11

Академия наук СССР
Журнал экспериментальной и теоретической физики
Том 34, вып. 3, 1958 г.

Ю. Н. Демков

О СИММЕТРИИ КООРДИНАТНОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ МНОГОЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ

Журнал экспериментальной и теоретической физики

Т. 34 *1958* *Вып. 3*

О СИММЕТРИИ КООРДИНАТНОЙ ВОЛНОВОЙ ФУНКЦИИ МНОГОЭЛЕКТРОННОЙ СИСТЕМЫ

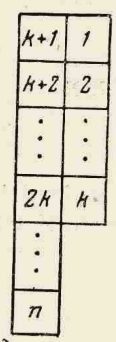
Ю. Н. Демков

Рассмотрена связь между двумя основными методами построения волновой функции многоэлектронной системы — методом теории групп и методом Фока. Показано, что координатная функция в первом методе удовлетворяет условию циклической симметрии Фока.

Пусть в операторе энергии n-электронной системы разделяются координатные и спиновые переменные и пусть, кроме того, спиновая часть оператора энергии H_s сферически симметрична:

$$H = H_0(1, 2, \ldots, n) + H_s(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n).$$

Тогда можно построить полную волновую функцию, которая удовлетворяет принципу Паули и является собственной функцией оператора квадрата полного спина $\mathbf{S}^2$, если известны координатная собственная функция $\psi(1, 2, \ldots, n)$ оператора H_0 и спиновая собственная функция $\chi(\sigma_1, \sigma_2, \ldots, \sigma_n)$ оператора H_s. Такое построение можно провести либо при помощи методов теории групп [1], либо по методу, предложенному Фоком [2]. В обоих методах как координатная, так и спиновая функции должны удовлетворять определенным условиям симметрии относительно перестановок аргументов. Очевидно, что оба способа построения должны быть эквивалентны, и поэтому должна существовать связь между этими условиями симметрии. Рассмотрим эту связь.



Из теории групп следует, что симметрия координатной волновой функции должна определяться схемой Юнга с двумя столбцами (см. рисунок). Это означает, что функция требуемой симметрии может быть получена из произвольной функции, если сначала произвести в ней симметризацию по парам переменных, расположенных в строках схемы, т. е. по парам $(1, k+1)$, $(2, k+2)$, $\ldots$, $(k, 2k)$, а затем провести антисимметризацию по столбцам, т. е. по переменным $(1, 2, \ldots, k)$ и $(k+1, k+2, \ldots, n)$. Если обозначить операторы симметризации и антисимметризации по группе переменных $(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m)$ соответственно через $S(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m)$ и $A(\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_m)$, то оператор Юнга может быть записан в виде

$$J(1, 2, \ldots, k \mid k+1, k+2, \ldots, n) =$$
$$= A(1, 2, \ldots, k)\, A(k+1, k+2, \ldots, n) \sum_{i=1}^{k} S(i, k+i) = A_1 A_2 S.$$

(Очевидно, что последовательность переменных в схеме Юнга может быть и другой; в результате будут получены другие операторы; число линейно независимых операторов определяет размерность представления группы перестановок, связанного с данной схемой Юнга.) Симметрия соответствующей спиновой функции должна определяться транспонированной схемой Юнга. Очевидно, что $k \leqslant n/2$. Значение полного спина равно $n/2 - k$.

В методе Фока координатная волновая функция должна удовлетворять следующим трем условиям: 1) антисимметрия по переменным $1, 2, \ldots, k$;

2) антисимметрия по переменным $k+1,\ k+2, \ldots, n$; 3) циклическая симметрия: оператор

$$\Phi = 1 - P_{k,k+1} - P_{k,k+2} - \ldots - P_{k,n},$$

действуя на координатную функцию, должен давать нуль. Здесь P_{ij} — операторы парных перестановок переменных i и j.

Очевидно, что функция, симметризованная по Юнгу, удовлетворяет условиям 1), 2). Покажем, что эта функция удовлетворяет также условию циклической симметрии 3), т. е. что выполняется тождество

$$\Phi J = 0.$$

Проверим это тождество непосредственно, убедившись, что в произведении $\Phi A_1 A_2 S$ все члены взаимно уничтожают друг друга. Рассмотрим для этого один из $k!\,(n-k)!$ членов в произведении $A_1 A_2$. Он может быть записан в виде перестановки

$$\pm \left(\begin{array}{l|l} 1, 2, \ldots, k & k+1, k+2, \ldots, n \\ \alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k & \alpha_{k+1}, \ \alpha_{k+2}, \ \ldots, \alpha_n \end{array} \right),$$

где $\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_k$ — переставленная последовательность чисел $1, 2, \ldots, k$; $\alpha_{k+1}, \alpha_{k+2}, \ldots, \alpha_n$ — переставленная последовательность чисел $k+1$, $k+2, \ldots, n$; а знак определяется четностью перестановки.

