامه)

حال به بحث خود درباره نمایشهای گروههای فضایی که در معادله (۲۸-۸) رها کردیم، برمی گردیم. در این جا به جزئیات بحث نمی پردازیم و فقط به بیان بدون اثبات نتایج اکتفا می کنیم. برای بحث دقیق خواننده را بار دیگر به کاستر^۲ ارجاع می دهیم.

مهمترین نتیجه این است که تمام نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فضایی را می توان از نمایشهای کاهش ناپذیر گروه K ی بردار \vec{k} ، بطوری که \vec{k} تمام منطقه بریلونن (داخل یا روی سطح منقطه) را پوشاند، به دست آورد. مراحل اصلی یافتن نمایشهای کاهش ناپذیر یک گروه فضایی را ذکر خواهیم کرد.

فرض کنید یک نمایش کاهش ناپذیر n بعدی گروه فضایی در دست است، در (۲۷-۸) نشان دادیم که ماتریسهای متناظر با انتقالهای محض دارای یک شکل بخصوصی هستند که در آن اولین $d = \frac{n}{q}$ عنصر قطر اصلی آنها $\exp(i \vec{k}_1 \cdot \vec{t})$ ، d عنصر بعدی $\exp(i A_2 \vec{k}_1 \cdot \vec{t}) = \exp(i \vec{k}_2 \cdot \vec{t})$ ، و الخ، می باشند. با در نظر گرفتن یک عنصر عمومی $\{A | \tau\}$ از گروه فضایی، ماتریسهای $D(\{A | \tau\})$ را به طریق زیر تقسیم می کنیم:

$$D(\{A | \tau\}) = \begin{bmatrix} D_{11}(\{A | \tau\}) & \dots & D_{1q}(\{A | \tau\}) \\ \vdots & & \vdots \\ D_{q1}(\{A | \tau\}) & \dots & D_{qq}(\{A | \tau\}) \end{bmatrix} \quad (38-8)$$

در این جا هر بلوك $D_{lm}(\{A | \underline{\tau}\})$ با $1 \leq l, m \leq q$ یک ماتریس مربعی از مرتبه d است. توابع پایه برای این نمایش n تابع بلاخ می باشند که تعداد d تا از آنها دارای بردار موجی \vec{k}_1 ، d تای دیگر دارای بردار موجی \vec{k}_2 و الا آخر می باشند. چنین نتیجه می شود که در این نمایش، که گوییم به شکل استاندارد است، هر سطر در (۸-۳۸) تنها شامل یک بلوك غیر صفر است. هدف ما تعیین این بلوك می باشد.

سطر l ام ماتریس (۸-۳۸) را در نظر بگیرید. بردار l ام در ستاره \vec{k}_1 را، که \vec{k}_1 می باشد انتخاب کرده و A را روی آن اثر دهید. نتیجه حاصل یک بردار از ستاره \vec{k}_1 می باشد، مثلاً

$$A k_l = k_m \quad (۳۹-۸)$$

در این صورت تنها بلوك غیر صفر در سطر l ام ماتریس (۸-۳۸)، بلوك m ام خواهد بود، یعنی:

$$D_{lj}(\{A | \underline{\tau}\}) = D_{lm}(\{A | \underline{\tau}\}) \delta_{jm}, \quad 1 \leq j \leq q \quad (۴۰-۸)$$

بلوك غیر صفر $D_{lm}(\{A | \underline{\tau}\})$ را می توان بر حسب نمایشهای کاهش ناپذیر گروه K از \vec{k}_1 به دست آورد. این کار را می توان برای تمام بردارهای \vec{k} واقع در داخل و روی منطقه بریلون بلوری که گروه فضایی آن سیمورفیک است و برای بردارهای \vec{k} در داخل منطقه بریلون بلوری که گروه فضایی آن غیر سیمورفیک است بسادگی انجام داد. برای مورد بردارهای \vec{k} باقیمانده روی منطقه بریلون بلوری که گروه فضایی اش غیر سیمورفیک است، یک روش کلی برای یافتن بلوك D_{lm} برای یک عنصر کلی $\{A | \underline{\tau}\}$ از گروه فضایی وجود ندارد. البته هنوز هم می توان با استفاده از خواص ویژه گروه غیر سیمورفیک مورد نظر، بلوك D_{lm} را به دست آورد. لیکن، در این جا آن را شرح نمی دهیم.

برای تمام بردارهای \vec{k} در مورد گروههای سیمورفیک و برای بردارهای \vec{k} در داخل منطقه بریلون برای گروههای غیر سیمورفیک، روش به دست آوردن $D_{lm}(\{A | \underline{\tau}\})$ به شرح زیر است. یک بردار \vec{k} بخصوص انتخاب می کنیم و آن را با \vec{k}_1 نشان می دهیم و سایر بردارهای ستاره \vec{k}_1 را پیدا می کنیم و آنها را با $\vec{k}_2, \vec{k}_3, \dots, \vec{k}_q$ نمایش می دهیم. سپس q عنصر A_j از گروه نقطه ای را که در (۸-۲۸) صدق می کنند انتخاب می کنیم. برای به دست

آوردن بلوک (l, m) ام ماتریس D ، عناصر A_1 و A_m را در نظر می‌گیریم. فرض کنید δ_1 و δ_m به ترتیب انتقال‌های مشخصه وابسته به A_1 و A_m باشند. عنصر گروه فضایی $\{B | \underline{\sigma}\}$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

$$\{B | \underline{\sigma}\} = \{A_m | \underline{\delta}_m\}^{-1} \{A_1 | \underline{\tau}\} \{A_l | \underline{\delta}_l\} \quad (41-8)$$

پس از انجام ضرب در طرف دوم داریم:

$$B = A_m^{-1} A A_1, \quad \underline{\sigma} = A_m^{-1} (A \underline{\delta}_l + \underline{\tau} - \underline{\delta}_m) \quad (42-8)$$

می‌توان ثابت کرد که B یک عنصر از گروه K ی بردار \vec{k}_1 است. حال یک نمایش کاهش ناپذیر d بعدی بخصوص از K ، مثلاً Γ را انتخاب کرده رابطه زیر را تعریف می‌کنیم:

$$D(B, \underline{\sigma}) = \exp(ik_1 \cdot \underline{\sigma}) \Gamma(B) \quad (43-8)$$

در این صورت بلوک (l, m) ام $D(\{A | \underline{\tau}\})$ ، همان ماتریس بالاست، یعنی:

$$D_{lm}(\{A | \underline{\tau}\}) = D(B, \underline{\sigma}) \quad (44-8)$$

می‌توان با در نظر گرفتن این که $\{A | \underline{\tau}\}$ تمام گروه فضایی S را طی کند، روش بالا را برای تمام عناصر گروه فضایی تکرار کرد. بدیهی است که نمایشی که به دست می‌آید دارای qd بعد است. هر نمایش کاهش ناپذیر K برای هر مقدار \vec{k} یک نمایش کاهش ناپذیر S می‌دهد. لیکن همه این نمایشها، نمایشهای متمایز از هم نمی‌باشند. برای این که تمام نمایشهای کاهش ناپذیر S را به دست آوریم، باید \vec{k} بخش $\frac{1}{g}$ ام از منطقه بریلونن را که بطور مناسبی انتخاب شده طی کند (g برابر است با مرتبه گروه نقطه‌ای) تا تنها یک بردار از هر ستاره معین \vec{k} را منظور کرده باشیم.

برای این که نتایج بدست آمده در این فصل را خلاصه کنیم، ابتدا دیدیم که ویژه حالت‌های انرژی هامیلتونین با پتانسیل تناوبی، همان توابع بلاخ می‌باشند. رابطه پخش $E = E(\vec{k})$ یک تابع چند مقداری در منطقه اول بریلونن است و سطوح انرژی ثابت که توسط، ثابت $E(\vec{k})$ ، نمایش داده می‌شوند کل تقارن گروه نقطه‌ای شبکه را دارا می‌باشند. به خاطر شکل بلاخی ویژه تابعها، کافی است معادله شرودینگر را به جای این که در کل بلور حل کنیم، آن را فقط در یک سلول واحد کل کنیم. از توابع بلاخ می‌توان برای ایجاد نمایشهای کاهش ناپذیر گروه فضایی S استفاده کرد. بالاخره، تبهگنی برای هر

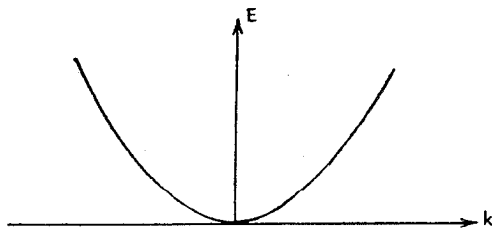
مقدار \vec{k} را می توان از نمایشهای کاهش ناپذیر گروه K و از تعداد بردارها در ستاره \vec{k} به دست آورد.

۴-۸ نوارهای انرژی الکترون آزاد : شبکه های یک بعدی و دو بعدی

در بخش (۱-۸) تذکر دادیم که انرژی، در تقریب الکترون آزاد، یک تابع درجه دوم از اندازه بردار موجی در طرح منطقه گسترش یافته می باشد. بهتر است نوارهای انرژی را در طرح منطقه کاهش یافته نشان دهیم و آنها را مورد مطالعه قرار دهیم. در این بخش، مثالهایی از شبکه یک بعدی و یک شبکه مربعی را بررسی خواهیم کرد.

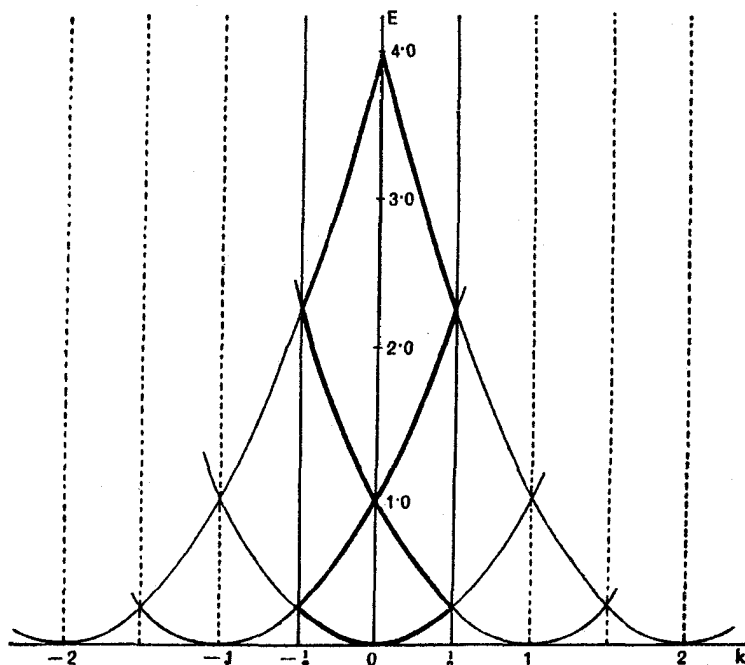
۱-۴-۸ شبکه یک بعدی

در طرح منطقه گسترش یافته رابطه انرژی بردار موجی، مانند آنچه در شکل (۵-۸) نشان داده شده است به صورت یک سهمی $E = \frac{h^2 k^2}{2m}$ می باشد. برای نمایش دادن انرژی در طرح منطقه کاهش یافته، توجه کنید که منطقه اول بریلونن شبکه، ناحیه $-\frac{\pi}{a} < k < \frac{\pi}{a}$ از فضای معکوس می باشد و بردارهای شبکه معکوس عبارتند از: $G = \frac{2\pi m}{a}$ ، که در آن a ثابت شبکه مستقیم و m یک عدد صحیح است. برای این که نوارهای انرژی را در این طرح رسم کنیم، یک سهمی را که مطابق شکل (۵-۸) رسم شده است. تصور کنید که رأس آن در محل نقاط شبکه معکوس باشد و تنها آن قسمت از آن را که در منطقه اول بریلونن قرار دارد



شکل ۵-۸ منحنی انرژی نسبت به بردار موجی برای یک شبکه یک بعدی در طرح منطقه گسترش

یافته در تقریب الکترون آزاد.



شکل ۸-۶ نوارهای انرژی الکترون آزاد برای یک شبکه یک بعدی در طرح منطقه کاهش یافته؛ محور k با مقیاس $\frac{\gamma\pi}{a}$ و محور E با مقیاس $\frac{\hbar^2\pi^2}{ma^2}$ ، که انرژی الکترون آزاد در $k = \frac{\gamma\pi}{a}$ است رسم شده اند.

در نظر بگیرید. این نوارها در شکل (۸-۶) نشان داده شده است. قسمتهای مختلف سهمی در این شکل (یعنی نوارهای مختلف) توسط معادلات زیر داده می شود

$$E = (\hbar^2/2m) (k - G)^2, \quad (۸-۴۵)$$

که در آن G مقادیر $0, \frac{+\gamma\pi}{-a}, \frac{+\gamma\pi}{-a}, \dots$ را می گیرد.

۸-۴-۲ شبکه مربعی

رابطه انرژی نسبت به بردار موجی برای یک شبکه دو بعدی را می توان توسط یک سطح دو بعدی در سه بعد نمایش داد بطوریکه دو بعد آن معرف k_x و k_y و بعد سوم معرف انرژی E باشد. برای هر شبکه دو بعدی، این سطح در طرح منطقه گسترش یافته و

در تقریب الکترون آزاد یک سهموی دورانی است که از دوران سهمی شکل (۸-۵) حول محور E به دست می‌آید. این سطح، در طرح منطقه کاهش یافته، بسته به شبکه، شکل نسبتاً پیچیده‌ای پیدا می‌کند. با وجود این می‌توانیم سطح مقطعهای این سطح را در امتداد خطوط تقارن مختلف در منطقه اول بریلونن، نشان دهیم، این را در این جا برای یک شبکه مربعی با گروه تقارنی نقطه ای C_{4v} نشان خواهیم داد.

شبکه معکوس شبکه مربعی نیز یک شبکه مربعی است، بردارهای شبکه معکوس

عبارتند از:

$$G = m \hat{k}_x + n \hat{k}_y, \quad (۴۶-۸)$$

که در آن \hat{k}_x و \hat{k}_y بردارهای راست هنجار در فضای معکوسند و m و n اعداد صحیح می‌باشند. یک مجموعه سهموی، مانند آنچه در بالا گفتیم، تصور کنید که رؤوس آنها در هریک از نقاط شبکه معکوس باشند. قسمتی از سطح هریک از سهمیها که در منطقه اول بریلونن ($-\frac{1}{4} \leq k_x, k_y < \frac{1}{4}$) قرار دارد، یک شاخه تابع $E = E(\vec{k})$ در طرح منطقه کاهش یافته را تشکیل خواهد داد. لیکن نمی‌توان این سطح را به آسانی در یک نمودار نشان داد. این مسأله برای شبکه‌های سه بعدی باز هم مشکلتر خواهد بود زیرا، در این صورت $E = E(\vec{k})$ یک سطح سه بعدی در فضای چهار بعدی (k_x, k_y, k_z, E) می‌باشد.

می‌توانیم با در نظر گرفتن سطح مقطعهای مختلف تابع چند مقداری $E = E(\vec{k})$ در راستای خطوط تقارنی مختلف در منطقه بریلونن، مسأله را تا حد قابل ملاحظه‌ای ساده کنیم. به عنوان مثال می‌توانیم از نقطه Γ در مرکز منطقه بریلونن شروع کنیم و در امتداد خط Δ به نقطه X برویم. در امتداد خط ΓX ، داریم $0 < k_x \leq \frac{1}{4}$ ، $k_y = 0$. سپس می‌توانیم در امتداد خط Z که $k_x = \frac{1}{4}$ و $0 \leq k_y \leq \frac{1}{4}$ است از نقطه X به M برویم. بالاخره می‌توانیم تغییرات انرژی نسبت به قدر مطلق k از M تا Γ را در امتداد خط Σ ، که برای آن $k_x = k_y = \frac{k}{\sqrt{2}}$ است، نشان دهیم. نوارهای الکترون آزاد در امتداد این خطوط تقارنی برای یک شبکه مربعی در شکل (۸-۷) نشان داده شده است. روش به دست آوردن نوارها و برچسب گذاری نوارهای مختلف توسط نمایشهای کاهش ناپذیر گروه بردارهای موجی در قسمت زیر تشریح خواهد شد.

$$E = (m - k_x)^2 + (n - k_y)^2, -\frac{1}{2} \leq k_x, k_y \leq \frac{1}{2} \quad (48-8)$$

موج تحت متناظر که جراب معادله شرودینگر است عبارت است از:

$$(m \ n) \equiv \phi_k(m, n) = \exp [i(k - G) \cdot r] \\ = \exp [i\{(k_x - m)x + (k_y - n)y\}]. \quad (49-8)$$

اکنون سه خط تقارنی Δ ، Z و Σ را در نظر می گیریم.

Δ . در امتداد خط ΓX ، داریم $k_y = 0$ و می توانیم k_x را به بازه $(0, \frac{1}{2})$ محدود کنیم زیرا بخش دیگر $(-\frac{1}{2}, 0)$ بازه، نوارهای متقارن می دهد. در این صورت

سطح مقطع سهموی $(48-8)$ در ابتدا خط Δ عبارت است از:

$$E(\Delta) = (m - k_x)^2 + n^2, 0 < k_x < \frac{1}{2} \quad (50-8)$$

موج تخت متناظر عبارت است از:

$$(m \ n)_{\Delta} = \exp [i\{(k_x - m)x - ny\}] \quad (51-8)$$

هر مجموعه مقادیر صحیح m و n یک نوار می دهد. همچنین از $(50-8)$ روشن می شود که قدر مطلقهای کوچکتر m و n با نوارهای پایتتر متناظرند. بردارهای شبکه معکوس متوالی را به ترتیب افزایش اندازه، بررسی می کنیم.

کوتاهترین بردار شبکه معکوس $(0, 0)$ است، که با استفاده از $(50-8)$ نوار زیر را

می دهد:

$$E_{0,0}(\Delta) = k_x^2, 0 < k_x < \frac{1}{2} \quad (52-8)$$

موج تخت مربوطه عبارت است از: $(0, 0)_{\Delta} = \exp(i k_x x)$. این پایتترین نوار در امتداد خط ΓX ، که در شکل $(7-8)$ نشان داده شده است، می باشد.

گروه بردارهای \vec{k} در امتداد خط Δ ، به استثنای نقاط انتهایی Γ و X ، زیرگروه (E, m_x) از C_{4v} می باشد. دو نمایش کاهش ناپذیر این گروه، برای نقاط واقع بر خط Δ ، با Δ_1 و Δ_2 نشان داده می شوند. در این صورت بدیهی است که موج تخت $(0, 0)_{\Delta}$ تحت گروه (E, m_x) ، مطابق Δ_1 تبدیل می شود.

مجموعه بعدی بردارهای شبکه معکوس عبارت است از: $(1, 0)$ ، $(1, 0)$ ،

$(0, 1)$ و $(0, 1)$. با قرار دادن این مقادیر m و n در $(50-8)$ سه نوار به دست می آوریم،

که دو تای آنها غیر تبهگن بوده و به ترتیب توسط $(1, 0)_\Delta$ و $(\bar{1}, 0)_\Delta$ ایجاد می شوند و سومی یک نوار دو بار تبهگن است که توسط موج تخت $(0, 1)_\Delta$ و $(0, \bar{1})_\Delta$ ایجاد می گردد. هریک از امواج تخت $(1, 0)_\Delta$ و $(1, 0)_\Delta$ بر طبق Δ_1 تبدیل می شوند. از طرف دیگر، دو موج تخت $(0, 1)_\Delta$ و $(0, \bar{1})_\Delta$ شکلهای زیر را دارند:

$$\begin{aligned} (0 1)_\Delta &= \exp[i(k_x x - y)], \\ (0 \bar{1})_\Delta &= \exp[i(k_x x + y)]. \end{aligned} \quad (53-8)$$

واضح است که این دو، تحت m_x که y را به $-y$ تبدیل می کند به یکدیگر تبدیل می شوند. از این رو نمایش $\Delta_1 \oplus \Delta_2$ از (E, m_x) را ایجاد می کنند. بسادگی می توان نشان داد که دو ترکیب خطی:

$$(0 1)_\Delta \pm (0 \bar{1})_\Delta \propto \exp(ik_x x) \times \begin{cases} \cos y \\ \sin y \end{cases} \quad (54-8)$$

به ترتیب بر طبق Δ_1 و Δ_2 تبدیل می شوند.

مجموعه های بعدی بردارهای شبکه معکوس عبارتند از:

$$\{(2, 0), (\bar{2}, 0), (0, 2), (0, \bar{2})\}, \{(1, 1), (1, \bar{1}), (\bar{1}, 1), (\bar{1}, \bar{1})\}$$

و غیره. نوارهای متناظر باتمام این امواج تخت رامی توانیم باهمان روش به دست آوریم و هر تعداد نوار که بخواهیم می توانیم بیابیم. شکل (۷-۸) تمام نوارها تا $E = 3$ را نشان می دهد. Z . گروه بردار \vec{k} برای یک نقطه عمومی روی خط $X M$ (به استثنای X و M) عبارت است از: (E, m_y) . نمایشهای کاهش ناپذیر آن را با Z_1 و Z_2 نشان می دهیم. بردار \vec{k} به صورت $(\frac{1}{4}, k_y)$ می باشد، که در آن $0 < k_y < \frac{1}{4}$. از این رو انرژی و امواج تخت به صورت زیر داده می شوند:

$$\begin{aligned} E(Z) &= (m - \frac{1}{4})^2 + (n - k_y)^2, \quad 0 < k_y < \frac{1}{4}; \\ (m n)_Z &= \exp i[(\frac{1}{4} - m)x + (k_y - n)y]. \end{aligned} \quad (55-8)$$

با در نظر گرفتن امواج تخت متوالی، بار دیگر، می توانیم نوارهای مختلف در امتداد Z را به دست آوریم. نتیجه می گیریم که هر نوار در امتداد $X M$ دو بار تبهگن است زیرا دو مجموعه $(-m, n)$ و $(m+1, n)$ به ازای $m = 0, 1, 2, 3, \dots$ یک انرژی می دهند. دو

موج تخت متناظر با هر نوار، مطابق نمایش $Z_1 \oplus Z_2$ تبدیل می شوند.

Σ . گروه بردار \vec{k} برای یک نقطه عمومی در امتداد ΓM (به استثنای Γ و M)، (E, σ) می باشد. نمایشهای کاهش ناپذیر آن را با Σ_1 و Σ_2 نشان می دهیم. بردار \vec{k} دارای شکل (k_x, k_x) می باشد. انرژی و امواج تخت توسط روابط زیر داده می شوند:

$$E(\Sigma) = (m - k_x)^2 + (n - k_x)^2, 0 < k_x < \frac{1}{2}; \quad (56-8)$$

$$(m \ n)_{\Sigma} = \exp [i \{ (k_x - m)x + (k_x - n)y \}].$$

نوارهای انرژی و تقارنهای امواج تخت را می توان به آسانی با روشی که در بالا برای Δ ارائه دادیم به دست آورد.

برچسب گذاری حالت های موج تخت در نقاط خاص Γ ، X و M به صورت زیر به دست می آید.

Γ . گروه بردار \vec{k} در Γ کل گروه نقطه ای C_{4v} می باشد. نمایشهای کاهش ناپذیر آن (برای شبکه مربعی) توسط Γ_i ، $1 \leq i \leq 5$ ، مشخص می شوند (جدول C_{4v} در جدول ۷-۷ را ببینید).

موج تخت متناظر با پایتترین انرژی عبارت است از: $(0, 0)_{\Gamma}$ که دارای $E = 0$ می باشد. در واقع، این موج تخت در $k = 0$ ، یک مقدار ثابت است که به نمایش Γ_1 تعلق دارد.

چهار موج تخت بعدی $(1, 0)_{\Gamma}$ ، $(\bar{1}, 0)_{\Gamma}$ ، $(0, 1)_{\Gamma}$ و $(0, \bar{1})_{\Gamma}$ با انرژی $E = 1$ در Γ تبهگن اند. شکل صریح این امواج تخت در $k = 0$ عبارتند از:

$$(1 \ 0)_{\Gamma} = \exp(-ix), (\bar{1} \ 0)_{\Gamma} = \exp(ix), \quad (57-8)$$

$$(0 \ 1)_{\Gamma} = \exp(-iy), (0 \ \bar{1})_{\Gamma} = \exp(iy).$$

می توانیم با پیدا کردن مشخصه ها، نشان دهیم که این امواج نمایش $\Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_5$ از گروه C_{4v} را ایجاد می کنند. چهار موج تخت بعدی $(1, 1)_{\Gamma}$ ، $(1, \bar{1})_{\Gamma}$ ، $(\bar{1}, 1)_{\Gamma}$ و $(\bar{1}, \bar{1})_{\Gamma}$ با انرژی $E = 2$ در Γ تبهگن اند و تحت C_{4v} مطابق نمایش $\Gamma_1 \oplus \Gamma_4 \oplus \Gamma_5$ تبدیل می شوند.

X . گروه بردار \vec{k} در X ، زیرگروه (E, m_x, m_y, C_4^2) از C_{4v} می باشد، و

نمایشهای کاهش ناپذیر آن (برای شبکه مربعی) توسط X_i ، $1 \leq i \leq 4$ نشان داده می‌شوند (جدول C_{2v} در جدول ۷-۷ را ببینید). مجموعه‌های زیر از امواج تخت تبهگن در نقطه X را به دست می‌آوریم: (i) مجموعه $\{(0, 0)_X, (1, 0)_X\}$ متناظر با نمایش $X_1 \oplus X_3$ ، با $E = 0.25$ ؛ (ii) مجموعه $\{(0, 1)_X, (0, \bar{1})_X, (1, \bar{1})_X, (1, 1)_X\}$ که بر طبق $X_1 \oplus X_2 \oplus X_3 \oplus X_4$ تبدیل می‌شود، با $E = 1.25$ ؛ (iii) مجموعه $\{(1, 0)_X, (2, 0)_X\}$ که با هم به $X_1 \oplus X_3$ تعلق دارد، با $E = 2.25$ و غیره.

M . گروه بردار \vec{k} در M ، کل گروه C_{4v} است. نمایشهای کاهش ناپذیر آن توسط M_i نشان داده می‌شود، $(1 \leq i \leq 5)$ ، که به ترتیب هم‌ارز Γ_i ها می‌باشند. مجموعه‌های امواج تخت تبهگن زیر را می‌توان به دست آورد: (i) مجموعه $\{(0, 1)_M, (1, 1)_M\}$ ، $(0, 1)_M$ ، $(1, 0)_M$ ، $(1, 1)_M$ با $E = 0.5$ و متعلق به نمایش $M_1 \oplus M_2 \oplus M_5$ ؛ (ii) مجموعه $\{(0, 1)_M, (1, 1)_M, (2, 1)_M, (0, 2)_M, (1, 2)_M, (2, 0)_M, (\bar{1}, 0)_M, (\bar{1}, 1)_M\}$ با $E = 2.5$ و متعلق به نمایش منظم C_{4v} و الی آخر.

۸-۴-۴ روابط سازگاری

از شکل (۷-۸) مشاهده می‌کنیم که، عموماً تبهگنی در نقاط خاص بیش از تبهگنی روی خطوط تقارنی است. به علاوه اگر از خطوط تقارن دور شویم و به یک نقطه عمومی در منطقه بریلونن برویم، جایی که گروه بردار \vec{k} تنها شامل عنصر همانی باشد، تبهگنی همه نوارها بطور کامل بر طرف می‌شود.

یک نقطه با تقارن بالا، نظیر Γ که در آن گروه بردار موجی C_{4v} است، در نظر بگیرید. وقتی از Γ ، در امتداد یک خط تقارن، مثلاً Δ ، دور شویم گروه تقارنی به C_{1h} تبدیل خواهد شد. یک نمایش کاهش ناپذیر Γ_i در نقطه Γ را در نظر بگیرید. وقتی تقارن از C_{4v} به C_{1h} کاهش می‌یابد، نمایش Γ_i ، عموماً ممکن است به جمع (مستقیم) دو نمایش کاهش ناپذیر Δ_1 و Δ_2 تبدیل شود. این کاهش را می‌توان با روش توصیف شده در فصل ۳، با بررسی جدولهای مشخصه C_{4v} و C_{1h} به دست آورد و این عمل از توابع پایه‌ای که نمایش بخصوص Γ_i را ایجاد می‌کنند مستقل است. لیکن، به این که کدام عناصر گروه

بزرگتر (در این جا C_{4v}) در گروه کوچکتر (در این جا C_{1h}) قرار دارند، بستگی دارد.

به عنوان مثال، روابط زیر بین نمایشهای Γ و نمایشهای Δ به دست می آید:

$$\Gamma_1 \rightarrow \Delta_1, \Gamma_2 \rightarrow \Delta_2, \Gamma_3 \rightarrow \Delta_1, \Gamma_4 \rightarrow \Delta_2, \Gamma_5 \rightarrow \Delta_1 \oplus \Delta_2. \quad (58-8)$$

در این صورت گرییم که نمایش Δ_1 با Γ_1 و Γ_3 سازگار است. Δ_1 با Γ_2 و Γ_4 ، و Δ_1 و Δ_2 هر دو با Γ_5 سازگارند. روابط مشابهی می توان بین Γ_i و Σ_1 و Σ_2 و همچنین نقاط خاص X و M برقرار کرد. بهتر است روابط سازگاری بین نمایشهای کاهش ناپذیر در نقاط خاص و نقاط روی خطوط مختلف تقارنی که یکدیگر را در آن قطع می کنند، برای هر گروه نقطه ای معین به صورت یک جدول بنویسیم. این کار یک بررسی ساده از درستی برچسب گذاری نوارها در یک نمودار ساختار الکترونی یک کریستال را فراهم می آورد. روابط سازگاری برای یک شبکه مربعی با گروه نقطه ای C_{4v} در جدول (۸-۲) آورده شده است.

جدول ۸-۲ روابط سازگاری برای یک شبکه مربعی.

Γ_1	Γ_2	Γ_3	Γ_4	Γ_5	M_1	M_2	M_3	M_4	M_5
Δ_1	Δ_2	Δ_1	Δ_2	$\Delta_1 \Delta_2$	Z_1	Z_2	Z_1	Z_2	$Z_1 Z_2$
Σ_1	Σ_2	Σ_2	Σ_1	$\Sigma_1 \Sigma_2$	Σ_1	Σ_2	Σ_2	Σ_1	$\Sigma_1 \Sigma_2$

X_1	X_2	X_3	X_4
Δ_1	Δ_2	Δ_1	Δ_2
Z_1	Z_2	Z_2	Z_1

۸-۵ نوارهای انرژی الکترون آزاد - شبکه های سه بعدی

در ادامه بحث گذشته در این بخش نوارهای انرژی الکترون آزاد سه نوع شبکه مکعبی را مورد بحث قرار می دهیم. روش یافتن نوارهای الکترون آزاد و برچسب گذاری آنها برای

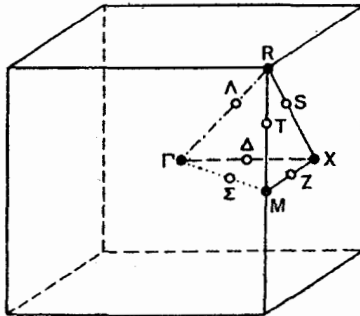
یک شبکه مربعی قبلاً تشریح شد. چون همان روش به شبکه‌های سه بعدی اعمال می‌شود، در این جا مفصلاً آن را ذکر نمی‌کنیم.

۸-۵-۱ شبکه مکعبی ساده

شبکه معکوس یک شبکه مکعبی ساده نیز یک مکعب ساده است و بردارهای شبکه معکوس توسط رابطه زیر داده می‌شوند:

$$G(m \ n \ p) = m\hat{k}_x + n\hat{k}_y + p\hat{k}_z.$$

که در آن \hat{k}_x ، \hat{k}_y ، \hat{k}_z بردارهای راست‌هنگار در فضای معکوس می‌باشند و m ، n و p می‌توانند تمام اعداد صحیح را بگیرند. منطقه اول بریلوئن یک مکعب به ضلع واحد می‌باشد. نقاط خاص و خطوط تقارنی در منطقه بریلوئن در شکل (۸-۸) نشان داده شده است. در جدول (۳-۸) نقاط خاص، خطوط و صفحات تقارن، ستاره‌های بردارهای \vec{k} و گروه‌های بردار \vec{k} آورده شده است. چهار وجهی ΓXMR بخش $\frac{1}{48}$ از منطقه بریلوئن می‌باشد زیرا عمل ۴۸ عنصر گروه نقطه ای O_h روی این چهار وجهی منطقه بریلوئن را بطور کامل می‌پوشاند بدون این که جای خالی بماند یا روی هم افتادگی به وجود آید.



شکل ۸-۸ نقاط خاص و خطوط تقارن در منطقه بریلوئن یک شبکه مکعبی ساده.

برای یافتن نوارهای الکترون آزاد در طرح منطقه کاهش یافته، توجه کنید که معادله ابر سهموی الکترون آزاد که رأسش در نقطه شبکه معکوس $G(m, n, p)$ می‌باشد عبارت

جدول ۸-۳ ستاره‌ها و گروهای بردارهای موجی برای نقاط خاص، خطوط صفحات تقارن برای

یک شبکه مکعبی ساده.

مرتبه K	گروه، \vec{k} K	تعداد بردارها در ستاره k	نشانه	k
1	C_1	48	none	(k_x, k_y, k_z)
2	C_{1h}	24	none	(k_x, k_x, k_z)
2	C_{1h}	24	none	$(k_x, k_y, 0)$
2	C_{1h}	24	none	$(k_x, k_y, \frac{1}{2})$
4	C_{2v}	12	Σ	$(k_x, k_x, 0)$
4	C_{2v}	12	Z	$(k_x, \frac{1}{2}, 0)$
4	C_{2v}	12	S	$(k_x, k_x, \frac{1}{2})$
6	C_{3v}	8	Λ	(k_x, k_x, k_x)
8	C_{4v}	6	T	$(k_x, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
8	C_{4v}	6	Δ	$(k_x, 0, 0)$
16	D_{4h}	3	M	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$
16	D_{4h}	3	X	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$
48	O_h	1	R	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$
48	O_h	1	Γ	$(0, 0, 0)$

است از:

$$E = [G(m n p) - k]^2 = (m - k_x)^2 + (n - k_y)^2 + (p - k_z)^2 \quad (8-9)$$

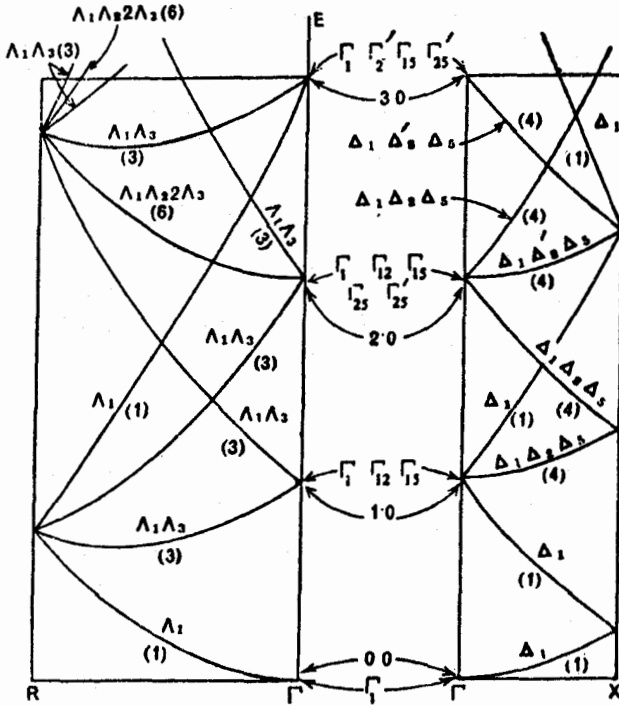
شکل (۸-۹) نوارهای الکترون آزاد برای یک شبکه مکعبی ساده در امتداد خطوط ΓX و ΓR را نشان می‌دهد. جدول (۸-۴) روابط سازگاری بین نقاط خاص Γ ، X ، M و R و خطوط تقارن ناشی شده از آنها را نشان می‌دهد.

۸-۵-۲ شبکه مکعبی مرکز حجمی

شبکه معکوس یک شبکه مکعبی درون وجهی (bcc) یک شبکه مرکز سطحی (fcc)

می‌باشد و بردارهای شبکه معکوس عبارتند از:

$$G(m n p) = mb_1 + nb_2 + pb_3, \quad (8-6)$$



شکل ۸-۹ نوارهای انرژی آزاد برای یک شبکه مکعبی ساده در طول ΓR و ΓX تا $E = 3$. برچسب گذاری نوارها در Γ و طول Δ و Λ نیز نشان داده شده است. تپه‌گنی هر نوار با عدد داخل پرانتزها مشخص شده است.

با

$$b_1 = \hat{k}_y + \hat{k}_z, \quad b_2 = \hat{k}_z + \hat{k}_x, \quad b_3 = \hat{k}_x + \hat{k}_y \quad (8-61)$$

کوته‌اترین بردارهای غیر صفر شبکه معکوس، دوازده بردار $\pm \hat{k}_x \pm \hat{k}_y \pm \hat{k}_z$ ، $\pm \hat{k}_x \pm \hat{k}_y$ ، $\pm \hat{k}_x$ ، $\pm \hat{k}_y$ ، $\pm \hat{k}_z$ ، $\pm \hat{k}_x$ ، $\pm \hat{k}_y$ ، $\pm \hat{k}_z$ می‌باشند. منطقه اول بریلوئن عبارت است از: حجمی که توسط دوازده عمود منصف این بردارها احاطه می‌شود، که یک دوازده وجهی منظم است. شکل (۸-۱۰) منطقه اول بریلوئن همراه با نقاط خاص و خطوط تقارن برای یک شبکه bcc را نشان می‌دهد. کافی است ساختار الکترونی تنها در چهار وجهی $\Gamma H N P$ که $\frac{1}{48}$ منطقه بریلوئن است، محاسبه

جدول ۴-۸ روابط سازگاری برای یک شبکه مکعبی ساده.