Подействуем теперь оператором парной перестановки из оператора Φ на этот член. Легко непосредственно проверить, что при этом выполняется тождество

$$\begin{pmatrix} k, & a \\ a, & k \end{pmatrix} \left(\begin{array}{l|l} \ldots b \ldots & \ldots b+k \ldots d \ldots \\ \ldots k \ldots & \ldots \ \ c \ \ \ldots a \ldots \end{array} \right) =$$

$$= \begin{pmatrix} k, c \\ c, k \end{pmatrix} \left(\begin{array}{l|l} \ldots b \ldots & \ldots b+k \ldots d \ldots \\ \ldots k \ldots & \ldots \ \ a \ \ \ldots c \ldots \end{array} \right) \begin{pmatrix} b, & b+k \\ b+k, & b \end{pmatrix};$$

причем

$$1 \leqslant b \leqslant k,\ k+1 \leqslant a \leqslant n,\ k+1 \leqslant c \leqslant n,\ k+1 \leqslant d \leqslant n.$$

Каждый из вторых сомножителей в правой и левой части тождества содержится в произведении $A_1 A_2$, причем они отличаются лишь одной парной перестановкой и, следовательно, входят в произведение с противоположными знаками. Оба первых сомножителя содержатся в операторе Фока Φ. Наконец, оператор

$$P_{b,\, b+k} = \begin{pmatrix} b, & b+k \\ b+k, & b \end{pmatrix},$$

действуя на оператор S, не изменяет его. Отсюда следует, что соответствующие члены в произведении $\Phi A_1 A_2 S$ действительно взаимно уничтожаются.

Возможен особый случай, когда $a = c$ и, следовательно, $b + k = d$. Тогда можно воспользоваться тождеством

$$\begin{pmatrix} k, & a \\ a, & k \end{pmatrix} \left(\begin{array}{l|l} \ldots b \ldots & \ldots b+k \ldots \\ \ldots k \ldots & \ldots \ \ a \ \ \ldots \end{array} \right) = \left(\begin{array}{l|l} \ldots b \ldots & \ldots b+k \ldots \\ \ldots k \ldots & \ldots \ \ a \ \ \ldots \end{array} \right) \begin{pmatrix} b, & b+k \\ b+k, & b \end{pmatrix},$$

из которого следует, что такой член в произведении взаимно уничтожится с произведением первого слагаемого в операторе Φ (единицы) на тот же самый член из произведения $A_1 A_2$. Тем самым наше утверждение доказано.

Таким образом всякая функция, симметризованная при помощи оператора Юнга, удовлетворяет условиям Фока.

Обратная связь является, очевидно, более сложной, ибо если для некоторой функции выполнены условия 1), 2), 3), то им соответствует, вообще говоря, ряд схем Юнга со всевозможными перестановками переменных $k+1$, $k+2, \ldots, n$. Любая линейная комбинация соответствующих операторов (среди них могут быть и линейно зависимые), действуя на произвольную функцию, даст функцию, удовлетворяющую трем условиям Фока.

Сравнивая оба способа симметризации, отметим, что симметризация при помощи операторов Юнга удобна, когда из некоторой, вообще говоря, несимметричной, координатной функции требуется построить функцию с должными свойствами симметрии. Если же функция уже известна, то легче проверить, выполняются ли для нее условия симметрии Фока или нет, чем производить аналогичную проверку при помощи операторов Юнга. Конкретный рецепт построения функции, удовлетворяющей условиям Фока, не вытекает непосредственно из этих условий; для различных частных случаев такие рецепты были предложены в работах [2,3]. Из доказанного выше следует, что таким общим рецептом и является симметризация по Юнгу.

Таким образом, оба способа рассмотрения, являясь по существу эквивалентными, в разных случаях дополняют друг друга.

Способы построения полной волновой функции из координатных и спиновых функций в методе Фока и в методе, основанном на теории групп, также различны. Связь между этими способами требует дополнительного рассмотрения.

В заключение я благодарю Г. Ф. Друкарева; настоящая заметка написана в результате обсуждения с ним этого круга вопросов.

Ленинградский государственный университет

Поступила в редакцию 14 октября 1957 г.

Литер:тура

[1] H. Weyl. Cruppentheorie und Quantenmechanik, Leipzig, 1931. E. Wigner. Cruppentheorie und ihre Anwendung auf die Quantenmechanik der Atomspektren, Braunschweig, 1931. Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. Квантовая механика, Гостехиздат, ч. 1, § 61, 1948.

[2] В. А. Фок. ЖЭТФ, **10**, 961, 1940.

[3] И. В. Абаренков. Вестн. ЛГУ, *10*, 43, 1956. Г. Ф. Друкарев. ЖЭТФ, **31**, 288, 1956.

ON SYMMETRY OF THE COORDINATE WAVE FUNCTION OF A MANY-ELECTRON SYSTEM

Yu. N. Demkov

The relation between the two main methods of construction of the wave function of a many-electron system, the group theory method and the Fock method, is considered. It is shown that the coordinate wave function obtained by the first method satisfies Fock's condition of cyclic symmetry.