Γ_1	Γ_2	Γ_{12}	Γ_{15}	Γ_{25}	Γ_1'	Γ_2'	Γ_{12}'	Γ_{15}	Γ_{25}
Δ_1	Δ_2	$\Delta_1\Delta_2$	$\Delta_1'\Delta_2$	$\Delta_2'\Delta_2$	Δ_1'	Δ_2'	$\Delta_1'\Delta_2'$	$\Delta_1\Delta_2$	$\Delta_2\Delta_2$
Λ_1	Λ_2	Λ_2	$\Lambda_2\Lambda_2$	$\Lambda_1\Lambda_2$	Λ_2	Λ_1	Λ_2	$\Lambda_1\Lambda_2$	$\Lambda_2\Lambda_2$
Σ_1	Σ_4	$\Sigma_1\Sigma_4$	$\Sigma_2\Sigma_1\Sigma_4$	$\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_3$	Σ_2	Σ_3	$\Sigma_2\Sigma_3$	$\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_4$	$\Sigma_1\Sigma_2\Sigma_4$

X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_1'	X_2'	X_3	X_4'	X_5'
Δ_1	Δ_2	Δ_2'	Δ_1'	Δ_2	Δ_1'	Δ_2'	Δ_2	Δ_1	Δ_2
Z_1	Z_1	Z_4	Z_4	Z_2Z_3	Z_2	Z_3	Z_3	Z_2	Z_1Z_4
S_1	S_4	S_1	S_4	S_2S_3	S_2	S_3	S_3	S_2	S_1S_4

M_1	M_2	M_3	M_4	M_5	M_1'	M_2'	M_3'	M_4'	M_5'
Σ_1	Σ_4	Σ_1	Σ_4	$\Sigma_2\Sigma_3$	Σ_2	Σ_3	Σ_3	Σ_2	$\Sigma_1\Sigma_4$
Z_1	Z_1	Z_3	Z_3	Z_2Z_4	Z_2	Z_2	Z_4	Z_4	Z_1Z_3
T_1	T_2	T_2'	T_1'	T_5	T_1'	T_2'	T_2	T_1	T_5

R_1	R_2	R_{12}	R_{15}	R_{25}	R_1'	R_2'	R_{12}'	R_{15}	R_{25}
Λ_1	Λ_2	Λ_3	$\Lambda_2\Lambda_3$	$\Lambda_1\Lambda_3$	Λ_2	Λ_1	Λ_3	$\Lambda_1\Lambda_3$	$\Lambda_2\Lambda_3$
S_1	S_4	S_1S_4	$S_2S_3S_4$	$S_1S_2S_3$	S_2	S_3	S_2S_3	$S_1S_3S_4$	$S_1S_2S_4$
T_1	T_2	T_1T_2	$T_1'T_5$	$T_2'T_5$	T_1'	T_2'	$T_1'T_2'$	T_1T_5	T_2T_5

شود. شکل (۸-۱۱) ساختار نواری الکترون آزاد یک بلور را که دارای ساختار bcc است و در راستای خطوط ΓH و ΓP دارای یک اتم بر نقطه شبکه است، نشان می دهد. روابط سازگاری برای شبکه bcc در جدول (۸-۵) آورده شده است.

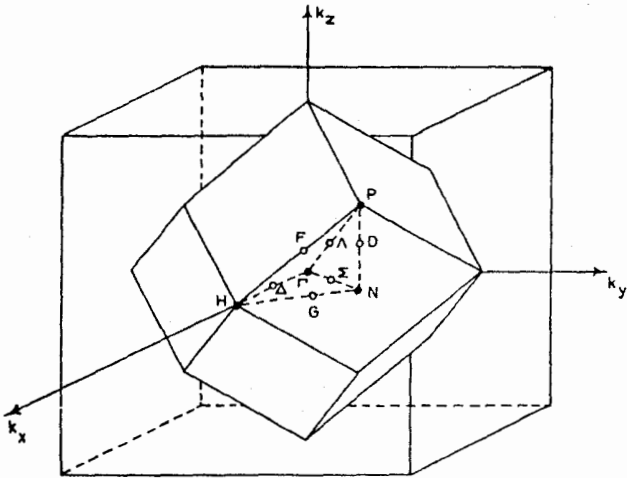
۸-۵-۳ شبکه مکعبی مرکز سطحی

شبکه معکوس یک شبکه fcc، یک شبکه bcc است و بردارهای انتقال بنیادی

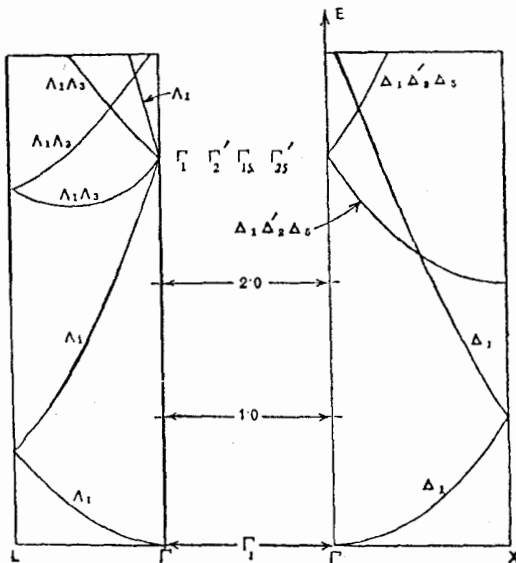
شبکه معکوس عبارتند از:

$$b_1 = \hat{k}_x + \hat{k}_y - \hat{k}_z, \quad b_2 = \hat{k}_x - \hat{k}_y + \hat{k}_z, \quad b_3 = -\hat{k}_x + \hat{k}_y + \hat{k}_z \quad (۸-۶۲)$$

تعداد کوتاهترین بردارهای مخالف صفر شبکه معکوس هشت است، که عبارتند از:



شکل ۸-۱۰ نقاط خاص و خطوط تقارن در منطقه بریلونن یک شبکه bcc. نقاط شبکه معکوس در مرکز مکعب و در وسط پالهای مکعب نشان داده شده اند. طول یال مکعب ۲ است.



شکل ۸-۱۱ نوارهای انرژی الکترون آزاد برای یک شبکه bcc در راستای ΓH و ΓP تا $E = 3$.

جدول ۵-۸ روابط سازگاری برای یک شبکه مکعبی مرکز حجمی. ستون اول گروه بردار موجی را

مشخص می کند.

Γ : مانند جدول (۴-۸).

O_h	H_1	H_2	H_{12}	H_{15}'	H_{25}'	H_{11}'	H_{22}'	H_{12}'	H_{15}	H_{25}
C_{4v}	Δ_1	Δ_2	$\Delta_1\Delta_2$	$\Delta_1'\Delta_5$	$\Delta_2'\Delta_5$	Δ_1'	Δ_2'	$\Delta_1'\Delta_2'$	$\Delta_1\Delta_5$	$\Delta_2\Delta_5$
C_{3v}	F_1	F_2	F_3	F_2F_3	F_1F_3	F_2	F_1	F_3	F_1F_3	F_2F_3
C_{2v}	G_1	G_4	G_1G_4	$G_2G_3G_4$	$G_1G_2G_3$	G_2	G_3	G_2G_3	$G_1G_3G_4$	$G_1G_2G_4$

T_d	P_1	P_2	P_3	P_4	P_5
C_{3v}	Λ_1	Λ_2	Λ_3	$\Lambda_1\Lambda_3$	$\Lambda_2\Lambda_3$
C_{3v}	F_1	F_2	F_3	F_1F_3	F_2F_3
C_{2v}	D_1	D_2	D_1D_2	$D_1D_3D_4$	$D_2D_3D_4$

D_{2h}	N_1	N_2	N_3	N_4	N_1'	N_2'	N_3'	N_4'
C_{2v}	Σ_1	Σ_2	Σ_3	Σ_4	Σ_1	Σ_2	Σ_3	Σ_4
C_{2v}	D_1	D_3	D_4	D_2	D_4	D_2	D_1	D_3
C_{2v}	G_1	G_3	G_2	G_4	G_4	G_2	G_3	G_1

(۶۳-۸)

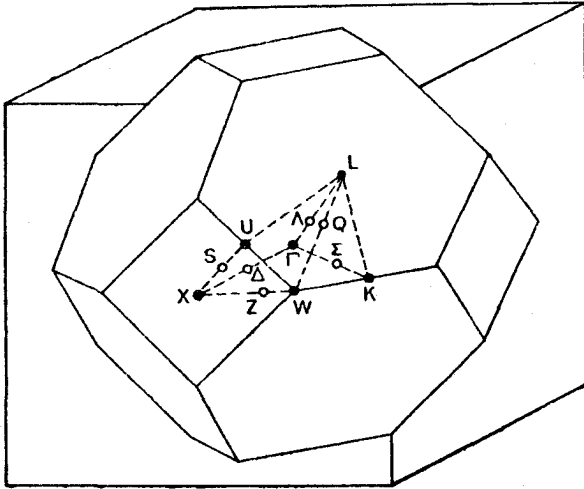
$$\pm \hat{k}_x \pm \hat{k}_y \pm \hat{k}_z$$

اگر عمود منصفهای این هشت بردار را رسم کنیم یک هشت وجهی به دست می آوریم. لیکن این هشت وجهی منطقه بریلونن شبکه fcc نمی باشد زیرا نواحی نزدیک به گوشه های آن به سایر نقاط شبکه معکوس نزدیکترند تا به مرکز آن. از این رو نیازی نیست که شش گوشه هشت وجهی به وسیله عمود منصفهای بردارها به شش نقطه همسایه درجه دوم شبکه معکوس که عبارتند از:

(۶۴-۸)

$$\pm 2\hat{k}_x, \pm 2\hat{k}_y, \pm 2\hat{k}_z.$$

تبدیل شوند. بدین ترتیب منطقه بریلونن یک شبکه fcc یک هشت وجهی بریده شده با ۱۴ وجه است که در شکل (۸-۱۲) همراه با نقاط و خطوط تقارن نشان داده شده است. پنج وجهی FXULKW (با ۵ وجه و ۶ رأس) یک بخش $\frac{1}{\sqrt{8}}$ مناسب از منطقه بریلونن است



شکل ۸-۱۲ نقاط خاص و خطوط تقارنی در منطقه بریلون یک شبکه fcc. نقاط شبکه معکوس در مرکز و رؤوس مکعب نشان داده شده می باشند. طول ضلع مکعب ۲ است.

که لازم است ساختار الکترونی را در آن محاسبه کنیم.

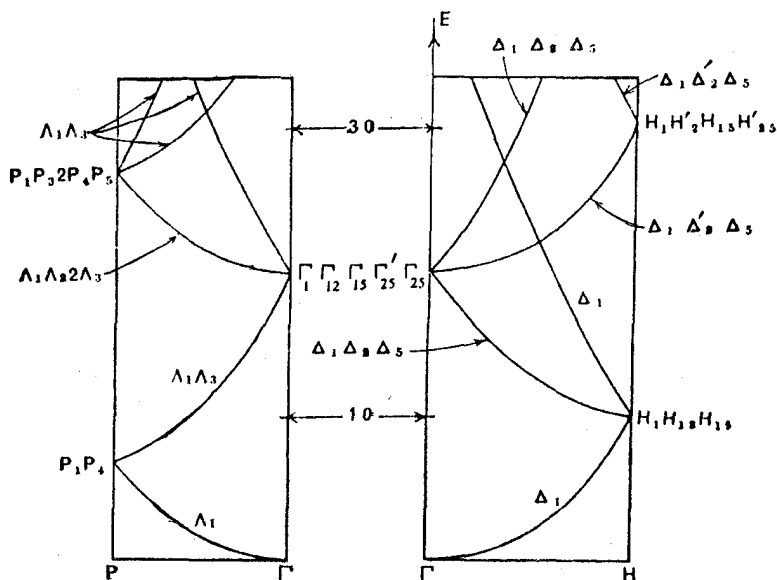
شکل (۸-۳) ساختار نواری الکترون آزاد یک بلور را نشان می دهد که دارای ساختار fcc می باشد و در راستای خطوط ΓX و ΓL دارای یک اتم بر نقطه شبکه است. روابط سازگاری برای شبکه fcc در جدول (۸-۶) آورده شده است.

جدول ۸-۶ روابط سازگاری برای یک شبکه fcc. ستون اول گروه بردار موجی را نشان می دهد. Γ : مانند جدول (۸-۴).

D_{4h}	X_1	X_2	X_3	X_4	X_5	X_1'	X_2'	X_3'	X_4'	X_5'
C_{4v}	Δ_1	Δ_2	Δ_2'	Δ_1'	Δ_5	Δ_1'	Δ_2'	Δ_2	Δ_1	Δ_5
C_{2v}	Z_1	Z_1	Z_4	Z_4	Z_2Z_3	Z_2	Z_2	Z_3	Z_3	Z_1Z_4
C_{2v}	S_1	S_4	S_1	S_4	S_2S_3	S_2	S_3	S_2	S_3	S_1S_4

D_{3h}	L_1	L_2	L_3	L_1'	L_2'	L_3'
C_{3v}	Λ_1	Λ_2	Λ_3	Λ_2	Λ_1	Λ_3
C_{1h}	Q_1	Q_2	Q_1Q_2	Q_1	Q_2	Q_1Q_2

C_{4v}	W_1	W_2	W_1'	W_2'	W_3
C_{2v} <td>Z_1</td> <td>Z_2</td> <td>Z_2</td> <td>Z_1</td> <td>Z_3Z_4</td>	Z_1	Z_2	Z_2	Z_1	Z_3Z_4
C_{1h} <td>Q_1</td> <td>Q_2</td> <td>Q_1</td> <td>Q_2</td> <td>Q_1Q_2</td>	Q_1	Q_2	Q_1	Q_2	Q_1Q_2



شکل ۸-۱۳ نوارهای انرژی الکترون آزاد یک شبکه fcc در راستای ΓX و ΓL تا $E = 3$.

۸-۶ نوارهای انرژی بلورهای واقعی

در دو بخش گذشته نوارهای انرژی الکترون آزاد بلورها را مورد بحث قرار دادیم. در این تقریب، از پتانسیل بلوری پیچیده حاصل از یونها و الکترونها بطور کامل صرفنظر کردیم و فرض کردیم که یک الکترون در یک پتانسیل ثابت در داخل شبکه حرکت می کند. این مدل هرچند با واقعیت خیلی فاصله دارد، به ما کمک کرد تا اطلاعات قابل ملاحظه ای از طبیعت نوارهای الکترونی به دست آوریم. چنین نتیجه می شود که نوارهای انرژی بسیاری از فلزات، بخصوص فلزات تک الکترونی (قلیائی) با نوارهای الکترون آزاد تفاوت چشمگیری ندارند. همچنان که از مدل الکترون آزاد به سمت یک بلور واقعی، با پتانسیل تناوبی می رویم، چند تغییر پدید می آید که از آن جمله اند: (الف) شکافتگی تبهگنی بالا که مشخصه مدل الکترون آزاد است، و (ب) هیبریدشدگی نوارهایی که دارای یک تقارن می باشند. این اثرات را در موقع مناسب در این بخش مورد بحث قرار خواهیم داد. در این

جانتها یک روش و شاید ساده ترین روش، برای تعیین نوارهای انرژی بلورهای حقیقی روش بسط موج تخت را مورد بحث قرار می دهیم.

۸-۶-۱ روش بسط موج تخت

دیدیم که در تقریب الکترون آزاد، توابع موج الکترونی، همان امواج تخت $\exp [i (\vec{k} - \vec{G}) \cdot \vec{r}]$ می باشند. اگر \vec{k} بتواند تمام منطقه اول بریلوئن را طی کند و \vec{G} مجموعه کلیه بردارهای شبکه معکوس را بگیرد، امواج تخت یک مجموعه کامل، برای بسط توابع موج یک الکترونی در بلورهای حقیقی، تشکیل می دهند. با در نظر گرفتن معادله شرودینگر (۸-۱) با پتانسیل $V(\vec{r})$ ، می توانیم ویژه تابع $\phi(\vec{r})$ را به صورت یک ترکیب خطی از امواج تخت بیان کنیم. به علاوه چون پتانسیل $V(\vec{r})$ تناوبی است، می تواند توسط سری فوریه اش که در آن جمع بندی روی بردارهای شبکه معکوس انجام می شود، نمایش داده شود. علاوه بر این می دانیم که یک پتانسیل تناوبی، تنها آن امواج تختی را با هم مخلوط می کند که بردارهای موجی شان به اندازه بردارهای شبکه معکوس باهم اختلاف داشته باشند. از این رو، داریم:

$$\phi(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} c(\vec{k} - \vec{G}) \exp[i(\vec{k} - \vec{G}) \cdot \vec{r}], \quad (۸-۶۵ \text{ الف})$$

$$V(\vec{r}) = \sum_{\vec{G}} V_{\vec{G}} \exp(i \vec{G} \cdot \vec{r}). \quad (۸-۶۵ \text{ ب})$$

با قرار دادن در معادله (۸-۱) و مرتب کردن جملات، داریم:

$$\sum_{\vec{G}} [(\lambda_{\vec{k} - \vec{G}} - E) c(\vec{k} - \vec{G}) + \sum_{\vec{G}'} V_{\vec{G}'} c(\vec{k} - \vec{G} - \vec{G}')] \exp[i(\vec{k} - \vec{G}) \cdot \vec{r}] = 0, \quad (۸-۶۶)$$

که در آن $\lambda_{\vec{k} - \vec{G}} = \frac{\hbar^2 (\vec{k} - \vec{G})^2}{2m}$ انرژی الکترون آزاد است. چون تمام امواج تخت، برای \vec{G} های مختلف، یک مجموعه توابع مستقل تشکیل می دهند، ضریب هر جمله در معادله بالا باید جداگانه صفر شود. از این جا داریم:

$$(\lambda_{\vec{k} - \vec{G}} - E) c(\vec{k} - \vec{G}) + \sum_{\vec{G}'} V_{\vec{G}'} c(\vec{k} - \vec{G} - \vec{G}') = 0, \quad (۸-۶۷)$$

که به ازای تمام \vec{G} ها برقرار است. ضرایب مجهول $c(\vec{k} - \vec{G})$ برای یک مقدار بخصوص \vec{k} و مقادیر مختلف \vec{G} و همچنین ویژه مقدار مجهول انرژی $E = E(\vec{k})$ می توانند از (۸-۶۷) به دست آیند. واضح است که برای هر مقدار \vec{G} ، یک معادله نظیر (۸-۶۷) می توان

نوشت. بدین ترتیب یک دسته معادلات خطی همگن برای ضرایب مجهول $c(\vec{k} - \vec{G})$ به دست می آوریم. شرط این که یک جواب غیربدهی برای این ضرایب داشته باشیم این است که دترمینان حاصل از ضرایب $c(\vec{k} - \vec{G} - \vec{G}_1)$ در (۶۷-۸) صفر باشد. این را می توان به صورت فشرده زیر نوشت:

$$\det |(\lambda_{k-G} - E)\delta_{GG'} + V_{G'-G}| = 0 \quad (68-8)$$

معادله (۶۷-۸) یا (۶۸-۸) معادله مفسر مسأله نامیده می شود.

به عنوان مثال، یک بلور یک بعدی تک اتمی را در نظر بگیرید و فرض کنید تنها سه ضریب فوریه به ازای $G = 0$ و $G = \pm G_1$ در (۸-۶۵ ب) دارای مقدار قابل ملاحظه ای باشند و از بقیه بتوان صرف نظر کرد. G_1 کوتاهترین بردار غیر صفر شبکه معکوس است. چون پتانسیل حقیقی است، داریم: $V_0 = V_{G_1}^*$. V_0 یک پتانسیل ثابت است و می توان آن را حذف کرد (به عبارت دیگر، فرض می کنیم $V_0 \equiv 0$). بطور مشابه، در تابع موج (۸-۶۵ الف) فرض می کنیم فقط سه ضریب $c(k)$ ، $c(k - G_1)$ و $c(k + G_1)$ مقدار قابل ملاحظه ای داشته باشند و بقیه قابل اغماض باشند. اکنون (۸-۶۷) را برای سه مقدار $G = \pm G_1$ و $G = 0$ می نویسیم و سه معادله خطی همگن برای سه ضریب مجهول به دست می آوریم. شرط این که این معادلات جوابهای غیربدهی داشته باشند این است که:

$$\begin{vmatrix} (\lambda_{k-G_1} - E) & V_1^* & 0 \\ V_1^* & (\lambda_k - E) & V_1 \\ 0 & V_1 & (\lambda_{k+G_1} - E) \end{vmatrix} = 0. \quad (69-8)$$

که در آن $V_1 \equiv V_{G_1}$. با حل این معادله، سه ویژه مقدار (احتمالاً پایستترین ویژه مقادیرها) به دست می آید که وقتی آنها را در سه معادله همگن قرار دهیم، می توانیم سه ضریب را تا تقریب یک ثابت بهنجارش پیدا کنیم و تابع موج زیر را به دست آوریم:

$$\psi_k(x) = c(k) \exp(ikx) + c(k - G_1) \exp[i(k - G_1)x] + c(k + G_1) \exp[i(k + G_1)x]. \quad (70-8)$$

اگر بخواهیم دقت محاسبه را بیشتر کنیم، روال بدیهی در چارچوب این روش این

است که تعداد بیشتری جمله، مثلاً، π تا، در بسط فوریه (۸-۶۵ ب) پتانسیل تناوبی، وارد کنیم. در این صورت باید جملات متناظر در تابع موج (۸-۶۵ الف) را نیز بیاوریم. سپس دترمینان مفسر که از مرتبه π است، ویژه مقدار خواهد داد، که حداقل چند ویژه مقدار پایین آنها نسبتاً دقیق خواهد بود.

واضح است که هر قدر بخواهیم دقت را بیشتر کنیم، مرتبه دترمینانی که باید حل کنیم بزرگتر می شود. حتی با کامپیوترهای امروزی، حل یک دترمینان مثلاً 30×30 یا 50×50 کار نسبتاً مشکلی است. در این جا نظریه گروهها، با روش قطری کردن بلوکی به کمک ما می آید، بطوری که می توان دترمینانهای به بزرگی مثلاً 300×300 یا 500×500 را با این روش قطری کرد^۵. این مطلب را در قسمت بعدی مورد بحث قرار خواهیم داد.

۸-۶-۲ تجزیه دترمینان مفسر

یک بلور تک اتمی مکعبی ساده سه بعدی را در نظر بگیرید. بردارهای شبکه معکوس را می توان برحسب اندازه هایشان به مجموعه هایی تقسیم کرد. بدین ترتیب یک بردار شبکه معکوس با طول صفر، شش بردار با طول واحد، دوازده بردار با طول $\sqrt{2}$ و غیره، داریم. معقول به نظر می رسد که انتظار داشته باشیم، در بسط پتانسیل اندازه ضرایب فوریه متناظر با بردارهای شبکه معکوس بزرگ، کوچک باشد. از این رو می توانیم چند جمله اول در بسط (۸-۶۵ ب) را در نظر بگیریم. لیکن چون پتانسیل $V(r)$ تقارن شبکه را دارا می باشد، باید یا تمام مجموعه بردارهای شبکه معکوس هم ارز را وارد کنیم یا هیچ کدام را. جدول (۸-۷) تعدادی از مجموعه های بردارهای شبکه معکوس برای یک شبکه مکعبی ساده را به ترتیب افزایش طول نشان می دهد. در آنچه به دنبال می آید با در نظر گرفتن بسط تابع موج به ۳۳ موج تخت (اولین پنج مجموعه جدول ۸-۷) این روش را روشن می سازیم.

۵- با وجودی که امروزه روشهایی که سریعتر از بسط موج تخت همگرا می شوند در اختیار داریم، ولی همه آنها اساساً بر حل یک معادله مفسر بنا شده اند. هدف ما صرفاً این است که کاربرد نظریه گروهها را در کاهش دترمینان مفسر نشان دهیم و این با روش بسط موج تخت ساده بخوبی انجام می شود.

جدول ۷-۸ چند مجموعه از کوتاهترین بردارهای شبکه معکوس برای یک شبکه مکعبی ساده.

مجموعه	طول	تعداد	تجمع کل
{0 0 0}	0	1	1
{1 0 0}	1	6	7
{1 1 0}	$\sqrt{2}$	12	19
{1 1 1}	$\sqrt{3}$	8	27
{2 0 0}	2	6	33
{2 1 0}	$\sqrt{5}$	24	57
{2 1 1}	$\sqrt{6}$	24	81
{2 2 0}	$\sqrt{8}$	12	93
{2 2 1}	3	24	117
{3 0 0}	3	6	123
{3 1 0}	$\sqrt{10}$	24	147
{3 1 1}	$\sqrt{11}$	24	171
{2 2 2}	$\sqrt{12}$	8	179
{3 2 0}	$\sqrt{13}$	24	203
{3 2 1}	$\sqrt{14}$	48	251
{4 0 0}	4	6	257

نقطه Γ را که گروه بردار موج O_h است در نظر بگیرید. امواج تخت به صورت $\exp(-i \vec{G} \cdot \vec{r})$ می باشند. هر مجموعه از امواج تخت جدول (۷-۸) می تواند برای ایجاد یک نمایش O_h مورد استفاده قرار گیرد.

جدول (۸-۸) مشخصه های نمایشهای ایجاد شده توسط پنج مجموعه اول و تجزیه آنها به نمایشهای کاهش ناپذیر را نشان می دهد. سپس می توانیم از هر مجموعه از امواج تخت ترکیبات خطی متقارن شده ای را بسازیم که بر طبق نمایشهای کاهش ناپذیر O_h تبدیل شوند. به عنوان مثال ترکیبات متقارن شده شش موج تخت مجموعه Γ_{100} عبارتند از:

$$\Gamma_1 : (100)_\Gamma + (\bar{1}00)_\Gamma + (010)_\Gamma + (0\bar{1}0)_\Gamma + (001)_\Gamma + (00\bar{1})_\Gamma \sim 1;$$

$$\Gamma_{12} : \begin{cases} (100)_\Gamma + (\bar{1}00)_\Gamma - (010)_\Gamma - (0\bar{1}0)_\Gamma \sim x^2 - y^2, \\ (100)_\Gamma + (\bar{1}00)_\Gamma + (010)_\Gamma + (0\bar{1}0)_\Gamma - 2(001)_\Gamma \\ - 2(00\bar{1})_\Gamma \sim x^2 + y^2 - 2z^2; \end{cases}$$

$$\Gamma_{15} : \begin{cases} (100)_\Gamma - (\bar{1}00)_\Gamma \sim x, \\ (010)_\Gamma - (0\bar{1}0)_\Gamma \sim y, \\ (001)_\Gamma - (00\bar{1})_\Gamma \sim z. \end{cases}$$

جدول ۸-۸ مشخصه‌های نمایش‌های O_h که توسط پنج مجموعه اول جدول (۷-۸) ایجاد می‌شوند و کاهش آنها.

نمایش	E	$6C_4$	$3C_4^2$	$6C_2$	$8C_3$	J	$6JC_4$	$3JC_4^2$	$6JC_2$	$8JC_3$	مجموعه
Γ_1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	$\{000\}_\Gamma$
$\Gamma_1 \oplus \Gamma_{12} \oplus \Gamma_{15}$	6	2	2	0	0	0	0	4	2	0	$\{100\}_\Gamma$
$\Gamma_1 \oplus \Gamma_{12} \oplus \Gamma_{15} \oplus \Gamma_{25} \oplus \Gamma_{25'}$	12	0	0	2	0	0	0	4	2	0	$\{110\}_\Gamma$
$\Gamma_1 \oplus \Gamma_{25} \oplus \Gamma_{15} \oplus \Gamma_{25'}$	8	0	0	0	2	0	0	0	4	0	$\{111\}_\Gamma$
$\Gamma_1 \oplus \Gamma_{12} \oplus \Gamma_{15}$	6	2	2	0	0	0	0	4	2	0	$\{200\}_\Gamma$

در این صورت اگر تابع موج را نه برحسب امواج تخت بلکه برحسب امواج تخت متقارن شده بسط دهیم، خود بخود عمل قطری کردن بلوکه مطلوب حاصل می‌شود. اگر اینها را در نمادگذاری فصل ۳ و ۵ توسط ψ_{pm}^α بیان کنیم، می‌توانیم تابع موج را به صورت زیر بنویسیم:

$$\phi_k(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha, p, m} a_{\alpha pm} \psi_{pm}^\alpha. \quad (71-8)$$

با به کار بردن این بسط در معادله شرودینگر (۱-۸)، داریم:

$$[\mathcal{H}_0 - E + V(\mathbf{r})] \sum_{\alpha, p, m} a_{\alpha pm} \psi_{pm}^\alpha = 0, \quad (72-8)$$

که در آن \mathcal{H}_0 معرف عملگر انرژی جنبشی است. با ضرب اسکالر این معادله در یک موج تخت متقارن شده ψ_{qn}^β و توجه به این که \mathcal{H}_0 و E تحت O_h تغییرناپذیرند،

$$(\psi_{qn}^\beta, \sum_{\alpha, p, m} a_{\alpha pm} [\mathcal{H}_0 - E + V(\mathbf{r})] \psi_{pm}^\alpha) = 0, \quad \text{داریم:}$$

یا:

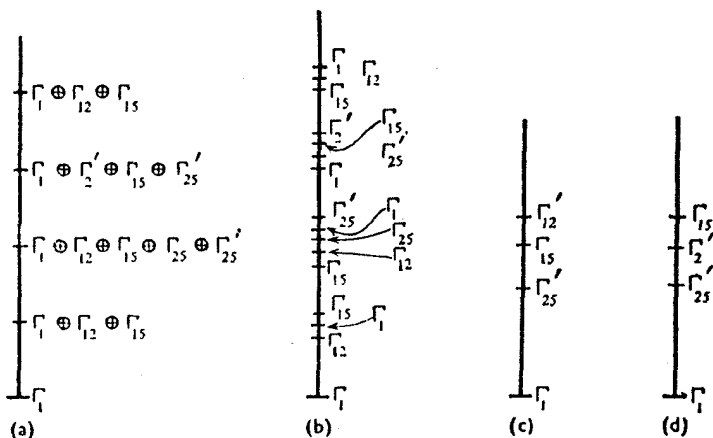
$$\sum_p a_{\beta pn} (\psi_{qn}^\beta, [\mathcal{H}_0 - E + V(\mathbf{r})] \psi_{pn}^\beta) = 0, \quad (73-8)$$

که به ازای تمام β ها، q ها و n ها برقرار است. این نیز یک مجموعه معادلات همگن خطی از ضرایب مجهول $a_{\beta pn}$ می‌باشد و ویژه مقدار E و ضرایب $a_{\beta pn}$ را می‌توان با حل دترمینان عناصر $(\psi_{qn}^\beta, [\mathcal{H}_0 - E + V(\mathbf{r})] \psi_{pn}^\beta)$ به دست آورد. اما اختلاف عمده در این است که، مرتبه این دترمینان بطور قابل ملاحظه‌ای کوچکتر است برای مقادیر ثابت β و n ، برابر است با تعداد مقادیر p (یا q).

حال به مثالی که آغاز کردیم، برمی گردیم. از جدول (۸-۸) ملاحظه می کنیم که نمایش Γ_1 پنج بار در طرح واقع شده است. بنابراین، $1 \leq p \leq 5$ و دترمینانی که باید حل شود یک دترمینان 5×5 است که پنج ویژه مقدار متناظر با Γ_1 را می دهد. نمایشهای Γ_2' و Γ_{25}' هر کدام تنها یک مرتبه رخ می دهد. این نمایشهای بلوکهای متناظر 1×1 را می دهند که خودشان ویژه مقادیرها نیز می باشند. نمایش Γ_{25}' دو مرتبه واقع می شود و یک نمایش سه بعدی است. متناظر با سه ستون Γ_{25}' ($n = 1, 2, 3; p, q = 1, 2$) سه دترمینان 2×2 داریم. با حل هر یک از این دترمینانها، دو ویژه مقدار به دست می آوریم که هر کدام سه بار تبهگن است. نمایش Γ_{12} سه مرتبه واقع می شود و دو بعدی است. متناظر با دو ستون Γ_{12} ($n = 1, 2; p, q = 1, 2, 3$) دو دترمینان 3×3 داریم. اما کافی است فقط یکی از آنها را حل کنیم تا سه ویژه مقدار به دست آوریم که هر کدام دو بار تبهگن اند. بالاخره، Γ_{15} چهار مرتبه واقع می شود بنابراین سه دترمینان 4×4 داریم که تنها یکی از آنها را می توان حل کرد تا چهار ویژه مقدار سه بار تبهگن به دست آورد.

بدین ترتیب مسأله حل یک دترمینان 33×33 به حل دو دترمینان یک بعدی و دترمینانهایی از مرتبه ۲، ۳، ۴ و ۵ تبدیل شده است. نتیجه عبارت است از ۳۳ تراز انرژی الکترونی در $\vec{k} = 0$. مجموعه های اضافی دیگر از امواج تخت را می توان به آسانی وارد کرد و همگرایی ویژه مقادیرها را مورد مطالعه قرار داد بدون این که در عملیات افزایش زیادی به وجود آید. انتقال از مورد تقریب الکترون آزاد به مورد مدل الکترون تقریباً آزاد در شکل (۸-۱۴) بطور شماتیک نشان داده شده است. همان طوری که در این کتاب تأکید کردیم، نظریه گروهها تنها شکافتگی تبهگنیها را می دهد. ترتیب دقیق ترازها به پتانسیل مسأله بستگی دارد و با حل معادله مفسر باید به دست آید. ممکن است که یک پتانسیل «قوی» تأثیری جدی در ترتیب ترازها داشته باشد، نظیر آنچه در شکلهای (۸-۱۴ ج) و (۸-۱۴ د) برای Si و Ge نشان داده شده است. در مورد Si ترتیب ترازها عبارت است از: $\Gamma_1, \Gamma_{25}', \Gamma_{12}', \Gamma_{15}, \Gamma_{25}', \Gamma_1, \Gamma_1, \Gamma_{25}, \Gamma_2', \Gamma_{25}'$ ، ... در حالی که برای Ge، ترتیب به صورت $\Gamma_1, \Gamma_{25}', \Gamma_{12}', \Gamma_{15}, \Gamma_{25}', \Gamma_1, \Gamma_1, \Gamma_{25}, \Gamma_2', \Gamma_{25}'$ ، ... می باشد.

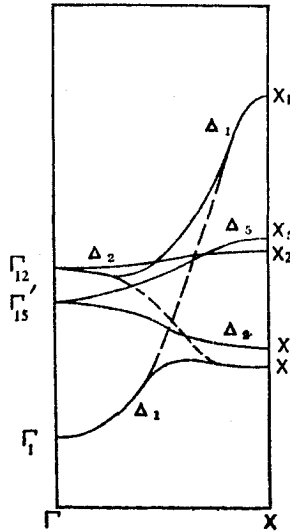
در هر نقطه دیگر از منطقه بریلوئن با تقارنی کمتر از تقارن مکعبی کامل، کاهش



شکل ۸-۱۴ تبهگنی بالای ترازهای الکترونی در مدل الکترون آزاد (الف) تحت تأثیر یک پتانسیل تناوبی شکافته می شود. (ب) (شماتیک)؛ (ج) و (د) چند تراز اول در $\vec{k} = 0$ را به ترتیب برای Si و Ge نشان می دهند (مقیاس رعایت نشده است).

معادله مفسر چندان موثر نیست. لذا با وجودی که اصولاً روش همان است ولی عملیات بیشتر می شود. به عنوان مثال، گروه بردار موجی در طول خط Δ ، C_{4v} است که دارای نمایشهای کاهش ناپذیر یک و دو بعدی است. باز هم می توانیم یک تعداد امواج تخت به شکل $\exp(i(\vec{k} - \vec{G}) \cdot \vec{r})$ در نظر بگیریم و ترکیبات مقارن شده مناسبی که بر طبق نمایشهای کاهش ناپذیر C_{4v} تبدیل می شوند به دست آوریم و دترمینان مفسر را حل کنیم. لیکن، در حالت کلی، ابعاد بلوکها از ابعاد در Γ بیشتر خواهد بود. در یک نقطه عمومی که گروه بردار موجی تنها عنصر همانی است، باید دترمینان کامل را، بدون این که آن را تجزیه کنیم (در مثال بالا دترمینان 33×33) حل کنیم. به عبارت دیگر هرچه گروه بردار موجی بزرگتر باشد، دقت ویژه مقادارها بیشتر خواهد بود. بطور آشکار یافتن ویژه مقادارها در نقاط تقارنی و در طول خطوط تقارنی در منطقه بریلوئن آسانتر است.

یک اثر پتانسیل بلور روی نوارهای انرژی، که در ابتدای این بخش تذکر دادیم، هیبریدشدگی نوارهایی است که تقارن یکسانی دارند. در مدل الکترون آزاد، نوارهایی که دارای یک تقارن هستند ممکن است یکدیگر را قطع کنند. بدین ترتیب، در امتداد خط ΓX



شکل ۸-۱۵ ساختار نواری مس در طول LX که هیبریدشدگی دو نواری را که دارای تقارن Δ_1 می باشد نشان می دهد، منحنیهای نقطه چین نواریهای فرضی است که در غیاب هیبریدشدگی وجود دارند.

در شکل (۸-۱۳) تعدادی تقاطع نواریهای تقارنی Δ_1 وجود دارد. با وارد کردن پتانسیل تناوبی، چنین تبهگنیهایی بر طرف می شود و نواریهای جدیدی به دست می آوریم.

به عنوان مثال دو نواری با تقارنهای Δ_1 و $\Delta_2 \oplus \Delta_3$ در ناحیه $1 < E \leq 2$

در شکل (۸-۹) را در نظر بگیرید. موج تختی که اوکین این نواریها را ایجاد می کند عبارت است از: $\Delta = \exp(i(k_x + 1)x)$ درحالی که نواری دیگر توسط چهار موج تخت $\Delta(10\bar{1})$ ، $\Delta(101)$ ، $\Delta(1\bar{1}0)$ ، $\Delta(110)$ ایجاد می گردد. ترکیب خطی اینها که برطبق Δ_1 تبدیل می شود مجموع چهار موج تختی است که موج زیر را می دهد $\exp(i k_x x)(\cos y + \cos z)$

این دو تابع مقارن شده بر طبق Δ_1 تبدیل می شوند و در مدل الکترون آزاد، در $k = \frac{1}{4}$ با $E = \frac{25}{16}$ تبهگن اند. وقتی پتانسیل بلور را منظور کنیم عناصر ماتریسی پتانسیل بین این توابع که دارای تقارن یکسان می باشند، غیر صفر خواهد بود و جوابها ریشه های بلوکهای متناظر در معادله مفسر خواهند بود. این بدان معنی است که برای ساختن ویژه تابعهای صحیح باید از ترکیبات خطی تمام توابع ممکن که دارای تقارن یکسان

می باشند استفاده کرد. این پدیده به هیبریدشدگی موسوم است و دارای این اثر است که تبهگنی بین نوارهایی را که دارای یک تقارن هستند برطرف می کند. شکل (۸-۱۵) نوارهای انرژی مس (ساختار fcc) در طول ΓX را که توسط سگال^۷ بدست آمده، نشان می دهد. هیبریدشدگی دو نوار با تقارن Δ_1 باید روشن باشد. از این رو، این را که، نوارهای با تقارن یکسان یکدیگر را قطع نمی کنند، به عنوان یک قاعده کلی در نظر می گیریم.

مسائل فصل هشتم

- ۱-۸. نشان دهید سلول ویگنر-سیتز دارای تقارن کامل گروه نقطه ای شبکه است.
- ۲-۸. نشان دهید که اگر گروه یک بردار معین \vec{k} ، K باشد. گروه هر بردار دیگر در ستاره \vec{k} نیز K خواهد بود.
- ۳-۸. روابط سازگاری نمایش دو مقداری گروه مکعبی O بین نقاط Γ و خطوط Δ ، Σ و Λ را به دست آورید.
- ۴-۸. روابط سازگاری داده شده در جدولهای (۴-۸)، (۵-۸) و (۶-۸) را ثابت کنید.
- ۵-۸. نوارهای انرژی الکترون آزاد شبکه های bcc و fcc نشان داده شده در شکل های (۸-۱۱) و (۸-۱۳) را به دست آورید و نمادگذاری نوارهای مختلف را ثابت کنید.
- ۶-۸. جدولهایی نظیر جدول (۳-۸) برای شبکه های bcc و fcc، با ردیف کردن گروههای بردار موجی در نقاط خاص مختلف و روی خطوط و صفحات تقارن در نواحی بریلوئن مربوطه، تشکیل دهید. نتیجه را با گروههای بردار موجی مندرج در جدولهای (۵-۸) و (۶-۸) مقایسه کنید.
- ۷-۸. گروههای بردار موجی برای شبکه fcc را در نقاط زیر تعیین کنید:

(الف) U، (ب) K، یک نقطه عمومی، (ج) WK، (د) UL، (ه) WU، (و)

KL. روابط سازگاری بین نمایشهای مربوط به W و یک نقطه عمومی در امتداد WU را به دست آورید.

۸-۸. گروههای بردار موجی شبکه bcc را برای یک نقطه عمومی روی صفحات $\Gamma X P$ ، $\Gamma H N$ ، و $\Gamma N P$ ، به دست آورید. همین کار را برای یک شبکه مکعبی ساده برای نقطه ای روی صفحات $\Gamma X M$ ، $\Gamma M R$ ، $\Gamma X R$ ، و $M X R$ انجام دهید.

۹-۸. نوارهای انرژی الکترون آزاد برای یک شبکه مستطیلی دو بعدی و یک شبکه شش وجهی را در امتداد خطوط مختلف تقارن آنها در الگوی ناحیه کاهش یافته به دست آورید. نمادهای نوارهای مختلف را پیدا کنید.

۱۰-۸. نوارهای انرژی الکترون آزاد برای یک شبکه مکعبی ساده در راستای ΓM ، MR ، XM و XR را رسم کنید و به وسیله نمایشهای کاهش ناپذیر مناسب نمادگذاری کنید. ثابت کنید روابط سازگاری جدول (۸-۴) برقرار است.

۱۱-۸. توضیح دهید چرا علی رغم این قاعده که نوارهای با تقارن یکسان یکدیگر را قطع نمی کنند، در مدل تک الکترونی بسیاری از نوارهایی دارای تقارن یکسانند، یکدیگر را قطع می کنند.

۱۲-۸. با ردیف کردن مجموعه های مختلف بردارهای شبکه معکوس، جدولهایی نظیر جدول (۸-۷) برای شبکه های bcc و fcc بسازید.

کتاب شناسی فصل هشتم

Azaroff (1960); Bell (1954); Bhagavantam (1966); Bhagavantam and Venkatarayudu (1969); Callaway (1964); Falicov (1967); Hamermesh (1964); Harrison (1970); Jones (1960); Kittel (1963); Koster (1957); Koster, Dimmock and Wheeler (1963); Loebl (1968); Mariot (1962); Meijer and Bauer (1962); Nussbaum (1966); Slater (1965); Tinkham (1964).

ثابتهای کشسانی بلورها

انتظار داریم که خواننده این کتاب با بررسیهای مقدماتی خواص کشسانی بلورها آشنا باشد. استرس، که به صورت نیروی وارد بر واحد سطح یک جامد تعریف می شود، یک تانسور مرتبه دوم با نه مؤلفه است که مؤلفه هایش را با X_x, Y_y, Z_z, Y_z, Z_x ، Z_y, Y_x, X_y و X_z نشان می دهیم. سه مؤلفه اول مؤلفه های استرس تنش است درحالی که شش مؤلفه آخر معرف استرس چینش می باشد. نمادگذاری طوری است که حروف بزرگ معرف جهت نیرو است درحالی که اندیسهای پایین عمود بر سطحی را که نیرو بر آن وارد می شود، نشان می دهند. بنابراین، به عنوان مثال، Y_z معرف مؤلفه نیرویی است که در امتداد محور y ها بر واحد سطح جامد عمود بر راستای z وارد می شود. وقتی جامد در تعادل استاتیکی است (یعنی نیرو یا گشتاور خالصی بر آن وارد نمی شود)، می توان نشان داد که تانسور استرس، متقارن است، یعنی:

$$X_y = Y_x, Y_z = Z_y, Z_x = X_z \quad (\text{الف - ۱})$$

بدین ترتیب تنها شش مؤلفه تانسور کشسان مستقل داریم.

بطور مشابه، تانسور کشیدگی یک تانسور متقارن مرتبه دوم است با شش مؤلفه مستقل بدون بعد $e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{yz}, e_{zy}, e_{zx}, e_{xy}$ ، $e_{xy} = e_{yx}$ ، $e_{zx} = e_{xz}$ ، $e_{yz} = e_{zy}$ ، e_{zz} ، e_{yy} ، e_{xx} . حال مؤلفه های استرس و کشیدگی را توسط بردارهای ستونی شش بعدی زیر نمایش می دهیم:

$$X \equiv \{e_{xx}, e_{yy}, e_{zz}, e_{yz}, e_{zx}, e_{xy}\}, \quad (\text{الف - ۲})$$

$$X \equiv \{X_x, Y_y, Z_z, Y_z, Z_x, X_y\},$$

که در آنها از آگولاد برای نشان دادن بردار ستونی استفاده کرده ایم. تا مرتبه اول استرسها و کشیدگیها، قانون هوك برقرار است و مؤلفه ها بطور خطی به یکدیگر وابسته اند. این برای تغییر شکلهای کوچک تقریب خوبی است و می توانیم رابطه علت و معلولی را به صورت زیر بنویسیم:

$$x = SX, X = Cx, \quad (\text{الف} - ۳)$$

که در آن S و C ماتریسهای مربعی^۱ از مرتبه شش می باشند و بدیهی است که C معکوس S است. عناصر S_{ij} ($1 \leq i, j \leq 6$) ماتریس S ثابتهای پذیرش الاستیک یا پذیرشهای الاستیک نامیده می شوند و عناصر C_{ij} ماتریس C به ثابتهای سختی الاستیک موسومند. بطور کلی این دو نوع عناصر را ثابتهای کشسانی جامد می نامیم. گرچه در (الف - ۳) تعداد ۳۶ ثابت کشسانی وجود دارد ولی می توان آنها را به گونه ای انتخاب کرد که متقارن باشند به قسمی که $C_{ij} = C_{ji}$ ($S_{ij} = S_{ji}$). این عمل تعداد ثابتهای کشسانی مستقل را حتی برای یک سیستمی که اصلاً هیچ تقارنی ندارد، به ۲۱ کاهش می دهد. یک بلور با پایستترین تقارن ممکن (سیستم سه میلی) همه ۲۱ ثابت کشسانی مستقل را دارد.

اگر سیستم دارای تقارن بالاتری باشد، تعداد ثابتهای کشسانی مستقل باز هم کاهش می یابد. این نتیجه را می توان به شرح زیر استنتاج کرد. چگالی انرژی کشسانی یک جامد را می توان با ضرایبی که ثابتهای سختی کشسانی می باشند بر حسب یک تابع دو خطی از مؤلفه های کشیدگی بیان کرد:

$$U = \sum_{l=1}^6 \sum_{k=1}^l (1 - \frac{1}{2} \delta_{kl}) C_{kl} e_k e_l, \quad (\text{الف} - ۴)$$

در این رابطه اندیسهای پایین مؤلفه های کشیدگی را به صورت زیر نوشته ایم:

$$xx \equiv 1, yy \equiv 2, zz \equiv 3, yz \equiv 4, zx \equiv 5, xy \equiv 6 \quad (\text{الف} - ۵)$$

از این رو ماتریس عمومی به صورت زیر است:

۱ - توجه کنید که در واقع S و C تانسورهای مرتبه چهار می باشند زیرا یک تانسور مرتبه دوم را به

تانسور مرتبه دوم دیگر تبدیل می کنند.

$$\left[\begin{array}{cccccc} C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\ C_{12} & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\ C_{13} & C_{23} & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\ C_{14} & C_{24} & C_{34} & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\ C_{15} & C_{25} & C_{35} & C_{45} & C_{55} & C_{56} \\ C_{16} & C_{26} & C_{36} & C_{46} & C_{56} & C_{66} \end{array} \right] \quad (\text{الف-۶})$$

حال، چگالی انرژی کشسانی باید تحت هر تبدیل تقارنی بلور تغییرناپذیر بماند. به عنوان مثال اگر یک بلور مکعبی کشیده شده داشته باشیم، چگالی انرژی کشسانی آن نباید صرفاً با تبدیل محورهای x ، y و z به یکدیگر، تغییر کند. با ارائه یکی دو مثال بطور صریح نشان خواهیم داد که یک چنین شرطی روی چگالی انرژی کشسانی با شرایطی که روی ثابتهای کشسانی اعمال می شود و هم ارزند. نتیجه این است که بعضی از ضرایب صفر می شوند و بعضی از آنهايي که مخالف صفرند با یکدیگر برابر می شوند و در نتیجه ثابتهای کشسانی مستقل بطور قابل ملاحظه ای کاهش می یابد.

بلورهای مکعبی

بلورهای مکعبی با تقارن دورانی سه گانه حول هر یک از چهار قطر مکعب مشخص می شوند. اثر این دورانها روی مختصات دکارتی در جدول (الف-۱) آورده شده است.

جدول الف-۱ اثر دورانهای سه گانه حول قطرهای مکعب روی مختصات دکارتی.

تعداد	دوران در جهت عقربه های ساعت به اندازه $\frac{2\pi}{3}$ حول محور	اثر دوران
1	$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}$	$x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$
2	$\begin{bmatrix} 1 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 & \bar{1} \\ 1 & 1 & \bar{1} \end{bmatrix}$	$x \rightarrow -z \rightarrow y \rightarrow x$
3	$\begin{bmatrix} 1 & \bar{1} & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \\ 1 & \bar{1} & 1 \end{bmatrix}$	$x \rightarrow z \rightarrow -y \rightarrow x$
4	$\begin{bmatrix} \bar{1} & 1 & 1 \\ \bar{1} & 1 & 1 \\ \bar{1} & 1 & 1 \end{bmatrix}$	$x \rightarrow -z \rightarrow -y \rightarrow x$

عمل اول جدول (الف - ۱) روی بلور را در نظر بگیرید، چگالی انرژی کشسانی

(الف - ۴) برابر است با:

$$U = \frac{1}{2} C_{11} e_{yy}^2 + C_{12} e_{yy} e_{zz} + C_{13} e_{yy} e_{xx} + C_{14} e_{yy} e_{zx} + C_{15} e_{yy} e_{xy} \\ + C_{16} e_{yy} e_{yz} + \frac{1}{2} C_{22} e_{zz}^2 + C_{23} e_{zz} e_{xx} + C_{24} e_{zz} e_{zx} + C_{25} e_{zz} e_{xy} \\ + C_{26} e_{zz} e_{yz} + \frac{1}{2} C_{33} e_{xx}^2 + C_{34} e_{xx} e_{zx} + C_{35} e_{xx} e_{xy} + C_{36} e_{xx} e_{yz} \quad (\text{الف - ۷}) \\ + \frac{1}{2} C_{44} e_{zx}^2 + C_{45} e_{zx} e_{xy} + C_{46} e_{zx} e_{yz} + \frac{1}{2} C_{55} e_{xy}^2 \\ + C_{56} e_{xy} e_{yz} + \frac{1}{2} C_{66} e_{yz}^2.$$

اگر چگالی انرژی کشسانی بخواهد تحت یک چنین تبدیلی تغییر نپذیرد، لازم

است که (الف - ۷) به ازای تمام مقادیر مؤلفه‌های کشیدگی با (الف - ۴) متحد باشد. این

زمانی امکان پذیر است که ضرایب جملات نظیر در (الف - ۴) و (الف - ۷) با یکدیگر

مساوی باشند. با مقایسه (الف - ۴) و (الف - ۷) و به خاطر داشتن این که $e_{xy} = e_{yx}$ و

غیره، داریم:

$$C_{11} = C_{22} = C_{33}, \quad C_{12} = C_{23} = C_{13}, \quad C_{14} = C_{25} = C_{36}, \\ C_{15} = C_{26} = C_{34}, \quad C_{16} = C_{24} = C_{35}, \quad C_{44} = C_{55} = C_{66}, \quad (\text{الف - ۸}) \\ C_{45} = C_{56} = C_{46}.$$

بدین ترتیب یک تبدیل تقارنی تعداد ثابتهای کشسانی مستقل را از ۲۱ به ۷ کاهش داده

است. در این صورت چگالی انرژی کشسانی به صورت زیر درمی آید:

$$U = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + C_{12} (e_{xx} e_{yy} + e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx}) \\ + C_{14} (e_{xx} e_{yz} + e_{yy} e_{zx} + e_{zz} e_{xy}) + C_{15} (e_{xx} e_{zx} + e_{yy} e_{xy} \\ + e_{zz} e_{yz}) + C_{16} (e_{xx} e_{xy} + e_{yy} e_{yz} + e_{zz} e_{zx}) + \frac{1}{2} C_{11} (e_{yz}^2 \\ + e_{zx}^2 + e_{xy}^2) + C_{45} (e_{yz} e_{zx} + e_{zx} e_{xy} + e_{xy} e_{yz}). \quad (\text{الف - ۹})$$

حال یک تبدیل دیگر، مثلاً تبدیل دوم در جدول (الف - ۱) را در نظر بگیرید. توجه

کنید که بنابه تعریف مؤلفه‌های کشیدگی $e_{y(-z)} = e_{(-y)z} = -e_{yz}$ ، $e_{(-y)(-z)} = e_{yz}$ ، غیره.

همان روش را ادامه می دهیم، یعنی اثر تبدیل روی چگالی انرژی کشسانی (الف - ۹)

را پیدا می کنیم و ضرایب جملات نظیر (الف - ۹) را با جملات عبارت جدید مساوی قرار

می دهیم نتیجه می شود که:

$$C_{14} = -C_{14}, C_{15} = -C_{15}, C_{16} = -C_{16}, C_{45} = -C_{45}, \quad (\text{الف-۱۰})$$

این امر باعث می‌شود که چگالی انرژی کشسانی به صورت زیر درآید:

$$U = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2 + e_{zz}^2) + C_{12} (e_{xx} e_{yy} + e_{yy} e_{zz} + e_{zz} e_{xx}) + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2 + e_{xy}^2). \quad (\text{الف-۱۱})$$

بقیه عملیات آورده شده در جدول (الف-۱) یا، در واقع، سایر عملیات گروه نقطه‌ای O_h چگالی انرژی (الف-۱۱) را تغییر نمی‌دهد و از این رو کاهش دیگری رخ نمی‌دهد. این نشان می‌دهد که بلورهای مکعبی تنها سه ثابت کشسانی مستقل دارند، که بطور قراردادی C_{11} ، C_{12} و C_{44} انتخاب می‌شوند. با استفاده از روابط (الف-۸) و (الف-۱۰) ماتریس (الف-۶)، حاصل از ضرایب کشسانی، به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{12} & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} \end{bmatrix} \quad (\text{الف-۱۲})$$

ترجیح کنید که تنها از تغییر ناپذیری چگالی انرژی کشسانی تحت دورانهای سه گانه حول قطرهای مکعب استفاده کرده ایم، بدون این که به تقارن چهارگانه حول محورهای مختصات اشاره کرده باشیم. بنابراین نتیجه بالا برای هر بلور مکعبی که گروه نقطه‌ای اش یکی از پنج گروه نقطه‌ای T ، T_d ، T_h و O_h باشد، معتبر است. می‌توانستیم همان نتیجه را با اعمال تبدیلات مختلف روی خود رابطه استرس-کشیدگی به دست آوریم، بدون این که به چگالی انرژی کشسانی بپردازیم. برای نشان دادن این نکته معادلات (الف-۳) را بطور کامل می‌نویسیم:

$$\begin{aligned} X_x &= C_{11} e_{xx} + C_{12} e_{yy} + C_{13} e_{zz} + C_{14} e_{yz} + C_{15} e_{zx} + C_{16} e_{xy}, \\ Y_y &= C_{12} e_{xx} + C_{22} e_{yy} + C_{23} e_{zz} + C_{24} e_{yz} + C_{25} e_{zx} + C_{26} e_{xy}, \\ Z_z &= C_{13} e_{xx} + C_{23} e_{yy} + C_{33} e_{zz} + C_{34} e_{yz} + C_{35} e_{zx} + C_{36} e_{xy}, \\ Y_x &= C_{14} e_{xx} + C_{24} e_{yy} + C_{34} e_{zz} + C_{44} e_{yz} + C_{45} e_{zx} + C_{46} e_{xy}, \\ Z_x &= C_{15} e_{xx} + C_{25} e_{yy} + C_{35} e_{zz} + C_{45} e_{yz} + C_{55} e_{zx} + C_{56} e_{xy}, \\ X_y &= C_{16} e_{xx} + C_{26} e_{yy} + C_{36} e_{zz} + C_{46} e_{yz} + C_{56} e_{zx} + C_{66} e_{xy}. \end{aligned} \quad (\text{الف-۱۳})$$

اکنون تبدیل اول ($x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$) جدول (الف - ۱) را روی معادلات بالا اعمال می‌کنیم. این عمل، معادلات را به شکل زیر درمی‌آورد:

$$\begin{aligned} Y_y &= C_{11} e_{yy} + C_{12} e_{zz} + C_{13} e_{xx} + C_{14} e_{zx} + C_{15} e_{xy} + C_{16} e_{yz}, \\ Z_z &= C_{12} e_{yy} + C_{22} e_{zz} + C_{23} e_{xx} + C_{24} e_{zx} + C_{25} e_{xy} + C_{26} e_{yz}, \\ X_x &= C_{13} e_{yy} + C_{23} e_{zz} + C_{33} e_{xx} + C_{34} e_{zx} + C_{35} e_{xy} + C_{36} e_{yz}, \\ Z_x &= C_{14} e_{yy} + C_{24} e_{zz} + C_{34} e_{xx} + C_{44} e_{zx} + C_{45} e_{xy} + C_{46} e_{yz}, \\ X_y &= C_{15} e_{yy} + C_{25} e_{zz} + C_{35} e_{xx} + C_{45} e_{zx} + C_{55} e_{xy} + C_{56} e_{yz}, \\ Y_z &= C_{16} e_{yy} + C_{26} e_{zz} + C_{36} e_{xx} + C_{46} e_{zx} + C_{56} e_{xy} + C_{66} e_{yz}. \end{aligned} \quad (\text{الف-۱۴})$$

با مقایسه این معادلات با معادلات (الف - ۱۳) و مساوی قرار دادن ضرایب جملات نظیر، همان شرایط (الف - ۸) را به دست می‌آوریم. بطور مشابه، با اعمال تبدیل دوم جدول (الف - ۱) و استفاده از تغییر ناپذیری رابطه استرس - کشیدگی، شرایط (الف - ۱۰) را به دست می‌آوریم. در موقوع به کار بردن این تبدیلات باید از این واقعیت که مؤلفه‌های کشیدگی مانند مؤلفه‌های استرس در روابط $(-X)(y) = X_y$ ، $X(-y) = (-X)(y) = -(X_y)$ و غیره صدق می‌کنند، استفاده کنیم. بالاخره بر ماتریس ثابتهای کشسانی به همان شکل (الف - ۱۲) می‌رسیم.

بلورهای چهار وجهی

بلورهای چهار وجهی توسط روابط $a_1 = a_2 \neq a_3$ و $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$ مشخص می‌شوند. گروه تقارنی نقطه‌ای شبکه D_{4h} است. محورهای x و y را به ترتیب در امتداد a_1 و a_2 و محور z را در امتداد a_3 انتخاب می‌کنیم بطوری که شبکه دارای تقارن چهارگانه حول محور z باشد. دوران 90° حول محور z باعث تبدیل $x \rightarrow y \rightarrow -x$ ، $z \rightarrow z$ می‌شود. با اعمال این عمل روی چگالی انرژی کشسانی (الف - ۴) و مساوی قرار دادن ضرایب جملات نظیر در (الف - ۴) و رابطه تبدیل یافته، شرایط زیر را برای ثابتهای کشسانی پیدا می‌کنیم:

$$\begin{aligned} C_{11} &= C_{22}, \quad C_{44} = C_{55}, \quad C_{13} = C_{23}, \quad C_{16} = -C_{26}, \quad C_{34} = -C_{35}, \\ C_{14} &= C_{25}, \quad C_{15} = C_{24} = C_{36} = C_{45} = C_{46} = C_{56} = 0. \end{aligned} \quad (\text{الف-۱۵})$$

این امر باعث می‌شود که تعداد ثابتهای کشسانی مستقل به ۸ کاهش یابد و چگالی انرژی کشسانی به صورت زیر درآید:

$$U = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2) + \frac{1}{2} C_{33} e_{zz}^2 + C_{12} e_{xx} e_{yy} + C_{13} (e_{xx} + e_{yy}) e_{zz} + C_{14} (e_{xx} - e_{yy}) e_{xy} + C_{34} (e_{yz} - e_{zx}) e_{zz} + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2) + \frac{1}{2} C_{66} e_{xy}^2. \quad (\text{الف-۱۶})$$

گروه D_{4h} همچنین شامل یک تقارن دوگانه حول محور x یا y نیز می‌باشد. دوران π حول محور x را که دارای اثر $x \rightarrow x, y \rightarrow -y, z \rightarrow -z$ باشد، در نظر بگیرد. با اعمال این، روی چگالی انرژی (الف-۱۶) ملاحظه می‌کنیم که تمام جملات بجز دو جمله‌ای که شامل ضرایب C_{16} و C_{34} می‌باشند، تغییرناپذیر می‌مانند. در این صورت شکل نهائی چگالی انرژی عبارت است از:

$$U = \frac{1}{2} C_{11} (e_{xx}^2 + e_{yy}^2) + \frac{1}{2} C_{33} e_{zz}^2 + C_{12} e_{xx} e_{yy} + C_{13} (e_{xx} + e_{yy}) e_{zz} + \frac{1}{2} C_{44} (e_{yz}^2 + e_{zx}^2) + \frac{1}{2} C_{66} e_{xy}^2. \quad (\text{الف-۱۷})$$

مشاهده می‌شود که هر تبدیل دیگر D_{4h} شکل دو خطی (الف-۱۷) را بدون تغییر می‌گذارد. بطوری که ساده‌سازی بیشتری وجود ندارد. بنابراین بلور چهار وجهی دارای شش ثابت کشسانی مستقل می‌باشد و ماتریس ثابتهای کشسانی به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{bmatrix} C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{12} & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\ C_{13} & C_{13} & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C_{44} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & C_{66} \end{bmatrix} \quad (\text{الف-۱۸})$$

شکل ماتریسهای ثابتهای کشسانی برای سیستمهای بلوری مختلف در زیر آورده شده است.^۲ چون ماتریس متقارن است، فقط ضرایب یک طرف قطر اصلی نشان داده شده است.

۱- سیستم سه میلی با ۲۱ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & C_{16} \\
 & C_{22} & C_{23} & C_{24} & C_{25} & C_{26} \\
 & & C_{33} & C_{34} & C_{35} & C_{36} \\
 & & & C_{44} & C_{45} & C_{46} \\
 & & & & C_{55} & C_{56} \\
 & & & & & C_{66}
 \end{array}$$

۲- سیستم تک میلی با ۱۳ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\
 & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & C_{26} \\
 & & C_{33} & 0 & 0 & C_{36} \\
 & & & C_{44} & C_{45} & 0 \\
 & & & & C_{55} & 0 \\
 & & & & & C_{66}
 \end{array}$$

۳- سیستم راست گوشه با ۹ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 & C_{22} & C_{23} & 0 & 0 & 0 \\
 & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & C_{44} & 0 & 0 \\
 & & & & C_{55} & 0 \\
 & & & & & C_{66}
 \end{array}$$

۴- سیستم چهار گوشه :

(i) گروههای نقطه ای C_4 ، S_4 ، C_{4h} : با ۷ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & C_{16} \\
 & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & -C_{16} \\
 & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & C_{44} & 0 & 0 \\
 & & & & C_{44} & 0 \\
 & & & & & C_{66}
 \end{array}$$

(ii) گروه‌های نقطه‌ای D_{4h} ، D_4 ، D_{2d} ، C_{4v} با ۶ ثابت مستقل معادله (الف-۱۸) را ببینید.

۵- سیستم مثلثی:

(i) گروه‌های نقطه‌ای S_6 ، C_3 با ۷ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & C_{15} & 0 \\
 & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & -C_{15} & 0 \\
 & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & C_{44} & 0 & -C_{15} \\
 & & & & C_{14} & C_{11} \\
 & & & & & \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})
 \end{array}$$

(ii) گروه‌های نقطه‌ای D_{3d} ، D_3 ، C_{3v} با ۶ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & C_{14} & 0 & 0 \\
 & C_{11} & C_{13} & -C_{14} & 0 & 0 \\
 & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & C_{44} & 0 & 0 \\
 & & & & C_{44} & C_{14} \\
 & & & & & \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})
 \end{array}$$

۶- سیستم شش ضلعی با ۵ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 & C_{11} & C_{13} & 0 & 0 & 0 \\
 & & C_{33} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & C_{44} & 0 & 0 \\
 & & & & C_{44} & 0 \\
 & & & & & \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})
 \end{array}$$

۷- سیستم مکعبی با ۳ ثابت مستقل. معادله (الف-۱۲) را ببینید.

۸- محیط یکروند با ۲ ثابت مستقل.

$$\begin{array}{cccccc}
 C_{11} & C_{12} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 & C_{11} & C_{12} & 0 & 0 & 0 \\
 & & C_{11} & 0 & 0 & 0 \\
 & & & \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12}) & 0 & 0 \\
 & & & & \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12}) & 0 \\
 & & & & & \frac{1}{2}(C_{11}-C_{12})
 \end{array}$$

پیزو الکتریسته و خودگیری دی الکتریک

بعضی از بلورها دارای این ویژگی هستند که تحت اثر یک میدان الکتریکی خارجی، یک ممان دو قطبی الکتریکی تشکیل می دهند. بعضی از این بلورها دارای این ویژگی اضافی نیز هستند که تحت یک استرس مکانیکی حتی در غیاب میدان الکتریکی، یک ممان دو قطبی الکتریکی تشکیل می دهند. بلورهای نوع اخیر پیزو الکتریک نامیده می شوند و کورانتز نمونه عالی از یک چنین بلورهایی می باشد. نمونه های دیگر عبارتند از: نمک راشل ($\text{NaKC}_4\text{H}_4\text{O}_6 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$) و فرو الکتریکهایی از نوع KH_2PO_4 .

ممان دو قطبی الکتریکی یک نتیجه کشیدگی ایجاد شده در بلور توسط میدان الکتریکی خارجی است. از این رو کمیت های متعددی بهم مربوط می شوند. اگر قطبی شدن الکتریکی (ممان دو قطبی الکتریکی بر واحد حجم) را با P ، کشیدگی کشسانی را با x ، میدان الکتریکی اعمال شده را با E و استرس مکانیکی وارده را با X نشان دهیم، در این صورت هر دو متغیر از مجموعه (P, E, x, X) را می توان به عنوان متغیرهای مستقل و دو تای دیگر را به عنوان متغیرهای وابسته در نظر گرفت. برای میدانها و استرسهای پایین، قطبی شدن و کشیدگی به صورت خطی به E و X بستگی دارند^۱:

$$P = -dX + \chi E, \quad x = -S^E X + \tilde{\alpha} E. \quad (\text{ب-۱})$$

در این جا d تانسور ضریب کشیدگی پیزو الکتریک، X تانسور خودگیری دی الکتریک و S^E تانسور پذیرش الاستیک می باشد، اندیس E برای این به کار رفته است که نشان دهد

۱- باگاواتام (۱۹۶۶)، فصل چهاردهم؛ فاتوزو و مرز (۱۹۶۷)، صفحه ۴۴؛ کانتزیک (۱۹۵۷)،

پذیرشهای الاستیک به میدان الکتریکی بستگی دارند و باید در میدانهای الکتریکی ثابت تعیین شوند.

معادلات (ب-۱) به همان سادگی که به نظر می‌رسند نیستند. این به دلیل این است که میدان الکتریکی E و قطبی شدن الکتریکی P بردار می‌باشند، درحالی که استرس X و کشیدگی x تانسورهای مرتبه دوم می‌باشند. از این رو، نتیجه می‌شود که x یک تانسور مرتبه دوم (چون دو بردار را بهم مربوط می‌سازد)، d یک تانسور مرتبه سوم (چون یک بردار را به یک تانسور مرتبه دوم مربوط می‌سازد) و SE^E ، همان طوری که در ضمیمه الف مورد بحث قرار گرفت، یک تانسور مرتبه چهارم است. اما چون x و X به جای نه مؤلفه، تنها دارای شش مؤلفه مستقل می‌باشند، می‌توانیم آنها را به صورت بردارهای ستونی (ماتریسهای از مرتبه 6×1) بنویسیم، مانند آنچه در ضمیمه الف انجام دادیم. در این صورت چون E و P نیز بردارهای ستونی از مرتبه 3×1 می‌باشند، نتیجه می‌شود که مؤلفه‌های مستقل تانسور ضریب کشیدگی پیزو الکتریک d را می‌توان به صورت یک ماتریس 3×6 نوشت:

$$d = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & d_{13} & d_{14} & d_{15} & d_{16} \\ d_{21} & d_{22} & d_{23} & d_{24} & d_{25} & d_{26} \\ d_{31} & d_{32} & d_{33} & d_{34} & d_{35} & d_{36} \end{bmatrix}. \quad (\text{ب-}2)$$

بطور مشابه x یک ماتریس 3×3 و SE^E یک ماتریس 6×6 می‌باشد؛ \tilde{d} در (ب-۱) معرف ترانزاد ماتریس d است و از مرتبه 6×3 می‌باشد. بنابراین، معادله اول (ب-۱) را وقتی بطور صریح بنویسیم، به صورت زیر درمی‌آید:

$$\begin{aligned} P_x &= -d_{11}X_x - d_{12}Y_y - d_{13}Z_z - d_{14}Y_z - d_{15}Z_x - d_{16}X_y \\ &\quad + \chi_{11}E_x + \chi_{12}E_y + \chi_{13}E_z, \\ P_y &= -d_{21}X_x - d_{22}Y_y - d_{23}Z_z - d_{24}Y_z - d_{25}Z_x - d_{26}X_y \\ &\quad + \chi_{21}E_x + \chi_{22}E_y + \chi_{23}E_z, \\ P_z &= -d_{31}X_x - d_{32}Y_y - d_{33}Z_z - d_{34}Y_z - d_{35}Z_x - d_{36}X_y \\ &\quad + \chi_{31}E_x + \chi_{32}E_y + \chi_{33}E_z. \end{aligned} \quad (\text{ب-}3)$$

وقتی یک بلور دارای تقارن وارونی باشد، یک مورد عام جالب توجه حاصل می شود. قطبی شدن P یک بردار قطبی است و تحت وارونی به -P تبدیل می شود. اما استرس مکانیکی تحت عمل وارونی تغییرناپذیر است و لذا رابطه خطی بین P و X دلالت بر این دارد که برای بلورهایی که دارای یک مرکز تقارند، P باید متحد با صفر باشد. بدین ترتیب به این نتیجه می رسیم که بلورهایی که دارای تقارن وارونی هستند نمی توانند پیزوالکتریک باشند. این امر باعث می شود که ۱۲ گروه نقطه ای طرد شوند و تنها ۲۰ گروه نقطه ای به عنوان گروههای نقطه ای ممکن بلورهای پیزوالکتریک باقی بمانند. برای یکی دو مورد بطور صریح ضرایب کشیدگی غیر صفر پیزوالکتریک را محاسبه خواهیم کرد.

بلورهای مکعبی (گروههای نقطه ای T و T_d)

بلورهایی که دارای گروههای O_h و O، T_h می باشند تحت وارونی تغییرناپذیرند و از بحث پاراگراف گذشته نتیجه می شود که برای بلورهایی که دارای گروههای نقطه ای T_h، O_h و T می باشند، داریم: $d_{ij} = 0$ ($1 \leq j \leq 6$ ، $1 \leq i \leq 3$) بنابراین دو گروه مکعبی T و T_d باقی می ماند.

با اعمال دوران سه گانه $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$ به معادلات (ب-۳) معادلات زیر به دست می آید (کافی است فقط دو معادله از سه معادله را در نظر بگیریم):

$$\begin{aligned} P_y &= -d_{11}Y_y - d_{12}Z_z - d_{13}X_x - d_{14}Z_x - d_{15}X_y - d_{16}Y_z \\ &\quad + \chi_{11}E_y + \chi_{12}E_z + \chi_{13}E_x, \\ P_z &= -d_{21}Y_y - d_{22}Z_z - d_{23}X_x - d_{24}Z_x - d_{25}X_y - d_{26}Y_z \\ &\quad + \chi_{21}E_y + \chi_{22}E_z + \chi_{23}E_x. \end{aligned} \quad (\text{ب-۴})$$

با مقایسه این دو معادله به ترتیب با معادلات دوم و سوم (ب-۳)، شرایط زیر به دست می آید:

$$\begin{aligned} d_{-1} &= d_{22} = d_{33}, \quad d_{12} = d_{23} = d_{31}, \quad d_{13} = d_{21} = d_{32}, \\ d_{14} &= d_{25} = d_{36}, \quad d_{15} = d_{26} = d_{34}, \quad d_{16} = d_{24} = d_{35}, \\ \chi_{11} &= \chi_{22} = \chi_{33}, \quad \chi_{12} = \chi_{23} = \chi_{31}, \quad \chi_{13} = \chi_{21} = \chi_{32}. \end{aligned} \quad (\text{ب-۵})$$

سپس دوران سه گانه $x \rightarrow -z \rightarrow y \rightarrow x$ را روی (ب-۳) اعمال می‌کنیم. با

در نظر داشتن این که E و P بردارهای قطبی هستند و از این رو $P_{(-x)} = -P_x$ و $E_{(-x)} = -E_x$ و غیره، معادلات زیر به دست می‌آید (باز هم فقط دو معادله نوشته شده است):

$$\begin{aligned} -P_z &= -d_{11}Z_z - d_{12}X_x - d_{13}Y_y + d_{14}X_y - d_{15}Y_z + d_{16}Z_x \\ &\quad -\chi_{11}E_x + \chi_{12}E_x - \chi_{13}E_y, \\ P_x &= -d_{21}Z_z - d_{22}X_x - d_{23}Y_y + d_{24}X_y - d_{25}Y_z + d_{26}Z_x \\ &\quad -\chi_{21}E_x + \chi_{22}E_x - \chi_{23}E_y. \end{aligned} \quad (\text{ب-۶})$$

بار دیگر، با مقایسه این معادلات به ترتیب با معادلات سوم و اول (ب-۳)، علاوه بر شرایط (ب-۵) شرایط زیر را به دست می‌آوریم:

$$\begin{aligned} d_{11} &= -d_{33}, \quad d_{12} = -d_{31}, \quad d_{13} = -d_{32}, \quad d_{15} = -d_{34}, \\ d_{24} &= -d_{16}, \quad \chi_{12} = -\chi_{31}, \quad \chi_{13} = -\chi_{21}. \end{aligned} \quad (\text{ب-۷})$$

این معادلات همراه با معادلات (ب-۵) باعث می‌شوند که تنها سه ضریب کشیدگی پیزو الکتریک مخالف صفر داشته باشیم که فقط یکی از آنها مستقل است ($d_{14} = d_{25} = d_{36}$) و سه مؤلفه خودگیری دی الکتریک مخالف صفر که باز هم فقط یکی از آنها مستقل است ($X_{11} = X_{22} = X_{33}$). از این رو برای بلورهای مکعبی که دارای گروه‌های نقطه ای T_d می‌باشند، داریم:

$$d = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & d_{14} \end{bmatrix}, \quad (\text{ب-۸ الف})$$

$$\chi = \begin{bmatrix} \chi_{11} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{11} & 0 \\ 0 & 0 & \chi_{11} \end{bmatrix}. \quad (\text{ب-۸ ب})$$

در این صورت معادلات (ب-۳) به صورت زیر درمی‌آیند:

$$\begin{aligned} P_x &= -d_{14}Y_z + \chi_{11}E_x, \\ P_y &= -d_{14}Z_x + \chi_{11}E_y, \\ P_z &= -d_{14}X_y + \chi_{11}E_z. \end{aligned} \quad (\text{ب-۹})$$

بلورهای چهار گوشه (گروه نقطه ای C_{4v})

بلورهای چهار گوشه می توانند یکی از هفت گروه نقطه ای C_4 ، S_4 ، C_{4h} ، D_{2d} ، C_{4v} ، D_4 و D_{4h} را داشته باشند. از این گروهها، C_{4h} و D_{4h} شامل تقارن وارونی می باشند و از این رو از رده های پیژوالکتریکی طرد می شوند. هر کدام از پنج گروه باقیمانده به یک مجموعه مختلف از ضرایب کشیدگی پیژوالکتریک مخالف صفر منجر می شوند. برای روشن شدن مطلب فقط به بررسی یک مورد می پردازیم - گروه C_{4v} .

مجموعه تقارن چهارگانه را محور Z ها انتخاب کنید. در این صورت یک دوران چهارگانه حول محور Z باعث تبدیل $Z \rightarrow Z$ ، $x \rightarrow y \rightarrow -x$ ، $y \rightarrow -y \rightarrow x$ می شود. با اعمال این تبدیل به معادلات (ب-۳) داریم:

$$\begin{aligned} P_y &= -d_{11}Y_y - d_{12}X_x - d_{13}Z_z + d_{14}X_z - d_{15}Z_y + d_{16}Y_x \\ &\quad + \chi_{11}E_y - \chi_{12}E_x + \chi_{13}E_z, \\ -P_x &= -d_{21}Y_y - d_{22}X_x - d_{23}Z_z + d_{24}X_z - d_{25}Z_y + d_{26}Y_x \\ &\quad + \chi_{21}E_y - \chi_{22}E_x + \chi_{23}E_z, \\ P_z &= -d_{31}Y_y - d_{32}X_x - d_{33}Z_z + d_{34}X_z - d_{35}Z_y + d_{36}Y_x \\ &\quad + \chi_{31}E_y - \chi_{32}E_x + \chi_{33}E_z. \end{aligned} \quad (\text{ب-۱۰})$$

با مقایسه این معادلات با (ب-۳) داریم:

$$\begin{aligned} d_{11} &= \pm d_{22} \equiv 0, \quad d_{12} = \pm d_{21} \equiv 0, \quad d_{13} = \pm d_{23} \equiv 0, \\ d_{16} &= \pm d_{26} \equiv 0, \quad d_{34} = \pm d_{35} \equiv 0, \quad \chi_{13} = \pm \chi_{23} \equiv 0, \\ \chi_{31} &= \pm \chi_{32} \equiv 0, \quad d_{36} = -d_{35} \equiv 0, \quad d_{14} = -d_{25}, \\ d_{15} &= d_{24}, \quad d_{31} = d_{32}, \quad \chi_{11} = \chi_{22}, \quad \chi_{12} = -\chi_{21}. \end{aligned} \quad (\text{ب-۱۱})$$

در این صورت معادلات (ب-۳) به صورت زیر درمی آید:

$$\begin{aligned} P_x &= -d_{14}Y_z - d_{15}Z_x + \chi_{11}E_x + \chi_{12}E_y, \\ P_y &= -d_{15}Y_z + d_{14}Z_x - \chi_{12}E_x + \chi_{11}E_y, \\ P_z &= -d_{31}X_x - d_{31}Y_y - d_{33}Z_z + \chi_{33}E_z. \end{aligned} \quad (\text{ب-۱۲})$$

حال به (ب-۱۲) یک انعکاس نسبت به صفحه XZ اعمال می کنیم که Y را به $-Y$ تبدیل می کند. مشاهده می کنیم که این امر باعث می شود دو تا از ضرایب فوق صفر شود:

$$d_{14}=0, X_{12}=0 \quad (\text{ب-۱۳})$$

سایر عملیات گروه C_{4v} کاهش بیشتری ایجاد نمی‌کنند. بنابراین، در یک بلور پیزو الکتریک چهار گوشه با گروه نقطه ای C_{4v} ، قطبی شدن الکتریکی توسط روابط زیر به استرس و میدان الکتریکی اعمال شده مربوط می‌شود:

$$\begin{aligned} P_x &= -d_{15}Z_x + X_{11}E_x, \\ P_y &= -d_{15}Y_z + X_{11}E_y, \\ P_z &= -d_{31}X_x - d_{31}Y_y - d_{33}Z_z + X_{33}E_z. \end{aligned} \quad (\text{ب-۱۴})$$

ماتریس ضریب کشیدگی پیزو الکتریک و ماتریس خودگیری دی الکتریک به صورت زیر درمی‌آیند:

$$d = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & d_{15} & 0 & 0 \\ d_{31} & d_{31} & d_{33} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{ب-۱۵ الف})$$

$$\chi = \begin{bmatrix} X_{11} & 0 & 0 \\ 0 & X_{11} & 0 \\ 0 & 0 & X_{33} \end{bmatrix}. \quad (\text{ب-۱۵ ب})$$

فهرست کامل از ضرایب کشیدگی پیزو الکتریک مخالف صفر، برای تمام ۲۰ گروه نقطه ای مجاز را می‌توانید در کتاب باگاوانتام پیدا کنید.^۲

تقارن وارونی زمان و تبهگنی

در فصل ۵ دیدیم که تقارن معمولاً با تبهگنی مرتبط است. این، بدان دلیل است که یک گروه تقارنی بزرگتر معمولاً نمایشهای کاهش ناپذیر با ابعاد بزرگتری دارند که تبهگنیها را تعیین می کند. اما، وقتی گروه تقارنی یک سیستم شامل تقارن وارونی زمان نیز باشد، گروه تقارنی کل شامل عملگرهایی است که بعضی یکانی و بعضی دیگر ضد یکانی هستند. در این صورت نمی توان، به مفهوم متداول، یک نمایش ماتریسی برای گروه تعریف کرد. این را می توان به شرح زیر دید.

گروه تقارنی سیستم بدون وارونی زمان را به G نمایش می دهیم. با احتساب تقارن وارونی زمان T ، که با تمام عملیات G جابجاپذیر است، گروه تقارنی کل عبارت است از: $(E, T) \otimes G$. فرض کنید $\{\phi_i\}$ مجموعه ای از توابع باشد که یک نمایش Γ از G را ایجاد می کند و فرض کنید A و B عناصری از G باشند. در این صورت داریم:

$$B\phi_i = \sum_j \phi_j \Gamma_{ji}(B). \quad (\text{ج-۱})$$

عملگر TA را به رابطه فوق اعمال می کنیم، داریم:

$$\begin{aligned} TA(B\phi_i) &= \sum_j (TA) [\phi_j \Gamma_{ji}(B)] \\ &= \sum_j (TA\phi_j) \Gamma_{ji}^*(B), \end{aligned} \quad (\text{ج-۲})$$

که در آن از خاصیت (۲-۵۵) عملگرهای ضد خطی استفاده کرده ایم. اما عمل TA روی ϕ_i را باید بتوان برحسب یک ترکیب خطی از ϕ_i ها نیز نوشت. بنابراین:

$$TA\phi_j = \sum_k \phi_k \Gamma_{kj}(TA), \quad (\text{ج-۳})$$

که در آن $\Gamma_{kj}(TA)$ عناصر ماتریس متناظر با عملگر TA است. با قرار دادن رابطه فوق در (ج-۲)، داریم:

$$TAB\phi_i = \sum_{j,k} \phi_k \Gamma_{kj}(TA) \Gamma_{ji}^*(B). \quad (\text{ج-۴})$$

اما با در نظر گرفتن اثر عملگر TAB مستقیماً روی ϕ_i ، باید داشته باشیم:

$$TAB\phi_i = \sum_k \phi_k \Gamma_{ki}(TAB). \quad (\text{ج-۵})$$

با مقایسه (ج-۴) و (ج-۵) و در نظر داشتن این که ϕ_k ها توابع مستقلی هستند، رابطه ماتریسی زیر را به دست می‌آوریم:

$$\Gamma(TAB) = \Gamma(TA)\Gamma^*(B) \neq \Gamma(TA)\Gamma(B) \quad (\text{ج-۶})$$

این رابطه نشان می‌دهد که ماتریسهای نمایش در این جا در خاصیت (۳-۱) نمایشهای معمولی که در ابتدای فصل ۳ تعریف شد، صدق نمی‌کنند. از این رو این ماتریسها، به مفهوم متداول، یک نمایش گروه را تشکیل نمی‌دهند. ویگنر، یک چنین مجموعه‌ای از ماتریسها را، هم نمایش گروهی که هم شامل عملگرهای یکانی و هم شامل عملگرهای ضد یکانی است، می‌نامند.

در مورد گروههایی که تنها شامل عملگرهای یکانی هستند، ارتباط بین تقارن و تبهگنی را در فصل ۵ مورد بحث قرار دادیم و نشان دادیم که تبهگنیهای مختلف با ابعاد نمایشهای کاهش ناپذیر گروه تقارنی برابرند. لیکن وقتی گروه شامل عملگرهای ضد یکانی باشد، نظریه نمایش فصل سوم معتبر نیست. با وجود این، ویگنر نشان داد که این سؤال که آیا تقارن و اارونی زمان تبهگنی اضافی به سیستم وارد می‌کند یا خیر، تنها با بررسی ماتریسهای نمایش متناظر با عملگرهای یکانی گروه تقارنی می‌تواند پاسخ داده شود، یعنی توسط گروه تقارنی Γ بدون در نظر گرفتن تقارن و اارونی زمان.

فرض کنید Γ یک نمایش گروه G باشد. در این صورت بنا به مسأله (۳-۳) Γ^* نیز یک نمایش G خواهد بود. حال سه مورد زیر اتفاق می‌افتد: (الف) Γ و Γ^* معادل با یک نمایش کاهش ناپذیر حقیقی هستند، یعنی، دارای مشخصه‌های حقیقی یکسانی هستند. (ب) Γ و Γ^* هم ارز نیستند، یعنی، مشخصه‌های متمایز دارند، (ج) Γ و Γ^* معادل ولی نمی‌توان آنها را حقیقی کرد، یعنی دارای مشخصه‌های مختلط یکسانی هستند.

برای این که نتیجه وینگر را به کار بندیم، باید سیستمهای با (i) اسپین صحیح و (ii) اسپین نیمه صحیح را جداگانه بررسی کنیم. با ترکیب سه مورد (الف)، (ب) و (ج) فوق با دو مورد (i) و (ii) برطبق اسپین، جمعاً شش امکان وجود دارد. در این صورت نتیجه وینگر در رابطه تبهگنی اضافی می تواند به صورت زیر بیان شود:

(ج-۷) هیچ تبهگنی اضافی در موارد الف (i) و ج (ii) وجود ندارد؛

تبهگنی دوگانه در موارد ب (i)، ب (ii)، الف (ii) و ج (i)

وجود دارد.

برای تعیین این که یک نمایش از یک گروه متعلق به مورد (الف) یا (ج) است، فراینوس و شور یک معیار ساده ای ارائه داده اند که فقط به مشخصه های X نمایش Γ بستگی دارد. این معیار توسط رابطه زیر داده می شود:

$$\sum_{A \in G} X(A^2) = \begin{cases} g & \text{مورد الف} \\ 0 & \text{مورد ب} \\ -g & \text{مورد ج} \end{cases} \quad (\text{ج-۸})$$

که در آن g مرتبه گروه G است.

از معیار (ج-۷) ملاحظه می کنیم که درموردی که نمایشهای Γ و Γ^* غیر هم ارزند (مورد ب) تبهگنی دو برابر می شود، چه اسپین عدد صحیح و چه نیمه صحیح باشد. به این دلیل است که نمایشهای مزدوج مختلط، برای نمایشهای کاهش ناپذیر گروههای نقطه ای، در جدول (۷-۷) با هم آورده شده اند. توابع پایه برای نمایشهای کاهش ناپذیر Γ و Γ^* را در نظر بگیرید. با وجودی که عملی در G وجود ندارد که توابع پایه Γ را با توابع پایه Γ^* با هم مخلوط کند، عملگر وارونی زمان این توابع را باهم مخلوط خواهد کرد و از این رو Γ و Γ^* در حضور تقارن وارونی زمان تبهگن خواهند بود.

وارونی زمان در نظریه نواری

گروه تقارنی یک بلور، گروه فضایی آن می باشد. چون یک گروه فضایی شامل تعداد عناصر بسیار زیادی است (عملاً بی نهایت عنصر)، معیار فراینوس - شور (ج-۸)

مناسب نیست. هرینگ یک معیار ساده تری را پیدا کرده است که تنها مشخصه های نمایشهای کاهش ناپذیر گروه بردار موجی \vec{k} را لازم دارد. این معیار عبارت است از:

$$\sum_B \chi(B^2) = \begin{cases} n & \text{مورد الف} \\ 0 & \text{مورد ب} \\ -n & \text{مورد ج} \end{cases} \quad (9-ج)$$

که در آن جمع بندی روی آن عناصر گروه نقطه ای انجام می شود که \vec{k} را به $-\vec{k}$ تبدیل می کند و n تعداد این عناصر است. بدیهی است که B^2 ، \vec{k} را تغییر ناپذیر می گذارد و از این رو به گروه بردار موجی k تعلق دارد.

یک نتیجه مهم تقارن وارونی زمان در ساختار نواری الکترونی این است که:

$$E(\mathbf{k} \uparrow) = E(-\mathbf{k} \downarrow), \quad (10-ج)$$

که در آن $E(\mathbf{k} \uparrow)$ انرژی الکترون با بردار موجی \vec{k} و اسپین بالا و غیره است. برای اثبات این رابطه معادله شرودینگر را به صورت زیر می نویسیم:

$$\mathcal{H}\psi_{\mathbf{k} \uparrow} = E(\mathbf{k} \uparrow) \psi_{\mathbf{k} \uparrow}, \quad (11-ج)$$

که در آن $\psi_{\mathbf{k} \uparrow}$ حاصلضرب یک تابع بلاخ با بردار موجی \vec{k} و یک تابع اسپین بالاست:

$$\psi_{\mathbf{k} \uparrow} = \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \times (\text{تابع اسپین بالا}) \quad (12-ج)$$

اگر بلور دارای تقارن وارونی زمان باشد، هامیلتونین \mathcal{H} با عملگر وارونی زمان T جابجاپذیر است و تابع $\psi_{\mathbf{k} \uparrow}$ باید با تابع $\psi_{\mathbf{k} \uparrow}$ تبهگن باشد. یادآور می شویم که $T = i, \sigma_y K$ که در آن K عملگر مزدوج مختلط است. اگر عملگر T را بر $\psi_{\mathbf{k} \uparrow}$ در (ج-۱۲) اعمال کنیم، عملگر اسپینی پاولی σ_y تنها روی تابع اسپین عمل خواهد کرد و تابع اسپین بالا را به تابع اسپین پایین تبدیل خواهد کرد.

$$\begin{aligned} T\psi_{\mathbf{k} \uparrow} &= i\sigma_y K\psi_{\mathbf{k} \uparrow} \\ &= i\exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}) u_{\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \times (\text{تابع اسپین پایین}) \end{aligned} \quad (13-ج)$$

این تابع، حاصلضرب یک تابع بلاخ با بردار موجی $-\vec{k}$ و یک تابع اسپین پایین می باشد و می توان آن را با $\phi_{-\mathbf{k}}$ نمایش داد. ولی باید داشته باشیم:

$$\mathcal{H}\phi_{-\mathbf{k} \downarrow} = E(-\mathbf{k} \downarrow) \phi_{-\mathbf{k} \downarrow} \quad (14-ج)$$

با مقایسه این رابطه با (ج-۱۱) و توجه به این نکته که $\psi_{k \uparrow}$ و $\phi_{-k \downarrow}$ باید به خاطر تقارن وارونی زمان، تبهگن باشند، مستقیماً به نتیجه (ج-۱۰) می‌رسیم. این نتیجه بدون توجه به تقارن فضایی بلور معتبر است.

اگر، علاوه بر این، بلور دارای تقارن وارونی باشد، می‌توان به آسانی دید که باید داشته باشیم:

$$E(k \uparrow) = E(-k \uparrow), \quad (\text{ج-۱۵})$$

زیرا عملگر وارونی فضا \vec{k} را به $-\vec{k}$ تبدیل می‌کند ولی روی اسپین عمل نمی‌کند. اگر تقارنهای وارونی زمان و وارونی فضا همزمان وجود داشته باشند، می‌توانیم (ج-۱۰) و

(ج-۱۵) را باهم ترکیب کنیم و برای هر اسپین بنویسیم:

$$E(\mathbf{k}) = E(-\mathbf{k}), \quad (\text{ج-۱۶})$$

توابع و نگاشتها

فرض کنید $X = \{x_1, x_2, \dots, x_m\}$ و $Y = \{y_1, y_2, \dots, y_n\}$ مجموعه‌های غیرتهی باشند. مجموعهٔ C که شامل تمام زوجهای مرتب شده (x_i, y_j) ، $1 \leq i \leq m$ ، $1 \leq j \leq n$ باشد، ضرب دکارتی X و Y نامیده می‌شود و به صورت $C = X \times Y$ نشان داده می‌شود. بدین ترتیب عناصر C عبارتند از: (x_1, y_1) ، (x_1, y_2) ، \dots ، (x_1, y_n) ، (x_2, y_1) ، \dots ، (x_2, y_n) ، و غیره، که جمعاً mn عنصر می‌باشند. در زوج مرتب (x_i, y_j) ، x_i را مختصهٔ اول و y_j را مختصهٔ دوم می‌نامیم.

فرض کنید f یک زیرمجموعهٔ غیرتهی از C باشد بطوری که هیچ دو عنصری از f دارای مختصهٔ اول یکسانی نباشند. یعنی اگر (x_i, y_j) عنصری از زیرمجموعه f باشد، هیچ عنصری به صورت (x_i, y_k) که در آن $j \neq k$ باشد، در f وجود نداشته باشد. به عبارت دیگر، اگر (x_i, y_j) و (x_i, y_l) عناصر f باشند، در این صورت باید داشته باشیم $j = l$. این چنین مجموعه‌ای را یک تابع از X به Y می‌نامیم.

دامنهٔ تابع f از X به Y زیرمجموعه‌ای از X است که شامل کلیهٔ مختصات اول عناصر f باشد، درحالی که برد تابع f زیرمجموعه‌ای از Y است که شامل تمام مختصات دوم عناصر f باشد.

مثال: فرض کنید $X = \{a, b, c\}$ و $Y = \{p, q, r, s\}$ دو مجموعه باشند.

ضرب دکارتی آنها عبارت است از:

۱ - حتماً خواننده متوجه خواهد شد که این شرط، در مفهوم متداول، دلالت بر این دارد که f یک تابع تک مقدار باشد.

$$C = X \times Y = \{(a, p), (a, q), (a, r), (a, s), (b, p), (b, q), (b, r), (b, s), (c, p), (c, q), (c, r), (c, s)\}. \quad (D. 1)$$

برای تعریف یک تابع از X به Y ، می توانیم هر زیر مجموعه C را با این شرط که هیچ دو عنصری که مختصه دوم آنها متفاوت هستند، دارای مختصه اول یکسانی نباشند، انتخاب کرد. به عنوان مثال می توانیم توابع زیر از X به Y را انتخاب کنیم:

$$\begin{aligned} f &= \{(a, q), (c, s)\}, \\ g &= \{(a, p), (b, p), (c, q)\}, \\ h &= \{(a, r), (b, r), (c, r)\}. \end{aligned} \quad (2-d)$$

تابع f دارای دامنه $\{a, c\}$ و برد $\{q, s\}$ است، تابع g دارای دامنه $\{a, b, c\}$ یعنی تمام مجموعه X و برد $\{p, q\}$ است و بالاخره دامنه h مجموعه X و برد آن $\{r\}$ است.

یک تابع f از X به Y را یک نگاشت می نامیم اگر دامنه f ، کل مجموعه X باشد. بنابراین در بین توابع تعریف شده در (2-d)، g و h نگاشت می باشند. یک نگاشت به نوبه خود به دو دسته تقسیم می شود: f را یک نگاشت X در Y می نامیم اگر برد f یک زیر مجموعه ویژه Y باشد، و به صورت زیر نمایش داده می شود:

$$f: X \rightarrow Y, \quad (3-d)$$

درحالی که f را یک نگاشت X بر روی Y می نامیم اگر برد f کل مجموعه Y باشد، و به صورت زیر نشان داده می شود:

$$f: X \xrightarrow{\text{بر روی}} Y \quad (4-d)$$

اگر (x, y) یک عنصر تابع f از X به Y باشد، که در آن $x \in X$ و $y \in Y$ ، در این صورت y را تصویر x تحت f می نامیم و به صورت $y = f(x)$ نمایش می دهیم. بدین ترتیب در مثال توابع تعریف شده در (2-d)، داریم $q = f(a)$ ، $p = g(b)$ ، $r = h(b)$ و غیره. یک تابع f از X به Y را یک به یک گوییم اگر عناصر متمایز X تصویرهای متمایزی تحت f در Y داشته باشند. در مثال بالا f یک تابع یک به یک از X به Y است، درحالی که g و h یک به یک نیستند.

حال به گروهها پردازیم، فرض کنید: $G = \{E, A, B, C, \dots\}$ یک گروه از

مرتبه g باشد که در آن E عنصر همانی گروه است و فرض کنید:

$$G = \{E_1, E_2, \dots, E_n, A_1, A_2, \dots, A_n, \dots\}$$

یک گروه از مرتبه ng باشد با عنصر همانی E_1 . حال یک نگاشت از G' به G را طوری تعریف می‌کنیم که $f(A_i) = A_i$ ، $f(E_i) = E_i$ و غیره، به ازای $1 \leq i \leq n$. اگر G' و G در جدولهای ضرب صدق کنند به قسمی که در G' ، $A_i B_j = C_k$ (به ازای مقادیری از i, j, k) نتیجه می‌شود: $f(A_i) f(B_j) = f(C_k)$ ، یعنی در G ، $AB = C$ ، آنگاه گروه G و G' را همومرفیک نامند. با بخش ۱-۶ مقایسه کنید.

فهرست راهنما

<p>پیزوالکتریسته ۴۰۹، ۴۱۳</p> <p>تانسور اینترسی ۴۰۰، ۴۰۱</p> <p>تانسور کشیدگی ۴۰۰، ۴۰۱</p> <p>تبدیل</p> <p>- یک تابع ۲۱۱</p> <p>- دستگاه مختصات ۲۱، ۳۱۵</p> <p>- متعامد ۶۴</p> <p>- تشابه ۲۸</p> <p>- یکانی ۶۴</p> <p>- تقارنی ۲۰</p> <p>تقارن هندسی ۲۳۹</p> <p>تقارنهای دینامیکی ۲۳۹</p> <p>- نوسان کننده هارمونیک ۲۴۵</p> <p>- اتم هیدروژن ۲۴۰</p> <p>تبهگتی</p> <p>- کرامر ۲۵۵</p> <p>- تصادفی ۲۲۲</p> <p>- اساسی ۲۲۲</p> <p>تقریب الکترون آزاد ۳۵۴</p> <p>ثابت‌های ساختار گروه لی ۱۹۶</p> <p>ثابت کشسانی ۴۰۰، ۴۰۸</p>	<p>ابعاد فضای برداری ۶۱</p> <p>اسپینور ۱۱۰، ۲۰۱</p> <p>اعداد کوانتومی خوب ۲۲۵</p> <p>اندازه حرکت زاویه ای ۲۱۰، ۲۷۴</p> <p>جمع - ۲۷۳</p> <p>ایزومرفیزم ۳۷</p> <p>بردار (ها) ۵۴</p> <p>- پایه ۶۲</p> <p>- مشخصه ۱۱۲</p> <p>- موجی ۳۵۷</p> <p>- محوری ۲۹۱</p> <p>- قطبی ۲۹۱</p> <p>- بهنجار شده ۶۲</p> <p>نرم - ۵۷</p> <p>استقلال خطی - ۶۰</p> <p>بسط فوریه - ۶۲</p> <p>بردار رونج - لنز ۲۴۱</p> <p>بلاخ</p> <p>توابع - ۳۶۵</p> <p>قضیه - ۳۵۴، ۳۵۷</p> <p>پارته ۲۳۰، ۲۵۶، ۲۶۱</p>
---	--

- جبرلی ۱۹۵، ۱۹۶
- پایه- ۱۹۶
- جدول مشخصه C_{3v} ۱۱۷
- جدول ضرب C_{3v} ۲۵
- خودگیری دی الکتریک ۴۰۹، ۴۱۳
- دترمینان اسلاتر ۲۵۹، ۲۶۹
- دترمینان گرام ۶۱
- دلتای کرونگر ۶۲
- رده (ها) ۲۸، ۲۹
- معکوس- ۵۰
- ضرب- ۳۰
- خودمعکوس ۱۵۰
- فیضی- ۱۱۲
- $SO(3)$ ۱۷۲
- روابط سازگاری ۳۸۲، ۳۸۳، ۳۸۵، ۳۸۷
- زیرفضا ۹۴
- تغییرناپذیر ۹۴
- خاص ۹۴
- زیرگروه ۳۰
- نرمال ۳۴
- تغییرناپذیر ۳۴
- شاخص- ۳۴
- زیمن
- اثر- ۲۷۱
- ساختار الکترونی بلورها ۳۵۲
- شبکه ۳۰۷
- معکوس ۳۵۴، ۳۵۷
- نقاط- ۳۵۶
- تقارن- ۳۵۷
- بردارهای- ۳۵۷
- شبه ذرات ۲۵۷
- شکافتگی تراز ۲۳۲
- شکافتگی میدان بلوری ۳۴۵
- ضرائب کلیش- گوردن ۲۷۹
- محاسبه- ۲۸۱
- روابط بازگشتی- ۲۸۳
- سری- ۱۹۳
- عملگر (ها)
- بالا برنده ۲۴۶
- پائین آورنده ۲۴۶
- برداری ۲۸۹
- تانسوری ۲۸۷، ۲۹۲
- تصویری ۶۶
- کاسیمیر ۱۹۸
- خطی ۷۴
- ضدخطی ۷۵
- ضدیکانی ۲۵۲
- هرمیتی ۷۵
- نرمال ۸۱
- مزدوج مختلط ۷۵
- عدد اشغال ۲۴۶
- وارونی زمانی ۲۵۲
- متعامد ۶۴، ۷۶
- نمایش- ۶۴
- عنصر ماتریسی- ۶۴
- فضا (ها)

- بسته
- کامل ۵۹
- دوگانه ۷۱
- تابع ۶۸
- خطی ۵۶
- حاصلضرب داخلی ۵۶
- متعامد ۸۱
- کاهش پذیر ۹۴
- اسپین ۱۱۰
- گروه ۱۱۰
- رده ۱۱۲
- پارامتر ۱۵۶
- هیلبرت ۵۳، ۵۹، ۲۰۸-۲۱۱
- ضرب مستقیم- ۶۷
- جمع مستقیم فضاهای تابع ۷۲
- قانون شرکت پذیری ۱۷
- قضیه تجدید آرایش ۲۵
- قضیه تعامد مشخصه ها ۱۱۲
- تعبیر- ۱۰۹
- قضیه عنصر ماتریسی ۲۳۵
- قضیه کرامر ۲۵۴
- قطبی شدن الکتریکی ۴۰۹
- قطری کردن ۷۷، ۸۰
- گروه (ها)
- آبدلی ۱۹
- متناوب ۴۲
- پیوسته ۱۷، ۱۵۲
- گسسته ۱۷
- محدود ۱۷
- نامحدود ۱۷
- دوره ای ۳۱
- نقطه ای ۳۰۷
- خارج قسمت ۲۴
- خطی ۱۵۵
- متقارن ۴۰
- توپولوژیکی ۱۵۴
- ایزومرفیک ۳۷
- عامل ۳۴
- شبه دوران ۱۷۷
- دوران- وارونی ۱۶۹
- دو وجهی ۴۹
- لی ۱۵۴، ۱۶۲
- لورنتر ۱۷۷
- تقارنی هامیلتونین ۲۲۱
- جایگشت ۴۰
- تعریف- ۱۷
- نظریه مجرد- ۱۷
- جدول ضرب- ۲۴
- مرتبه- ۱۷، ۱۵۴
- نظریه نمایش- ۹۰
- گروه (Z) SU ۱۷۹
- کاربرد- ۲۰۱
- مولدهای- ۱۹۴
- نابتهای ساختار- ۱۹۷
- نمایشهای- ۱۸۱
- درجه- ۱۹۸

مولدهای - ۱۶۲	- همومرفیزم روی (۳) SO 185
درجه - ۱۹۸	گروه (۳) SU 199
نمایشهای - ۱۹۵	کاربرد - ۲۰۱، ۲۰۳
تابتهای ساختار - ۱۹۶	مولدهای - ۱۹۹
لم شور ۱۰۱، ۱۰۴	تابتهای ساختار - ۱۹۹
ماتریس هرمیتی ۷۶	گروه (n) SU 193
ماتریس کیانی ۶۵	مولدهای - ۱۹۳
ماتریس بلوکی قطری شده ۸۳	گروه (n) U 193
میدان ۵۴	مولدهای - ۱۹۳
میدان گالوا ۸۹۱	گروه (های) دوران ۱۶۳، ۱۷۶
میدان نوکلئونی ۲۰۲	گروه (۲) SO 163
معیار برای کاهش ناپذیری ۱۱۵	مولدهای - ۱۶۵
معادله ویژه مقداری ۷۷	گروه (۳) SO 168
منطقه بریلونن ۳۵۹	رده های - ۱۷۲
- شبکه bcc ۳۸۶	همبندی - ۱۷۳
- شبکه fcc ۳۸۸	مولدهای - ۱۷۰
- شبکه مکعبی ساده ۳۸۲	پارامترهای - ۱۶۹
مولد (های)	گروه (۲) O 176
- گروه لی ۱۶۲	گروه (n) O 175
- گروه (۲) SO 165	گروه (۲) GL 155
- گروه (۳) SO 170	گروه (Z) GL 155
- گروه (۳) SU 199	گروه C_{3v} ۲۴، ۱۱۶
مشخصه های مرکب ۱۱۵	جدول مشخصه - ۱۱۶
مشخصه های ساده (ابتدائی) ۱۱۵	رده های - ۲۹
نمایش (ها)	جدول ضرب - ۲۴
- متمایز (غیر هم ارز) ۹۴	نمایشهای منظم - ۱۲۵
- تک مقداری ۱۹۰	نمایشهای کاهش ناپذیر - ۱۱۹، ۱۲۴
- دو مقداری ۱۸۹	گروه لی ۱۵۴، ۱۶۲

- | | |
|--------------------------|-----------------------|
| کاهش- ۱۱۴ | - چند مقداری ۱۹۱ |
| نوارهای الکترون آزاد ۳۷۳ | - همانی ۹۲ |
| نظریه طیفی عملگرها ۸۰ | - منظم ۱۲۵ |
| ویژه بردار ۷۷ | - هم ارز ۹۳ |
| - تیهگن ۷۷ | - وفادار (با وفا) ۹۲ |
| ویژه مقدار ۷۶ | - بی وفا ۹۲ |
| مسأله- ۷۷ | - کاهش پذیر ۱۰۰ |
| چندگانگی- ۷۷ | - کاهش ناپذیر ۱۰۰ |
| طیف- ۷۷ | - گروههای نقطه ای ۳۲۶ |
| ویژه تابع ۷۷ | - گروه پیوسته ۱۶۲ |
| ویژه فضا ۸۱ | - یک عملگر ۶۴ |
| هومومرفیزم ۳۷ | تعریف- ۹۰ |
| هیبریدشدگی ۲۰۴ | ابعاد- ۹۱ |
| هارمونیکهای کروی ۲۶۶ | مشخصه های- ۱۱۱ |
| هم مجموعه ۳۲ | ضرب مستقیم- ۱۳۹ |

نام اشخاص

Abel	۱۷	آبل	Ghirardi	۲۰۰	گیراردی
Azaroff	۳۰۸	آزاروف	Hamermesh	۱۳۱	همرمش
Bell	۱۷	بل	Hamilton	۱۷	هامیلتون
Bethe	۱۷	بت	Heisenberg	۲۵۹	هایزنبرگ
Bhagavantam	۴۰۶	باگاواتام	Herring	۴۱۶	هرینگ
Bouchaert	۳۲۸	بوکارت	Joshi	۸۰	جوشی
Buerger	۳۲۱	بورگر	Kaenzig	۴۰۹	کانتزیگ
Cauchy	۱۷	کوشی	Kittel	۳۰۶	کیتل
Cayley	۱۷	کایلی	Koster	۳۲۸	کاستر
Cotton	۱۳۱	کاتون	Kreyzig	۷۹	کریزیگ
Dirac	۲۵۹	دیراک	Landau	۳۱۸	لاندو
Ekart	۲۸۷	اکارت	Lifshitz	۳۱۸	لیفشیتز
Englefield	۱۷۷	انگلفیلد	Mariot	۱۳۱	ماریوت
Falicov	۵۰	فالیکوف	Merz	۴۰۹	مرز
Fano	۲۹۵	فانو	Messiah	۱۷۰	مسیا
Fatuzzo	۴۰۹	فاتوزو	Murphy	۳۳۸	مورفی
Fonda	۲۰۰	فوندا	Ne'eman	۲۰۴	نیمن
Frobenius	۴۱۶	فراینوس	Pauli	۲۴۲	پاولی
Galois	۱۷	گالوا	Racah	۱۹۸	راکا
Gauss	۱۷	گوس	Schiff	۱۹۸	شیف
Gellmann	۲۰۴	گلمان	Schur	۴۱۶	شور

نام اشخاص / ۴۲۹

Segall	۴۱۶	سگال	Wigner	۱۷	ویگنر
Simmons	۸۱	سیمونز	Wybourne	۱۷۹	وایبورن
Sylvester	۱۷	سیلوستر	Ziman	۱۷۰	زیمان
Tinkham	۱۳۱	تینکام			

واژه نامه

Angular momentum	اندازه حرکت زاویه ای	Dielectric suscepti-	
Axial rotation group	گروه دوران محوری	bility	خودگیری دی الکتریک
Axis of symmetry	محور تقارن	Direct product	ضرب مستقیم
Bloch theorem	قضیه بلاخ	Double group	گروه دوگانه
Brillouin zone	منطقه بریلوئن	Dynamical symmetry	تقارن دینامیکی
Casimir operator	عملگر کاسیمیر	Eigen function	ویژه تابع
Character vector	بردار مشخصه	Eigen space	ویژه فضا
Class	رده	Eigen value	ویژه مقدار
Class space	فضای رده	Eigenvalue equation	معادله ویژه مقدراری
Clebsch - Gordan		Eigenvector	ویژه بردار
coefficients	ضرائب کلبش - گوردن	Electric polarization	قطبی شدن الکتریکی
Closure	بست	Electronic structure	ساختار الکترونی
Compactness	فشردهگی	of crystals	بلورها
Connectedness	همبندی	Free electron ap-	تقریب الکترون آزاد
Coset	هم مجموعه	proximation	
Crystal field split-		Free electron band	نوار الکترون آزاد
ting	شکافتگی میدان بلوری	Generator	مولد
Degeneracy	تبهگنی	Geometrical symme-	
accidental-	تبهگنی تصادفی	try	تقارن هندسی
essential-	تبهگنی اساسی	Gram determinant	دترمینان گرام
Diagonalization	قطری کردن	Group	گروه

abelian-	گروه آبلی	lowering-	عملگر پائین آورنده
abstract theory		occupation	
of-	نظریه مجرد گروه	number-	عملگر عدد اشغال
continuous-	گروه پیوسته	orthogonal-	عملگر متعامد
cyclic	گروه دوره ای	projection-	عملگر تصویری
dihedral-	گروه دو وجهی	raising-	عملگر بالا برنده
discrete-	گروه گسسته	representation	
factor-	گروه عامل	of-	نمایش عملگر
order of-	مرتبه گروه	transpose-	عملگر ترانهاد
permutation-	گروه جایگشت	unitary-	عملگر یکانی
topological-	گروه توپولوژیکی	Order of a group	مرتبه گروه
Group space	فضای گروه	Orthogonality	تعامد
Hilbert space	فضای هیلبرت	Parity	پاریته
Homomorphism	هومومرفیزم	Piezoelectricity	پیزوالکتریسیته
Inner product	ضرب داخلی	Point group	گروه نقطه ای
Inversion	وارونی	Pseudorotation	
Isomorphism	ایزومرفیزم	group	گروه شبه دوران
Lattice	شبکه	Rearrangement theo-	
Legendre polynomi-		rem	قضیه تجدید آرایش
als	چند جمله ایهای لژاندر	Reciprocal lattice	شبکه معکوس
Level splitting	شکافتگی تراز	Representation	نمایش
Lie algebra	جبر لی	distinct-	نمایش متمایز
Matrix element theo-		diuble-valued-	نمایش دوستداری
rem	قضیه عنصر ماتریسی	faithful-	نمایش وفادار
Octahedral group	گروه هشت وجهی	identity-	نمایش همانی
Operator	عملگر	irreducible-	نمایش کاهش ناپذیر
antilinear-	عملگر ضد خطی	multivalued-	نمایش چند مقداری
antiunitary-	عملگر ضد یکانی	reducible-	نمایش کاهش پذیر

regular-	نمایش منظم	Strain tensor	تانسور کشیدگی
unfaithful..	نمایش بی‌وفا	Stress tensor	تانسور استرس
Rotation group	گروه دوران	Structure constant	ثابت ساختار
Rotation-inversion group	گروه دوران- وارونی	Subgroup	زیرگروه
Runge-Lenze vector	بردار رونج- لنتز	invariant-	زیرگروه تغییرناپذیر
Schur's lemma	لم شور	Subspace	زیرفضا
Secular equation	معادله مفسر	Tensor operator	عملگر تانسوری
Selection rules	قواعد گزینش	Tetrahedral group	گروه چهار وجهی
Set	مجموعه	Time-reversal	وارونی زمانی
Similarity transformation	تبدیل تشابه	Triangular inequality	نامساوی مثلثی
Space group	گروه فضایی	Vector	بردار
Spinor	اسپینور	axial-	بردار محوری
		polar-	بردار قطبی
		Zeeman effect	اثر زیمن